

Université des Sciences et Technologies de Lille I

Mémoire de thèse pour obtenir
le titre de DOCTEUR en SCIENCES
(spécialité mathématique et informatique)

Groupe Modulaire et Cartes Combinatoires :
Génération et Comptage

Samuel Alexandre VIDAL

Date de soutenance 5 Juillet 2010

Membres du jury

| | | |
|-------------|-----------------|---------|
| Rapporteurs | Gérard DUCHAMP | PR |
| | Timothy WALSH | PR UQAM |
| Examineurs | Pierre DEBES | PR |
| | Alain GIORGETTI | MCF |
| Directeurs | Marc HUTTNER | PR |
| | Michel PETITOT | PR |

Laboratoire de mathématique Paul Painlevé de Lille (U.M.R. CNRS 8524)

Laboratoire d'informatique fondamentale de Lille (U.M.R. CNRS 8022)

Table des matières

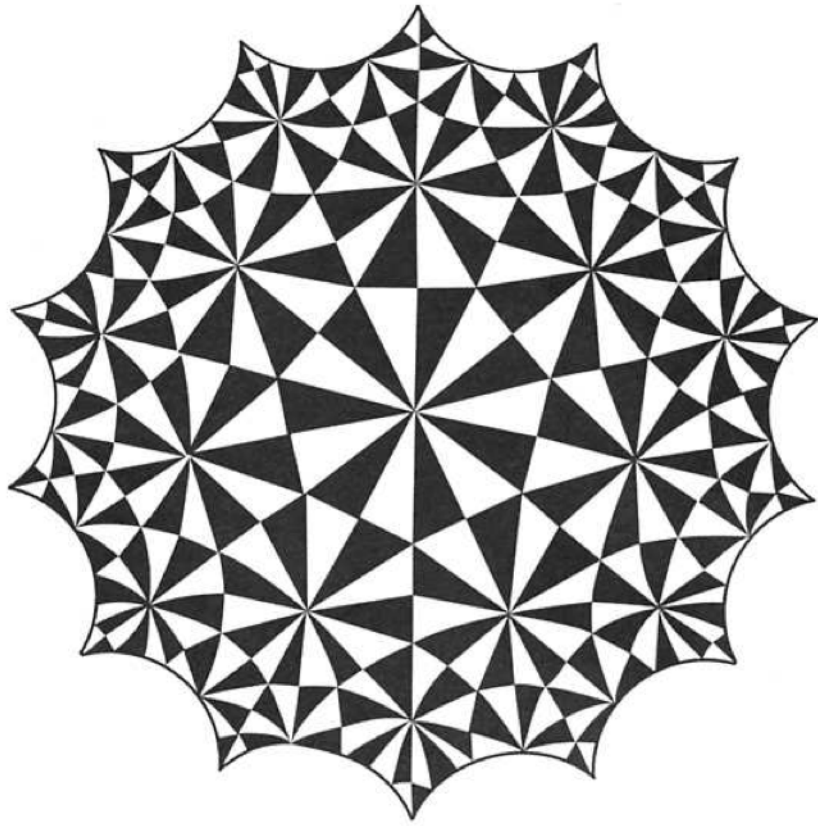
| | |
|--|-----------|
| Notations | 9 |
| Remerciements | 13 |
| Introduction générale | 15 |
| 0.1 Contenu des chapitres, contributions | 16 |
| 0.1.1 Les sous-groupes du groupe modulaire et leurs classes de conjugaison | 17 |
| 0.1.2 Une interprétation combinatoire de l'asymptotique des fonctions d'Airy | 19 |
| 0.1.3 Un algorithme optimal pour générer les diagrammes tri- valents enracinés et les cartes triangulaires enracinées . . | 20 |
| 1 Les Sous-groupes du groupe modulaire et leurs classes de conjugaison | 23 |
| 1.0 Introduction | 23 |
| 1.1 Préliminaires combinatoires | 27 |
| 1.1.1 Graphes généralités | 27 |
| 1.1.2 Subdivision barycentrique | 28 |
| 1.1.3 Orientation cyclique aux sommets | 30 |
| 1.1.4 Diagrammes pointés | 33 |
| 1.1.5 Aspects algorithmiques | 34 |
| 1.2 Principe de classification | 35 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1.3 | Dénombrement | 37 |
| 1.3.1 | Espèces combinatoires, généralités | 39 |
| | Structures étiquetées <i>vs.</i> structures non-étiquetées | 42 |
| | Séries associées | 42 |
| 1.3.2 | Exponentiation et logarithme d'espèces combinatoires | 45 |
| 1.3.3 | Produit cartésien de deux espèces, somme directe | 46 |
| | Dénombrement étiqueté | 47 |
| | Dénombrement non-étiqueté | 48 |
| 1.3.4 | Dénombrement de diagrammes pointés | 49 |
| 1.3.5 | Dénombrement de permutations | 53 |
| 1.3.6 | Calcul explicite : première méthode | 56 |
| 1.3.7 | Calcul explicite : deuxième méthode | 59 |
| 1.3.8 | Critère de séparabilité | 60 |
| 1.3.9 | Produit de Hadamard de séries séparables | 62 |
| 2 | A Combinatorial Interpretation of Airy Asymptotics | 65 |
| 2.0 | Introduction | 65 |
| 2.1 | Triangular Maps | 65 |
| 2.1.1 | Trivalent diagrams | 66 |
| 2.2 | Counting Principle | 67 |
| 2.3 | Recursive Decomposition | 69 |
| 2.3.1 | The Ten Reductive Bijections | 72 |
| 2.4 | Airy Functions | 74 |
| 2.4.1 | Integral Representation | 74 |
| 2.4.2 | Asymptotic Expansion | 76 |
| 2.4.3 | Newton Iteration | 78 |
| 2.4.4 | Closed form | 79 |
| 2.4.5 | Logarithmic Derivative | 80 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3 | An Optimal Algorithm to Generate Rooted Trivalent Diagrams and Rooted Triangular Maps | 83 |
| 3.0 | Introduction | 83 |
| 3.0.1 | Definition of a CAT Generator | 84 |
| 3.0.2 | Problem Statement | 84 |
| 3.0.3 | Motivation | 85 |
| 3.0.4 | Comment on Terminology | 85 |
| 3.1 | Trivalent Diagrams | 86 |
| 3.1.1 | Rooted Trivalent Diagrams | 88 |
| 3.1.2 | Labeled <i>versus</i> Unlabeled Diagrams | 88 |
| 3.2 | Characteristic Labeling | 89 |
| 3.2.1 | Implementation | 90 |
| 3.2.2 | Correctness | 92 |
| 3.2.3 | Applications | 93 |
| 3.3 | Generating Algorithm | 93 |
| 3.3.1 | Implementation | 95 |
| | The Generate procedure | 97 |
| | The Dispatch procedure | 97 |
| | The TryClosedWhite procedure | 99 |
| | The TryForward procedure | 100 |
| | The TryClosedBlack procedure | 101 |
| | The TryBackward procedure | 101 |
| | The Recurse procedure | 102 |
| 3.3.2 | Correctness | 103 |
| 3.3.3 | Average Time Complexity | 105 |
| 3.4 | First Application: Modular Group and Unrooted Trivalent Diagrams | 107 |
| 3.4.1 | Displacements Groups | 107 |

| | | |
|---|---|------------|
| 3.4.2 | Unrooted Plane Binary Trees | 108 |
| 3.4.3 | Classification Principle | 109 |
| 3.5 | Second Application: Triangular Maps | 113 |
| 3.5.1 | Cyclic Orientation | 115 |
| 3.5.2 | Associated Trivalent Diagram | 116 |
| 3.5.3 | Exhaustive Generation of Triangular Maps | 118 |
| 3.6 | Concluding Remarks and Perspectives | 125 |
| Conclusion Générale | | 127 |
| A Réseaux de Pétri stochastiques | | 135 |
| A.1 | Réseaux de Pétri | 137 |
| A.1.1 | Systèmes de réactions chimiques | 137 |
| A.1.2 | Réseaux de Pétri | 138 |
| A.2 | Les Réseaux de Pétri stochastiques | 140 |
| A.2.1 | Chaîne de Markov définissant la temporisation | 140 |
| A.2.2 | Master-equation | 141 |
| A.2.3 | Analogie de l'équation de Schrödinger | 143 |
| | Rappels sur l'algèbre de Weyl | 143 |
| | Le dictionnaire fondamental | 145 |
| | L'hamiltonien d'un réseau de Pétri stochastique | 147 |
| | Réduction de modèle en présence de lois de conservation | 147 |
| A.3 | Calcul du propagateur | 149 |
| A.3.1 | Exemple : la file $M/M/\infty$ | 151 |
| A.3.2 | Méthode de Wei-Norman | 154 |
| | Les deux systèmes de coordonnées exponentielles | 154 |
| | Mise en oeuvre pratique | 156 |
| A.4 | Moments à l'instant t | 160 |
| A.4.1 | Formules utilisées | 160 |

| | | |
|---------------------------|---|------------|
| A.4.2 | Ordre d'un système | 162 |
| A.4.3 | Gène non régulé | 164 |
| A.4.4 | Systèmes d'ordre 2 | 166 |
| | Le gène autorégulé | 167 |
| | Moyennisation pour le gène autorégulé | 169 |
| | Dégradation du second ordre | 172 |
| A.5 | Conclusion | 177 |
| List of Algorithms | | 179 |
| List of Figures | | 181 |
| List of Tables | | 183 |
| Bibliography | | 187 |



Notations

| | |
|-----------------|---|
| D_3 | Species of connected trivalent diagrams. |
| D_3^\bullet | Species of rooted connected trivalent diagrams. |
| D_3^* | Species of not necessarily connected trivalent diagrams. |
| M_3 | Species of connected triangular maps. |
| M_3^* | Species of not necessarily connected triangular maps. |
| M_3^\bullet | Species of rooted connected triangular maps. |
| M | Species of maps. |
| M^* | Species of not necessarily connected maps. |
| M^\bullet | Species of rooted connected maps. |
| Ens | Species of sets. |
| S | Species of permutations. |
| S_2 | Species of permutations of order 2. |
| S_3 | Species of permutations of order 3. |
| S_2^+ | Species of permutations of order 2, without fixed point. |
| S_3^+ | Species of permutations of order 3, without fixed point. |
| C_n | Species of cycles of order n . |
| C | Species of cycles. |
| Γ^{map} | Triangular map associated to the regular trivalent diagram Γ . |
| Λ^{inc} | Incidence diagram of a triangular map. |
| Λ^{sb} | Barycentric subdivision of the map Λ . |
| Λ^{sb+} | Enriched barycentric subdivision of the map Λ . |

| | |
|---|--|
| \mathcal{Z} | Cycle index series. |
| \mathcal{Z}_F | Cycle index series of the species F . |
| $F(t)$ | Exponential generating series of the species F . |
| $\tilde{F}(t)$ | Ordinary generating series of the species F . |
| $\mathcal{Z}_1 \odot \mathcal{Z}_2$ | Hadamard product of two cycle index series. |
| $\mathcal{Z}_1 + \mathcal{Z}_2$ | Sum of two cycle index series. |
| F^c | Species of connected components of objects of the species F . |
| F^* | Species of sets of objects of the connected species F . |
| $F^{[n]}$ | Species of size n objects of the species F . |
| F^\bullet | Species of objects of the species F with a point marked out. |
| $F \times G$ | Direct product of the two species F and G . |
| $F + G$ | Direct sum of the two species F and G . |
| \mathbb{Z} | Group of integers. |
| \mathbb{Q} | Field of rational numbers. |
| $\bar{\mathbb{Q}}$ | Algebraic closure of the field of rational numbers. |
| $\text{Gal}_{\mathbb{Q}}(\bar{\mathbb{Q}})$ | Absolute Galois group over the rationals. |
| $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ | Cyclic group with n elements. |
| F_n | Free group on n letters. |
| \mathfrak{S}_n | Symmetric group on n letters. |
| \mathcal{H}_n | n 'th Hecke group. |
| $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ | Modular group. |
| S, T, A, B | Elements of the modular group used as generators. |
| $G_1 * G_2$ | Free product of the two groups G_1 and G_2 . |
| $G_1 \times G_2$ | Direct product of the two groups G_1 and G_2 . |
| $A \cup B$ | Union of the two sets A and B . |
| $A \cap B$ | Intersection of the two sets A and B . |
| $A \times B$ | Direct product of the two sets A and B . |
| $A \sqcup B$ | Direct sum of the two sets A and B . |
| $\coprod_{i \in I} A_i$ | Direct sum of the family of sets $(A_i)_{i \in I}$. |
| $A \simeq B$ | The two objects A and B are isomorphic. |
| $A \underset{\text{nat.}}{\simeq} B$ | The two objects A and B are naturally isomorphic. |
| $F \underset{\text{nat.}}{\simeq} G$ | The two functors F and G are naturally isomorphic (also used for species). |

| | |
|--|---|
| Γ | Diagram. |
| Γ_{\bullet} | Set of black vertices of the trivalent diagram Γ . |
| Γ_{\circ} | Set of white vertices of the trivalent diagram Γ . |
| Γ_{-} | Set of edges of the trivalent diagram Γ . |
| $\partial_{\bullet}, \partial_{\circ}$ | Boundary mappings of a trivalent diagram. |
| $\sigma_{\bullet}, \sigma_{\circ}$ | Permutations associated to a trivalent diagram. |
| a^{-1} | The arc a in reverse direction. |
| Λ | Combinatorial map. |
| Λ_0 | Set of vertices of the combinatorial map Λ . |
| Λ_1 | Set of arcs of the combinatorial map Λ . |
| Λ_2 | Set of faces of the combinatorial map Λ . |
| s, t, ℓ, r | Structure mappings of a combinatorial map. |
| $\text{Ai}(z)$ | Airy function of the first kind. |
| $\text{Bi}(z)$ | Airy function of the second kind. |

Remerciements

Je souhaite en tout premier lieu remercier mes deux directeurs de thèse Michel Petitot et Marc Huttner pour leur aide considérable, leur grande ouverture d'esprit, leurs encouragements continuels, leur soutien de tout instant et avant tout pour l'atmosphère d'amitié et la richesse de la collaboration qu'ils ont su entretenir entre nous durant ces cinq années de doctorat. Leur très large culture m'a permis d'apprendre à leur contact plus de Mathématiques qu'il m'aurait été permis d'imaginer.

Le travail des rapporteurs Gérard Duchamp, Timothy Walsh, Alain Giorgetti et Pierre Dèbes aura contribué de façon très significative à la qualité de cette thèse, tout particulièrement en ce qui concerne le chapitre 3 qui doit beaucoup aux innombrables remarques, corrections et suggestions de Timothy Walsh.

Je remercie mon père Romain pour avoir su me donner le goût pour la science dès mon plus jeune âge, mes grand parents France et René pour leur soutien matériel et leur affection sans lesquels rien n'aurait été possible.

Ma reconnaissance se tourne également vers le Ministère de l'Éducation Nationale français pour m'avoir financé pendant la durée de cette thèse, cela m'aura permis de m'installer à Lille.

Ces cinq années passées sur Lille comptent parmi les plus joyeuses de ma vie, je le dois beaucoup à la chaleur et à la gentillesse des gens du Nord, tant il est vrai qu'ils ont dans le coeur le soleil qu'ils n'ont pas dans le ciel. Je garde un excellent souvenir des membres du laboratoire de Mathématiques pures et appliquées Paul Painlevé et du laboratoire d'informatique fondamentale de Lille.

C'est avec beaucoup de tendresse enfin que je remercie ma fiancée Francine pour son soutien sans faille depuis neuf ans que l'on se connaît.

Samuel Vidal, Lille le 29 Juin 2010.

Introduction Générale

Les triangulations de surfaces sont l'une des briques de base de la topologie algébrique et elles constituent une structure de donnée importante en infographie puisqu'elles fournissent un modèle discret des surfaces. Du point de vue de l'informatique, les applications des triangulations sont bien connues. Elles concernent aussi bien les aspects théoriques que les aspects pratiques de la discipline et elles vont de l'infographie aux méthodes discrètes de résolution d'équations aux dérivées partielles. Elle jouent également un rôle central dans de nombreux algorithmes de géométrie algorithmique, une discipline en plein essor ayant un impact industriel important dû à son utilité dans la CAO.

Un aspect particulièrement intéressant du sujet, outre son vaste champ d'application, réside justement dans son ubiquité, puisqu'il est à l'oeuvre en physique mathématique, en informatique et même en mathématiques pures, ce qui fournit de nombreuses zones d'échanges fructueux entre diverses branches apparemment éloignées de la science.

Du point de vue des mathématiques, la théorie des cartes combinatoires est également un vénérable sujet dont l'étude remonte à Cayley et Hamilton. Depuis cette époque il a été l'objet de très nombreuses études qui ont fourni d'innombrables résultats concernant le problème particulier de l'énumération des cartes combinatoires *enracinées*. Ces résultats proviennent de diverses communautés de chercheurs, chacune avec ses propres méthodes et traditions. Parmi elles, les combinatoriciens énumératifs ont joué un rôle significatif, à commencer par les travaux pionniers de Tutte [71] sur les cartes planaires enracinées. Ces travaux étaient au début motivés par le problème des quatre couleurs. Les physiciens théoriciens ont également joué un rôle important qui débute avec les travaux de t'Hooft [69] portant sur l'étude des intégrales de matrices aléatoires

et sur les diagrammes de Feynman. Les mathématiciens purs comme Harer et Zagier [36] ont également contribué à la théorie en rapport avec de difficiles questions de géométrie algébrique concernant les espaces de module des surfaces de Riemann. Enfin, nous devons mentionner en physique mathématique le modèle de gravité quantique de Witten-Kontsevich [44] qui utilise de façon centrale la combinatoire avancée des cartes triangulaires et des diagrammes trivalents.

Bien que l'on connaisse beaucoup de choses sur la théorie des cartes combinatoires enracinées, on ne connaît que très peu de choses concernant le problème important d'énumération des cartes combinatoires non-enracinées à isomorphisme près, à l'exception des cartes planaires avec les travaux pionniers de Liskovets [50]. Il apparaît comme un problème difficile de combinatoire, qui est resté presque intact durant près de 150 ans. En effet, les seuls résultats généraux concernant ces objets importants sont jusqu'à présent tous contenus dans un article récent de Mednykh et Nedela [56]. En employant la théorie des espèces de structures inventée par Joyal [37], nous décrivons une méthode de comptage s'appliquant à la fois au dénombrement des cartes combinatoires enracinées et non-enracinées. Les séries génératrices que nous obtenons sont explicitement reliées au développement asymptotique de la fonction d'Airy.

0.1 Contenu des chapitres, contributions

Un des objectifs de cette thèse de doctorat est d'étudier la théorie des cartes combinatoires et ses liens avec la théorie des groupes et notamment celle du groupe modulaire. Pour simplifier l'exposé au maximum, le choix que nous avons fait tout au long de cette thèse a été de se focaliser sur deux exemples significatifs et duaux, les cartes triangulaires et les diagrammes trivalents mais tous les résultats obtenus se généralisent sans peine au cas des cartes quelconques ou à celui des cartes ne comportant que des faces d'un degré donné. La table 3.18 page 131 donne par exemple une idée de la façon de généraliser les résultats du chapitre deux. Dans ce qui suit, nous passons en revue le contenu et tentons de dresser une liste des résultats originaux contenus dans chacun d'eux.

0.1.1 Les sous-groupes du groupe modulaire et leurs classes de conjugaison

Dans ce premier chapitre on introduit une structure combinatoire des diagrammes trivalents pointés, qui permet une classification complète des sous-groupes du groupe modulaire. On étudie les relations entre les caractéristiques de ces diagrammes et celles des sous groupes correspondants. Lorsque l'on considère des diagrammes trivalents non pointés on montre que l'on peut classer complètement les classes de conjugaison de ces sous-groupes. On obtient deux relations bijectives comme suit.

$$\begin{array}{ccc}
 \text{Diagrammes trivalents} & \longleftrightarrow & \text{Sous-groupes de } \text{PSL}_2(\mathbb{Z}) \\
 \text{à isomorphisme près} & & \text{à conjugaison près} \\
 \\
 \text{Diagrammes trivalents pointés} & \longleftrightarrow & \text{Sous-groupes de } \text{PSL}_2(\mathbb{Z}) \\
 \text{à isomorphisme près} & &
 \end{array}$$

Une fois ces correspondances démontrées nous nous attaquons au problème du dénombrement de ses structures. Notre argument fait intervenir la théorie des espèces de structures due à A. Joyal [37] et développée par l'école combinatoire québécoise dans le livre [14, 15]. Nous rappelons dans la section 1.3.1 les rudiments de théorie des espèces qui nous sont utiles pour obtenir ces résultats.

Une difficulté que nous avons rencontrée est d'ordre calculatoire. En effet, une série indicatrice des cycles générique est une série portant sur une famille infinie de variables $x_1, x_2, \dots, x_k, \dots$, de poids respectifs $1, 2, \dots, k, \dots$

$$\mathcal{Z} = \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n} \frac{a_{k_1, \dots, k_n}}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n}$$

Ainsi, en graduation n il y a p_n termes, où p_n est le nombre de partitions de n . Ce nombre croît très vite avec n , ce qui pose des problèmes de complexité sérieux. L'identité de Hardy-Ramanujan [35] nous donne en effet,

$$p_n \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^{\pi\sqrt{2n/3}}}{4n\sqrt{3}}$$

Nous sommes parvenus à contourner cette difficulté en introduisant une nouvelle notion. Une série indicatrice des cycles est dite *séparable* lorsqu'elle

se factorise en un produit de séries univariées en les x_k . Une telle série est donc de la forme suivante.

$$\mathcal{Z} = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \frac{a_{k,n}}{k^n n!} x_k^n \right) \quad \text{avec } a_{k,0} = 1 \text{ pour tout } k \geq 1.$$

Sous forme factorisée, une telle série comporte en filtration n un nombre de termes nettement plus facile à manipuler puisqu'on a la borne asymptotique suivante (pour $n \rightarrow \infty$).

$$n + \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{n}{3} \right\rfloor + \dots + 1 = O(n \log n)$$

L'intérêt de cette notion est précisément qu'un grand nombre d'espèces combinatoires rencontrées en pratique sont séparables. Nous avons découvert un critère combinatoire très simple qui caractérise ces espèces.

Définition 0.1. Une espèce combinatoire F est dite,

- (i) *rigide*¹, si ses objets ont tous un groupe de symétrie trivial,
- (ii) *semi-rigide*, si l'espèce pointée F^\bullet associée est rigide,
- (iii) *séparable*, si sa série indicatrice \mathcal{Z}_F est séparable.

Critère 0.1. Soit F une espèce combinatoire n'admettant qu'un seul objet en poids un. Les points suivants sont équivalents.

- (i) F est séparable.
- (ii) L'espèce connexe associée F^c est semi-rigide.

Les principaux avantages de la méthode sont les suivants.

- (i) Elle se généralise facilement à la classification et au dénombrement des sous-groupes de tout produit libre de groupes cycliques et aux classes de conjugaison de ces sous-groupes. On peut par exemple calculer le nombre de sous-groupes d'indice fini donné k et le nombre de leurs classes de conjugaison dans les groupes libres F_2, F_3, F_4 etc..., les groupes cartographiques comme les groupes de Hecke²,

$$\mathcal{H}_n \simeq \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$$

1. elles sont parfois appelées plates ou asymétriques [15, Définition 2, p. 322].

2. On constate que $\text{PSL}_2(\mathbb{Z}) \simeq \mathcal{H}_3$.

- (ii) Les calculs de séries génératrices ont une complexité très faible du fait de la séparabilité des espèces considérées.
- (iii) Il y a un dictionnaire riche entre les caractéristiques des sous-groupes et les structures combinatoires qui les décrivent.
- (iv) Elle fournit un cadre unifié et conceptuellement simple qui permet de traiter un grand nombre de questions apparemment disjointes.
- (v) La correspondance avec les diagrammes fournit une description efficace et finie, facilement manipulable, pour explorer les propriétés d'objets infinis comme les sous-groupes d'indices finis dans des groupes infinis.

0.1.2 Une interprétation combinatoire de l'asymptotique des fonctions d'Airy

Dans ce chapitre on procède au rapprochement inattendu de l'équation d'Airy [2][1, chap. 10, p. 446] $y'' = xy$ et de la combinatoire des cartes triangulaires pointées. La série génératrice $M_3^\bullet(t)$ des cartes triangulaire est divergente et ne peut donc être interprétée comme le développement de Taylor d'une fonction analytique comme c'est l'usage en combinatoire. Cependant au moyen d'un argument de décomposition récursive des cartes triangulaires, aussi appelé dévissage, on constate que cette série vérifie une équation différentielle non-linéaire de type Riccati. Un petit changement de variable nous ramène à l'équation de Riccati associée à l'équation de Airy $u' + u^2 = x$, c'est-à-dire à l'équation différentielle que satisfait la dérivée logarithmique d'une fonction d'Airy. On l'obtient en posant $u = y'/y$.

Une façon de rendre plus clair ce rapprochement est de considérer la série génératrice exponentielle qui compte les cartes triangulaires non-pointées non nécessairement connexes. Un argument standard de combinatoire analytique nous donne en effet $M_3^\bullet(t) = t \frac{d}{dt} \log M_3^*(t)$. On voit alors la série génératrice $M_3^*(t)$ comme la partie hypergéométrique commune à tous les développements asymptotiques des solutions de cette équation au voisinage de la singularité essentielle à l'infini. On a,

$$M_3^*(t) = {}_2F_0 \left(\begin{matrix} \frac{1}{6}, \frac{5}{6} \\ - \end{matrix} \middle| 6t^6 \right)$$

et en considérant l'exemple du développement asymptotique au sens de Poincaré de la fonction de Airy de première espèce en $+\infty$

$$\text{Ai}(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^{-2/3x^{3/2}}}{2\sqrt{\pi} x^{1/4}} {}_2F_0 \left(\begin{matrix} \frac{1}{6}, \frac{5}{6} \\ - \end{matrix} \middle| -\frac{3}{4}x^{-3/2} \right)$$

l'analogie est frappante.

Aperçu de la méthode. Considérons la série hypergéométrique divergente qui apparaît dans ce développement asymptotique,

$$g(t) = {}_2F_0 \left(\begin{matrix} \frac{1}{6}, \frac{5}{6} \\ - \end{matrix} \middle| 6t^6 \right)$$

qui vérifie l'équation différentielle suivante,

$$\left[\frac{1}{6}\theta - 6t^6 \left(\frac{1}{6}\theta + \frac{1}{6} \right) \left(\frac{1}{6}\theta + \frac{5}{6} \right) \right] g(t) = 0$$

où θ est l'opérateur d'Euler $t \frac{d}{dt}$. Cette équation se simplifie en,

$$[\theta - t^6 \theta^2 - 6t^6 \theta - 5t^6] g(t) = 0$$

Le travail consiste alors à chercher l'espèce combinatoire G satisfaisant l'équation différentielle combinatoire suivante (au sens des espèces)

$$G^{\bullet} \underset{\text{nat.}}{\simeq} X^6 G^{\bullet\bullet} + 6X^6 G^{\bullet} + 5X^6 G$$

et à expliciter l'isomorphisme naturel. Cette espèce n'est autre que celle des cartes triangulaires non-enracinées non nécessairement connexes M_3^* et l'isomorphisme naturel n'est autre que le procédé de décomposition récursive de cette espèce.

Cette démarche semble fidèle à celle du livre de Labelle, Leroux et Bergeron [14, 15] de fournir un relèvement combinatoire de la quasi totalité du calcul différentiel et intégral.

0.1.3 Un algorithme optimal pour générer les diagrammes trivalents enracinés et les cartes triangulaires enracinées

Dans le troisième chapitre nous détaillons et analysons un algorithme capable de dresser une liste exhaustive des cartes triangulaires enracinées d'une

taille donnée et des diagrammes trivalents enraciné en temps amorti constant. La preuve de la complexité fait intervenir un lemme très simple sur les arbres et semble applicable dans son principe à une vaste classe de générateurs exhaustifs procédant par backtrack. Les applications de l'algorithme sont nombreuses en voici quelques unes.

- (i) Fournir une liste d'exemples permettant de tester des conjectures et de forger l'intuition.
- (ii) Fournir une confirmation des résultats de dénombrement obtenus par des analyses indépendantes.
- (iii) Fournir des résultats de dénombrement finement gradués (en petit poids). En effet, ayant à disposition une liste complète des diagrammes de petite taille on peut collecter des statistiques beaucoup plus détaillées que celles que l'on sait obtenir au moyen de séries génératrices. Par exemple, aucune méthode n'est actuellement connue pour compter les cartes triangulaires non-étiquetées non-enracinées par leur genre et leur nombre de faces. La table 3.15 page 123 donne ce décompte en petite graduation et a été obtenu à partir notre algorithme.

Chapitre 1

Les Sous-groupes du groupe modulaire et leurs classes de conjugaison

1.0 Introduction

Les sous-groupes de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ interviennent par exemple dans l'étude des équations fonctionnelles de fonctions multivaluées sur des courbes algébriques projectives *i.e.* surfaces de Riemann compactes, notamment dans l'étude des fonctions polylogarithmes généralisées sur des revêtements algébriques de la sphère de Riemann. On sait par ailleurs qu'elles correspondent de façon exhaustive [9] aux courbes algébriques projectives (munies d'un nombre fini de *points marqués*) définies sur la clôture algébrique $\bar{\mathbb{Q}}$ du corps des nombres rationnels \mathbb{Q} . L'étude de ces structures en vue d'une meilleure compréhension du groupe de Galois absolu $\mathrm{Gal}_{\mathbb{Q}}(\bar{\mathbb{Q}})$ constitue un des points les plus saillants du vaste programme galoisien de Grothendieck [33] comme en témoigne le nombre de publications de haut niveau consacrées à ces questions sur les vingt dernières années. On peut même faire remonter l'origine de ce sujet aux travaux de Klein sur la géométrie de l'icosaèdre [40].

Le point principal se trouve sans doute être que $\mathrm{Gal}_{\mathbb{Q}}(\bar{\mathbb{Q}})$ agit *fidèlement* sur la catégorie de ces revêtements (en modifiant les données de monodromie).

Cette action est toutefois encore très loin d'être bien comprise et cela en dépit des nombreux efforts qui ont été consacrés à son étude. Elle jouit d'excellentes propriétés de finitude, ce qui attise l'espoir de parvenir un jour à la décrire complètement. Les objets permutés sont en effet des structures combinatoires basiques et les orbites de cette action sont toutes finies. Un nombre important de publications ont été consacrées et sont encore consacrées à l'étude d'invariants préservés par cette action de groupe dans l'espoir d'en caractériser un jour les orbites avec précision.

L'étude des formes modulaires s'est pour l'instant beaucoup concentrée sur la famille des sous-groupes de congruences présents dans $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$. Ils reçoivent une interprétation modulaire astucieuse due à P. Deligne [22]. Ils sont associés à la catégorie des courbes elliptiques classifiées modulo leurs isogénies centralisées par leurs points de n -division.

Le groupe modulaire se conçoit également comme l'exemple le plus significatif de groupe Fuchsien ainsi qu'en témoignent les illustres travaux de Poincaré. Son action sur le demi-plan de Poincaré \mathcal{H} est donnée par les transformations homographiques

$$\pm \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \tau = \frac{a\tau + b}{c\tau + d} \quad \mathrm{Im} \tau > 0$$

avec a, b, c et d entiers rationnels vérifiant $ad - bc = 1$. Cette action de groupe admet un domaine fondamental \mathcal{F} qui produit un pavage du demi-plan de Poincaré par des triangles hyperboliques. La figure 1.1 reprend cette situation qui est des plus classiques.

Les éléments τ du demi-plan de Poincaré \mathcal{H} sont sensés représenter l'invariant ω_2/ω_1 , où (ω_1, ω_2) décrit une base orientée d'un réseau de \mathbb{C} . C'est un invariant complet pour l'action du groupe \mathbb{C}^* des homothéties complexes. Une telle base est dite *réduite* lorsqu'elle satisfait aux conditions de Gauss, qui exprimées en terme de l'invariant τ se réduisent aux inégalités suivantes :

$$|1| \leq |\tau| \quad |\tau - 1| \leq |\tau| \quad |\tau + 1| \leq |\tau|$$

et ce sont précisément celles-ci qui définissent le domaine fondamental \mathcal{F} de l'action du groupe modulaire $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ sur le demi-plan de Poincaré [65].

Dans ce chapitre, nous parvenons à classifier les sous-groupes du groupe modulaire $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$, ainsi que leurs classes de conjugaison, au moyen d'invariants

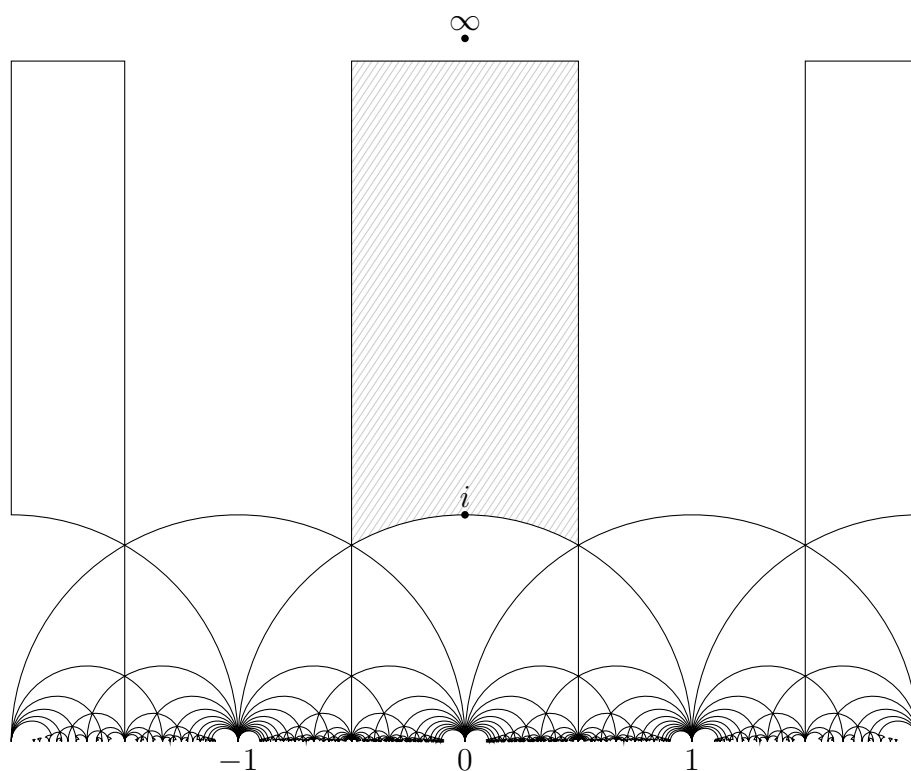


Figure 1.1. Pavage du demi-plan de Poincaré par les translatsés du domaine fondamental \mathcal{F} sous l'action du groupe modulaire $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$.

de nature combinatoire : des diagrammes. Notre argument s'applique en principe, moyennant quelques adaptations triviales, au cas du produit libre de deux groupes cycliques quelconques. Par exemple, le groupe modulaire $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ est produit libre des deux groupes cycliques $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ et $\mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ et ses sous-groupes se classifient de fait au moyen de diagrammes trivalents. On donne des critères simples sur les diagrammes permettant de décider récursivement (*i.e.* au moyen d'un algorithme) si un sous-groupe est distingué, si deux sous-groupes sont conjugués, ou plus simplement si deux sous-groupes sont en relation d'inclusion. On parvient en particulier aux correspondances biunivoques suivantes :

| | | |
|--|-----------------------|--|
| Diagrammes trivalents à isomorphisme près | \longleftrightarrow | Sous-groupes de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ à conjugaison près |
| Diagrammes trivalents pointés à isomorphisme près | \longleftrightarrow | Sous-groupes de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ |

Fort de ces équivalences, nous obtenons des formules générales, sous forme de séries génératrices pour compter le nombre de sous-groupes d'indice fini donné dans $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ et le nombre de leurs classes de conjugaison. Elles coïncident en effet avec le nombre de diagrammes trivalents et leurs variantes pointées pour un nombre d'arcs donné. On aboutit dans un premier temps à la formule générale donnant le nombre de diagrammes trivalents *pointés*, laquelle conduit aux premières valeurs suivantes,

$$\tilde{D}_3^\bullet(t) = t + t^2 + 4t^3 + 8t^4 + 5t^5 + 22t^6 + 42t^7 + 40t^8 + 120t^9 + \dots$$

Lesquelles avaient déjà été calculées par Stothers en 1977 [68].

La formule générale donnant le nombre de diagrammes trivalents *non-pointés* de taille donnée laquelle permet de compter le nombre de *classes de conjugaison* de sous-groupes ayant un indice fini donné dans $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$,

$$\tilde{D}_3(t) = t + t^2 + 2t^3 + 2t^4 + t^5 + 8t^6 + 6t^7 + 7t^8 + 14t^9 + \dots$$

était restée jusqu'à maintenant un problème ouvert et elle est nettement plus difficile à obtenir. La solution que nous présentons fait intervenir de façon cruciale la théorie des *espèces combinatoires*, due à Joyal et aux travaux de l'école québécoise de combinatoire. Les tables 3.1 à 3.5 pages 110 à 112 donnent une liste exhaustive des diagrammes trivalents *non pointés* de taille inférieure à *neuf*. Elles vérifient précisément ce décompte.

On dispose également d'une interprétation des diagrammes trivalents en terme de revêtements et la représentation de monodromie correspondante permet une relecture de ce dénombrement en terme de permutations : le n -ième terme correspond au nombre de paires de permutations (τ_1, τ_2) à conjugaison simultanée près qui agissent transitivement sur un ensemble de taille n et qui vérifient les conditions d'*involutivité* $\tau_1^2 = \mathrm{id}$ et de *triangularité* $\tau_2^3 = \mathrm{id}$.

Enfin, la formule générale, écrite naïvement, pose de sérieux problèmes de complexité : les calculs nécessaires pour en déterminer les coefficients interdisent par leur volume de considérer des termes au delà des tout premiers. Nous nous sommes donc attaché dans la dernière partie de cet exposé à donner une méthode de calcul efficace. Celle-ci s'appuie sur une factorisation inattendue de la série génératrice correspondante. Il en résulte un effondrement de la complexité qui autorise un calcul en très grand poids. On illustre ce point en donnant les termes de poids 500 des séries considérées.

1.1 Préliminaires combinatoires

1.1.1 Graphes généralités

Dans cette section nous introduisons une variante de la notion de graphe, laquelle servira de point de départ à la construction de notre invariant combinatoire. La définition présentée ici diffère légèrement de la notion habituelle de graphe mais le texte signalera clairement ces quelques différences. On s'attachera en outre dans la section suivante à décrire une opération permettant de construire un graphe au sens habituel à partir d'un graphe au sens de la définition ci-dessous, et la donnée d'une structure supplémentaire sur le graphe ainsi construit permettra de retrouver l'équivalence avec notre définition.

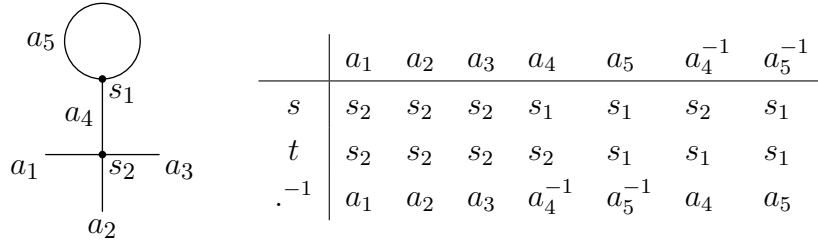
Définition 1.1. Par un *graphe* Γ , on entend la donnée de deux ensembles Γ_0 et Γ_1 , et de trois applications $s, t : \Gamma_1 \rightarrow \Gamma_0$ et $\cdot^{-1} : \Gamma_1 \rightarrow \Gamma_1$ qui vérifie pour tout $a \in \Gamma_1$:

$$(a^{-1})^{-1} = a \qquad s(a^{-1}) = t(a) \qquad t(a^{-1}) = s(a)$$

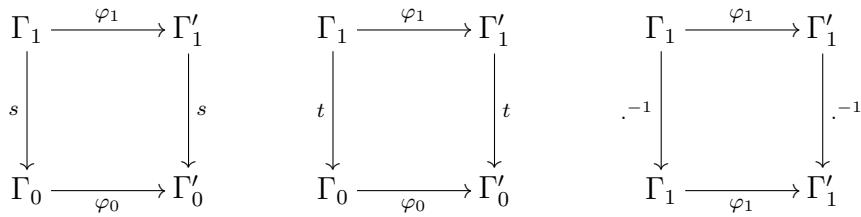
Les *sommets* du graphe sont les éléments de Γ_0 , ses *arcs* (ou *demi-arêtes*) sont les éléments de Γ_1 et les deux applications s et t font correspondre à tout arc a , son *origine* $s(a)$ et sa *destination* $t(a)$. Comme l'application \cdot^{-1} est involutive, on a une action du groupe à deux éléments sur Γ_1 . Les *arêtes* (ou *bi-arcs*) du graphe sont les orbites dans Γ_1 de cette action de groupe. On note Γ_1^* cet ensemble et π la projection $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_1^*$.

Remarque. La définition que l'on donne n'exclut pas qu'un arc ait même origine et même destination. On dit que c'est une *boucle*, ni qu'une arête ne comporte qu'un arc, auquel cas on dit que l'arête est *pliée* [33, p. 15]. En théorie quantique des champs, les diagrammes de Feynman sont des structures qui admettent de telles arêtes pliées, pour lesquelles une extrémité reste "ouverte", ce sont les *arêtes externes* du diagramme ou *pattes externes*.

Exemple 1. On observe que le graphe suivant admet *deux* sommets et *cinq* arêtes dont trois sont pliées. Il y a donc *sept* arcs. Le tableau précise les valeurs des trois applications correspondantes. On a posé $\Gamma_0 = \{s_1, s_2\}$ et $\Gamma_1 = \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_4^{-1}, a_5^{-1}\}$.



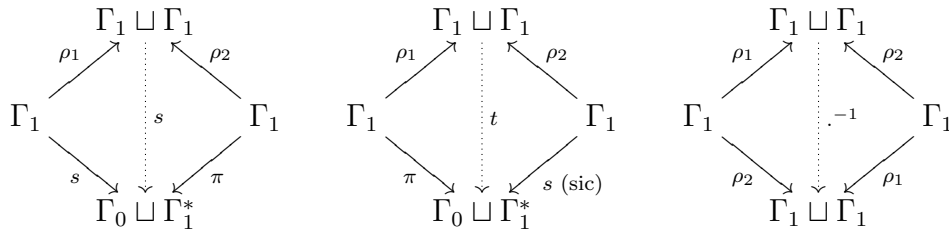
Définition 1.2. Un *morphisme* φ entre deux graphes Γ et Γ' est la donnée de deux applications $\varphi_0 : \Gamma_0 \rightarrow \Gamma'_0$ et $\varphi_1 : \Gamma_1 \rightarrow \Gamma'_1$ compatibles aux applications de structure en ce sens que les diagrammes suivants commutent :



1.1.2 Subdivision barycentrique

Nous décrivons maintenant un procédé simple pour se débarrasser des boucles et des arêtes pliées. La *subdivision barycentrique* est l'opération qui associe à tout graphe Γ le graphe Γ^{sb} obtenu à partir de Γ en ajoutant un sommet supplémentaire au milieu de chaque arête.

De façon plus précise, on associe à Γ le graphe Γ^{sb} avec $\Gamma_0^{\text{sb}} = \Gamma_0 \sqcup \Gamma_1^*$ et $\Gamma_1^{\text{sb}} = \Gamma_1 \sqcup \Gamma_1$. Les trois applications de structure sont définies par les trois diagrammes commutatifs suivants où l'on note ρ_1 et ρ_2 les injections naturelles associées à la réunion disjointe $\Gamma_1 \sqcup \Gamma_1$:



L'opération est évidemment *fonctorielle* mais n'admet pas d'opération inverse, ne serait-ce que parce qu'une fois l'opération effectuée, il n'y a plus moyen de distinguer les sommets qui proviennent de Γ_0 de ceux qui proviennent

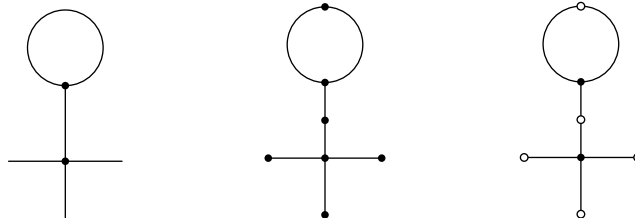
de Γ_1^* . Autrement dit, le foncteur n'est pas fidèle. Une façon de remédier au problème consiste à enrichir la catégorie d'arrivée par une information de *couleur*. Les graphes obtenus n'ont plus nos boucle ni arêtes pliés.

Définition 1.3. Un *graphe bicolorié* est un graphe Γ muni d'une application α de l'ensemble de ses sommets à valeurs dans $\{0, 1\}$.

Par convention, on qualifera de *blancs* (resp. de *noirs*) les sommets x tels que $\alpha(x) = 0$ (resp. $\alpha(x) = 1$). Les morphismes de graphes bicoloriés sont les morphismes de graphes qui préservent cette information supplémentaire.

L'opération de *subdivision barycentrique enrichie* est alors, l'opération qui à un graphe Γ associe le graphe Γ^{sb} muni de la coloration qui aux sommets provenant de Γ_0 associe la valeur *un* (noir) et à ceux qui proviennent de Γ_1^* associe la valeur *zéro* (blanc). On notera $\Gamma^{\text{sb}+}$ le graphe bicolorié ainsi obtenu.

Exemple 2. On reprend dans le dessin de gauche le graphe de l'exemple 1 plus haut. On représente au centre le résultat de sa subdivision barycentrique et à droite le résultat de sa subdivision barycentrique enrichie.



Le foncteur $\cdot^{\text{sb}+}$ que l'on obtient par ce qui précède est *pleinement fidèle*. Il n'est en revanche pas *surjectif* pas même au sens faible d'*essentiellement surjectif*. Les sommets blancs sont en effet toujours de degré *un* ou *deux*, suivant qu'ils proviennent d'une arête pliée ou non. De plus, deux sommets de même couleur ne sont jamais reliés par une même arête.

Définition 1.4. Un graphe bicolorié est dit *propre* (*clean*) si ses sommets blancs sont de degré *un* ou *deux* et si deux sommets de même couleur ne sont jamais reliés par une même arête.

On vérifie sans peine que le foncteur de subdivision barycentrique enrichie $\cdot^{\text{sb}+}$ est essentiellement surjectif sur la *sous-catégorie pleine* des graphes bico-

loriés propres. Il résulte donc une équivalence de catégories entre cette dernière et la catégorie des graphes au sens des définitions 1.1 et 1.2.

Remarque subsidiaire. Il y a une bijection naturelle évidente entre l'ensemble des arcs d'un graphe et les arêtes de sa subdivision barycentrique ; elle est d'ailleurs *unique* (à conjugaison par \cdot^{-1} près.)

1.1.3 Orientation cyclique aux sommets

Dans ce qui suit, nous allons procéder à quelques enrichissements supplémentaires de la catégorie des graphes.

Définition 1.5. L'*étoile* relative à un sommet x d'un graphe Γ est par définition l'ensemble $s^{-1}(x) = \{a \in \Gamma_1 \mid s(a) = x\}$ des arcs ayant pour origine ce sommet.

Etant donné un graphe Γ , une *orientation cyclique aux sommets* est la donnée d'une action $(a, k) \mapsto a + k$ du groupe cyclique infini \mathbb{Z} sur l'ensemble des arcs de Γ qui premièrement, soit compatible aux *étoiles* au sens où $s(a + 1) = s(a)$ quel que soit l'arc a et qui d'autre part, soit *étoile-transitive* au sens où quels que soient les arcs a_1 et a_2 , la condition $s(a_1) = s(a_2)$ entraîne l'existence d'une relation $a_1 = a_2 + k$ avec k dans \mathbb{Z} . Nous adopterons la formulation équivalente suivante, moins pesante.

Définition 1.6. Un graphe Γ est dit *cycliquement orienté aux sommets* s'il est muni d'une action de \mathbb{Z} sur Γ_1 dont les orbites coïncident exactement avec les étoiles du graphe.

Remarque. Il reviendrait au même de munir indépendamment chaque étoile d'une action transitive de \mathbb{Z} mais les notations seraient alors moins transparentes.

Définition 1.7. Un *morphisme* de graphes cycliquement orientés aux sommets est un morphisme de graphes φ dont la composante φ_1 est un morphisme de \mathbb{Z} -ensembles (*i.e.* $\varphi_1(a + 1) = \varphi_1(a) + 1$ quel que soit a).

Principe 1. La catégorie des ensembles munis de deux actions indépendantes, d'un groupe G_1 et d'un groupe G_2 , où les morphismes sont les applications qui commutent simultanément aux deux actions, est *isomorphe* à la catégorie des ensembles munis d'une action du produit libre $G_1 * G_2$.

Démonstration. Cela résulte de la propriété universelle du produit libre : en notant ρ les morphismes naturels associés au produit libre et η les morphismes de structure de ces actions de groupes, on voit qu'ils s'insèrent dans un diagramme commutatif comme suit :

$$\begin{array}{ccc}
 & G_1 * G_2 & \\
 \rho_1 \nearrow & \vdots & \nwarrow \rho_2 \\
 G_1 & \eta_1 * \eta_2 & G_2 \\
 \eta_1 \searrow & \vdots & \swarrow \eta_2 \\
 & \text{Sym}_X &
 \end{array}$$

Fin de la démonstration. □

Application. En faisant $G_1 = \mathbb{Z}$ et $G_2 = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, on voit qu'un graphe Γ cycliquement orienté aux sommets est canoniquement muni d'une action du groupe $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, produit libre du groupe cyclique infini \mathbb{Z} avec le groupe à deux éléments $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, sur l'ensemble de ses arcs, qui soit compatible aux morphismes naturels $\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \leftarrow \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$.

L'opération qui à un graphe muni d'une orientation cyclique aux sommets associe l'ensemble de ses arcs munis de cette action de groupe est fonctorielle (*foncteur d'oubli*). On voit tout de suite qu'elle ne peut pas être fidèle puisque deux graphes sans arêtes mais comportant un nombre de sommets différent ne sont pas distingués à l'arrivée. On est donc amené à restreindre la catégorie de *départ* :

Définition 1.8. On dira qu'un graphe muni d'une orientation cyclique aux sommets est un *diagramme* s'il ne comporte aucun sommet isolé.

Définition 1.9. Un diagramme sera qualifié de *trivalent* si ses sommets sont tous de degré *un* ou *trois*. Le *degré* d'un sommet étant le nombre d'arcs issus de ce sommet.

Remarque. Un diagramme est trivalent si et seulement si l'action de \mathbb{Z} sur ses arcs vérifie la condition $a + 3 = a$ pour tout a .

Théorème 1.1. *Le foncteur d'oubli, qui à un diagramme associe l'ensemble de ses arcs muni de l'action du groupe $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, est une équivalence de catégories.*

Démonstration. Nous allons décrire une opération de *reconstruction* qui à un ensemble muni d'une action de $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ redonne un diagramme *naturellement*

isomorphe au diagramme de départ. Nous n'explicitons pas la functorialité car celle-ci découle immédiatement de la nature des opérations utilisées.

Soit X un ensemble muni d'une action du groupe $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. On lui associe le graphe dont l'ensemble des arcs est X et dont l'ensemble des sommets est le quotient de X par l'action du groupe \mathbb{Z} . L'application s est la projection canonique $X \rightarrow X/\mathbb{Z}$, et l'application $\cdot^{-1} : X \rightarrow X$ est l'involution associée à l'élément non-trivial de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. L'application $t : X \rightarrow X/\mathbb{Z}$ est alors définie par $t(a) = s(a^{-1})$ pour tout a .

Les trois conditions de la définition 1.1 sont bien vérifiées. D'autre part, vu la construction, l'action de \mathbb{Z} est bien compatible à l'application s au sens de la définition 1.6. La définition 1.8 est elle aussi satisfaite puisque l'application s est *surjective*.

Il reste maintenant à exhiber l'isomorphisme naturel φ entre le diagramme de départ Γ et le diagramme reconstruit via cette opération : pour la composante φ_1 on choisit simplement l'identité de Γ_1 , la composante φ_0 nécessite en revanche un raisonnement. Il est immédiat au vu des définitions 1.6 et 1.8 que la paire (Γ_0, s) est un représentant du foncteur qui à tout ensemble Y associe l'ensemble des applications $u : \Gamma_1 \rightarrow Y$ pour lesquelles on ait $u(a+1) = u(a)$ quel que soit $a \in \Gamma_1$. Il résulte un isomorphisme naturel *canonique* entre la paire (Γ_0, s) et la paire $(\Gamma_1/\mathbb{Z}, \pi)$ où π désigne la projection $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_1/\mathbb{Z}$. On fait le choix de cette bijection pour φ_0 . La commutativité des trois diagrammes de la définition 1.2 est alors immédiate par naturalité. Fin de la démonstration. \square

Le résultat suivant permet de raffiner l'équivalence que l'on vient d'obtenir.

Théorème 1.2. *Un diagramme est connexe si et seulement si l'action du groupe $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ sur ses arcs est transitive.*

Démonstration. On rappelle qu'un graphe est connexe s'il existe une chaîne reliant toute paire de sommets distincts x et y , c'est-à-dire une suite finie d'arcs a_0, \dots, a_n telle que $s(a_0) = x$, $t(a_n) = y$ et $t(a_{k-1}) = s(a_k)$ pour $k = 1, \dots, n$. Comme l'action de \mathbb{Z} est supposée transitive sur chaque étoile, il revient au même de supposer qu'il existe une suite d'entiers r_1, \dots, r_n telle que $a_{k-1}^{-1} = a_k + r_k$. Comme d'autre part l'application s est supposée surjective,

cela équivaut bien à ce que l'action de $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ soit transitive sur les arcs. Fin de la démonstration. \square

Corollaire. *Il résulte que la catégorie des diagrammes connexes est équivalente à celle des $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ -ensembles transitifs.*

Convention. Dans ce qui suit, sauf mention expresse du contraire, les diagrammes seront tous supposés *connexes*.

1.1.4 Diagrammes pointés

Définition 1.10. Un diagramme est dit *pointé* lorsqu'il est muni d'un *arc distingué*, lequel est appelé *point base* du diagramme (*sic*). Les morphismes de diagrammes pointés seront toujours supposés respecter les points base.

Cette définition est justifiée par le résultat suivant :

Lemme 1.3. *Un morphisme φ entre deux diagrammes connexes Γ et Γ' est complètement déterminé par la donnée d'un arc de Γ et de son image.*

Il est clair qu'inversement, il n'existe pas toujours de morphisme d'un diagramme pointé Γ dans un autre Γ' . On dispose d'un critère précis :

Lemme 1.4. *Il existe un morphisme pointé $\varphi : (\Gamma, a) \rightarrow (\Gamma', a')$ entre deux diagrammes connexes Γ et Γ' si et seulement si les fixateurs de a et de a' dans $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ satisfont à la relation d'inclusion suivante :*

$$\text{Fix}_a(\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}) \subseteq \text{Fix}_{a'}(\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z})$$

En vertu de l'équivalence de catégories démontrée au paragraphe précédent, les deux lemmes sont une conséquence immédiate du principe général suivant :

Principe 2. Etant donnés deux ensembles pointés (X, x) et (Y, y) munis chacun d'une action transitive d'un même groupe G , il existe une application équivariante pointée $f : (X, x) \rightarrow (Y, y)$ si et seulement si les fixateurs de x et de y dans G satisfont à la relation d'inclusion suivante :

$$\text{Fix}_x(G) \subseteq \text{Fix}_y(G)$$

Une telle application est nécessairement unique.

Remarque. Il n'est pas nécessaire de supposer que le groupe G opère transitivement sur l'ensemble d'arrivé Y . Toutefois, si l'on ne suppose plus que l'action de G sur X soit transitive, il faut généraliser la notion de pointage pour retrouver un énoncé analogue.

Démonstration. Comme l'action de G sur X est supposée transitive, la condition que f soit pointée et équivariante suffit à la déterminer complètement. En effet, pour tout élément x' de X , on peut choisir un élément g de G tel que $x' = g.x$ et alors $f(x') = f(g.x) = g.f(x) = g.y$. Montrons à présent que la fonction f est indépendante de ce choix. Cela correspond à ce que $g.x = g'.x$ entraîne $g.y = g'.y$ quels que soient g et g' deux éléments de G . Il est par ailleurs évident que cette condition revient exactement à ce que les fixateurs de x et de y vérifient l'inclusion de l'énoncé. Fin de la démonstration. \square

Corollaire 1. *Une conséquence importante de l'unicité que l'on observe dans le principe précédent, est que si l'on a deux morphismes pointés comme suit,*

$$(\Gamma, a) \rightarrow (\Gamma', a') \quad \text{et} \quad (\Gamma', a') \rightarrow (\Gamma, a)$$

ce sont nécessairement deux isomorphismes réciproques l'un de l'autre.

En particulier, tout endomorphisme de diagramme qui fixe un arc, est nécessairement le morphisme identité. Le groupe des automorphismes d'un diagramme opère donc librement sur l'ensemble des ses arcs. On parle dans ce cas de structure semi-rigide.

1.1.5 Aspects algorithmiques

Une conséquence intéressante de l'enrichissement que constitue la donnée d'une orientation cyclique en chaque sommet, est qu'il est très commode de décider *récurivement* (c'est-à-dire au moyen d'un *algorithme*) s'il existe un morphisme pointé $\varphi : (\Gamma, a) \rightarrow (\Gamma', a')$ entre deux diagrammes connexes *finis* Γ et Γ' .

Définition 1.11. Une *paire critique* (relativement à deux diagrammes Γ et Γ') est par définition un couple (a, a') constitué d'un arc de chacun des graphes (a dans Γ_1 et a' dans Γ'_1) pour lesquels il existe une *obstruction* à la réalisation d'un morphisme pointé $(\Gamma, a) \rightarrow (\Gamma', a')$.

Une telle obstruction prend, en vertu du lemme 1.4 ci-dessus, la forme d'un élément g de $\mathbb{Z} * \mathbb{Z} / 2\mathbb{Z}$ tel que $g.a = a$ et $g.a' \neq a'$. Une façon pratique de décider de l'existence d'un tel élément consiste par exemple, à calculer la clôture dans $\Gamma_1 \times \Gamma'_1$ de la paire (a, a') par les deux règles suivantes :

$$\begin{aligned} (a_1, a_2) &\longrightarrow (a_1 + 1, a_2 + 1) \\ (a_1, a_2) &\longrightarrow (a_1^{-1}, a_2^{-1}) \end{aligned}$$

Il s'agit de la plus petite partie de $\Gamma_1 \times \Gamma'_1$ qui contienne (a, a') et qui soit stable vis-à-vis de ces deux règles.

Comme l'ensemble $\Gamma_1 \times \Gamma'_1$ est *fini* le calcul *termine* et d'après le lemme, la paire (a, a') considérée initialement est critique si et seulement si l'on rencontre deux paires (a_1, a_2) et (a_3, a_4) avec $a_1 = a_3$ et $a_2 \neq a_4$. En arrêtant le calcul dès que cette situation se produit, on peut même relâcher la condition de finitude portant sur le graphe Γ' ; on voit en outre que le nombre d'opérations élémentaires est du même ordre de grandeur que le nombre d'arcs de Γ .

1.2 Principe de classification

La classification repose en premier lieu sur l'équivalence de catégories entre les diagrammes pointés et les G -ensembles transitifs pointés faisant l'objet du théorème 1.1. Il convient ici d'énoncer quelques généralités supplémentaires concernant cette dernière catégorie.

Principe 3. L'ensemble sous-jacent à un groupe G muni de son action par translation (à gauche) et pointé par l'élément neutre est un objet *initial* dans la catégorie des G -ensembles transitifs pointés — C'est en réalité le cas de tout ensemble pointé sur lequel G opère librement et transitivement. Le point muni de l'action triviale du groupe G et de son pointage tautologique est quant à lui *terminal*.

Principe 4. Soit H un sous-groupe quelconque d'un groupe G et soit (X, x) un ensemble pointé sur lequel G opère à *gauche*, librement et transitivement (voir par exemple le principe 3 ci-dessus). On définit une action à *droite* de H sur X par,

$$x'.h \stackrel{\text{def.}}{=} (gh.x) \quad \text{Pour tout } x' = g.x \in X \text{ et tout } h \in H.$$

Cette action dépend évidemment du point base x . On note X/H l'ensemble quotient et $\pi : X \rightarrow X/H$ la projection correspondante. Le quotient X/H est alors canoniquement muni d'une action à gauche de G pour laquelle la projection π soit équivariante. Cette action est transitive et de plus, le fixateur de $\pi(x)$ dans G est exactement H .

Remarque. En vertu du principe 2, ce qui précède est un problème universel. L'objet construit est donc unique à isomorphisme canonique près.

Démonstration. L'action de H à droite est bien définie puisque par hypothèse la représentation $x' = g.x$ existe (G agit transitivement) et est unique (G agit librement). Vérifions que la relation $g.\pi(x') = \pi(g.x')$ définit une action de G sur le quotient X/H , ou plus précisément, que cette relation ne dépend pas du représentant x' de la classe $\pi(x')$. Soit donc x' et x'' deux éléments de X pour lesquels $\pi(x') = \pi(x'')$. Il existe donc $h \in H$ tel que $x'.h = x''$. On pose $x' = g'.x$ et $x'' = g''.x$ avec g' et g'' dans G (*uniques*, comme ci-dessus). Il résulte que l'on a $g'.h.x = g''.x$. En faisant agir l'élément g à gauche on obtient $gg'.h.x = gg''.x$. En appliquant π aux deux membres de l'égalité on obtient que $\pi(gg'.h.x) = \pi(gg''.x)$. En faisant agir l'élément h^{-1} à droite sur l'argument de π dans le membre de gauche, on obtient finalement la relation $\pi(gg'.x) = \pi(gg''.x)$ d'où $\pi(g.x') = \pi(g.x'')$. Ceci achève de démontrer que l'action de G induite par π est bien définie. La dernière assertion est évidente. Fin de la démonstration. \square

Principe 5. On sait bien que dans un G -ensemble, les fixateurs de deux éléments d'une même orbite sont conjugués. Plus précisément, on a :

$$\text{Fix}_x(G) = g \cdot \text{Fix}_{g.x}(G) \cdot g^{-1}$$

Application 1. Le principe 4 ci-dessus achève de démontrer les deux correspondances biunivoques suivantes :

$$\begin{array}{l} \text{Diagrammes pointés} \\ \text{à isomorphismes près} \end{array} \longleftrightarrow \text{Sous-groupes de } \mathbb{Z} * \mathbb{Z} / 2\mathbb{Z}$$

$$\begin{array}{l} \text{Diagrammes trivalents pointés} \\ \text{à isomorphismes près} \end{array} \longleftrightarrow \text{Sous-groupes de } \text{PSL}_2(\mathbb{Z})$$

Application 2. Le principe 5 ci-dessus permet de *gommer* les points base. Il en résulte les deux équivalences suivantes.

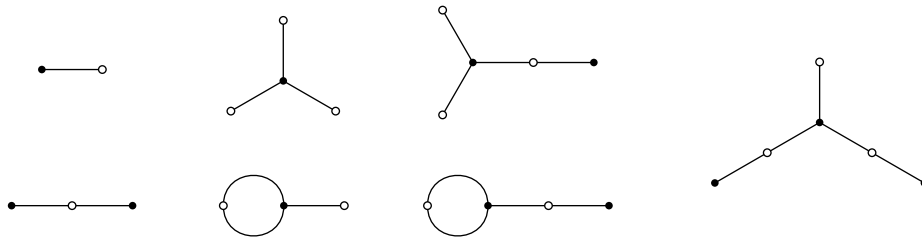


Table 1.1. Diagrammes trivalents de taille inférieure à cinq, à isomorphisme près.

| | | |
|---|-----------------------|---|
| Diagrammes à isomorphismes près | \longleftrightarrow | Sous-groupes de $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ à conjugaison près |
| Diagrammes trivalents à isomorphismes près | \longleftrightarrow | Sous-groupes de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ à conjugaison près |

Autrement dit, deux diagrammes pointés correspondent à deux sous-groupes conjugués si et seulement si les diagrammes obtenus en gommant les points base sont isomorphes.

Corollaire. *Un diagramme correspond donc à un sous-groupe distingué si et seulement si son groupe d'automorphismes opère transitivement sur ses arcs.*

Exemples. Les tables 1.1 à 1.5 ci-contre, donnent une liste exhaustive des diagrammes trivalents connexes dont la taille est inférieure ou égale à neuf. Afin de permettre une meilleure lisibilité de leurs arcs, les diagrammes sont représentés sous la forme de leur subdivision barycentrique enrichie (*cf.* section 1.1.2). Enfin, dans cette représentation, l'orientation cyclique aux sommets est choisie pour coïncider avec l'orientation trigonométrique du plan du dessin.

1.3 Dénombrement

Un des objectifs est à présent, de donner des formules générales, sous forme de séries génératrices, permettant de compter le nombre de diagrammes trivalents connexes ainsi que leurs variantes pointées. Pour obtenir ces séries nous nous sommes appuyés sur quelques résultats de *théorie des espèces*. Par

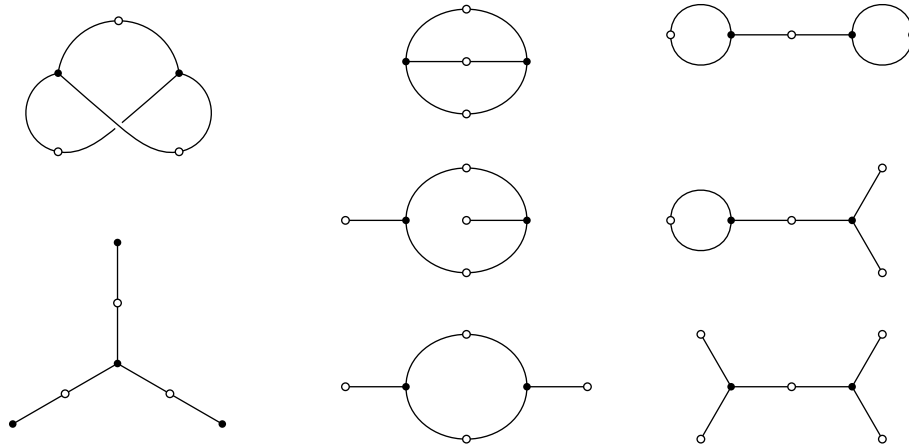


Table 1.2. Diagrammes trivalents de taille six, à isomorphisme près.

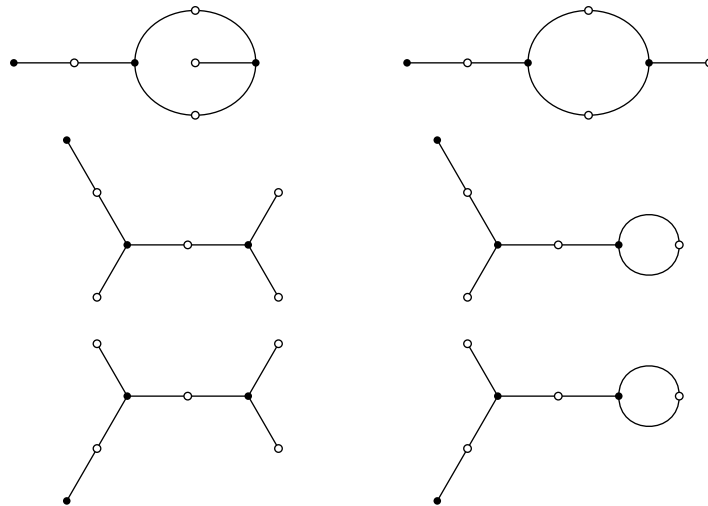


Table 1.3. Diagrammes trivalents de taille sept, à isomorphisme près.

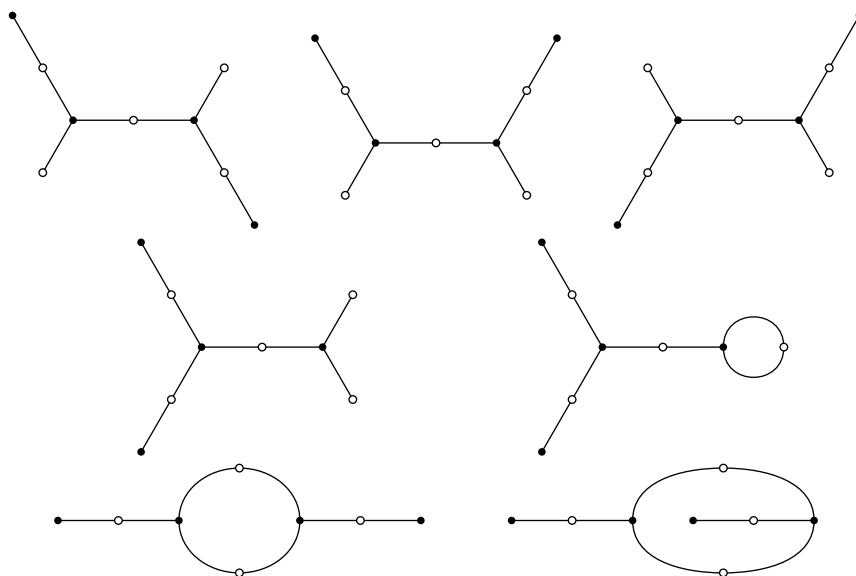


Table 1.4. Diagrammes trivalents de taille huit, à isomorphisme près.

commodité pour le lecteur, nous avons cru bon de présenter dans les sections suivantes un rapide survol des quelques rudiments qui nous sont utiles.

Le lecteur souhaitant approfondir le sujet pourra se référer à l'article fondateur [37]. Les articles [46], [88] et [89] sont consacrés à certains perfectionnements et généralisations. Enfin, l'ouvrage [14] reprend remarquablement l'ensemble des définitions, notations, et résultats de cette théorie, en un exposé à la fois pédagogique et synthétique.

1.3.1 Espèces combinatoires, généralités

La théorie des espèces débute par une reformulation éclairée de la théorie de Pólya [61, 62]. Il s'agit d'encoder la combinatoire d'une famille de structures dans une série dite d'index cyclique à une infinité de variables commutatives x_1, \dots, x_k, \dots

Définition 1.12. Une *espèce combinatoire* (au sens de A. Joyal [37]) est un foncteur F de la catégorie des ensembles finis avec bijections, vers celle des ensembles finis avec applications quelconques.

Etant donné un ensemble fini E et une espèce F , les éléments de l'ensemble

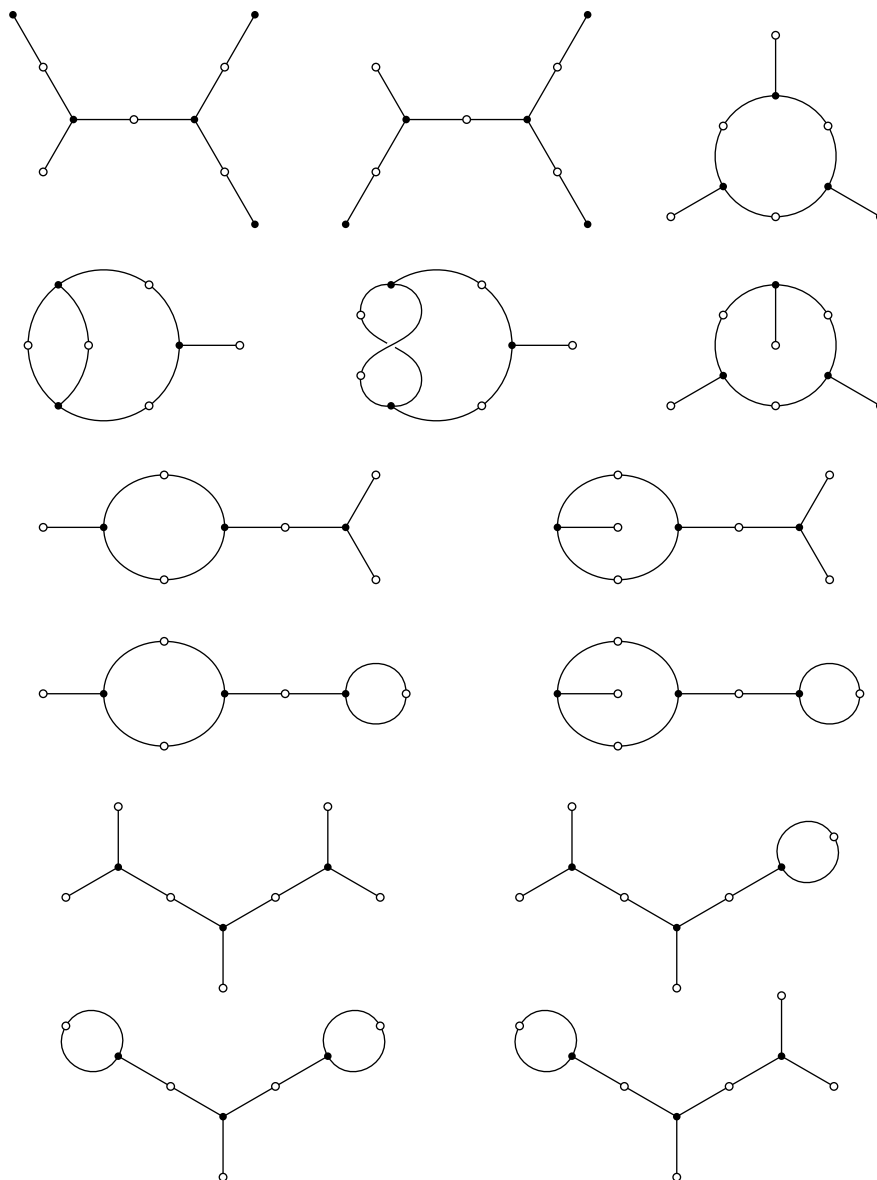


Table 1.5. Diagrammes trivalents de taille neuf, à isomorphisme près.

$F(E)$ sont les F -structures, ou structures d'espèce F , construites sur E . On dit aussi que l'ensemble E étiquette les structures de l'ensemble $F(E)$. Si ϱ est une bijection entre deux ensembles finis E_1 et E_2 , l'application induite $F(\varrho)$, notée ϱ_* , est le *transport de structure* le long de ϱ , elle associe à toute F -structure sur E_1 une F -structure sur E_2 , elle est de plus *bijective* par functorialité. On considère cette application comme un *réétiquetage*.

Définition 1.13. Un *morphisme* φ entre deux espèces combinatoires F et G est une *opération* qui à tout ensemble fini E associe une application $\varphi_E : F(E) \rightarrow G(E)$ commutant aux applications de transfert de structure au sens où, quel que soit l'application bijective ϱ entre deux ensembles finis E_1 et E_2 , le diagramme suivant soit commutatif :

$$\begin{array}{ccc} F(E_1) & \xrightarrow{\varphi_{E_1}} & G(E_1) \\ \varrho_* \downarrow & & \downarrow \varrho_* \\ F(E_2) & \xrightarrow{\varphi_{E_2}} & G(E_2) \end{array}$$

On résume la situation en disant que φ est une application *naturelle* [28] entre l'ensemble des F -structures construites au dessus d'un ensemble donné et celui des G -structures construites au-dessus du même ensemble.

Le simple fait d'avoir dégagé et mis en lumière cette condition de naturalité, doit être considéré comme un progrès important et un apport significatif de la théorie des espèces. Un tel morphisme, préserve non seulement le décompte des structures étiquetées mais aussi celui des classes de structures obtenues par l'opération de *réétiquetage* *i.e.* l'opération du groupe symétrique, induite par functorialité à partir de son action sur l'ensemble des étiquettes.

Exemples. Nous donnons ici quelques exemples qui seront réutilisés ensuite pour traiter les problèmes énumératifs visés :

1. L'*espèce des ensembles* notée Ens est le foncteur qui, à tout ensemble fini E , associe le singleton $\text{Ens}(E) = \{E\}$ et à toute application bijective $\varrho : E_1 \rightarrow E_2$ associe l'application canonique $\text{Ens}(E_1) \rightarrow \text{Ens}(E_2)$.
2. L'*espèce des permutations* notée S est le foncteur qui, à tout ensemble fini E , associe l'ensemble $S(E)$ des permutations σ de E et

qui à toute bijection $\varrho : E_1 \rightarrow E_2$ associe la conjugaison par ϱ définie par $\varrho_*(\sigma) = \varrho \sigma \varrho^{-1}$.

3. L'espèce des permutations d'ordre n notée S_n qui, à tout ensemble fini E , associe le sous-ensemble $S_n(E)$ de $S(E)$ constitué des permutation σ vérifiant $\sigma^n = \text{id}$.
4. L'espèce des cycles notée C qui à tout ensemble fini E associe le sous-ensemble $C(E)$ de $S(E)$ constitué des permutations cycliques.
5. On définit de même l'espèce des cycles de longueur n notée C_n qui, à tout ensemble fini E , associe l'ensemble $C_n(E) = C(E)$ si E est de taille n et l'ensemble vide sinon.

Structures étiquetées vs. structures non-étiquetées

On distingue essentiellement deux problématiques de dénombrement attachées à une espèce combinatoire donnée F . La première, consiste à exprimer le nombre de structures *étiquetées* d'espèce F construites sur un ensemble d'étiquettes donné E . N'importe quelle bijection entre les deux ensembles $F(E)$ et $G(E)$ préserve ce dénombrement.

La deuxième problématique, beaucoup plus délicate, consiste à compter les structures *non-étiquetées*. Il s'agit des orbites de l'action du groupe symétrique, induite par functorialité à partir de son action sur l'ensemble des étiquettes. Deux structures étiquetées sont considérées comme identiques du point de vue non-étiqueté dès que l'on peut obtenir l'une à partir de l'autre par une opération de *réétiquetage*. Pour qu'une bijection entre les deux ensembles $F(E)$ et $G(E)$ préserve ce dénombrement il suffit qu'elle commute aux réétiquetages.

Séries associées

A une espèce combinatoire F , on associe trois séries génératrices $F(t)$, $\tilde{F}(t)$ et $\mathcal{Z}_F(x_1, x_2, \dots, x_k, \dots)$ en l'indéterminée commutative t (de poids un) pour les deux premières et en l'infinité d'indéterminées commutatives x_1, \dots, x_k, \dots (de poids $1, \dots, k, \dots$ respectivement) pour la dernière. Elles correspondent chacune à une problématique de dénombrement précise.

1. La *série génératrice exponentielle* ou *série de Hurwitz*

$$F(t) = \sum_{n \geq 0} \frac{a_n}{n!} t^n \quad \text{avec } a_n \stackrel{\text{def.}}{=} |F(\{1, \dots, n\})|$$

qui compte les *structures étiquetées*.

2. La *série génératrice des types d'isomorphisme*

$$\tilde{F}(t) = \sum_{n \geq 0} \tilde{a}_n t^n \quad \text{avec } \tilde{a}_n \stackrel{\text{def.}}{=} |F(\{1, \dots, n\})/\mathfrak{S}_n|$$

qui compte les *classes d'isomorphisme des structures*.

3. Enfin, la *série indicatrice des cycles*, ou *série de Joyal-Pólya* [61, 62, 37],

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_F &= \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} a_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} x_1^{\sigma_1} \cdots x_n^{\sigma_n} \\ &= \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n} \frac{a_{k_1, \dots, k_n}}{1^{k_1} k_1! \cdots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \cdots x_n^{k_n} \end{aligned}$$

où l'on désigne par $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ les nombres de cycles de longueur 1 à n de la permutation σ et où $a_{\sigma_1, \dots, \sigma_n}$ désigne le nombre de points fixes de la permutation $\sigma_* = F(\sigma)$ induite par F sur l'ensemble $F(\{1, \dots, n\})$ des structures d'espèce F construites au-dessus de l'ensemble $X = \{1, \dots, n\}$. La notation précédente est justifiée puisque ce nombre ne dépend que du type cyclique de σ (*i.e.* les entiers $\sigma_1, \dots, \sigma_n$). On peut donc utiliser la notation a_{k_1, \dots, k_n} , où k_1, \dots, k_n sont des entiers vérifiant $k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n$.

Les trois séries précédentes sont des *invariants* de l'espèce combinatoire F pour la notion d'isomorphisme d'espèces combinatoires. Mais si l'on omettait la condition de naturalité présente dans la définition 1.13, seule la première série serait conservée par isomorphisme. C'est là, la lacune principale de la combinatoire bijective qui empêchait, avant la théorie des espèces, de traiter des exemples significatifs de dénombrements non-étiquetés. Les seuls dénombrements non-étiquetés s'obtenaient tous jusque-là, à partir d'un dénombrement étiqueté, en résolvant les symétries par une astuce.

Le dénombrement de diagrammes pointés que l'on donne à la section 1.3.4 est un exemple d'application d'une telle méthode; il s'obtient sans recourir aux séries indicatrices. Par contraste, il semble impossible d'obtenir le

dénombrement de diagrammes non-pointés à partir d'un dénombrement de structures étiquetées. Le recours aux séries indicatrices est donc indispensable dans ce cas.

Lemme de condensation ([37, 14]). *La série indicatrice des cycles \mathcal{Z}_F d'une espèce F raffine les deux séries génératrices $F(t)$ et $\tilde{F}(t)$ au sens où l'on a $F(t) = \mathcal{Z}_F(t, 0, 0, \dots)$ et $\tilde{F}(t) = \mathcal{Z}_F(t, t^2, t^3, \dots)$.*

Remarque. Ces deux changements de variable sont compatibles avec la graduation posée précédemment.

Démonstration. La première formule résulte immédiatement de l'interprétation combinatoire des coefficients. La deuxième est quant à elle conséquence immédiate du lemme de Burnside. \square

Exemples. Nous donnons ci dessous, les séries génératrices de l'espèce des ensembles et de celle des permutations. Le cas des espèces C , C_n et S_n des cycles, des cycles de longueur n et des permutations d'ordre n respectivement, est l'objet de la section 1.3.5.

1. Pour l'espèce Ens des ensembles, on a trivialement $a_n = 1$, $\tilde{a}_n = 1$ et $a_{k_1, \dots, k_n} = 1$. D'où il résulte aussitôt,

$$\begin{aligned} \text{Ens}(t) &= \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} t^n = \exp(t) \\ \widetilde{\text{Ens}}(t) &= \sum_{n \geq 0} t^n = \frac{1}{1-t} \\ \mathcal{Z}_{\text{Ens}}(x_1, x_2, \dots) &= \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n} \frac{1}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n} \\ &= \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \frac{1}{k^n n!} x_k^n \right) \\ &= \prod_{k \geq 1} \exp\left(\frac{x_k}{k}\right) \end{aligned}$$

2. Pour l'espèce S des permutations, on a trivialement $a_n = n!$, $\tilde{a}_n = p_n$, où p_n est le nombre de partitions de l'entier n , et $a_{k_1, \dots, k_n} =$

$1^{k_1} k_1! \cdots n^{k_n} k_n!$. D'où il résulte aussitôt,

$$\begin{aligned} S(t) &= \sum_{n \geq 0} t^n = \frac{1}{1-t} \\ \tilde{S}(t) &= \sum_{n \geq 0} p_n t^n = \prod_{k \geq 1} \frac{1}{1-t^k} \quad \text{d'après Euler [30],} \\ \mathcal{Z}_S(x_1, x_2, \dots) &= \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1+2k_2+\dots+nk_n=n} x_1^{k_1} \cdots x_n^{k_n} \\ &= \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} x_k^n \right) \\ &= \prod_{k \geq 1} \frac{1}{1-x_k} \end{aligned}$$

1.3.2 Exponentiation et logarithme d'espèces combinatoires

Les formules concernant la série d'index cyclique des trois espèces C , C_n et S_n des *cycles*, des *cycles de longueur n* et des *permutations d'ordre n* respectivement s'obtiennent par un jeu faisant intervenir les deux opérations d'*exponentiation* et de *logarithme* d'une espèce combinatoire.

On suppose donnée une espèce combinatoire F pour laquelle on ait $F(\emptyset) = \emptyset$. On note $\text{Ens}(F)$ ou encore F^* , l'espèce obtenue à partir de l'espèce F par *composition* pléthystique avec le foncteur Ens de l'espèce des ensembles. Il s'agit de l'*exponentielle* de l'espèce F . Les $\text{Ens}(F)$ -structures sont par définition des *assemblées* [37] de F -structures. De façon plus précise, le foncteur $\text{Ens}(F)$ associe à tout ensemble fini E , l'ensemble dont les éléments sont les uplets $(n; P_1, \dots, P_n; A_1, \dots, A_n)$ constitués d'un entier n , d'une partition de E comportant n parties P_1, \dots, P_n et sur chacune de ces parties, la donnée A_k d'une structure d'espèce F construite au dessus d'elle (*i.e.* on impose que A_k appartienne à l'ensemble $F(P_k)$ quel que soit k).

Pour les séries de Hurwitz associées à deux espèces F et G reliées par la relation fonctorielle $G \simeq \text{Ens}(F)$, on a les relations suivantes, lesquelles justifient la terminologie.

$$G(t) = \exp(F(t)) \quad \text{et} \quad F(t) = \log(G(t))$$

Les séries génératrices des types d'isomorphisme satisfont aux relations plus compliquées suivantes, dues à Harary et Palmer [34].

$$\tilde{G}(t) = \exp\left(\sum_{n \geq 1} \frac{1}{n} \tilde{F}(t^n)\right) \quad \text{et} \quad \tilde{F}(t) = \sum_{n \geq 1} \frac{\mu(n)}{n} \log\left(\tilde{G}(t^n)\right)$$

où μ désigne la fonction de Möbius.

Ces formules admettent la généralisation suivante, due à Joyal [37], aux séries d'index cyclique associées aux espèces F et G .

$$\mathcal{Z}_G = \exp\left(\sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} \mathcal{Z}_{F,k}\right) \quad \text{et} \quad \mathcal{Z}_F = \sum_{k \geq 1} \frac{\mu(k)}{k} \log(\mathcal{Z}_{G,k})$$

où $\mathcal{Z}_{F,k}$ et $\mathcal{Z}_{G,k}$ désignent les séries obtenues à partir des séries \mathcal{Z}_F et \mathcal{Z}_G respectivement, en effectuant le changement de variable consistant à remplacer la variable x_n par la variable x_{kn} , et cela simultanément pour tout $n \geq 1$. Autrement dit, si de manière générale, on note $\mathcal{Z}_F(x_1, x_2, x_3, \dots)$ la série indicatrice d'une espèce F , quel que soit l'entier $k \geq 1$, on a :

$$\mathcal{Z}_{F,k}(x_1, x_2, x_3, \dots) = \mathcal{Z}_F(x_k, x_{2k}, x_{3k}, \dots)$$

1.3.3 Produit cartésien de deux espèces, somme directe

Le produit cartésien de deux espèces, s'interprète comme une *superposition de structures*, contrairement au produit habituel qui lui, s'interprète comme une *juxtaposition de structures*. La somme directe s'interprète elle, comme une *disjonction de structures*. De façon plus précise :

Définition 1.14. Le *produit cartésien* de deux espèces combinatoires F et G , est l'espèce notée $F \times G$, définie pour tout ensemble fini E et toute application bijective f entre deux ensembles finis E_1 et E_2 , par :

$$\begin{aligned} (F \times G)(E) &= F(E) \times G(E) \\ (F \times G)(f) &= F(f) \times G(f) \end{aligned}$$

Définition 1.15. On définit de même, la *somme directe* de deux espèces combinatoires F et G , notée $F + G$, qui à tout ensemble fini E et toute application bijective f entre deux ensembles finis E_1 et E_2 , associe respectivement :

$$\begin{aligned} (F + G)(E) &= F(E) \sqcup G(E) \\ (F + G)(f) &= F(f) \sqcup G(f) \end{aligned}$$

De façon plus précise, si l'on note :

$$\begin{array}{lll} E'_1 = F(E_1) & E'_2 = F(E_2) & f' = F(f) \\ E''_1 = G(E_1) & E''_2 = G(E_2) & f'' = G(f) \end{array}$$

On a deux diagrammes commutatifs comme suit :

$$\begin{array}{ccc} E'_1 \xleftarrow{\pi'_1} E'_1 \times E''_1 \xrightarrow{\pi''_1} E''_1 & & E'_1 \xrightarrow{\rho'_1} E'_1 \sqcup E''_1 \xleftarrow{\rho''_1} E''_1 \\ \downarrow f' & \downarrow f' \times f'' & \downarrow f'' \\ E'_2 \xleftarrow{\pi'_2} E'_2 \times E''_2 \xrightarrow{\pi''_2} E''_2 & & E'_2 \xrightarrow{\rho'_2} E'_2 \sqcup E''_2 \xleftarrow{\rho''_2} E''_2 \end{array}$$

où l'on note π les projections naturelles associées à chacun des deux produits cartésiens et ρ les injections naturelles associées à chacune des deux réunions disjointes. De la sorte, la flèche verticale du milieu de chacun des deux diagrammes est nécessairement unique et le produit cartésien de deux espèces F et G est le *produit direct*, au sens des catégories, des deux foncteurs correspondants. Idem pour la somme directe, qui s'interprète comme une *somme directe* de foncteurs ou *coproduit*.

Remarque. Le produit cartésien $F \times G$ de deux espèces combinatoires F et G ne correspond pas au produit habituel, noté $F \cdot G$ et il en est de même pour les séries associées. Parmi ces deux notions, nous n'aurons toutefois à considérer le produit cartésien et non le produit usuel.

Dénombrément étiqueté

Soient données deux espèces combinatoires F et G , dont les séries de Hurwitz sont les suivantes,

$$F(t) = \sum_{n \geq 0} \frac{a_n}{n!} t^n \quad \text{et} \quad G(t) = \sum_{n \geq 0} \frac{b_n}{n!} t^n$$

Il est clair que la série de Hurwitz du produit cartésien $F \times G$ de ces deux espèces est le *produit de Hadamard* des deux séries précédentes :

$$F(t) \odot G(t) \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{n \geq 0} \frac{a_n b_n}{n!} t^n$$

Il n'existe malheureusement pas de formule de ce genre pour les séries génératrices des types d'isomorphisme. La difficulté provient du fait que le foncteur de *passage au quotient* (qui à un ensemble sur lequel opère un groupe fait correspondre l'ensemble des orbites de cette action de groupe) souffre d'un défaut d'exactitude à *gauche* : il ne commute pas au produit cartésien et n'a pas d'adjoint formel à droite.

Il commute toutefois à la réunion disjointe de sorte que la série génératrice des types d'isomorphisme associée à la somme directe de deux espèces combinatoires est la somme usuelle des séries correspondantes.

Dénombrement non-étiqueté

Pour traiter de la question du produit cartésien de deux espèces combinatoires (correspondant à la *superposition* de structures) il convient, dans le cadre du dénombrement non-étiqueté, d'introduire la série de Joyal-Pólya ou *série indicatrice des cycles* de ces deux espèces. Ce type de série compte les *points fixes* de l'action de réétiquetage, et non ses *orbites*. Or le foncteur de *passage aux points fixes* d'une action de groupe est lui *exact à gauche*, il commute aux produits et aux sommes et admet un adjoint formel à droite. Cela permet de retrouver un principe de comptage. Il résulte en particulier, le lemme suivant qui établit des formules qui combinées au lemme de condensation permettent de traiter cette question.

Lemme 1.5. *Si l'on note par \mathcal{Z}_F et \mathcal{Z}_G les séries indicatrices des cycles [61, 62, 37] de deux espèces combinatoires F et G :*

$$\mathcal{Z}_F = \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1+2k_2+\dots+nk_n=n} \frac{a_{k_1,\dots,k_n}}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n} \text{ et}$$

$$\mathcal{Z}_G = \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1+2k_2+\dots+nk_n=n} \frac{b_{k_1,\dots,k_n}}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n}$$

La série indicatrice des cycles du produit cartésien $F \times G$ est simplement le produit de Hadamard des deux séries précédentes :

$$\mathcal{Z}_F \odot \mathcal{Z}_G \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1+2k_2+\dots+nk_n=n} \frac{a_{k_1,\dots,k_n} b_{k_1,\dots,k_n}}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n}$$

La série indicatrice des cycles de la somme directe $F + G$ est la somme usuelle $\mathcal{Z}_F + \mathcal{Z}_G$ (terme à terme) des deux séries \mathcal{Z}_F et \mathcal{Z}_G .

Application 3. Considérons les espèces D et D^* , des *diagrammes* au sens de la définition 1.8, respectivement connexes et non-nécessairement connexes. On rappelle qu'il s'agit de graphes au sens des définitions 1.1 et 1.2 munis d'une orientation cyclique aux sommets au sens de la définition 1.6 et dépourvus de sommets isolés. En vertu du théorème 1.1 on sait que l'espèce D^* est isomorphe à celle des ensembles munis d'une action du groupe $\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. On sait aussi, ce qui est équivalent par application du principe 1, qu'elle est isomorphe à l'espèce des ensembles munis chacun d'une action indépendante des deux groupes \mathbb{Z} et $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. De là, on tire les deux isomorphismes naturels suivants :

$$\text{Ens}(D) \simeq D^* \simeq S_2 \times S$$

où l'on désigne par S_2 l'espèce des *involutions* et par S celle des *permutations* quelconques et où le premier isomorphisme traduit l'existence et l'unicité de la décomposition d'un diagramme en somme directe de ses composantes connexes.

Application 4. Si l'on se restreint aux espèces D_3 et D_3^* des *diagrammes trivalents*, respectivement connexes et non-nécessairement connexes, on a comme précédemment, conformément au lemme 1.1.3, les deux isomorphismes naturels suivants :

$$\text{Ens}(D_3) \simeq D_3^* \simeq S_2 \times S_3$$

où l'on désigne comme ci-dessus, par S_2 l'espèce des involutions et par S_3 celle des permutations d'ordre trois.

1.3.4 Dénombrement de diagrammes pointés

Nous considérons dans cette section les deux espèces D_3^\bullet et D_3 , des diagrammes trivalents connexes, respectivement *pointés* et *non-pointés*. Nous donnerons ci-dessous des exemples permettant de bien saisir la distinction. Nous considérons les séries formelles suivantes associées à ces deux espèces.

| Diagrammes | Pointés | Non-pointés |
|---------------|--|--|
| Étiquetés | $D_3^\bullet(t) = \sum_{n \geq 0} \frac{a_n^\bullet}{n!} t^n$ | $D_3(t) = \sum_{n \geq 0} \frac{a_n}{n!} t^n$ |
| Non-Étiquetés | $\tilde{D}_3^\bullet(t) = \sum_{n \geq 0} \tilde{a}_n^\bullet t^n$ | $\tilde{D}_3(t) = \sum_{n \geq 0} \tilde{a}_n t^n$ |

On a trivialement la relation suivante, qui exprime que le choix d'un point base sur les structures étiquetées revient à appliquer l'opérateur d'Euler à la séries génératrices de Hurwitz.

$$D_3^\bullet(t) = t \frac{d}{dt} D_3(t)$$

Comme d'autre part, les diagrammes trivalents connexes pointés sont des structures *rigides*, au sens où elle n'admettent pas d'automorphisme, on a $\tilde{D}_3^\bullet(t) = D_3^\bullet(t)$. De cela il résulte,

$$a_n^\bullet = n a_n \quad \text{et} \quad \tilde{a}_n^\bullet = \frac{a_n^\bullet}{n!} \quad \text{puis} \quad \tilde{a}_n^\bullet = \frac{a_n}{(n-1)!}$$

On s'est donc ramenés, pour compter le nombre \tilde{a}_n^\bullet de diagrammes trivalents connexes pointés et non-étiquetés, à compter le nombre a_n de diagrammes trivalents connexes étiquetés.

De l'isomorphisme $\text{Ens}(D_3) \simeq S_2 \times S_3$ on tire la relation $D_3(t) = \log(S_2(t) \odot S_3(t))$. On sait d'autre part que les séries $S_2(t)$ et $S_3(t)$ admettent les expressions simples suivantes

$$S_2(t) = \exp\left(t + \frac{t^2}{2}\right) \quad \text{et} \quad S_3(t) = \exp\left(t + \frac{t^3}{3}\right)$$

On obtient alors l'expression suivante permettant de calculer les coefficients de la série génératrice $\tilde{D}_3^\bullet(t)$:

$$D_3(t) = \log\left(\sum_{n \geq 0} n! t^n \sum_{\substack{n_1+2n_2=n \\ n_3+3n_4=n}} \frac{1}{n_1! n_2! n_3! n_4! 2^{n_2} 3^{n_4}}\right)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0^* = 1, \quad a_1^* = 1, \quad a_2^* = 1, \quad a_3^* = 2, \quad a_4^* = \frac{15}{4}, \quad a_5^* = \frac{91}{20}, \\ (n^4 + 18n^3 + 119n^2 + 343n + 366) a_{n+6}^* = \\ (n^5 + 18n^4 + 121n^3 + 373n^2 + 511n + 242) a_n^* \\ + (3n^2 + 15n + 18) a_{n+1}^* \\ + (2n^4 + 33n^3 + 205n^2 + 566n + 582) a_{n+2}^* \\ + (3n^4 + 52n^3 + 938n^2 + 333n^2 + 982) a_{n+3}^* \\ + (n^3 + 12n^2 + 53n + 85) a_{n+4}^* \\ + (n^3 + 9n^2 + 20n + 1) a_{n+5}^* \end{array} \right.$$

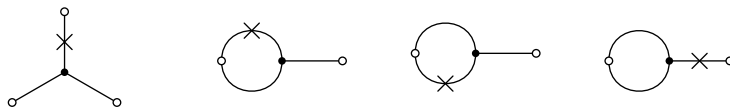
Table 1.6. Relation de récurrence de longueur six vérifiée par les coefficients de la série $D_3^*(t)$.

Les coefficients de la série sous le log, laquelle n'est autre que $D_3^*(t)$, peuvent être calculés efficacement en utilisant l'équation de récurrence linéaire donnée dans la table 1.6. On aboutit finalement au dénombrement suivant, sous la forme de la série $\tilde{D}_3^\bullet(t)$, des sous-groupes du groupe modulaire $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$:

$$\tilde{D}_3^\bullet(t) = t + t^2 + 4t^3 + 8t^4 + 5t^5 + 22t^6 + 42t^7 + \dots$$

Il reste maintenant à calculer la série $\tilde{D}_3(t)$, ce qui sera fait au moyen de séries de Joyal-Pólya au paragraphe 1.3.6. Nous améliorons le calcul au moyen de la notion de forme factorisée et nous donnons une formule explicite au paragraphe 1.3.7.

Application 5. Le groupe modulaire admet donc un seul sous-groupe d'indice deux, nécessairement distingué et quatre sous-groupes d'indice trois. Il est facile sur les diagrammes correspondants de constater que parmi ces quatre sous-groupes, un seul est distingué et que les trois autres sont conjugués entre eux.



On a huit sous-groupes d'indice quatre formant deux classes de conjugaison correspondant chacune au quatre façons de pointer chacun des deux dia-

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_3^\bullet(t) = & t + t^2 + 4t^3 + 8t^4 + 5t^5 + 22t^6 + 42t^7 + 40t^8 + 120t^9 + 265t^{10} + 286t^{11} \\
& + 764t^{12} + 1729t^{13} + 2198t^{14} + 5168t^{15} + 12144t^{16} + 17034t^{17} + 37702t^{18} \\
& + 88958t^{19} + 136584t^{20} + 288270t^{21} + 682572t^{22} + 1118996t^{23} \\
& + 2306464t^{24} + 5428800t^{25} + 9409517t^{26} + 19103988t^{27} + 44701696t^{28} \\
& + 80904113t^{29} + 163344502t^{30} + 379249288t^{31} + 711598944t^{32} \\
& + 1434840718t^{33} + 3308997062t^{34} + 6391673638t^{35} + 12921383032t^{36} \\
& + 29611074174t^{37} + 58602591708t^{38} + 119001063028t^{39} \\
& + 271331133136t^{40} + 547872065136t^{41} + 1119204224666t^{42} \\
& + 2541384297716t^{43} + 5219606253184t^{44} + 10733985041978t^{45} \\
& + 24300914061436t^{46} + 50635071045768t^{47} + 104875736986272t^{48} \\
& + 236934212877684t^{49} + 499877970985660t^{50} + o(t^{50})
\end{aligned}$$

Table 1.7. Développement à l'ordre cinquante de la série $\tilde{D}_3^\bullet(t)$ donnant le nombre de diagrammes trivalent connexes pointés (A005133).

grammes trivalents de taille quatre. On a cinq sous-groupes d'indice cinq tous conjugués entre eux, correspondant aux cinq pointages de l'unique diagramme trivalent de taille cinq.

Parmi les sous-groupes d'indice six, seuls deux sont distingués, ils correspondent aux deux diagrammes non-équivalents suivants,



qui ont pour groupes d'automorphisme, le groupe symétrique \mathfrak{S}_3 et le groupe cyclique $\mathbb{Z}/6\mathbb{Z}$ respectivement.

Ces deux diagrammes correspondent à deux sous-groupes bien connus de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$. Le premier, n'est autre que le *groupe modulaire de niveau deux*, lequel est isomorphe au groupe libre à deux générateurs et est associé à la classification des courbes elliptiques modulo les isogénies centralisées par leurs

points de deux-division. On l'obtient comme noyau du morphisme naturel $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z}) \rightarrow \mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}) \simeq \mathfrak{S}_3$. Le deuxième diagramme correspond lui, au sous-groupe dérivé constitué des commutateurs de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$, le groupe cyclique $\mathbb{Z}/6\mathbb{Z}$ est par conséquent l'*abélianisé* de $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$, *i.e.* son premier groupe d'homologie.

1.3.5 Dénombrement de permutations

Nous cherchons à présent à déterminer explicitement les coefficients des séries \mathcal{Z}_{S_n} pour $n = 2$ et 3 afin de pouvoir calculer les termes de la série génératrice des types de l'espèce D_3 . Nous le faisons plus généralement pour $n = p$ un nombre premier quelconque, et le même raisonnement s'appliquerait pour un nombre entier n quelconque avec des formules plus compliquées au fur et à mesure que le nombre de diviseurs de n augmente.

Lemme 1.6 (Comparer à [37, 14]). *On a l'écriture suivante pour la série d'index cyclique \mathcal{Z}_C associée à l'espèce des cycles,*

$$\mathcal{Z}_C = \sum_{\substack{r \geq 1 \\ s \geq 1}} \frac{\varphi(r) x_r^s}{rs}$$

où φ désigne l'indicatrice d'Euler.

Démonstration. A partir de l'isomorphisme naturel $S \simeq \mathrm{Ens}(C)$ exprimant l'existence et l'unicité de la décomposition des permutations en cycles à supports disjoints, on obtient, au moyen de la formule d'inversion de Möbius, la série indicatrice de l'espèce des cycles :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_C &= \sum_{k \geq 1} \frac{\mu(k)}{k} \log \left(\prod_{l \geq 1} \frac{1}{1 - x_{kl}} \right) \\ &= \sum_{r \geq 1} \sum_{d | r} \frac{\mu(d)}{d} \log \left(\frac{1}{1 - x_r} \right) \\ &= \sum_{r \geq 1} \frac{\varphi(r)}{r} \log \left(\frac{1}{1 - x_r} \right) \\ &= \sum_{\substack{r \geq 1 \\ s \geq 1}} \frac{\varphi(r) x_r^s}{rs} \end{aligned}$$

Fin de la démonstration. □

Lemme 1.7 (Comparer à [37, 14]). *On a l'écriture suivante pour la série d'index cyclique \mathcal{Z}_{C_n} associée à l'espèce des cycles de longueur n ,*

$$\mathcal{Z}_{C_n} = \sum_{rs=n} \frac{\varphi(r) x_r^s}{n}$$

Démonstration. Il s'agit de regrouper les termes de la série \mathcal{Z}_C calculée précédemment, en paquets homogènes de même poids. On obtient alors l'expression de $\mathcal{Z}_{C_n} = \mathcal{Z}_C^{[n]}$, la composante homogène de poids n de \mathcal{Z}_C :

$$\mathcal{Z}_C = \sum_{n \geq 1} \sum_{rs=n} \frac{\varphi(r) x_r^s}{n} \quad \text{d'où,} \quad \mathcal{Z}_{C_n} = \sum_{rs=n} \frac{\varphi(r) x_r^s}{n}$$

Fin de la démonstration. □

Théorème 1.8 (Comparer à [37, 14]). *La série indicatrice de l'espèce S_n des permutations σ d'ordre n (i.e. qui satisfont à la relation $\sigma^n = 1$) est donnée par la formule ci-dessous où φ désigne l'indicatrice d'Euler.*

$$\mathcal{Z}_{S_n} = \prod_{k \geq 1} \prod_{\substack{rs|n \\ r|k}} \exp \frac{\varphi(r) x_k^s}{ks}$$

Important. *On observe un phénomène de séparation des variables, lequel est à l'origine de l'algorithme rapide de calcul de séries génératrices des types d'isomorphisme, donné au paragraphe 1.3.7 : la série génératrice \mathcal{Z}_{S_n} s'exprime comme produit de séries univariées en les x_k .*

Démonstration. Comme une permutation d'ordre n se décompose canoniquement en cycles d'ordre d où d divise n , on obtient un isomorphisme naturel $S_n \simeq \text{Ens}(\sum_{d|n} C_d)$. D'où,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{S_n} &= \exp \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} \sum_{d|n} \sum_{rs=d} \frac{\varphi(r) x_{kr}^s}{d} \\ &= \exp \sum_{k \geq 1} \sum_{rs|n} \frac{\varphi(r) x_{kr}^s}{krs} \\ &= \prod_{k \geq 1} \prod_{\substack{rs|n \\ r|k}} \exp \frac{\varphi(r) x_k^s}{ks} \end{aligned}$$

Fin de la démonstration. □

Les deux résultats suivants donnent les coefficients de la série \mathcal{Z}_{S_n} sous une forme plus explicite en se restreignant pour simplifier, au cas où l'entier n est un nombre premier p . Les raisonnements s'étendent sans difficulté au cas d'un entier n quelconque mais nous ne ferons usage que des cas $p = 2$ et $p = 3$ dans la suite.

Théorème 1.9. *Pour p un nombre premier quelconque, on a l'écriture suivante, sous forme factorisée de la série indicatrice de l'espèce des permutations d'ordre p ,*

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{S_p} &= \prod_{k \geq 1} \exp \left(\chi_{p,k} \frac{x_k}{k} + \frac{x_k^p}{pk} \right) \\ &= \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \sum_{n_1 + pn_2 = n} \frac{\chi_{p,k}^{n_1}}{n_1! n_2! k^{n_1+n_2} p^{n_2}} x_k^n \right)\end{aligned}$$

où le symbole $\chi_{p,k}$ vaut p ou 1 suivant que k est divisible par p ou non.

Démonstration. Il s'agit d'expliciter les coefficients de la série \mathcal{Z}_{S_p}

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{S_p} &= \prod_{k \geq 1} \exp \sum_{\substack{rs|p \\ r|k}} \frac{\varphi(r) x_k^s}{ks} \\ &= \prod_{k \geq 1} \exp \left(\frac{\varphi(1) x_k}{k} + \frac{\varphi(1) x_k^p}{kp} + \begin{cases} \frac{\varphi(p) x_k}{k} & \text{si } k \equiv 0 \pmod{p} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \right) \\ &= \prod_{k \geq 1} \exp \left(\chi_{p,k} \frac{x_k}{k} + \frac{x_k^p}{kp} \right) \quad \text{avec } \chi_{p,k} = \begin{cases} p & \text{si } k \equiv 0 \pmod{p} \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}\end{aligned}$$

Il suffit à présent d'extraire les coefficients de cette série indicatrice. On observe pour cela le développement de Taylor suivant,

$$\exp(az + bz^p) = \sum_{\substack{n_1 \geq 0 \\ n_2 \geq 0}} \frac{a^{n_1} b^{n_2}}{n_1! n_2!} z^{n_1 + pn_2}$$

qui nous donne bien (en effectuant un changement de variables convenable),

$$\mathcal{Z}_{S_p} = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \sum_{n_1 + pn_2 = n} \frac{\chi_{p,k}^{n_1}}{n_1! n_2! k^{n_1+n_2} p^{n_2}} x_k^n \right)$$

Fin de la démonstration. □

Théorème 1.10. *Le nombre $u_p(\sigma)$ de permutations d'ordre p premier sur un ensemble à n éléments, qui commutent à une permutation σ ne dépend que du type cyclique $(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ de σ (où σ_k désigne le nombre de cycles de longueur k présent dans la décomposition cyclique de σ), et vaut :*

$$u_p(\sigma) = \prod_{k=1}^n \sum_{n_1 + pn_2 = \sigma_k} \frac{\sigma_k! k^{\sigma_k} \chi_{p,k}^{n_1}}{n_1! n_2! k^{n_1+n_2} p^{n_2}} \quad \text{avec } \chi_{p,k} = \begin{cases} p & \text{si } p \text{ divise } k, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Démonstration. Le premier point est évident. Il est alors permis de noter $u_p(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ la valeur de $u_p(\sigma)$. Pour montrer le deuxième point nous nous appuyons sur le théorème 1.9 démontré précédemment.

$$\mathcal{Z}_{S_p} = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \sum_{n_1 + pn_2 = n} \frac{\chi_{p,k}^{n_1}}{n_1! n_2! k^{n_1+n_2} p^{n_2}} x_k^n \right)$$

et puisque l'on a, par définition :

$$\mathcal{Z}_{S_p} = \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n} \frac{u_p(k_1, \dots, k_n)}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n}$$

Il ne reste plus qu'à identifier les coefficients de ces deux écritures. Fin de la démonstration. \square

1.3.6 Calcul explicite : première méthode

Fort des formules que l'on vient d'obtenir nous tâchons à présent de compter les diagrammes trivalents non-pointés. Nous commençons pour cela par évaluer explicitement les séries indicatrices \mathcal{Z}_{S_2} et \mathcal{Z}_{S_3} de l'espèce des permutations d'ordre *deux* et *trois* respectivement, puis nous évaluons celle de l'espèce $D_3^* \simeq S_2 \times S_3$ des diagrammes trivalents non-nécessairement connexes.

Pour donner une idée des calculs, nous présentons dans les tables numériques 1.8 et 1.9 ci-contre, le développement en filtration *sept* de ces deux séries. Elles sont obtenues en explicitant la formule du théorème 1.10 avec $p = 2$ puis $p = 3$. La table 1.10 donne quant à elle les coefficients de la série indicatrice des cycles de l'espèce $S_2 \times S_3$. Ils s'obtiennent, conformément au lemme 1.5 en effectuant le produit de Hadamard des deux séries précédentes.

En effectuant le changement de variable $x_k \rightarrow t^k$ dans cette dernière série on obtient, conformément au lemme de condensation et à l'isomorphisme

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{S_2} = & 1 + x_1 + \frac{1}{2} (2x_1^2 + 2x_2) + \frac{1}{6} (4x_1^3 + 6x_1x_2 + 2x_3) \\
& + \frac{1}{24} (10x_1^4 + 24x_1^2x_2 + 8x_1x_3 + 18x_2^2 + 12x_4) \\
& + \frac{1}{120} (26x_1^5 + 80x_1^3x_2 + 40x_1^2x_3 + 90x_1x_2^2 + 60x_1x_4 + 40x_2x_3 + 24x_5) \\
& + \frac{1}{720} \left(\begin{aligned} & 76x_1^6 + 300x_1^4x_2 + 160x_1^3x_3 + 540x_1^2x_2^2 + 360x_1^2x_4 \\ & + 240x_1x_2x_3 + 144x_1x_5 + 300x_2^3 + 360x_2x_4 + 160x_3^2 \\ & + 240x_6 \end{aligned} \right) \\
& + \frac{1}{5040} \left(\begin{aligned} & 232x_1^7 + 1092x_1^5x_2 + 700x_1^4x_3 + 2520x_1^3x_2^2 + 1680x_1^3x_4 \\ & + 1680x_1^2x_2x_3 + 1008x_1^2x_5 + 2100x_1x_2^3 + 2520x_1x_2x_4 \\ & + 1120x_1x_3^2 + 1680x_1x_6 + 1260x_2^2x_3 + 1008x_2x_5 \\ & + 840x_3x_4 + 720x_7 \end{aligned} \right) \\
& + \text{etc...}
\end{aligned}$$

Table 1.8. Série indicatrice des cycles de l'espèce S_2 .

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{S_3} = & 1 + x_1 + \frac{1}{2} (x_1^2 + x_2) + \frac{1}{6} (3x_1^3 + 3x_1x_2 + 6x_3) \\
& + \frac{1}{24} (9x_1^4 + 6x_1^2x_2 + 24x_1x_3 + 3x_2^2 + 6x_4) \\
& + \frac{1}{120} (21x_1^5 + 30x_1^3x_2 + 60x_1^2x_3 + 15x_1x_2^2 + 30x_1x_4 + 60x_2x_3 + 24x_5) \\
& + \frac{1}{720} \left(\begin{aligned} & 81x_1^6 + 135x_1^4x_2 + 360x_1^3x_3 + 45x_1^2x_2^2 + 90x_1^2x_4 + 360x_1x_2x_3 \\ & + 144x_1x_5 + 135x_2^3 + 90x_2x_4 + 360x_3^2 + 360x_6 \end{aligned} \right) \\
& + \frac{1}{5040} \left(\begin{aligned} & 351x_1^7 + 441x_1^5x_2 + 1890x_1^4x_3 + 315x_1^3x_2^2 + 630x_1^3x_4 \\ & + 1260x_1^2x_2x_3 + 504x_1^2x_5 + 945x_1x_2^3 + 630x_1x_2x_4 + 2520x_1x_3^2 \\ & + 2520x_1x_6 + 630x_2^2x_3 + 504x_2x_5 + 1260x_3x_4 + 720x_7 \end{aligned} \right) \\
& + \text{etc...}
\end{aligned}$$

Table 1.9. Série indicatrice des cycles de l'espèce S_3 .

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{S_2} \odot \mathcal{Z}_{S_3} &= 1 + x_1 + \frac{1}{2} (2x_1^2 + 2x_2) + \frac{1}{6} (12x_1^3 + 6x_1x_2 + 6x_3) \\
&+ \frac{1}{24} (90x_1^4 + 24x_1^2x_2 + 24x_1x_3 + 18x_2^2 + 12x_4) \\
&+ \frac{1}{120} \left(\begin{aligned} &546x_1^5 + 240x_1^3x_2 + 120x_1^2x_3 + 90x_1x_2^2 + 60x_1x_4 \\ &+ 120x_2x_3 + 24x_5 \end{aligned} \right) \\
&+ \frac{1}{720} \left(\begin{aligned} &6156x_1^6 + 2700x_1^4x_2 + 1440x_1^3x_3 + 540x_1^2x_2^2 \\ &+ 360x_1^2x_4 + 720x_1x_2x_3 + 144x_1x_5 + 2700x_2^3 \\ &+ 360x_2x_4 + 1440x_3^2 + 720x_6 \end{aligned} \right) \\
&+ \frac{1}{5040} \left(\begin{aligned} &81432x_1^7 + 22932x_1^5x_2 + 18900x_1^4x_3 + 7560x_1^3x_2^2 \\ &+ 5040x_1^3x_4 + 5040x_1^2x_2x_3 + 1008x_1^2x_5 + 18900x_1x_2^3 \\ &+ 2520x_1x_2x_4 + 10080x_1x_3^2 + 5040x_1x_6 + 3780x_2^2x_3 \\ &+ 1008x_2x_5 + 2520x_3x_4 + 720x_7 \end{aligned} \right) \\
&+ \text{etc...}
\end{aligned}$$

Table 1.10. Série indicatrice des cycles de l'espèce $S_2 \times S_3$.

$D_3^* \simeq S_2 \times S_3$, les huit premiers termes de la série génératrice des types d'isomorphisme de l'espèce D_3^* des diagrammes trivalents non-nécessairement connexes :

$$\tilde{D}_3^*(t) = 1 + t + 2t^2 + 4t^3 + 7t^4 + 10t^5 + 24t^6 + 37t^7 + \dots$$

La série génératrice des types d'isomorphismes de l'espèce D_3 des diagrammes trivalents connexes s'obtient, au moyen de la formule d'inversion de Möbius en vertu de l'isomorphisme naturel $D_3^* \simeq \text{Ens}(D_3)$ qui traduit l'existence et l'unicité de la décomposition d'un diagramme trivalent quelconque en ses composantes connexes.

$$\tilde{D}_3(t) = \sum_{k \geq 1} \frac{\mu(k)}{k} \log(\tilde{D}_3^*(t^k))$$

Le calcul explicite donne les premiers coefficients suivants :

$$\tilde{D}_3(t) = t + t^2 + 2t^3 + 2t^4 + t^5 + 8t^6 + 6t^7 + \dots$$

1.3.7 Calcul explicite : deuxième méthode

Le nombre et la taille des termes d'une série indicatrice de cycle sont souvent prohibitifs et conduisent à des calculs difficilement menables. En effet, même à l'aide de puissants ordinateurs on ne peut en général guère espérer calculer en grand poids, car il y a en général p_n termes en poids n (où p_n désigne le nombre de partitions d'un ensemble à n éléments) et donc $p_0 + p_1 + p_2 + \dots + p_n$ termes en tout dans une série tronquée en filtration n .

A titre indicatif, signalons qu'en filtration cinquante, il y a déjà plus d'un million de termes dans une série d'index cyclique générique et que dans les cas habituels, la plupart d'entre eux sont tellement gros que leur écriture nécessitent plusieurs pages manuscrites. En poids cinq cents, il faudrait compter environ $4,2 \times 10^{22}$ termes dont la taille serait bien plus grande encore. Autant dire que l'on ne peut guère espérer mener les calculs très loin sans introduire d'idée nouvelle.

Nous avons réussi à mener les calculs au-delà du poids cinq cents à l'aide d'un station de bureau en un temps très bref (environ un quart d'heure). La solution provient de la notion suivante :

Définition 1.16. Une série indicatrice de cycle \mathcal{Z} est dite *séparable* si elle admet une écriture de la forme suivante :

$$\mathcal{Z} = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \frac{a_{k,n}}{k^n n!} x_k^n \right) \quad \text{avec } a_{k,0} = 1 \text{ pour tout } k \geq 1.$$

(un produit de séries univariées en les x_k .)

Une telle écriture s'appelle *forme factorisée* de la série \mathcal{Z} . Les coefficients $a_{k,n}$ sont alors *uniques*. En développant, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n} \left(\frac{a_{1,k_1}}{1^{k_1} k_1!} x_1^{k_1} \right) \dots \left(\frac{a_{n,k_n}}{n^{k_n} k_n!} x_n^{k_n} \right) \\ &= \sum_{n \geq 0} \sum_{k_1 + 2k_2 + \dots + nk_n = n} \frac{a_{k_1, \dots, k_n}}{1^{k_1} k_1! \dots n^{k_n} k_n!} x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n} \end{aligned}$$

où l'on a posé $a_{k_1, \dots, k_n} = a_{1,k_1} \dots a_{n,k_n}$.

L'intérêt principal de cette notion est que le nombre de termes présents dans chacune des sommes entre parenthèses dans la formule de la définition 1.16 est m/n en filtration m puisque le terme x_n^k est de poids kn . Le nombre total de termes est donc,

$$n + \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{n}{3} \right\rfloor + \dots + 1 = O(n \log n)$$

ce qui est petit. Si l'on est capable d'effectuer les calculs directement sur la forme factorisée, on assiste à un effondrement de la complexité, que l'on n'était pas en mesure d'attendre à priori. C'est à proprement parler, un petit miracle de l'arithmétique.

1.3.8 Critère de séparabilité

Le lemme suivant aboutit à un critère très commode de séparabilité. Une permutation est dite *pure* lorsque tout ses cycles ont même longueur.

Lemme 1.11. *Soit G un groupe constitué de permutations de n lettres. Les deux points suivants sont équivalents.*

- (i) *Le groupe G agit librement.*
- (ii) *Les permutations de G sont toutes pures.*

Démonstration. Supposons que G agisse librement et supposons en vue d'une contradiction qu'il comporte une permutation non pure σ . Soit c_1 et c_2 deux cycles de σ de longueurs respectives k_1 et k_2 avec $k_1 < k_2$. Les points du cycles c_1 sont fixés par la permutation $\sigma^{k_1} \in G$ mais pas ceux du cycle c_2 . Cela contredit la liberté de l'action de G .

Supposons maintenant que toutes les permutations de G soient pures. Si l'une de ces permutations σ comporte un point fixe (un cycle de longueur un), alors tout les points de σ sont fixes et σ est l'élément neutre de G . Ceci montre que l'action de G est libre. Fin de la démonstration. \square

Définition 1.17. Une espèce combinatoire F est dite,

- (i) *rigide*¹, si ses objets ont tous un groupe de symétrie trivial,
- (ii) *semi-rigide*, si l'espèce pointée F^\bullet associée est rigide,
- (iii) *séparable*, si sa série indicatrice \mathcal{Z}_F est séparable.

Critère 1.12. Soit F une espèce combinatoire n'admettant qu'un seul objet en poids un. Les points suivants sont équivalents.

- (i) F est séparable.
- (ii) La série indicatrice \mathcal{Z}_{F^c} est une somme de séries univariées en les x_k .
- (iii) L'action du groupe de symétrie sur les composantes connexes est libre.
- (iv) L'espèce connexe associée F^c est semi-rigide.

Démonstration. Nous procédons par équivalence. Soit F une espèce combinatoire séparable. Sa série indicatrice est de la forme,

$$\mathcal{Z}_F = \prod_{k \geq 1} F_k(x_k)$$

La série indicatrice de l'espèce connexe F^c est donc,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{F^c} &= \sum_{\ell \geq 1} \frac{\mu(\ell)}{\ell} \log \left(\prod_{k \geq 1} F_k(x_k) \right) \\ &= \sum_{n \geq 1} \sum_{\ell k = n} \frac{\mu(\ell)}{\ell} \log(F_k(x_n)) \end{aligned}$$

Inversement, si \mathcal{Z}_{F^c} est somme de séries univariées en les x_k on a,

$$\mathcal{Z}_{F^c} = \sum_{k \geq 1} F_k^c(x_k)$$

1. elles sont parfois appelées plates ou asymétrique [15, Définition 2, p. 322].

et donc,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_F &= \exp \sum_{\substack{\ell \geq 1 \\ k \geq 1}} \frac{1}{\ell} F_k^c(x_k) \\ &= \prod_{n \geq 1} \exp \sum_{\ell k = n} \frac{1}{\ell} F_k^c(x_n) \end{aligned}$$

Ceci montre l'équivalence des deux premiers points.

Si la série indicatrice \mathcal{Z}_{F^c} est somme de séries univariées en les x_k , c'est que les permutations du groupe de symétrie de chaque composante connexe sont toutes pures. En appliquant le lemme on voit donc que les points (ii) et (iii) sont équivalents.

Il reste à remarquer que le fait que l'action du groupe de symétrie d'une structure soit libre signifie exactement que la seule symétrie pouvant préserver un point marqué est l'identité. On constate ainsi que les points (iii) et (iv) sont équivalents. Fin de la démonstration. \square

1.3.9 Produit de Hadamard de séries séparables

Une propriété étonnante des séries séparables, non évidente a priori, est précisément que le produit de Hadamard de deux telles séries s'exprime encore de façon simple en terme des coefficients de leurs formes factorisées. De façon précise :

Lemme 1.13. *Si*

$$\mathcal{Z}_1 = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \frac{a_{k,n}}{k^n n!} x_k^n \right) \quad \text{et} \quad \mathcal{Z}_2 = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \frac{b_{k,n}}{k^n n!} x_k^n \right)$$

sont deux séries d'index cyclique séparables, présentées sous leurs formes factorisées, alors,

$$\mathcal{Z}_1 \odot \mathcal{Z}_2 = \prod_{k \geq 1} \left(\sum_{n \geq 0} \frac{a_{k,n} b_{k,n}}{k^n n!} x_k^n \right)$$

Démonstration. Immédiat par inspection des formules. \square

Application 6. On aboutit finalement à la série génératrice $\tilde{D}_3(t)$, laquelle énumère pour un nombre d'arêtes donné, les diagrammes trivalents connexes à isomorphisme près, ou ce qui est équivalent, les classes de conjugaison de sous-groupes d'indice fini correspondants dans le groupe modulaire $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$.

$$\tilde{D}_3(t) = \sum_{r \geq 1} \frac{\mu(r)}{r} \sum_{k \geq 1} \log \left(\sum_{n \geq 0} n! k^n u_{k,n} v_{k,n} t^{rkn} \right)$$

où les éléments $u_{k,n}$ et $v_{k,n}$ sont les coefficients de Taylor de la fonction,

$$\exp \left(\chi_{p,k} \frac{x_k}{k} + \frac{x_k^p}{kp} \right) \quad \text{avec } \chi_{p,k} = \begin{cases} p & \text{si } k \equiv 0 \pmod{p} \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

pour les valeurs $p = 2$ et $p = 3$ respectivement. Ce qui donne les valeurs suivantes, en effectuant le développement en série.

$$u_{k,n} = \sum_{n_1+2n_2=n} \frac{\chi_{2,k}^{n_1}}{n_1! n_2! k^{n_1+n_2} 2^{n_2}} \quad \text{et} \quad v_{k,n} = \sum_{n_1+3n_2=n} \frac{\chi_{3,k}^{n_1}}{n_1! n_2! k^{n_1+n_2} 3^{n_2}}$$

Lesquelles vérifient des équations de récurrences évidentes, d'ordre deux et trois respectivement. La table 1.11 ci-contre donne les cinquante premiers termes de la série $\tilde{D}_3(t)$.

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_3(t) = & t + t^2 + 2t^3 + 2t^4 + t^5 + 8t^6 + 6t^7 + 7t^8 + 14t^9 + 27t^{10} + 26t^{11} \\
& + 80t^{12} + 133t^{13} + 170t^{14} + 348t^{15} + 765t^{16} + 1002t^{17} + 2176t^{18} \\
& + 4682t^{19} + 6931t^{20} + 13740t^{21} + 31085t^{22} + 48652t^{23} + 96682t^{24} \\
& + 217152t^{25} + 362779t^{26} + 707590t^{27} + 1597130t^{28} + 2789797t^{29} \\
& + 5449439t^{30} + 12233848t^{31} + 22245655t^{32} + 43480188t^{33} \\
& + 97330468t^{34} + 182619250t^{35} + 358968639t^{36} + 800299302t^{37} \\
& + 1542254973t^{38} + 3051310056t^{39} + 6783358130t^{40} + 13362733296t^{41} \\
& + 26648120027t^{42} + 59101960412t^{43} + 118628268978t^{44} \\
& + 238533003938t^{45} + 528281671324t^{46} + 1077341937144t^{47} \\
& + 2184915316390t^{48} + 4835392099548t^{49} + 9997568771074t^{50} + o(t^{50})
\end{aligned}$$

Table 1.11. Développement à l'ordre cinquante de la série $\tilde{D}_3(t)$ donnant le nombre de diagrammes trivalents connexes (A121350).

$$\begin{aligned}
[t^{500}] \tilde{D}_3^\bullet(t) = & 129430367485890696501112403782149140632007458406669818924 \\
& 049655237581302432985235983195547225893573668769081095237 \\
& 520334045385563837477539980582454212848418771007253898122 \\
& 98261906049050179891685415479424
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[t^{500}] \tilde{D}_3(t) = & 258860734971781393002224807564298281264014916813339637848 \\
& 099310475162604865970471966391094451787371816235545381100 \\
& 065419026649727056066352318775170749619149459628751242388 \\
& 57108849306258234323621889976
\end{aligned}$$

Table 1.12. Termes de poids *cinq cents* des séries $\tilde{D}_3^\bullet(t)$ et $\tilde{D}_3(t)$.

Chapitre 2

A Combinatorial Interpretation of Airy Asymptotics

2.0 Introduction

In this chapter we prove that the coefficients in the asymptotic expansion of the logarithmic derivative of the Airy function of the first kind give the exact number of triangulations of compact oriented surfaces of a given size. To prove this fact, we introduce an exact recursive decomposition of the triangulations which yields a recurrence relation among the number of triangular subdivisions precisely matching that of the Airy asymptotics.

2.1 Triangular Maps

A *topological map* Λ is a polyhedral decomposition of a compact oriented surface S in cells of dimension *zero*, *one* and *two*, which are called the *vertices*, *edges* and *faces* of the map. Each n -dimensional cell is assumed to be diffeomorphic to the standard n -disc D^n . A map is said to be *strictly triangular* if each of its faces is bordered by a cycle of exactly three directed edges.

Combinatorial maps, and in particular triangular maps, are completely des-

cribed by various convenient *combinatorial invariants*. Three of the most useful are the *permutational description* of combinatorial maps, *incidence diagram* and *combinatorial skeleton*, the later two being mutually Poincaré (*i.e.* face-vertex) dual to each other, meaning that the incidence diagram of a map is the combinatorial skeleton of its Poincaré dual and vice versa. In what follows, we shall restrict ourselves to present one of those convenient combinatorial descriptions, namely the *incidence diagram* of a triangular map, because it is well suited both to display and to manipulation due to its one-dimensional character.

2.1.1 Trivalent diagrams

A (*regular*) *trivalent diagram* Γ of size n is a connected graph with exactly $6n$ edges and having two sorts of vertices called *black vertices* and *white vertices*. The conditions are the following. First, each edge of Γ is incident to exactly *one* vertex of each of the two sorts. Every black vertex is incident to exactly *three* edges whereas every white vertex is incident to exactly *two* edges. There is one more supplement of structure which is essential. The three incident edges to any black vertices are cyclically ordered (there are exactly two cyclic orders on a set of three elements). A *rooted* trivalent diagram is a trivalent diagram with a distinguished *edge*. That edge is called the *root* of the diagram.

A *morphism* between two trivalent diagrams Γ and Γ' is a triple of applications sending respectively the black vertices, white vertices and edges of Γ to those of Γ' preserving both incidence and cyclic orientations. A morphism between two rooted diagrams is furthermore assumed to send root to root.

Examples 1. Figure 2.1 shows the five distinct rooted (*regular*) trivalent diagrams of size *one* *i.e.* with exactly *six* edges. Among those rooted diagrams, three are mutually conjugate meaning that they only differ by the position of their root. The two others are distinguished meaning that all the choices of a root are equivalent *i.e.* they are isomorphic to their six conjugates.

Trivalent diagrams are combinatorial descriptions of triangular maps. The correspondence is as follows. Given a triangular map Λ , draw a black dot in the middle of each of its faces and a white dot in the middle of each of its

edges. Draw edges connecting each black dot to its three white neighbors. Then impose on each set of three edges incident to any black dot the cyclic orientation induced by the underlying oriented surface. If you now forget about the triangular map and remember only the black and white dots, the edges and the cyclic orientations just defined, you get a unique trivalent diagram called the *incidence diagram* of the triangular map.

Theorem 2.1. *The operation that associates to a triangular map its incidence diagram is functorial and realizes an equivalence of category between that of strictly triangular maps and that of regular trivalent diagrams.*

In particular, this means that there is a biunivoque correspondence between the isomorphism classes of strictly triangular maps and those of regular trivalent diagrams.

2.2 Counting Principle

In this section we shall describe a simple way to get the labelled (exponential) generating series of the species of trivalent diagrams which is isomorphic to that of triangular maps by Theorem 2.1 above. Let M_3^* be the species of not necessarily connected triangular maps labelled on their directed edges and let M_3 be its connected counterpart. As a consequence of the existence and unicity of the decomposition of a triangular map in its connected components we get the following isomorphism of species,

$$M_3^* = E(M_3) \tag{2.2.1}$$

where E stands for the species of sets. With exponential generating series this gives,

$$M_3^*(t) = \exp(M_3(t)) \quad \text{and} \quad M_3(t) = \log(M_3^*(t)) \tag{2.2.2}$$

We have the following natural isomorphism,

$$M_3^* \simeq S_2^+ \times S_3^+ \tag{2.2.3}$$

where S_2^+ and S_3^+ are the species of permutations having only cycles of length *two* and *three* respectively and where the symbol \odot stands for the cartesian product of species or superposition product.

The exponential generating series of S_2^+ and S_3^+ are,

$$S_2^+(t) = e^{\frac{t^2}{2}} \quad \text{and} \quad S_3^+(t) = e^{\frac{t^3}{3}} \quad (2.2.4)$$

and the cartesian product of species translates to a modified Hadamard product of generating series,

$$M_3^*(t) = S_2^+(t) \odot S_3^+(t) \quad (2.2.5)$$

which is defined by the following relation,

$$\sum_{n \geq 0} a_n \frac{t^n}{n!} \odot \sum_{n \geq 0} b_n \frac{t^n}{n!} = \sum_{n \geq 0} a_n b_n \frac{t^n}{n!} \quad (2.2.6)$$

Theorem 2.2. *The exponential generating series of M_3^* is hypergeometric and divergent. We have,*

$$M_3^*(t) = {}_2F_0 \left(\begin{matrix} \frac{1}{6}, \frac{5}{6} \\ - \end{matrix} \middle| 6t^6 \right) = \sum_{n \geq 0} \frac{(\frac{1}{6})_n (\frac{5}{6})_n}{n!} 6^n t^{6n} \quad (2.2.7)$$

Proof. From equations 2.2.5 and 2.2.6 above, one gets,

$$M_3^*(t) = \sum_{n \geq 0} \frac{t^{2n}}{2^n n!} \odot \sum_{n \geq 0} \frac{t^{3n}}{3^n n!} = \sum_{n \geq 0} \frac{(6n)!}{(3n)!(2n)!} \frac{t^{6n}}{2^{3n} 3^{2n}} \quad (2.2.8)$$

Putting,

$$b_n = \frac{(6n)!}{(3n)!(2n)!} \frac{1}{2^{3n} 3^{2n}} \quad (2.2.9)$$

simplifying the following expression,

$$\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{(6n+1)(6n+2)(6n+3)(6n+4)(6n+5)(6n+6)}{(3n+1)(3n+2)(3n+3)(2n+1)(2n+2)} \frac{1}{2^3 3^2} \quad (2.2.10)$$

$$= 6 \frac{(n + \frac{1}{6})(n + \frac{5}{6})}{(n+1)} \quad (2.2.11)$$

and using $b_0 = 1$, we get as claimed,

$$b_n = \frac{(\frac{1}{6})_n (\frac{5}{6})_n}{n!} 6^n \quad (2.2.12)$$

End of the demonstration. □

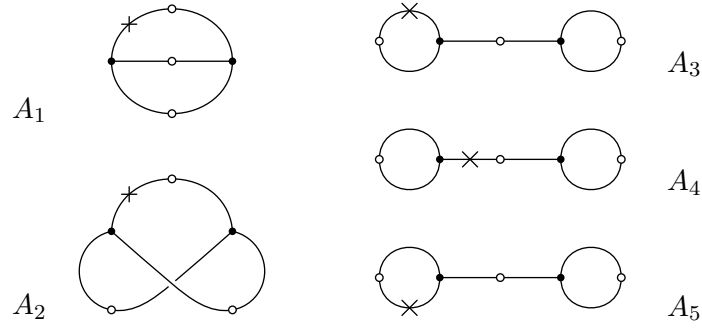


Figure 2.1. The five base cases of the recursive decomposition.

2.3 Recursive Decomposition

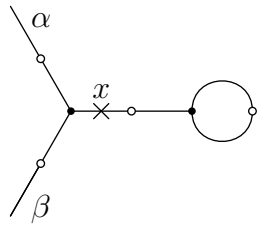
In this section we present a way to decompose a regular trivalent diagram in a unique way into one or two trivalent diagrams with a strictly lower number of edges. There are five base cases and ten inductive cases as shown in figures 2.1, 2.2 and 2.3. Any rooted diagram with six edges belongs to one of the five base cases whereas any rooted trivalent diagram with more than six edges belongs to one of the ten inductive cases (*cf.* theorem 2.4). The claim is that one obtain each rooted trivalent diagram exactly once if one carefully follows this inductive scheme.

Definition 2.1. A rooted trivalent diagram of size $n > 1$ with base point x is said to be of type $k = 1, \dots, 10$ if the local configuration of its edges around the marked point x is identical to one described in the ten pictures of figures 2.2 and 2.3.

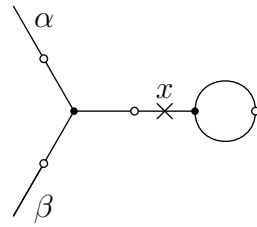
Let n be a strictly positive integer. We note X_n the set of all rooted trivalent diagrams of size n (*i.e.* with exactly $6n$ edges) and X_{n+1}^k the subset of X_{n+1} constituted of trivalent diagrams of type k . Using those notations the decomposition goes as follows, with the R_k being particular bijections to be described in section 2.3.1.

Theorem 2.3 (Inductive Cases). *There are ten bijections as follows,*

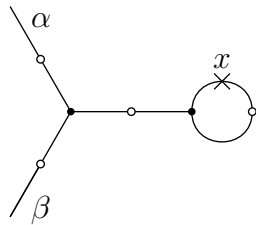
1. $X_{n+1}^k \underset{R_k}{\simeq} X_n \quad (k = 1, \dots, 8)$
2. $X_{n+1}^9 \underset{R_9}{\simeq} X_n \times \{1, \dots, 6n - 2\}$



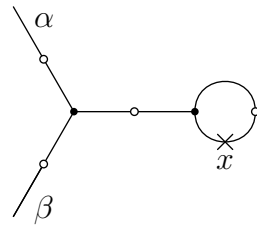
Case 1.



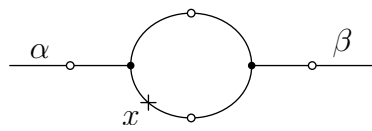
Case 2.



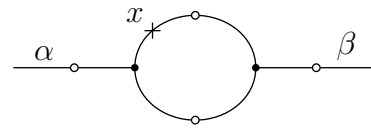
Case 3.



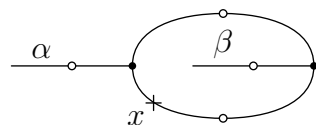
Case 4.



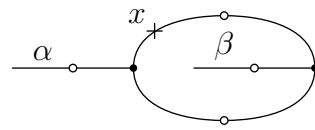
Case 5.



Case 6.



Case 7.



Case 8.

Figure 2.2. The first eight inductive cases of the recursive decomposition and local configuration in the vicinity of the marked edge x .



Case 9 : x is *not* a connecting edge. Case 10 : x is a connecting edge.

Figure 2.3. The two last inductive cases of the recursive decomposition (case 9 and 10) are defined by complementary to the first eight cases and distinguished by a *global* criterion : whether the marked edge is connecting or not. The figure shows the local configuration in the vicinity of the marked edge x . Of course, the two pictures are identical because there is no *local* difference between those two cases.

$$3. \quad X_{n+1}^{10} \underset{R_{10}}{\simeq} \coprod_{n_1+n_2=n} X_{n_1} \times X_{n_2}$$

Theorem 2.4 (Exactness). *rooted triangular maps of size $n + 1$ satisfy one and only one of the ten criteria i.e. we have,*

1. $X_{n+1}^1 \cup \dots \cup X_{n+1}^{10} = X_{n+1}$
2. $X_{n+1}^k \cap X_{n+1}^\ell = \emptyset \quad 1 \leq k < \ell \leq 10$

To prove theorem 2.3 we shall describe in the next section the particular bijections R_1, \dots, R_{10} . We shall focus now on theorem 2.4. Its first point is immediate if we define the criteria for rule 9 and 10 as being complementary to the the first eight criteria. Then, to show the second part, one have to show the disjunction of the first eight cases,

$$X_{n+1}^k \cap X_{n+1}^\ell = \emptyset \quad 1 \leq k < \ell \leq 8 \quad (2.3.1)$$

and the disjunction of the two last cases separately.

The disjunction of the first eight cases is obvious by careful inspection of figures 2.2 and 2.3, and the disjunction of the two last cases is immediate by definition, the only difference between case 9 and 10 being whether the marked edge x is a connecting edge or not.

According to theorem 2.4 there is one and only one recursive decomposition of a rooted trivalent diagram using the previous scheme. This recursive decomposition induces in turn the following recurrence relation.

Theorem 2.5. *The number a_n of rooted regular trivalent diagrams with exactly $6n$ edges, which is also the number of rooted triangular maps with $2n$ triangular faces, satisfies the following recurrence relation.*

$$a_1 = 5 \quad \text{and} \quad a_{n+1} = (6n + 6) a_n + \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k} \quad \text{with } n \geq 1. \quad (2.3.2)$$

Proof. We note a_{n+1}^k the cardinal of the set X_{n+1}^k . From theorem 2.3 we have,

$$1. \quad a_{n+1}^k = a_n \quad k = 1, \dots, 8$$

$$2. \quad a_{n+1}^9 = (6n - 2) a_n$$

$$3. \quad a_{n+1}^{10} = \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k}$$

and from theorem 2.4 we have,

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_{n+1}^1 + \dots + a_{n+1}^{10} \\ &= 8 a_n + (6n - 2) a_n + \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k} \\ &= (6n + 6) a_n + \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k} \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Which completes the proof. □

2.3.1 The Ten Reductive Bijections

In this section we shall describe explicitly the ten particular bijections R_1 to R_{10} appearing in the statement of theorem 2.3. They fall in three categories as expressed by the three distinct points of the theorem. The first eight bijections R_1 to R_8 are similar in flavour and can be described at once using the pictures of figure 2.2. The two last ones R_9 and R_{10} both deserve special care.

Let's describe first, the eight bijections R_1 to R_8 . Suppose we are given an element of X_n , that is a rooted trivalent diagram of size n *i.e.* with exactly $6n$

edges. Let α be its root and β be the edge immediately incident to α by its white vertex. Now cut the white vertex between α and β and insert six new edges matching the pattern of one of the eight pictures of figure 2.2. Then change the root from α to the edge marked x as indicated by the picture. You get in this way a new trivalent diagram of size $n + 1$ *i.e.* with exactly $6n + 6$ edges. That diagram satisfies the corresponding criterion and thus belongs to X_{n+1}^k if we used the k^{th} picture. What precedes thus describes eight applications

$$R_k : X_n \rightarrow X_{n+1}^k \quad (2.3.4)$$

for $k = 1, \dots, 8$ and since the process is easily reversed it follows that these are bijections. That proves the first point of theorem 2.3.

To describe the ninth bijection R_9 , we have to introduce a suitable numbering of the edges of the trivalent diagrams of size n . For all the elements Γ of X_n , take the set of its $6n - 2$ edges which are distinct from both the marked edge α and the edge $\beta = \alpha \cdot A$, then choose a numbering of this set with distinct elements of $\{1, \dots, 6n - 2\}$. There are obviously many such numberings, and two different choices give two different bijections, but since any one of them is suitable to our purpose we won't assume anything more about them.

Given an element Γ of X_n and a number k from 1 to $6n - 2$, we consider α , β , γ and δ the four edges of Γ defined as follows. Let α designate the marked edge of Γ , β the edge $\alpha \cdot A$, γ the edge of Γ having number k and $\delta = \gamma \cdot A$. Within those assumptions, the four edges α , β , γ and δ are all distinct. Now cut the white vertices between α and β , and between γ and δ and insert six new edges according to the pattern shown in figure 2.3. Then change the marked edge from α to that designated by x on the figure. You get this way, a trivalent diagram of size $n + 1$ not having its marked edge x a connecting edge and thus falling exactly in the ninth category X_{n+1}^9 . We therefore constructed an application,

$$R_9 : X_n \times \{1, \dots, 6n - 2\} \rightarrow X_{n+1}^9 \quad (2.3.5)$$

Now, since the process is easily reversed to recover the original diagram Γ and the number k from the rooted trivalent diagram we've just constructed, it follows that R_9 is a bijection. This proves the second point of theorem 2.3.

The last bijection R_{10} is of a similar flavour to the preceding bijection R_9 except that it is somewhat simpler to describe. Suppose we have two rooted

trivalent diagrams Γ_1 and Γ_2 of size n_1 and n_2 respectively. Let's call α and γ their respective roots and let $\beta = \alpha \cdot A$ and $\delta = \gamma \cdot A$. If we cut the white vertices between α and β , and between γ and δ , if we then insert six new edges following the pattern of figure 2.3 and if we mark as a root the edge designated by x in the figure, then we get as before a rooted trivalent diagram of size $n + 1$ (with $n = n_1 + n_2$) having its root x a connecting edge, and thus falling in the last category X_{n+1}^{10} . We therefore constructed an application,

$$R_{10} : \coprod_{n_1+n_2=n} X_{n_1} \times X_{n_2} \rightarrow X_{n+1}^{10} \quad (2.3.6)$$

which is again bijective as follows from the obvious reversibility of the process. This proves the last point of theorem 2.3.

2.4 Airy Functions

The Airy function of the first kind $\text{Ai}(x)$ is the well known special function arising for example in optics to describe some interference phenomena. It is solution to the ordinary second order linear equation $y'' = xy$. We shall give in this section a treatment of the Airy function $\text{Ai}(x)$ and its asymptotic expansion in the real direction $x \rightarrow +\infty$ by saddle point analysis. The material in this section is classical [2] [1, Chap. 10, p. 446] and represents no contribution from the author. It is given for completeness as a convenience to the reader.

2.4.1 Integral Representation

The Laplace transform of ordinary differential equations is a standard and powerful method to get an integral representation of their solutions. In the present case, we are searching for an integral form of the solutions to the Airy equation. The trick is as follows. Let Y be the following integral,

$$Y(x) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} q(t) e^{xt} dt \quad (2.4.1)$$

where $q(t)$ is an unknown function and γ is an unknown path. Substituting it in the Airy equation we get the following condition.

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} t^2 q(t) e^{xt} dt - \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} x q(t) e^{xt} dt = 0 \quad (2.4.2)$$

Integrating by part the second integral it becomes,

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} (t^2 q(t) + q'(t)) e^{xt} dt - \frac{q(t) e^{xt}}{2i\pi} \Big|_{\gamma} = 0 \quad (2.4.3)$$

That condition rests on the choice of the unknown function $q(t)$ and on the choice of the path of integration γ . Taking for q the particular function $q(t) = e^{-t^3/3}$ one solves the Laplace transform of the Airy equation,

$$t^2 q(t) + q'(t) = 0 \quad (2.4.4)$$

and makes the corresponding term in the last integral vanish. It then remains to cancel the boundary term by a suitable choice of the integration path γ . The precise condition reads,

$$\frac{e^{-t^3/3} e^{xt}}{2i\pi} \Big|_{\gamma} = 0 \quad (2.4.5)$$

To satisfy this, it suffice to take any path going to infinity at both ends in one of the three complex sectors $\Re(-t^3) < 0$. There are three essentially different choices for that and they correspond to three different solutions of the Airy equation.

The Airy function of the first kind Ai , is the integral along the first of those path,

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma_1} e^{xt-t^3/3} dt \quad (2.4.6)$$

and changing that path to any other, amounts to a simple change of variable as follows, where $\omega = e^{\frac{2i\pi}{3}}$ is a complex root of unity,

$$\omega \text{Ai}(\omega x) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma_2} e^{xt-t^3/3} dt \quad \omega^2 \text{Ai}(\omega^2 x) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma_3} e^{xt-t^3/3} dt \quad (2.4.7)$$

Since the sum of the three paths is a contractile cycle, it is null in homology and we get the following relation,

$$\text{Ai}(x) + \omega \text{Ai}(\omega x) + \omega^2 \text{Ai}(\omega^2 x) = 0 \quad (2.4.8)$$

The Airy function of the second kind Bi is the following linearly independent solution to the Airy equation,

$$\text{Bi}(x) = e^{\frac{i\pi}{6}} \text{Ai}(e^{\frac{2i\pi}{3}} x) + e^{-\frac{i\pi}{6}} \text{Ai}(e^{-\frac{2i\pi}{3}} x) \quad (2.4.9)$$

Together, those two functions form a basis of solutions to the Airy equation. They are both real-valued on the real line and entire analytic functions on the complex plane. The Ai function is furthermore the only solution, up to a constant factor, that is bounded on the real line.

2.4.2 Asymptotic Expansion

We shall now derive a formula for the asymptotic expansion of $\text{Ai}(x)$ in the direction $x \rightarrow +\infty$. The exponential form of the integral representation makes very appealing the application of the stationary phase method of Laplace to get such an asymptotic expansion. The integral has first to be transformed to a form which is more suitable to that method :

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma} e^{xt-t^3/3} dt = \frac{x^{1/2}}{2i\pi} \int_{\gamma} e^{x^{3/2}(w-w^3/3)} dw \quad (2.4.10)$$

Here we used the simple change of variable $t = x^{1/2}w$. We then introduce the following auxiliary integral,

$$F(\lambda) = \int_{\gamma} e^{\lambda(w-w^3/3)} dw \quad \text{so that} \quad \text{Ai}(x) = \frac{x^{1/2}}{2i\pi} F(x^{3/2}) \quad (2.4.11)$$

The method of Laplace consists now in deforming continuously the path of integration γ to another one along which the integrand has *stationary phase*, that is a path along which the function $h(w) = w - w^3/3$ has constant imaginary part. As a simple consequence of the Cauchy-Riemann conditions satisfied by analytic functions, this amounts to finding a *path of steepest descent* along the real part of the function $h(w)$, hence the name of the method.

There is such a path satisfying the condition of the previous paragraph which follows the level line of null imaginary part of $h(w)$. It consists of the left hand branch of the hyperbola having equation,

$$u^2 - \frac{1}{3}v^2 = 1 \quad \text{with } w = u + iv. \quad (2.4.12)$$

Along that path, the function $h(w)$ achieves its maximum value at the saddle point $w = -1$ of the real part of $h(w)$.

The task now is to parameterize this path by a real variable τ so that the following equation is satisfied.

$$w - \frac{1}{3}w^3 = -\frac{2}{3} - \tau^2 \quad (2.4.13)$$

In this way, we have transformed $F(\lambda)$ in the following gaussian type integral,

$$F(\lambda) = e^{-2/3\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda\tau^2} w'(\tau) d\tau \quad (2.4.14)$$

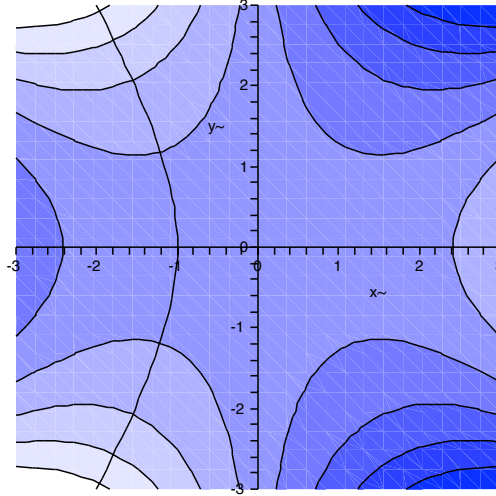


Figure 2.4. The above picture shows a level line plot of the real part of $h(x+iy)$. The darker zones correspond to high values of $\Re h(x+iy)$, while lighter zones correspond to lower ones.

which according to Watson's lemma [85], has an asymptotic expansion as $\lambda \rightarrow +\infty$ in decreasing powers of λ ,

$$F(\lambda) = e^{-2/3\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \left(\sum_{k=0}^n \frac{w^{(2k+1)}(0)}{4^k k! \lambda^k} + O\left(\frac{1}{\lambda^{n+1}}\right) \right) \quad (2.4.15)$$

valid for all positive n . Doing that, we find the precise form of the asymptotic expansion we are searching for,

$$\text{Ai}(x) = \frac{e^{-2/3x^{3/2}}}{2i\sqrt{\pi}x^{1/4}} \left(\sum_{k=0}^n \frac{w^{(2k+1)}(0)}{4^k k! x^{3k/2}} + O\left(\frac{1}{x^{3(n+1)/2}}\right) \right) \quad (2.4.16)$$

But it still remains to compute the coefficients $w^{(2k+1)}(0)$. There are some general methods to do that. The simplest is brute force. Let $w_n = w^{(n)}(0)/n!$.

By implicit differentiation of w using relation 2.4.13 we get,

$$\begin{aligned}
w_0 - 1/3 w_0^3 &= -2/3 \\
w_1 - w_0^2 w_1 &= 0 \\
w_2 - w_0^2 w_2 - w_0 w_1^2 &= -1 \\
w_3 - w_0^2 w_3 - 2 w_0 w_1 w_2 - 1/3 w_1^3 &= 0 \\
w_4 - w_0^2 w_4 - 2 w_0 w_1 w_3 - w_0 w_2^2 - w_1^2 w_2 &= 0 \\
&\dots
\end{aligned} \tag{2.4.17}$$

The general equation for $n > 2$ is the following,

$$w_n + \frac{1}{3} \sum_{k_1+k_2+k_3=n} w_{k_1} w_{k_2} w_{k_3} = 0 \tag{2.4.18}$$

The system consisting of those equations have exactly three distinct solutions which differ by their projections on the two first coordinates w_0 and w_1 . The in first term w_0 can be determined the following way. Equating the maximum values of both side of equation 2.4.13 we find, $w = -1$ and $\tau = 0$ from which we deduce $w_0 = -1$. There are two solutions that satisfy that condition and they correspond to the two directions of traversal of the path, either from bottom to top which corresponds to $w_1 = i$ or from top to bottom which corresponds to $w_1 = -i$. The subsequent terms of the Taylor expansion of $w(\tau)$ can get pumped one term at a time from that infinite sequence of equations, but for obvious reasons, this gets much harder as the number n becomes large.

2.4.3 Newton Iteration

Another way to compute the coefficients w_k which is more efficient, is by the following Newton iteration process. Let $W_0 = -1 + i\tau$ and for all $n \geq 0$,

$$W_{n+1} = W_n - \frac{W_n^3 - 3W_n - 2 - 3\tau}{3W_n^2 - 3} \tag{2.4.19}$$

The third iterate is already accurate to order eight, the fifth iterate is accurate to order twenty and a few more iterations gives plenty of accurate terms to the expansion,

$$\begin{aligned}
W_3 = -1 + i\tau - \frac{1}{6} \tau^2 - \frac{5}{72} i\tau^3 + \frac{1}{27} \tau^4 + \frac{77}{3456} i\tau^5 - \frac{7}{486} \tau^6 \\
- \frac{2431}{248832} i\tau^7 + \frac{5}{729} \tau^8 + O(\tau^9)
\end{aligned} \tag{2.4.20}$$

That gives,

$$\text{Ai}(x) = \frac{e^{-2/3x^{3/2}}}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} \left(1 - \frac{5}{48}x^{-3/2} + \frac{385}{4608}x^{-3} - \frac{85085}{663552}x^{-9/2} + O(x^{-6}) \right) \quad (2.4.21)$$

as $x \rightarrow +\infty$.

2.4.4 Closed form

Since asymptotic expansions satisfy as formal power series the same differential equations as the function they are asymptotic to, we can turn the Airy equation satisfied by the asymptotic expansion we search into a recurrence relation for its coefficients. To that purpose we put,

$$E(x) = \frac{e^{-2/3x^{3/2}}}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} \quad \text{and} \quad H(x) = \sum_{k \geq 0} b_k x^{-3k/2} \quad (2.4.22)$$

Assuming now that the product EH satisfies the Airy equation (*i.e.* $(EH)'' - xEH = 0$), we obtain for H the following second order differential equation,

$$H''(x) - 2 \left(\frac{1}{4x} + \sqrt{x} \right) H'(x) + \frac{5}{16x^2} H(x) = 0 \quad (2.4.23)$$

To prove this, one expands the Airy equation satisfied by the product EH using Liebniz rule then rewrites it using,

$$E'(x) = - \left(\frac{1}{4x} + \sqrt{x} \right) E(x) \quad \text{and} \quad E''(x) = \left(x + \frac{5}{16x^2} \right) E(x) \quad (2.4.24)$$

That differential equation on H can in turn be expanded using,

$$\begin{aligned} H(x) &= \sum_{k \geq 0} b_k x^{-\frac{3k}{2}} \\ H'(x) &= \sum_{k \geq 0} -\frac{3k}{2} b_k x^{-\frac{3k+2}{2}} \\ H''(x) &= \sum_{k \geq 0} \frac{9k^2 + 6k}{4} b_k x^{-\frac{3k+4}{2}} \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

Doing so and equating the coefficients of $x^{-\frac{3k+4}{2}}$ we finally get the following recurrence relation,

$$\left(\frac{9}{4}k^2 + \frac{9}{4}k + \frac{5}{16} \right) b_k + 3(k+1)b_{k+1} = 0 \quad (k \geq 1) \quad (2.4.26)$$

The best form for it, is the following,

$$b_{k+1} = -\frac{3}{4} \frac{(k+1/6)(k+5/6)}{k+1} b_k \quad (2.4.27)$$

Since we already know from the computations above that $b_0 = 1$, this unravels the hypergeometric nature of the formal power series H ,

$$H(x) = {}_2F_0 \left(\begin{matrix} \frac{1}{6}, \frac{5}{6} \\ - \end{matrix} \middle| -\frac{3}{4}x^{-3/2} \right) \quad (2.4.28)$$

The following closed form is then demonstrated.

Theorem 2.6. *Let n be any positive integer, then as $x \rightarrow +\infty$,*

$$\text{Ai}(x) = \frac{e^{-2/3x^{3/2}}}{2\sqrt{\pi} x^{1/4}} \left[\sum_{k=0}^n \frac{(\frac{1}{6})_k (\frac{5}{6})_k}{k!} \left(-\frac{3}{4}x^{-3/2} \right)^k + O\left(\frac{1}{x^{3n/2+1}} \right) \right] \quad (2.4.29)$$

2.4.5 Logarithmic Derivative

We shall now derive the asymptotic expansion of the logarithmic derivative of Ai and show its combinatorial interpretation. By the computation above, and using the fact that,

$$\frac{(uv)'}{uv} = \frac{u'v + uv'}{uv} = \frac{u'}{u} + \frac{v'}{v} \quad (2.4.30)$$

it is easy to determine the precise form of the asymptotic expansion of $\text{Ai}'(x)/\text{Ai}(x)$ as $x \rightarrow +\infty$.

$$\frac{\text{Ai}'(x)}{\text{Ai}(x)} = \underbrace{-\sqrt{x} - \frac{1}{4x}}_{E'/E} - \underbrace{\sum_{k \geq 1}^n c_k x^{-\frac{3k+2}{2}} + O\left(x^{-\frac{3n+5}{2}}\right)}_{H'/H} \quad \text{for all } n \geq 1. \quad (2.4.31)$$

Using the computation above, it is easy to determine the first few terms of that expansion.

$$c_1 = -\frac{5}{32}, \quad c_2 = \frac{15}{64}, \quad c_3 = -\frac{1105}{2048}, \quad c_4 = \frac{1695}{1024}, \quad \text{etc...} \quad (2.4.32)$$

Those terms aren't positive integers so they can hardly be interpreted combinatorially as such, but the following interesting normalization does uncover as we shall see, the true combinatorial meaning of those coefficients,

$$c_k = (-1)^k \frac{a_k}{2^{3k+2}} \quad (2.4.33)$$

It leads to the following first few terms,

$$a_1 = 5, \quad a_2 = 60, \quad a_3 = 1105, \quad a_4 = 27120, \quad \text{etc...} \quad (2.4.34)$$

We shall now prove that those terms precisely satisfy the recurrence relation of theorem 2.5. To that purpose, we shall first determine a differential equation satisfied by $\text{Ai}'(x)/\text{Ai}(x)$ using the following simple computation. Let $u = y'/y$ then,

$$y' = uy \quad \text{and} \quad y'' = u'y + u^2y \quad (2.4.35)$$

so that the Airy equation $y'' = xy$ yields the following Riccati type equation $u' + u^2 = x$. Its solutions are precisely the logarithmic derivatives of the solutions of the Airy equation. Now if we put,

$$u = \left(-\sqrt{x} - \frac{1}{4x} - U \right) \quad (2.4.36)$$

with $U = H'/H$ the logarithmic derivative of H , one has,

$$\begin{aligned} \left(-\sqrt{x} - \frac{1}{4x} - U \right)' &= -\frac{1}{2\sqrt{x}} + \frac{1}{4x^2} - U' \\ \left(-\sqrt{x} - \frac{1}{4x} - U \right)^2 &= x + \frac{1}{16x^2} + U^2 + \frac{1}{2\sqrt{x}} + 2 \left(\sqrt{x} + \frac{1}{4x} \right) U \end{aligned} \quad (2.4.37)$$

The Riccati equation for u translates to U the following way.

$$-U' + U^2 + 2 \left(\sqrt{x} + \frac{1}{4x} \right) U = -\frac{5}{16x^2} \quad (2.4.38)$$

If we expand that differential equation using,

$$\begin{aligned} U &= \sum_{n \geq 1} c_n x^{-\frac{3n+2}{2}} \\ U' &= \sum_{n \geq 1} -\frac{3n+2}{2} c_n x^{-\frac{3n+4}{2}} \\ U^2 &= \sum_{n \geq 2} \left(\sum_{k_1+k_2=n} c_{k_1} c_{k_2} \right) x^{-\frac{3n+4}{2}} \end{aligned} \quad (2.4.39)$$

and if we equate the coefficients of $x^{-\frac{3n+4}{2}}$, we get the following recurrence relation on the coefficients c_n ,

$$-2 c_{n+1} = \frac{3n+3}{2} c_n + \sum_{k_1+k_2=n} c_{k_1} c_{k_2} \quad \text{for } n \geq 1. \quad (2.4.40)$$

Now writing that equation in term of the normalized coefficients a_n we get,

$$\begin{aligned} \frac{(-1)^{n+2}}{2^{3n+4}} a_{n+1} &= (3n+3) \frac{(-1)^n}{2^{3n+3}} a_n + \sum_{k_1+k_2=n} \frac{(-1)^{k_1}}{2^{3k_1+2}} \frac{(-1)^{k_2}}{2^{3k_2+2}} a_{k_1} a_{k_2} \\ &= (6n+6) \frac{(-1)^n}{2^{3n+4}} a_n + \frac{(-1)^n}{2^{3n+4}} \sum_{k_1+k_2=n} a_{k_1} a_{k_2} \end{aligned} \quad (2.4.41)$$

simplifying by the common factor we finally get,

$$a_{n+1} = (6n+6) a_n + \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k} \quad \text{with } n \geq 1. \quad (2.4.42)$$

as claimed.

Chapter 3

An Optimal Algorithm to Generate Rooted Trivalent Diagrams and Rooted Triangular Maps

3.0 Introduction

Roughly speaking, a trivalent diagram is a connected graph with degree conditions imposed on its vertices and a cyclic orientation imposed on the edges adjacent to each vertex. It is the combinatorial description of an unembedded trivalent ribbon graph [70, 44] (*cf.* definitions 3.1 and 3.2 for a precise definition). We shall see (*cf.* Theorem 3.1) that it can be described by a pair of permutations $(\sigma_{\bullet}, \sigma_{\circ})$ satisfying the conditions of *involutivity* $\sigma_{\circ}^2 = \text{id}$ and *triangularity* $\sigma_{\bullet}^3 = \text{id}$. The notion of rooted trivalent diagrams is also very useful, both to our study and to the target applications; so we take a special care to study them in detail.

3.0.1 Definition of a CAT Generator

The expression “CAT generator” is an acronym for *constant amortized time generator* meaning a generator of combinatorial structures that on the average spends only a constant time generating each of the structures. The usual idea in such a generator is that passing from one structure to the next one requires only a few modifications to be made. Sometimes, though, it could take more modifications than usual and we don’t usually have any upper bound on the number of actual modifications that could be needed to pass from a structure to the next. When the need for a large number of modifications tends to be significantly rare in comparison to a small number, we can sometimes prove that an amortization effect is going on. Technically, one can summarize that amortization effect by saying that the total amount of time needed to generate n distinct structures is asymptotically bounded by a constant multiple of the number n of structures being generated, the word *constant* meaning that the bound is independent of the size of the structures being generated.

3.0.2 Problem Statement

We shall describe and analyze two algorithms, the first giving an exhaustive list of rooted trivalent diagrams of a given size (*cf.* definitions 3.3 and 3.4 below) and the second giving an exhaustive list of unrooted trivalent diagrams (definitions 3.1 and 3.2), those lists being non-redundant in that no two diagrams in the same list are isomorphic. The algorithm for rooted diagrams will be shown to have optimal performance meaning that the time necessary to generate a diagram is bounded in the amortized sense. What is striking is that the bound is independent of the size of the diagrams being generated. One objective of the paper is to provide a reusable theoretical framework for algorithms generating exhaustive lists of complex combinatorial structures with attention paid to the case of unlabeled structures and to those generators having the CAT property.

3.0.3 Motivation

In a chapter 1 we gave a complete classification of the subgroups of the modular group $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ and their conjugacy classes by rooted trivalent diagrams and trivalent diagrams. A question one may ask is how to generate a complete list of such trivalent diagrams. Such a question is unavoidable: for a classification to be fully satisfactory there should be a systematic way to enumerate all the particular instances of the objects being classified. Moreover, it was soon realized that there is a connection with combinatorial maps. In this paper we clarify that point and give as an application a way to generate exhaustive lists of triangular combinatorial maps.

The other sources of motivations to generate trivalent diagrams come mainly from mathematical physics in connection with two-dimensional quantum gravity and the Witten-Kontsevich model [44]. Algebraic topology is also a source of motivation through triangular subdivisions of surfaces, knots, braids, links and tangles theory [70, 8]. It is also connected to the deformation theory of quantized Hopf algebras [26, 27]. The problem we solve is also relevant to the study of combinatorial maps as explained in Section 3.5 and to the vast galoisian program of A. Grothendieck [33] as explained in hundreds of papers and books such as [64, 77, 48, 25]. As an application, we give in Section 3.4 a way to generate a complete list describing all the sub-groups of a given finite index in the modular group $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ and a way to decide conjugacy relations among those subgroups. We show also in Section 3.5, as a second application, how to generate an exhaustive list of triangular maps satisfying various criteria.

3.0.4 Comment on Terminology

We chose to borrow some notion and terminology from the category theory in this exposition. The related concepts: categories, functors, natural transformations, equivalence of categories, are fully covered in the first four sections of the first chapter of the textbook [49, p. 7 to 18] by MacLane.

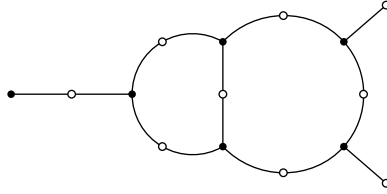


Figure 3.1. A trivalent diagram is conveniently described by a diagram like the one above, hence the name. The actual cyclic orientation of the vertices are conveniently rendered implicit by adopting the counter-clockwise orientation of the figure.

3.1 Trivalent Diagrams

Definition 3.1. A *trivalent diagram* is a connected, two-colored bipartite graph (parallel edges allowed but not loops) such that every black vertex is of degree 1 or 3 and every white vertex is of degree 1 or 2, with a cyclic order imposed on the edges incident to each vertex. The *size* of a trivalent diagram is the number of its edges.

Given a trivalent diagram Γ , we denote by Γ_- , Γ_\bullet and Γ_\circ the sets of its edges, black vertices and white vertices, respectively. Given an edge $a \in \Gamma_-$, we denote by $\partial_\bullet(a) \in \Gamma_\bullet$ and $\partial_\circ(a) \in \Gamma_\circ$ the black vertex and the white vertex to which it is incident. Given an edge $a \in \Gamma_-$, we denote by $\sigma_\bullet(a)$ and $\sigma_\circ(a)$ the next edge incident to $\partial_\bullet(a)$ and $\partial_\circ(a)$, respectively, in the cyclic order. According to the degree conditions of the definition we have $\sigma_\bullet^3 = \sigma_\circ^2 = \text{id}$ which implies that both σ_\bullet and σ_\circ are bijections; so they are permutations on the set of edges Γ_- of the diagram. The connectivity condition of the definition is equivalent to the transitivity of the permutation group generated by σ_\bullet and σ_\circ .

Definition 3.2. A *morphism* φ between two trivalent diagrams Γ and Γ' is a triple of mappings φ_\bullet , φ_\circ and φ_- from the three sets Γ_\bullet , Γ_\circ and Γ_- to the three sets Γ'_\bullet , Γ'_\circ and Γ'_- , respectively, compatible with the three structure mappings and the two permutations in that φ_- is equivariant to each of the

permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} and the following diagram is commutative.

$$\begin{array}{ccccc}
 \Gamma_{\bullet} & \xleftarrow{\partial_{\bullet}} & \Gamma_{-} & \xrightarrow{\partial_{\circ}} & \Gamma_{\circ} \\
 \downarrow \varphi_{\bullet} & & \downarrow \varphi_{-} & & \downarrow \varphi_{\circ} \\
 \Gamma'_{\bullet} & \xleftarrow{\partial_{\bullet}} & \Gamma'_{-} & \xrightarrow{\partial_{\circ}} & \Gamma'_{\circ}
 \end{array}$$

When those three mappings are bijections the morphism is an *isomorphism*.

An important fact, well known to the experts, is recalled in the following theorem. It is used throughout the article to formulate the algorithms.

Theorem 3.1. *The set Γ_{-} and the two permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} entirely suffice to describe the isomorphism class of the diagram Γ . Moreover, the cycles of the permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} are in natural bijection with the black and white vertices of Γ , respectively.*

Proof. Given a trivalent diagram Γ , an isomorphic trivalent diagram Γ' can be reconstructed from the set Γ_{-} and the two permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} of Γ_{-} . Let $\Gamma_{-}/\sigma_{\bullet}$, the cycles of the permutation σ_{\bullet} , be its set of black vertices and let $\Gamma_{-}/\sigma_{\circ}$, the cycles of the permutation σ_{\circ} , be its set of white vertices, and define its boundary mappings ∂'_{\bullet} and ∂'_{\circ} to be the natural projection of the quotients.

We now construct the isomorphism the following way. Since ∂_{\bullet} and ∂_{\circ} are equivariant to the permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} , respectively, they induce natural mappings φ_{\bullet} and φ_{\circ} completing the following commutative diagram.

$$\begin{array}{ccccc}
 \Gamma'_{\bullet} & \xleftarrow{\partial'_{\bullet}} & \Gamma'_{-} & \xrightarrow{\partial'_{\circ}} & \Gamma'_{\circ} \\
 \downarrow \varphi_{\bullet} & & \parallel \varphi_{-} & & \downarrow \varphi_{\circ} \\
 \Gamma_{\bullet} & \xleftarrow{\partial_{\bullet}} & \Gamma_{-} & \xrightarrow{\partial_{\circ}} & \Gamma_{\circ}
 \end{array}$$

Taking φ_{-} to be the identity mapping, one has a morphism from the diagram Γ' to the diagram Γ . To show it's an isomorphism, one has to show the bijectivity of the three mappings φ_{\bullet} , φ_{\circ} and φ_{-} . The mapping φ_{-} , being the identity, is necessarily bijective. The bijectivity of the mappings φ_{\bullet} and φ_{\circ} means that two edges are in the same cycles of the respective permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} if and only if they are incident to the same black and white vertex, respectively, which is guaranteed by the definition. \square

3.1.1 Rooted Trivalent Diagrams

The following concept plays an important rôle in that chapter and in the applications.

Definition 3.3. A trivalent diagram is said to be *rooted* if one of its edges is distinguished from the others as its *root*.

A convenient way to describe the rooting of a diagram is to draw a cross on its distinguished edge.

Definition 3.4. A *morphism* φ of rooted trivalent diagrams (Γ, a) and (Γ', a') is a morphism of the underlying diagrams (ignoring the roots) whose φ_- component is further assumed to send root to root.

3.1.2 Labeled *versus* Unlabeled Diagrams

Historically, the dichotomy between *labeled* and *unlabeled* structures had been greatly clarified and properly emphasized by the introduction by A. Joyal of *combinatorial species* [37]. The subject was, and still is, a very prolific source of discovery from the Quebec school of combinatorics and from a growing community of researchers around the world. One must cite the book [14, 15] by F. Bergeron, G. Labelle and P. Leroux, which gives an exposition of the whole subject.

On a given set of vertices X one can build different trivalent diagrams and rooted trivalent diagrams. We denote by $D_3(X)$ and $D_3^\bullet(X)$ the corresponding sets of structures, we call X the *labeling alphabet* and we refer to diagrams one can build on that set as diagrams *labeled* by X . Any bijection ϱ between two finite sets X and Y induces a bijection ϱ_* between the sets $D_3(X)$ and $D_3(Y)$ of trivalent diagrams labeled by X and Y , respectively. This induced bijection is the *relabeling operation* from $D_3(X)$ to $D_3(Y)$. It is also referred as a *transport of structure* along the relabeling bijection ϱ . The same considerations also apply to rooted trivalent diagrams and in fact to any labeled combinatorial structures.

The above discussion leads to the consideration of the *Joyal Functors* D_3

and D_3^\bullet of the two combinatorial species of trivalent diagrams and rooted trivalent diagrams, respectively. In the formalism of Joyal, two labeled structures are said to be *conjugate* or *isomorphic* if they coincide modulo the relabeling operation. An unlabeled structure is then just a conjugacy class of labeled structures. We denote by $\tilde{D}_3(n)$ and $\tilde{D}_3^\bullet(n)$ the sets of unlabeled trivalent diagrams, unrooted and rooted, respectively, and by $D_3(n)$ and $D_3^\bullet(n)$ the sets of trivalent diagrams, unrooted and rooted, respectively, and labeled by the set $\{1, \dots, n\}$. The symmetric group \mathfrak{S}_n acts via relabeling on the set of structures labeled by $\{1, \dots, n\}$ and the sets $\tilde{D}_3(n)$ and $\tilde{D}_3^\bullet(n)$ can be seen as the quotient sets of those group actions.

$$\tilde{D}_3(n) \stackrel{\text{def.}}{=} D_3(n)/\mathfrak{S}_n \quad \text{and} \quad \tilde{D}_3^\bullet(n) \stackrel{\text{def.}}{=} D_3^\bullet(n)/\mathfrak{S}_n$$

We call the corresponding natural projections

$$\begin{aligned} \pi_n : D_3(n) &\rightarrow \tilde{D}_3(n) \\ \pi_n : D_3^\bullet(n) &\rightarrow \tilde{D}_3^\bullet(n) \end{aligned}$$

the *condensation mappings* of the combinatorial species D_3 and D_3^\bullet .

3.2 Characteristic Labeling

A *characteristic labeling* is the choice of a unique representative in every conjugacy class of structures. In other terms, a characteristic labeling can be seen as a natural section to the condensation mapping π *i.e.* a natural mapping s such that $\pi s = \text{id}$. Good characteristic labelings are those which are computable. They are even better if there is an efficient way to compute them.

Rooted trivalent diagrams have the enjoyable property of possessing many characteristic labelings that are computable by means of efficient algorithms. This situation is to be contrasted with that of general graphs. No algorithm is known to decide in polynomial time whether two given graphs are isomorphic, and having an efficient algorithm computing a characteristic labeling of general graphs would render that particular problem trivial. What makes trivalent diagrams particular in that respect is not so much that they are trivalent but more in that their edges are cyclically oriented at their vertices. Indeed, general graphs with only trivalent vertices still suffer from the above problem.

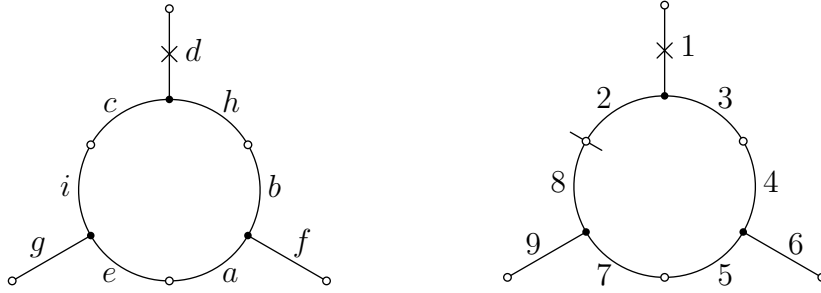


Figure 3.2. If one gives as input to the relabeling algorithm (Algorithm 3.2.2) the rooted diagram shown on the left with an arbitrary initial labeling on the arbitrary alphabet $X = \{a, b, c, d, e, f, g, h, i\}$, it produces the characteristic relabeling shown on the right with numbers from 1 to 9 according to the depth-first traversal order of Algorithm 3.2.1. Note the *natural cutting* between the edges labeled by 2 and 8 that arises from the depth-first traversal.

What we give now is a succinct description of an algorithm producing a characteristic labeling of rooted trivalent diagrams Γ and having linear time-complexity in the number of edges of Γ . The idea is the following: build a rooted plane binary tree T by depth-first traversal (in prefix order) of the edges of the diagram (not the vertices, we insist on the edges). Given a particular edge a of Γ , the two directions that are explored from it are given by the two operations σ_\bullet and σ_\circ on the set of edges. We take care never to revisit a previously visited edge and we label the edges of Γ by numbers from 1 to n according to the order of their appearance in the depth-first traversal.

3.2.1 Implementation

We need as global data an integer c and the following seven arrays:

| | |
|------------------|--|
| Input variables | $s_0, s_1 : X \rightarrow X$ |
| Output variables | $t_0, t_1 : \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$ |
| | $visited : X \rightarrow \text{Bool}$ |
| Local variables | $\ell_0 : X \rightarrow \{1, \dots, n\}$ |
| | $\ell_1 : \{1, \dots, n\} \rightarrow X$ |

Algorithm 3.2.1, which is an auxiliary recursive program, computes the transport bijections ℓ_0 and ℓ_1 . Algorithm 3.2.2 is the main entry point of the relabeling process. It does the initialization job (line 2 to 4) and the actual relabeling of the input diagram (line 6 to 8). It takes as input a trivalent diagram labeled with the elements of the set X and rooted by the element x of X . The arrays s_0 and s_1 and the element $x \in X$ are descriptions of the input diagram via its associated two permutations σ_\bullet and σ_\circ (cf. Theorem 3.1). The output diagram is encoded by the two arrays t_0 and t_1 in the very same fashion. The array *visited* is used to remember the positions already visited by the relabeling process. The integer c serves as a counter to label the vertices in the order they are encountered, while ℓ_0 and ℓ_1 are internal arrays describing the mutual inverse transport bijections between the input diagram and the output diagram.

Algorithm 3.2.1: VISIT ($x : X$)

```

1 begin
2   if visited[ $x$ ] then return
3   visited[ $x$ ]  $\leftarrow$  true
4    $\ell_0$ [ $x$ ]  $\leftarrow$   $c$ 
5    $\ell_1$ [ $c$ ]  $\leftarrow$   $x$ 
6    $c \leftarrow c + 1$ 
7   VISIT ( $s_0$ [ $x$ ])
8   VISIT ( $s_1$ [ $x$ ])
9 end

```

Algorithm 3.2.2: RELABEL ($x : X$)

```

1 begin
2    $c \leftarrow 1$ 
3   for  $i \in X$  do
4     visited[ $i$ ]  $\leftarrow$  false
5   VISIT ( $x$ )
6   for  $k \in \{1, \dots, n\}$  do
7      $t_0$ [ $k$ ]  $\leftarrow$   $\ell_0$ [ $s_0$ [ $\ell_1$ [ $k$ ]]]
8      $t_1$ [ $k$ ]  $\leftarrow$   $\ell_0$ [ $s_1$ [ $\ell_1$ [ $k$ ]]]
9 end

```

3.2.2 Correctness

The idea behind that algorithm is quite simple and presents no difficulty except the actual proof of the relabeling being characteristic. There are two ways to do the proof; one is conceptual by nature and the other is more technical. The particular description of the algorithm is itself part of that former argument. We shall give both arguments because preferring one or the other is simply a matter of taste. We give the conceptual argument first.

One could have taken the input diagram to be labeled by the set $\{1, \dots, n\}$ and then shown that the output labeled diagram remains unchanged if one conjugates the input labeled diagram according to any permutation of the labeling set. Such a proof would typically look rather technical if not difficult. Instead, one can rather *abstract* the labeling alphabet of the input diagram to be an arbitrary n -element set X , this requirement being the only assumption made on X . In particular, we make absolutely no assumption on its elements or on any structure that it may carry.

A moment's thought may convince the reader that abstracting the input label set to X and making no assumption whatsoever on its elements indeed guarantees the required invariance. As this argument is a bit subtle and may seem a hand-waving argument to most people, we now give another proof avoiding such considerations.

Theorem 3.2. *Algorithm 3.2.2 produces a characteristic relabeling of the connected rooted trivalent diagrams of size n – that is, t_0 and t_1 are invariant under any bijection from X onto another set X' .*

Proof. Any bijection ϱ between two sets of input labels X and X' induces a conjugacy of the two input permutations s_0 and s_1 of X yielding two permutations $s'_0 = \varrho \cdot s_0 \cdot \varrho^{-1}$ and $s'_1 = \varrho \cdot s_1 \cdot \varrho^{-1}$ of X' . Now, putting $\ell_0(x) = c$ and $\ell'_0(x') = c$ according to line 4 of Algorithm 3.2.1 with $x' = \varrho(x)$ and varying x yields $\ell'_0 = \ell_0 \cdot \varrho^{-1}$. Similarly, considering line 5 of the same algorithm, we get $\ell'_1 = \varrho \cdot \ell_1$. The permutations t_0, t'_0, t_1 and t'_1 verify the following identities (by line 6-8 of Algorithm 3.2.2):

$$\begin{aligned} t_0 &= \ell_0 \cdot s_0 \cdot \ell_1, & t'_0 &= \ell'_0 \cdot s'_0 \cdot \ell'_1, \\ t_1 &= \ell_0 \cdot s_1 \cdot \ell_1, & t'_1 &= \ell'_0 \cdot s'_1 \cdot \ell'_1, \end{aligned}$$

and substituting ℓ'_0 , ℓ'_1 , s'_0 , and s'_1 for their above values yields a cancellation of the ϱ 's,

$$\begin{aligned} t'_0 &= (\ell_0 \cdot \varrho^{-1}) \cdot (\varrho \cdot s_0 \cdot \varrho^{-1}) \cdot (\varrho \cdot \ell_1) = t_0, \\ t'_1 &= (\ell_0 \cdot \varrho^{-1}) \cdot (\varrho \cdot s_1 \cdot \varrho^{-1}) \cdot (\varrho \cdot \ell_1) = t_1, \end{aligned}$$

thus proving the required invariance of the output. \square

3.2.3 Applications

Beside its simplicity, this algorithm has several important consequences and applications,

- 1) Since, according to Theorem 3.2, the relabeling is characteristic to the isomorphism classes, one can test the isomorphism of two rooted diagrams by relabeling them using Algorithm 3.2.2 and simply compare the two results for equality.
- 2) There is a linear order on the isomorphism classes of rooted diagrams induced by the lexicographic order on the permutations of their characteristic labeling.
- 3) A notion of *characteristic rooting* for diagrams emerges from that linear order by choosing as a representative of each conjugacy class its minimal element.

That last remark can be used to implement an efficient filter procedure rejecting any rooted trivalent diagram that is not minimal in its conjugacy class. It is useful to get a generator of unrooted diagrams from a rooted diagram generator.

3.3 Generating Algorithm

One can imagine that while exploring a particular rooted trivalent diagram using Algorithm 3.2.2 of Section 3.2, we output a sequence of events describing the particular cycles of the permutations t_0 and t_1 we encounter at each stage

of the traversal. Those events could typically say for example: there we reach a new unforeseen black vertex (forward connection) and we label its adjacent edges c , $c + 1$, $c + 2$, or there we reach a previously visited white vertex (backward connection), or there we reach an unforeseen white vertex, etc...

One can easily convince oneself that such a sequence of events, relying only on the execution of the algorithm and not on the particular labeling of the input diagram, is in fact characteristic to the diagram. If sufficiently detailed, that sequence of events can be used to unambiguously characterize rooted trivalent diagrams. The idea now would be to consider a rooted plane tree with leaves labeled by rooted trivalent diagrams and with edges labeled by events in such a way that the sequence of events one gets along any branch from the root to a leaf is the very sequence of events that unambiguously characterizes the corresponding rooted trivalent diagram.

We now obtain a usable principle of generation if we require two further properties: exhaustivity, meaning that every isomorphism class of rooted trivalent diagram gets represented on a particular leaf of the tree and non-redundancy, meaning that every such isomorphism class gets represented just once. Assuming that we spend only a constant time on each node of that tree and that the number of those nodes is linearly bounded by the number of its leaves, this would provide a constant amortized time algorithm to generate rooted trivalent diagrams.

To ease the memory requirements of the generator, we won't actually build the generation tree in memory. It will instead be realized in the calling pattern between the procedures of the generating program. Also, the program would be more useful if it generates the diagrams in permutational form instead of a sequence of events describing it. This means that we have to carry around a partial diagram that gets built while exploring the generation tree, each generating event completing that description and each backtrack reversing the particular changes we have made.

3.3.1 Implementation

The generating algorithm uses as global data two integers c and n , a stack of integers and two integer arrays

$$s_0, s_1 : \{ 1, \dots, n \} \rightarrow \{ 1, \dots, n \}$$

representing the rooted trivalent diagram being constructed by its black and white permutations σ_\bullet and σ_\circ , respectively. The integer n represents the maximum size of the diagram being generated while the integer c is the labeling counter used to attribute integer labels to the edges of rooted trivalent diagrams being generated. The manipulation of the stack is done through the following five primitives.

$$\text{PUSH} : \text{Integer} \times \text{Stack} \rightarrow \text{Stack}$$

$$\text{POP} : \text{Stack} \rightarrow \text{Integer} \times \text{Stack}$$

$$\text{STACKISEMPTY} : \text{Stack} \rightarrow \text{Bool}$$

$$\text{MASK, REVEAL} : \text{Integer} \times \text{Stack} \rightarrow \text{Stack}$$

The stack can be implemented using a doubly linked circular list represented by two zero-based arrays of integers.

$$N, P : \{ 0, \dots, n \} \rightarrow \{ 0, \dots, n \}.$$

The item of index zero is just a sentinel and the stack is considered empty if the following relation holds,

$$N[0] = P[0] = 0.$$

The Mask and Reveal procedures implement removal and insertion primitives using a trick popularized by Knuth [41] under the name of “dancing link”. Namely, a call to the Mask procedure with parameter s removes the item s of the stack using the following two instructions,

$$N[P[s]] \leftarrow N[s],$$

$$P[N[s]] \leftarrow P[s],$$

while a subsequent call to the Reveal procedure with parameter s restores the previous state of the stack, before the call to the Mask procedure, using the following two instructions,

$$N[P[s]] \leftarrow s,$$

$$P[N[s]] \leftarrow s.$$

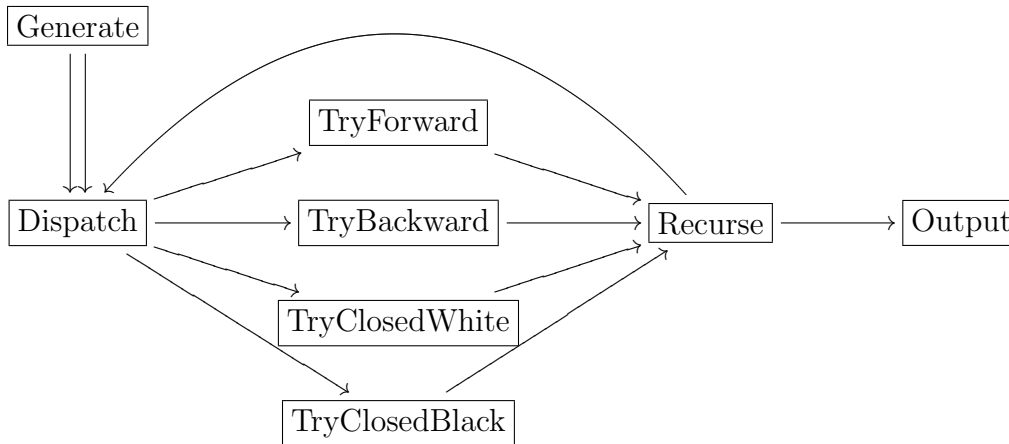


Figure 3.3. Overall structure of the generating algorithm.

The generating algorithm is composed of seven procedures (Algorithms 3.3.1 to 3.3.7) and a user-defined procedure called Output that serves as an outlet to the algorithm and that can be used, for instance, to do printing jobs or to collect some statistics on rooted trivalent diagrams. The overall structure of the calling pattern between those procedure is shown in Figure 3.3. The algorithm works by a recursive exploration of the structure being constructed in a way that mimics the depth-first traversal of the labeling algorithm of Section 3.2.

The recursion has two base cases that are produced by the Generate procedure (Algorithm 3.3.1) which is the main entry point of the algorithm. The inductive step of the recursion corresponds to a call to the Dispatch procedure (Algorithm 3.3.2), whose purpose is to successively handle each of the various cases one can encounter at each stage of the construction/exploration of the diagrams. This is the branching part of the generating algorithm in the sense that it is there that the generation tree forks into subtrees eventually leading to the leaves where the produced structures reside. A call to the Dispatch procedure results in a call to the Recurse procedure (Algorithm 3.3.7) through each of the four Try procedure (Algorithm 3.3.4 to 3.3.5). The purpose of the Recurse procedure is to call the Output procedure if the stack is empty meaning that the exploration/construction is finished and that we can thus output a finished structure or to pop an edge and call the dispatch procedure if the

stack is not empty meaning that the structure being explored/constructed is not yet finished.

The Generate procedure

The Generate procedure (Algorithm 3.3.1) is the main entry point of the program. It is responsible for the two base cases of the induction, namely whether the produced structure has a univalent black vertex adjacent to its root edge (handled in lines 3 to 5 of the procedure) or a trivalent one (handled in lines 7 to 13).

In the case where the vertex is univalent, the corresponding fixed point is built (line 4 of the algorithm), the labeling counter is set to 2 (the label of the next encountered edge), and then the exploration/construction continues in the direction of the white vertex by calling the Dispatch procedure with parameter 1 (line 5 of the algorithm).

In the case where the vertex is trivalent, the three edges around it are labeled 1, 2 and 3 in counterclockwise direction, the corresponding cycle in the black permutation is built by the three instructions lines 8 to 10 of the algorithm and the two edges 1 and 2 are pushed onto the stack for further exploration (lines 11 and 12) while the edge 3 is explored in the direction of its white vertex by calling the Dispatch procedure with parameter 3 (line 13 of the algorithm).

The Dispatch procedure

This is the start of the induction step of the generation algorithm. The hypothesis at its start is that the two arrays s_0 and s_1 reflect the structure of a partial trivalent diagram being explored according to the depth-first traversal of the labeling algorithm of Section 3.2. The current edge s and the labeling counter c reflect the stage of the exploration. The exploration/construction is supposed to continue from the current edge s in the direction of its white vertex and c is the label attributed to the next unlabeled edge we encounter. At the beginning of the procedure, we don't know whether that white vertex is univalent or bivalent, and if it's bivalent, we don't know which is the other

Algorithm 3.3.1: GENERATE ()

```
1 begin
2   if  $n \geq 1$  then
3      $c \leftarrow 2$ 
4      $s_0[1] \leftarrow 1$ 
5     DISPATCH (1)
6   if  $n \geq 3$  then
7      $c \leftarrow 4$ 
8      $s_0[1] \leftarrow 2$ 
9      $s_0[2] \leftarrow 3$ 
10     $s_0[3] \leftarrow 1$ 
11    PUSH (1)
12    PUSH (2)
13    DISPATCH (3)
14 end
```

edge incident to it. There are four possible cases:

Case 1. The white vertex incident to the current edge s is univalent. That case is handled by a call to the TryClosedWhite procedure in line 3 of the Dispatch procedure (Algorithm 3.3.2). We can then assume for the three other cases that this vertex is bivalent.

Case 2. The edge adjacent to the current edge by its bivalent white vertex hasn't been visited yet and the next black vertex is trivalent. This case is handled in line 4 by a call to the TryForward procedure.

Case 3. As in the previous case, the adjacent edge hasn't been visited yet but here the next black vertex is univalent. This case is handled in line 5 by a call to the TryClosedBlack procedure.

Case 4. The edge adjacent to the current edge by its bivalent white vertex has already been visited and thus already has a label, which we call t . The point is that those edges, already visited but still waiting for further exploration on their white side, are precisely those that are stored in the stack. Each edge stored in the stack corresponds to an admissible possibility for the white

neighbour of the current edge. The exploration of those possibilities is done by the “for” statement in lines 6 to 9 of the procedure. The edge of the stack t matched with the current edge s is temporarily removed from the stack using the “dancing link” trick implemented by the Mask and Reveal primitives called in lines 7 and 9 of the procedure.

The production of new edges has to be compatible with the maximum allowed size n of the diagrams. That condition is checked by the two “if” statements in lines 4 and 5 of the procedure.

Important. *We claim that those four cases cover all the possibilities and that they are mutually exclusive.*

Remark. The order in which the cases are handled by the Dispatch procedure only affects the order in which the structures are produced but not the way they are labeled nor does it change the set of structures that is produced.

Algorithm 3.3.2: DISPATCH ($s : integer$)

```

1 local  $t : integer$ 
2 begin
3   TRYCLOSEDWHITE ( $s$ )
4   if  $c + 3 \leq n + 1$  then TRYFORWARD ( $s$ )
5   if  $c + 1 \leq n + 1$  then TRYCLOSEDBLACK ( $s$ )
6   for  $t \in \text{STACK}$  do
7     MASK ( $t$ )
8     TRYBACKWARD ( $s, t$ )
9     REVEAL ( $t$ )
10 end

```

The TryClosedWhite procedure

It handles the case where the current edge s is incident to a univalent white vertex (case 1. above), as the following picture shows.



It simply builds a fixed point on s in the white permutation (line 2 of the procedure) then it calls the Recurse procedure.

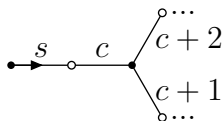
Algorithm 3.3.3: TRYCLOSEDWHITE ($s : integer$)

```

1 begin
2    $s_1[s] \leftarrow s$ 
3   RECURSE ()
4 end
```

The TryForward procedure

Its purpose is to handle the case where the current edge s is incident to a bivalent white vertex followed by a trivalent black vertex (case 2 above) as the following picture shows.



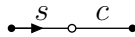
The edges incident to that trivalent black vertex are supposed never to have been encountered before and are then labeled by the values c , $c + 1$ and $c + 2$ (the case where the adjacent edge has already been encountered and thus has already a label is handled by the TryBackward procedure). Lines 2 to 6 build the corresponding black and white cycles in the permutation arrays. Among the three created edges, two need further exploration on their white side; so they are put on the stack by the Push instructions line 7 and 8. Before the Recurse procedure is called, the labeling counter c is increased to account for the creation of the three new edges. The state of the stack and the labeling counter are both restored to their previous value by the instructions in lines 11 to 13, before the procedure exits.

Algorithm 3.3.4: TRYFORWARD ($s : integer$)

```
1 begin
2    $s_0[c] \leftarrow c + 1$ 
3    $s_0[c + 1] \leftarrow c + 2$ 
4    $s_0[c + 2] \leftarrow c$ 
5    $s_1[s] \leftarrow c$ 
6    $s_1[c] \leftarrow s$ 
7   PUSH ( $c + 1$ )
8   PUSH ( $c + 2$ )
9    $c \leftarrow c + 3$ 
10  RECURSE ()
11   $c \leftarrow c - 3$ 
12  POP ()
13  POP ()
14 end
```

The TryClosedBlack procedure

It handles the case where the current edge s is incident to a bivalent white vertex followed by a univalent black vertex (case 3 above), as the following picture shows.



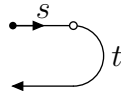
It builds the white 2-cycle and the black 1-cycle in lines 2 to 4 then the labeling counter c is increased in line 5 to account for the creation of the new edge labeled c . It calls the Recurse procedure line 6 and then restores the value of the labeling counter before it exits.

The TryBackward procedure

It handles the case where the current edge s is incident to a bivalent white vertex followed by an edge t that has already been visited (case 4 above), as the following picture shows.

Algorithm 3.3.5: TRYCLOSEDBLACK ($s : integer$)

```
1 begin
2    $s_1[s] \leftarrow c$ 
3    $s_1[c] \leftarrow s$ 
4    $s_0[c] \leftarrow c$ 
5    $c \leftarrow c + 1$ 
6   RECURSE ()
7    $c \leftarrow c - 1$ 
8 end
```



The edge t is chosen in the Dispatch procedure and is removed from the stack before the TryBackward procedure is called and reinstalled back after the procedure terminates. The procedure simply binds together the two edges s and t by building a 2-cycle in the white permutation and then calls the Recurse procedure.

Algorithm 3.3.6: TRYBACKWARD ($s, t : integer$)

```
1 begin
2    $s_1[s] \leftarrow t$ 
3    $s_1[t] \leftarrow s$ 
4   RECURSE ()
5 end
```

The Recurse procedure

Its purpose is to check for the termination of the recursion. If the stack is empty, then the recursion terminates and it calls the Output procedure. In that case, the two arrays s_0 and s_1 describe a finished rooted trivalent diagram with edges labeled from 1, the root edge, to $c - 1$, the last attributed label. The size of the diagram is thus $c - 1$. Otherwise, when the stack is not empty,

an edge is popped out of the stack and the recursion continues by a call to the Dispatch procedure in line 7.

Algorithm 3.3.7: RECURSE ()

```

1 local  $k$  : integer
2 begin
3   if STACKISEMPTY () then
4     OUTPUT ()
5   else
6      $k \leftarrow$  POP ()
7     DISPATCH ( $k$ )
8     PUSH ( $k$ )
9 end

```

3.3.2 Correctness

In this section we show that the algorithm is correct and provide a complexity analysis of its execution time. This complexity analysis is based on a study of the structure of the execution tree of the algorithm and relies on the assumption that it is finite. We first prove that assumption.

Lemma 3.3. *The generating algorithm terminates in a finite amount of time.*

Proof. Looking at the procedures we see that each of them takes only a finite time to complete provided the procedures that are called also take in turn a finite time to complete. Therefore the proof reduces to showing that only a finite number of procedures is called, meaning that the execution tree of the algorithm is finite. Using König’s infinity lemma on trees [39] one has to show that all the branches of that tree are finite. We show that there is a non-negative integer quantity that is strictly decreasing along every branch. If we denote by n_s the size of the stack, then $\mu = 2n_s + n - c + 1$ is such a quantity, where n is the maximum size of the diagrams being generated and c is the labeling counter of the algorithm. It is non-negative because n_s is non-negative and because according to the “if” conditions of the Dispatch procedure, $n - c + 1$ is also non-negative, meaning that no label exceeding n is

ever attributed to an edge. In the following table we summarize the changes in the value of n_s , c and μ after a cycle Dispatch \rightarrow Try- \rightarrow Recurse \rightarrow Dispatch has been completed in each of the four cases described in Section 3.3.1 (cf. figure 3.3).

| | case 1. | case 2. | case 3. | case 4. |
|--------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| n'_s | $n_s - 1$ | $n_s + 1$ | $n_s - 1$ | $n_s - 2$ |
| c' | c | $c + 3$ | $c + 1$ | c |
| μ' | $\mu - 2$ | $\mu - 1$ | $\mu - 3$ | $\mu - 4$ |

In each case, $\mu' < \mu$ so the quantity μ is strictly decreasing along every branch of the execution tree. \square

Lemma 3.4. *The rooted trivalent diagrams produced by the generating algorithm are labeled according to the characteristic labeling of Section 3.2.*

Proof. The proof is by induction. Assuming that the stack, the labeling counter and the labels of the cycles already generated agree with the corresponding state of the labeling procedure of Section 3.2 at the start of a call to the Dispatch procedure (induction hypothesis) one can check that the execution of the algorithm through each of the four Try- procedures (Algorithm 3.3.4 to 3.3.5) preserves that hypothesis, that is the new cycles introduced in the permutations s_0 and s_1 are labeled consistently with that of the labeling procedure and that the state of the stack also matches the one found in the labeling after visiting those new cycles. Finally, one has to check that the two base cases produced by the Generate procedure are also consistent with the characteristic labeling. This is immediate and completes the induction. \square

Theorem 3.5. *The generating algorithm produces an exhaustive and non-redundant list of rooted trivalent diagrams.*

Proof. Exhaustivity comes primarily by induction from the local exhaustivity claim of the case analysis of Section 3.3.1. The mutual exclusion of the cases ensures that different rooted diagrams are produced, at least differing in the way they are labeled (the labeling counter is strictly increasing during the generation process of a structure), but since the structures are produced in their characteristic labeling, none of them could be isomorphic. \square

3.3.3 Average Time Complexity

In this section we prove the main property of the algorithm, that it spends a constant amortized time generating each structure. One way to do the proof could be to express an estimate of the total execution time and the number of structures produced and show that the quotient of those two quantities is bounded independently of the size of the produced structures. We propose instead a proof of the majoration based on the following principle and a careful analysis of the execution tree of the generating algorithm.

Balance Principle.¹ *In a finite tree, the number of leaves is greater than the number of its nodes having degree at least 2.*

Proof. The proof is by an easy recurrence on the number of internal nodes. Every finite tree can be constructed starting from a one-node tree by successive replacement of a leaf by an internal node having only leaves as sons. The starting tree satisfies the balance principle; so the recurrence is initialized. Assuming by recurrence that a finite tree satisfies the principle, and replacing one of its leaves by a internal node having $k \geq 1$ leaves as sons, one increases the number of internal nodes by 1 and the number of leaves by $k - 1 \geq 0$. If $k \geq 2$ the number of nodes having degree at least 2 is increased by 1, but the number of leaves is also increased by $k - 1 \geq 1$; so the resulting tree still satisfies the principle. The recurrence is complete. \square

Lemma 3.6. *The total execution time of the generating algorithm is $O(C_n)$, where C_n is the number of procedures called during the execution.*

Proof. The only procedure of the algorithm that contains a loop and thus can have an arbitrarily long execution time is the Dispatch procedure. Since each iteration of the loop has a constant execution time and since the TryBackward procedure is called each time, we can transfer the cost of the iteration to the TryBackward procedure and then assume the Dispatch procedure to have a bounded execution time. In this way every procedure is assumed to have a bounded execution time so that the total execution time is proportional to C_n . \square

1. Beside I claim no originality for that simple result, I couldn't find any reference for it in the litterature. This is why I chose to provide a proof, for the convenience of the reader. The only originality here is the application of this principle to the proof of a CAT property.

Let D_n, R_n, O_n denote respectively, the total number of times the Dispatch, Recurse and Output procedures are called and let T_n denote the total number of times one of the four Try- procedures is called, where n is the maximum size of the structures being produced.

Lemma 3.7. *We have $D_n \leq 2 O_n$.*

Proof. Let D'_n denote the number of calls to the Dispatch procedure that have an out-degree at most 2. The leaves of the execution tree of the algorithm are calls to the Output procedure because the other procedures all have out-degree at least 1, hence by the balance principle above $D'_n \leq O_n$. The Dispatch procedure has an out-degree at least one because it calls the TryClosedWhite procedure unconditionally (line 3), and when its out-degree is 1 it means that the stack is empty (line 6) and that $c \leq n$ (lines 4 and 5). This means that all the n edges have been labeled and that the call to the Recurse procedure subsequent to the call to the TryClosedWhite will result in a call to the Output procedure and no further call to the Dispatch procedure. Therefore we see that the Dispatch procedure can have an out-degree of 1 but that can only happen once at the end of each branch. We thus have $D_n \leq D'_n + O_n$ and then $D_n \leq 2 O_n$. \square

Theorem 3.8 (CAT property). *The average time spent by the generating algorithm to produce each structure is bounded independently of its size.*

Proof. Let C_n denote the total number of procedures called during the execution of the algorithm. The number of structures produced by the algorithm is equal to O_n . Since the total execution time of the algorithm is $O(C_n)$ the average time spent producing each structure is $O(C_n/O_n)$. We have to show that the quotient C_n/O_n is bounded independently of n . We clearly have $C_n = 1 + D_n + R_n + T_n + O_n$: the +1 accounts for the first call to the Generate procedure. Since the Recurse procedure is only called by one of the four Try- procedures and each one calls it exactly once we have $T_n = R_n$. Since the Recurse procedure is called twice by the Generate procedure and the Recurse procedure calls one of the Recurse or Output procedures, we have $R_n + 2 = D_n + O_n$. Therefore we have,

$$\begin{aligned}
C_n &= 1 + D_n + R_n + T_n + O_n \\
&= 1 + D_n + 2 R_n + O_n && \text{as } T_n = R_n, \\
&= 3 D_n + 3 O_n - 3 && \text{as } R_n + 2 = D_n + O_n, \\
&\leq 9 O_n && \text{as } D_n \leq 2 O_n,
\end{aligned}$$

and then $C_n/O_n \leq 9$. The bound on the quotient is independent of n as announced. \square

3.4 First Application: Modular Group and Unrooted Trivalent Diagrams

We recall that the modular group $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z})$ is the following group of 2 by 2 integer matrices with unit determinant:

$$\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z}) = \left\{ \pm \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_2(\mathbb{Z}) / \pm \mathrm{Id} \mid ad - bc = 1 \right\}.$$

There are many possible finite presentations for this group and we shall stick to the following:

$$\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z}) = \langle A, B \mid A^2 = B^3 = 1 \rangle$$

with A and B being the following two matrices:

$$A = \pm \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad B = \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix},$$

for it renders explicit the following isomorphism:

$$\mathrm{PSL}_2(\mathbb{Z}) \simeq \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} * \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}.$$

3.4.1 Displacements Groups

The modular group acts naturally on the set of edges of any trivalent diagram. This action is generated by the two *elementary moves*,

$$a \cdot A = \sigma_{\circ}(a) \quad \text{and} \quad a \cdot B = \sigma_{\bullet}(a).$$

The elementary move A acts by exchanging positions of the two edges incident to any bivalent white vertex and by fixing the only edge incident to any univalent white vertex. Similarly, the elementary move B acts by cyclically permuting the three edges incident to any trivalent black vertex and by fixing the only edge incident to any univalent black vertex.

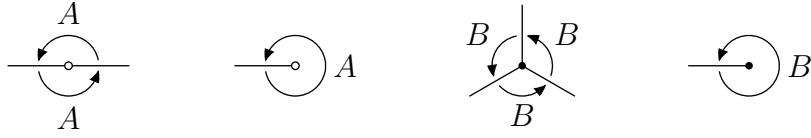


Figure 3.4. A picture of the result of the action of the two elementary moves A and B on the edges incident to the various sorts of vertices.

Given any trivalent diagram Γ , the two elementary moves just described generate a group Φ_Γ called the *displacement group* of Γ . It is easily verified that it is the quotient group of $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ by the kernel of the group action $\rho: \text{PSL}_2(\mathbb{Z}) \rightarrow \mathfrak{S}_{\Gamma_-}$. The modular group has therefore a universal status with respect to that construction: it can be considered as the universal group of displacements for the species of trivalent diagrams. If one restricts one's attention to finite trivalent diagrams, the profinite completion of $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ would be a more appropriate candidate for that purpose.

3.4.2 Unrooted Plane Binary Trees

One can associate to any (unrooted) plane binary tree Θ a connected and acyclic trivalent diagram Γ , called its *enriched barycentric subdivision* $\Gamma = \Theta^{sb+}$, by putting an extra white vertex in the middle of every edge of Θ . The set of directed edges of Θ and that of undirected edges of Γ are in bijection in two natural ways.

There is another famous presentation of the modular group. It is given by two generators S and T and two relations as follows,

$$\text{PSL}_2(\mathbb{Z}) = \langle S, T \mid S^2 = (ST)^3 = 1 \rangle,$$

with S and T being the following two matrices:

$$S = \pm \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad T = \pm \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

The conversion between the two presentations is done through the application of the following rules:

$$\begin{aligned} A &\rightarrow S, & S &\rightarrow A, \\ B &\rightarrow (ST)^2, & T &\rightarrow AB^{-1}. \end{aligned}$$

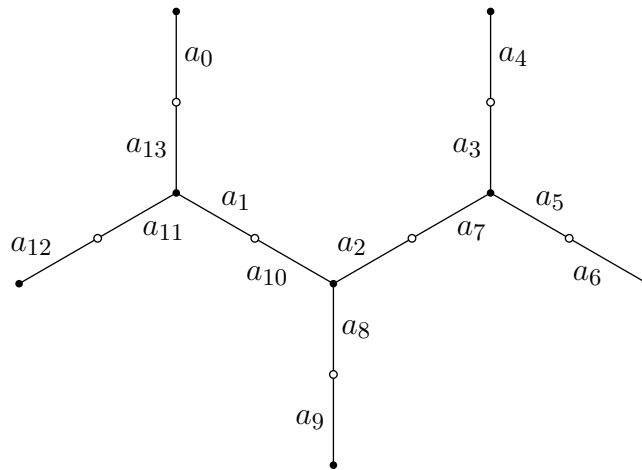


Figure 3.5. We see in this example the result of iterating the elementary move T on the edges of a binary tree. The edges are labeled by a_k where $a_{k+1} = a_k \cdot T$. This can be used to implement depth-first traversals in a purely iterative way.

Here are two basic criteria relating connectedness and acyclicity of finite trivalent diagrams to the transitivity of the action of some displacement groups:

- 1) A finite trivalent diagram Γ is *connected* if and only if its displacement group Φ_Γ acts transitively on its set of edges.
- 2) If it is a tree, then the subgroup Ψ_Γ of its displacements generated by the elementary move T acts transitively on its set of edges.

There is a natural bijection between trivalent diagrams having no univalent white vertex and those having no univalent black vertex. It works by removing every univalent black vertex and the adjacent edges in one direction and by growing every univalent white vertex with a new edge and a new univalent black vertex in the other direction. This bijection is compatible with connectedness and acyclicity and we thus recover by restriction the classical bijection between complete and incomplete plane binary trees.

3.4.3 Classification Principle

To any connected rooted trivalent diagram, one can moreover associate the subgroup of $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ consisting of elements that fix the distinguished edge of

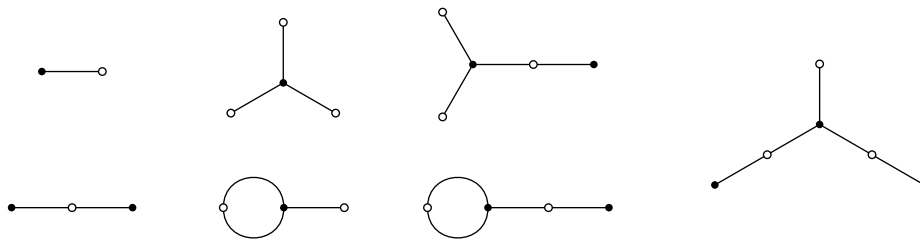


Table 3.1. Trivalent diagrams of size up to five, up to isomorphism.

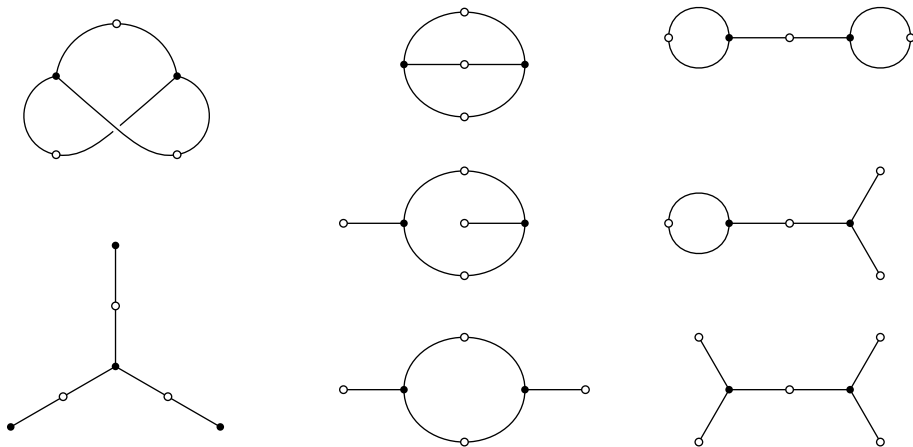


Table 3.2. Trivalent diagrams of size six, up to isomorphism.

the diagram. We proved in [77] that this correspondence is one to one and we presented an enumeration in the form of a generating series that agrees perfectly with the number of structures generated by Algorithm 3.3.1.

Now, if one changes the distinguished edge of a rooted trivalent diagram, the corresponding subgroups get conjugated. We have moreover proved that two subgroups in the modular group are conjugated if and only if the associated rooted trivalent diagrams differ only in the position of their distinguished edges. It follows that the unrooted trivalent diagrams correspond in a one-to-one fashion to the conjugacy classes of subgroups of the modular group.

We gave in [77] the exhaustive list of trivalent diagrams of size up to nine. That list was computed by hand in a non-systematic fashion. One intent of Algorithm 3.3.1 of Section 3.3.1 is to permit a retroactive validation of both those tables and the associated generating series that we reproduce here in Tables 3.6 and 3.7; they are parts of the online encyclopedia of integer

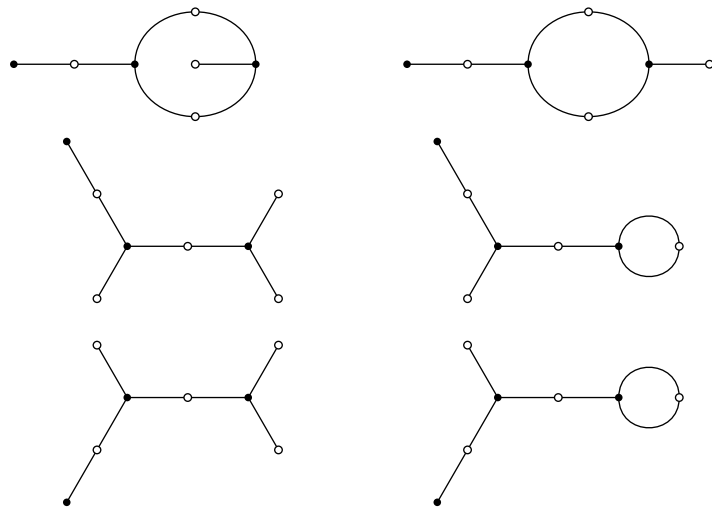


Table 3.3. Trivalent diagrams of size seven, up to isomorphism.

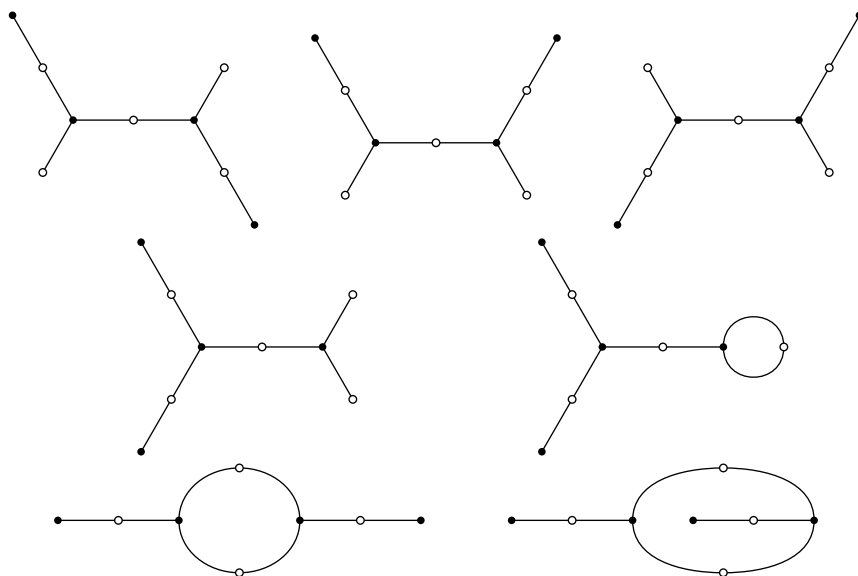


Table 3.4. Trivalent diagrams of size eight, up to isomorphism.

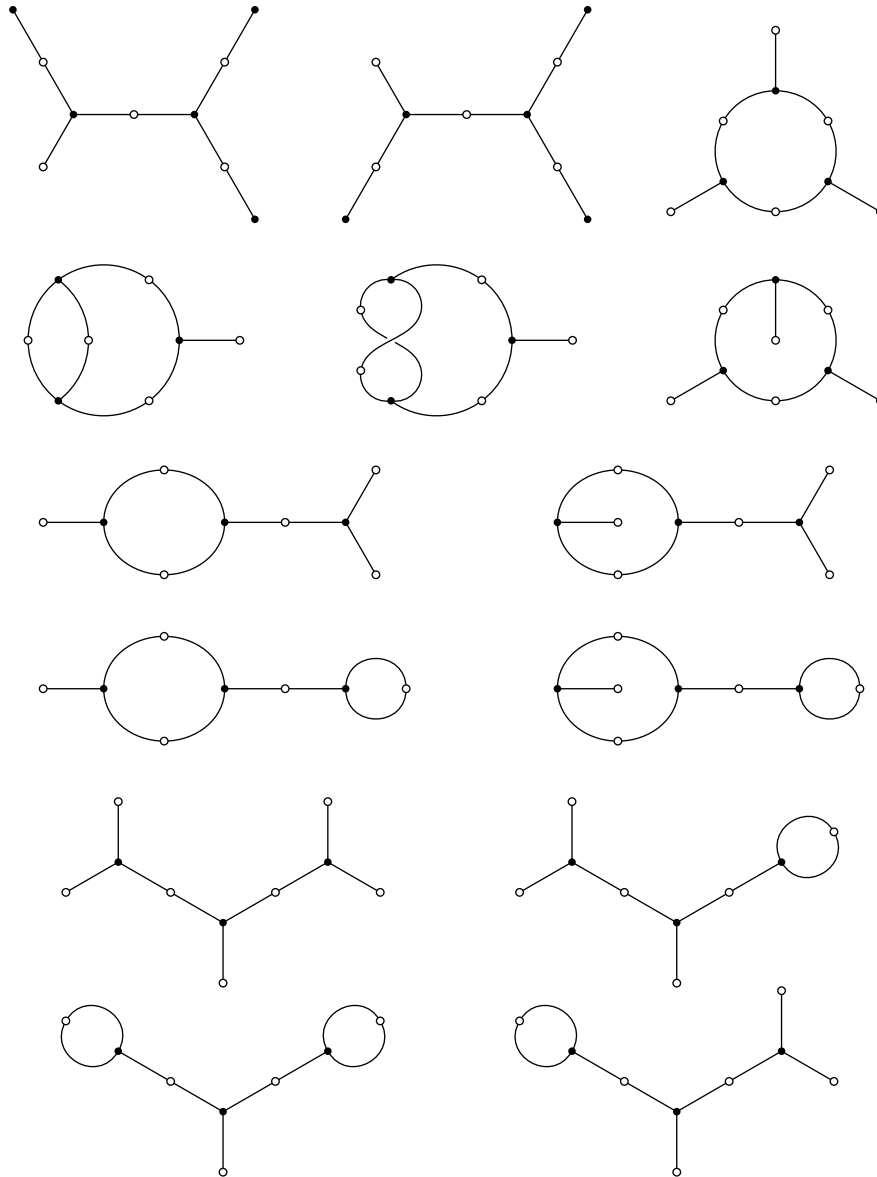


Table 3.5. Trivalent diagrams of size nine, up to isomorphism.

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_3^\bullet(t) = & t + t^2 + 4t^3 + 8t^4 + 5t^5 + 22t^6 + 42t^7 + 40t^8 + 120t^9 + 265t^{10} + 286t^{11} \\
& + 764t^{12} + 1729t^{13} + 2198t^{14} + 5168t^{15} + 12144t^{16} + 17034t^{17} + 37702t^{18} \\
& + 88958t^{19} + 136584t^{20} + 288270t^{21} + 682572t^{22} + 1118996t^{23} \\
& + 2306464t^{24} + 5428800t^{25} + 9409517t^{26} + 19103988t^{27} + 44701696t^{28} \\
& + 80904113t^{29} + 163344502t^{30} + 379249288t^{31} + 711598944t^{32} \\
& + 1434840718t^{33} + 3308997062t^{34} + 6391673638t^{35} + 12921383032t^{36} \\
& + 29611074174t^{37} + 58602591708t^{38} + 119001063028t^{39} \\
& + 271331133136t^{40} + 547872065136t^{41} + 1119204224666t^{42} \\
& + 2541384297716t^{43} + 5219606253184t^{44} + 10733985041978t^{45} \\
& + 24300914061436t^{46} + 50635071045768t^{47} + 104875736986272t^{48} \\
& + 236934212877684t^{49} + 499877970985660t^{50} + o(t^{50})
\end{aligned}$$

Table 3.6. Order fifty development of the generating series $\tilde{D}_3^\bullet(t)$ giving as the coefficient of t^n the number of connected rooted trivalent diagrams with n edges (A005133) which is also the number of index n subgroups in the modular group $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$.

sequences [67] under the references (A005133) and (A121350).

We generated unrooted trivalent diagrams using a method already described in [83]: by imposing a linear order on the set of rooted trivalent diagrams with a given number of edges, generating them all and accepting only those that are minimal, according to the linear order, among all those that differ only in the position of their root. Tables 3.1 to 3.5 show all the unrooted trivalent diagrams with up to 9 edges.

3.5 Second Application: Triangular Maps

By an (*oriented*) *triangular map* we mean a finite polyhedral structure composed of vertices, directed edges, and oriented triangular faces with an incidence relation between them. Suggestively enough, a directed edge, also called

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_3(t) = & t + t^2 + 2t^3 + 2t^4 + t^5 + 8t^6 + 6t^7 + 7t^8 + 14t^9 + 27t^{10} + 26t^{11} \\
& + 80t^{12} + 133t^{13} + 170t^{14} + 348t^{15} + 765t^{16} + 1002t^{17} + 2176t^{18} \\
& + 4682t^{19} + 6931t^{20} + 13740t^{21} + 31085t^{22} + 48652t^{23} + 96682t^{24} \\
& + 217152t^{25} + 362779t^{26} + 707590t^{27} + 1597130t^{28} + 2789797t^{29} \\
& + 5449439t^{30} + 12233848t^{31} + 22245655t^{32} + 43480188t^{33} \\
& + 97330468t^{34} + 182619250t^{35} + 358968639t^{36} + 800299302t^{37} \\
& + 1542254973t^{38} + 3051310056t^{39} + 6783358130t^{40} + 13362733296t^{41} \\
& + 26648120027t^{42} + 59101960412t^{43} + 118628268978t^{44} \\
& + 238533003938t^{45} + 528281671324t^{46} + 1077341937144t^{47} \\
& + 2184915316390t^{48} + 4835392099548t^{49} + 9997568771074t^{50} + o(t^{50})
\end{aligned}$$

Table 3.7. Order fifty development of the generating series $\tilde{D}_3(t)$ giving as the coefficient of t^n the number of connected unrooted trivalent diagrams with n edges (A121350) which is also the number of conjugacy classes of index n subgroup in the modular group $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$.

an *arc*, is bordered by an ordered pair of vertices, which we call its *origin* and its *destination*, respectively, such that triangular faces are each bordered by a cycle of three arcs whose destination coincides with the origin of the following arc in cyclic order.

The following definition is useful in grasping the incidence relations of a combinatorial map but insufficient because it lacks some traversal information such as the cyclic orientation of the faces.

Definition 3.5. A *combinatorial pre-map* Λ is given by three sets Λ_0 , Λ_1 and Λ_2 and five mappings $s, t : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_0$, $\ell, r : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_2$ and $\cdot^{-1} : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_1$ satisfying the following conditions for all elements a of Λ_1 ,

$$\begin{array}{lll}
s(a^{-1}) = t(a) & \ell(a^{-1}) = r(a) & (a^{-1})^{-1} = a \\
t(a^{-1}) = s(a) & r(a^{-1}) = \ell(a) & a^{-1} \neq a.
\end{array}$$

The four mappings s , t , ℓ and r are further assumed to be *surjective*.

The elements of the three sets Λ_0 , Λ_1 , and Λ_2 are the *vertices*, the *arcs* (directed edges), and the *faces* of the combinatorial map, respectively. The

two mappings s and t map any arc a to its *origin* $s(a)$ and *destination* $t(a)$. The two mappings ℓ and r map any arc a to its *left-hand face* $\ell(a)$ and *right-hand face* $r(a)$. Finally, the mapping \cdot^{-1} maps any arc a to its *inverse* a^{-1} obtained by reversing its direction.

Definition 3.6. A *morphism* φ between two combinatorial pre-maps Λ and Λ' is a triple of mappings $\varphi_0 : \Lambda_0 \rightarrow \Lambda'_0$, $\varphi_1 : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda'_1$ and $\varphi_2 : \Lambda_2 \rightarrow \Lambda'_2$ compatible with the five structure mappings in the sense that the following diagrams are commutative.

$$\begin{array}{ccc}
 \Lambda_1 & \xrightarrow{\varphi_1} & \Lambda'_1 \\
 \downarrow s,t & & \downarrow s,t \\
 \Lambda_0 & \xrightarrow{\varphi_0} & \Lambda'_0
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{ccc}
 \Lambda_1 & \xrightarrow{\varphi_1} & \Lambda'_1 \\
 \downarrow \ell,r & & \downarrow \ell,r \\
 \Lambda_2 & \xrightarrow{\varphi_2} & \Lambda'_2
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{ccc}
 \Lambda_1 & \xrightarrow{\varphi_1} & \Lambda'_1 \\
 \downarrow \cdot^{-1} & & \downarrow \cdot^{-1} \\
 \Lambda_1 & \xrightarrow{\varphi_1} & \Lambda'_1
 \end{array}$$

When the three mappings are bijections the morphism is an *isomorphism*.

3.5.1 Cyclic Orientation

In a given combinatorial pre-map Λ , the *inner border* of a face f is the set $\ell^{-1}(f) = \{a \in \Lambda_1 \mid \ell(a) = f\}$ of arcs having f as their left-hand face. A combinatorial pre-map is said to be *strictly triangular* if each of its faces has exactly three arcs in its inner border. The following definition describes the traversal information lacking from a triangular combinatorial pre-map to fully describe a triangular map.

Definition 3.7. A (*strictly*) *triangular map* Λ is a strictly triangular combinatorial pre-map together with a cyclic order imposed on the three arcs that have the same left-hand face: $a + 1$ denotes the next arc after a in this cyclic order.

Definition 3.8. A *morphism* φ (respectively, an *isomorphism*) between two triangular maps Λ and Λ' is a morphism (respectively, an isomorphism) of the underlying combinatorial pre-maps that preserves the cyclic order of the previous definition.

3.5.2 Associated Trivalent Diagram

To any triangular map Λ one can associate in a natural way a trivalent diagram $\Gamma = \Lambda^{inc}$ which is called the *incidence diagram* of the triangular map. To any face of Λ one associates a black vertex of Γ and to any edge of Λ one associates a white vertex of Γ ; then one connect black and white vertices of Γ by an edge if the corresponding face and edge are incident in Λ . The cyclic orientations around black vertices is the one given by the cyclic orientation of the corresponding triangular faces of Λ . Table 3.8 gives three simple examples of the correspondence. This operation has already been described by Walsh in [82], namely: taking the face-vertex dual of Λ one gets a trivalent map and then applying the construction of Walsh, one gets the incidence diagram Γ .

The *incidence diagram* of a triangular map Λ is the trivalent diagram, denoted by Λ^{inc} , whose sets of white vertices, black vertices and edges are the following,

$$\Lambda_{\circ}^{inc} = \{\mathbf{a}_a\}_{a \in \Lambda_1^*}, \quad \Lambda_{\bullet}^{inc} = \{\mathbf{b}_f\}_{f \in \Lambda_2}, \quad \Lambda_{-}^{inc} = \{\mathbf{c}_a\}_{a \in \Lambda_1},$$

where Λ_1^* is the set of undirected edges of Λ , and whose structure mappings $\partial_{\circ} : \Lambda_{-}^{inc} \rightarrow \Lambda_{\circ}^{inc}$, $\partial_{\bullet} : \Lambda_{-}^{inc} \rightarrow \Lambda_{\bullet}^{inc}$ and the permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} of Λ_{-}^{inc} are defined by the following relations,

$$\begin{aligned} \partial_{\circ}(\mathbf{c}_a) &= \mathbf{a}_{\pi(a)}, & \sigma_{\circ}(\mathbf{c}_a) &= \mathbf{c}_{a-1}, \\ \partial_{\bullet}(\mathbf{c}_a) &= \mathbf{b}_{\ell(a)}, & \sigma_{\bullet}(\mathbf{c}_a) &= \mathbf{c}_{a+1}, \end{aligned}$$

where $\pi(a)$ is the undirected version of the arc a . This operation is functorial for it is easily extended to morphisms of triangular maps by the following process: to any morphism φ between two triangular maps Λ and Λ' , we associate a morphism denoted by φ^{inc} between the corresponding incidence diagrams Λ^{inc} and $(\Lambda')^{inc}$. It is given by the following relations,

$$\varphi_{\circ}^{inc}(\mathbf{a}_a) = \mathbf{a}'_{\varphi_1^*(a)}, \quad \varphi_{\bullet}^{inc}(\mathbf{b}_f) = \mathbf{b}'_{\varphi_2(f)}, \quad \varphi_{-}^{inc}(\mathbf{c}_a) = \mathbf{c}'_{\varphi_1(a)}.$$

Functoriality should be obvious by careful inspection.

The \cdot^{inc} functor we get by what precedes is full and faithful [49, p. 14 and 15], but not essentially surjective² in that trivalent diagrams we get as

2. A functor $F : A \rightarrow B$ is *essentially surjective* if for any objects $b \in B$ there is an object $a \in A$ such that $F(a)$ and b are isomorphic in B .

the incidence diagram of a trivalent map Λ have no univalent white vertex nor univalent black vertex. We call a trivalent diagram *regular* if it has no univalent vertex. The \cdot^{inc} functor is essentially surjective on the full subcategory of regular trivalent diagrams, and so,

Theorem 3.9. *The \cdot^{inc} functor realizes an equivalence between the category of triangular maps and the full subcategory of regular trivalent diagrams.*

Proof. To prove this theorem we shall describe a *reconstruction* operation, which associates to any regular trivalent diagram Γ a triangular map denoted by Γ^{map} with functorial property and such that for all regular trivalent diagrams Γ and triangular maps Λ , one has the following two natural *reciprocity isomorphisms*,

$$(\Gamma^{map})^{inc} \underset{nat.}{\simeq} \Gamma \quad \text{and} \quad (\Lambda^{inc})^{map} \underset{nat.}{\simeq} \Lambda.$$

We shall first introduce some notations. We call Ψ_Γ the subgroup of Φ_Γ generated by the elementary move T (*cf.* Section 3.4.2) and denote the natural projection by $\pi : \Gamma_- \rightarrow \Gamma_-/\Psi_\Gamma$. The mapping induced between Γ_-/Ψ_Γ and Γ'_-/Ψ_Γ by an equivariant mapping $\varphi : \Gamma_- \rightarrow \Gamma'_-$ will be denoted by φ_Ψ . The sets of vertices, edges and faces of the reconstructed map are the following,

$$\Gamma_0^{map} = \{ \mathfrak{d}_x \}_{x \in \Gamma_-/\Psi_\Gamma} \quad \Gamma_1^{map} = \{ \mathfrak{e}_a \}_{a \in \Gamma_-} \quad \Gamma_2^{map} = \{ \mathfrak{f}_y \}_{y \in \Gamma_\bullet}.$$

The five structure mappings $s, t : \Gamma_1^{map} \rightarrow \Gamma_0^{map}$, $r, \ell : \Gamma_1^{map} \rightarrow \Gamma_2^{map}$ and $\cdot^{-1} : \Gamma_1^{map} \rightarrow \Gamma_1^{map}$ and the group action $+$: $\Gamma_1^{map} \times \mathbb{Z} \rightarrow \Gamma_1^{map}$ of the reconstructed map are given by the following equations:

$$\begin{aligned} s(\mathfrak{e}_a) &= \mathfrak{d}_{\pi(a)}, & \ell(\mathfrak{e}_a) &= \mathfrak{f}_{\partial_\bullet(a)}, & \mathfrak{e}_a^{-1} &= \mathfrak{e}_{\sigma_\circ(a)}, \\ t(\mathfrak{e}_a) &= \mathfrak{d}_{\pi(\sigma_\circ(a))}, & r(\mathfrak{e}_a) &= \mathfrak{f}_{\partial_\bullet(a^{-1})}, & \mathfrak{e}_a + 1 &= \mathfrak{e}_{\sigma_\bullet(a)}. \end{aligned}$$

The construction then extends to morphisms in the sense that any morphism φ between two regular trivalent diagrams Γ and Γ' induces a morphism φ^{map} between the two reconstructed maps Γ^{map} and $(\Gamma')^{map}$ whose three components are the following,

$$\varphi_0^{map}(\mathfrak{d}_x) = \mathfrak{d}_{\varphi_-, \Psi(x)}, \quad \varphi_1^{map}(\mathfrak{e}_a) = \mathfrak{e}_{\varphi_-(a)}, \quad \varphi_2^{map}(\mathfrak{f}_y) = \mathfrak{f}_{\varphi_\bullet(y)}.$$

The functoriality of the reconstruction operation and the two reciprocity isomorphisms should be clear by careful inspection. \square

Remark. The content of the above theorem is nothing but a special case of *Poincaré duality*.

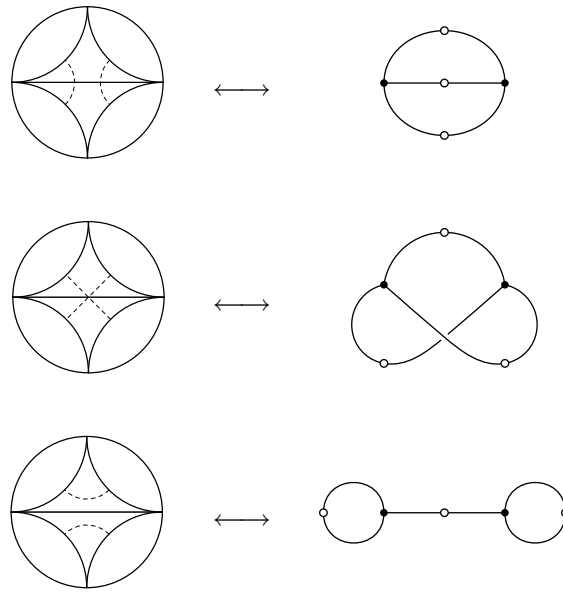


Table 3.8. The three triangular maps with two faces together with their incidence diagrams. The triangular map in the middle row corresponds to the only way to build a torus using two triangles, and the two others, top and bottom rows, correspond to the two different ways to build a sphere using two triangles.

3.5.3 Exhaustive Generation of Triangular Maps

To adapt the generator algorithm to produce only regular rooted trivalent diagrams and thus rooted triangular maps, it suffices to remove the call to Algorithms 3.3.5 and 3.3.3 from line 6 and 7 of Algorithm 3.3.2 and the lines 2 to 5 from Algorithm 3.3.1. Those two removals preserve the CAT property we thus get a constant amortized time generator for regular rooted triangular maps, as announced.

The tables 3.8 to 3.11 show exhaustive lists of *unrooted* triangular maps produced from the output of the generator algorithm. An easy and efficient way to do that is described in [83]. Following the remarks in section 3.2.3 we can put a linear order on the set of rooted trivalent diagrams of a given size. We then simply have to remove from the list the trivalent diagrams that are not minimal in their conjugacy class. Filtering out non-minimal representatives doesn't require to store a full list of generated diagrams. Since two conjugated

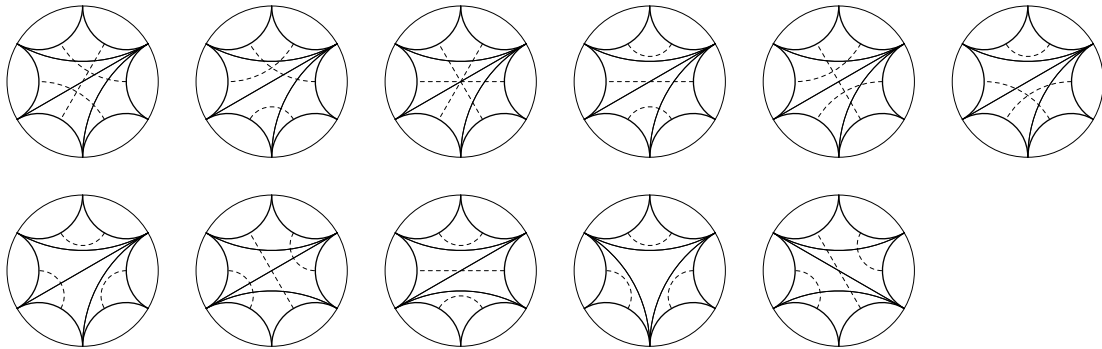


Table 3.9. The eleven triangular maps with four faces. According to Table 3.15, six of them are spheres while five of them are toruses. This is easily checked using Euler's formula $\chi_E = n_v - n_e + n_f = 2 - 2g$ [32, chap. 8, sec. 8a].

rooted diagrams differ only in the position of their root, walking through the full conjugacy class of a rooted diagram is accomplished by successively moving its root to every possible position.

The interpretation of the drawings of tables 3.8 to 3.11 requires some explanation. For that purpose we adopt a geographical terminology. Ignoring for a moment the surrounding circle and the dashed lines of the drawings, the triangular regions are called the countries of the maps and the solid lines are the boundaries of their incident countries. One can distinguish the boundaries that are bordering two distinct countries (the inner boundaries) from those that are bordering a single country (the outer boundaries). The roads of the maps are symbolized by dashed lines connecting, in a two-by-two fashion, the outer boundaries of the maps.

To produce them, we have considered the plane rooted binary tree of the depth-first traversal of Algorithm 3.2.1. As already noted, this algorithm provides natural cuttings for the associated trivalent diagrams. Those cuttings arise as what we previously called backward connections. In contrast, the edges of the traversal tree correspond to what we previously called forward connections. In the graphical representation, we use an embedding of the produced triangulated polygon in the Poincaré disc model of the hyperbolic plane as it seems the natural setting for generic non-overlapping triangular tilings. The surrounding circle around each figure is of course irrelevant to the structures.

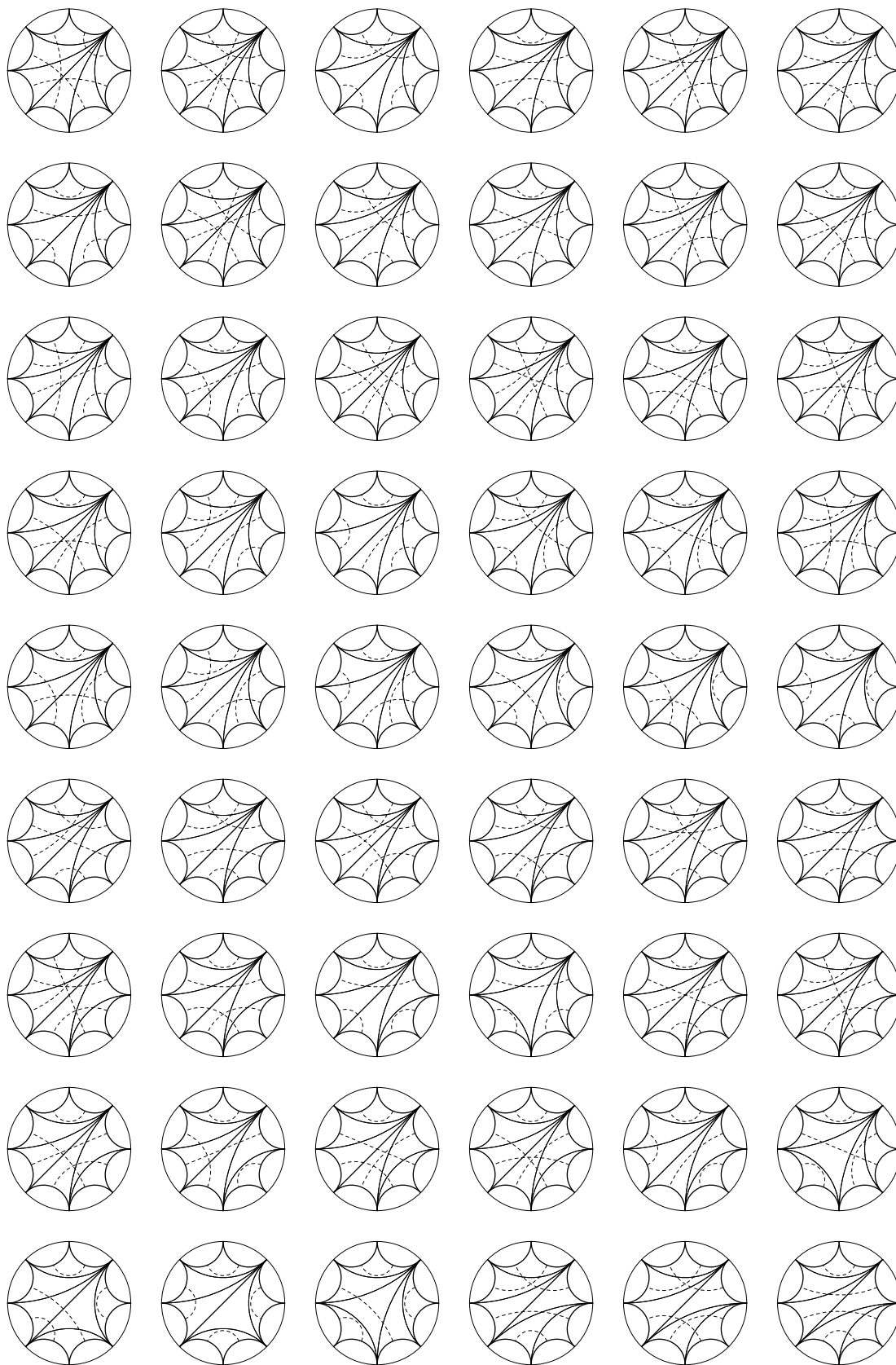


Table 3.10. The eighty-one triangular maps with six faces (first part).

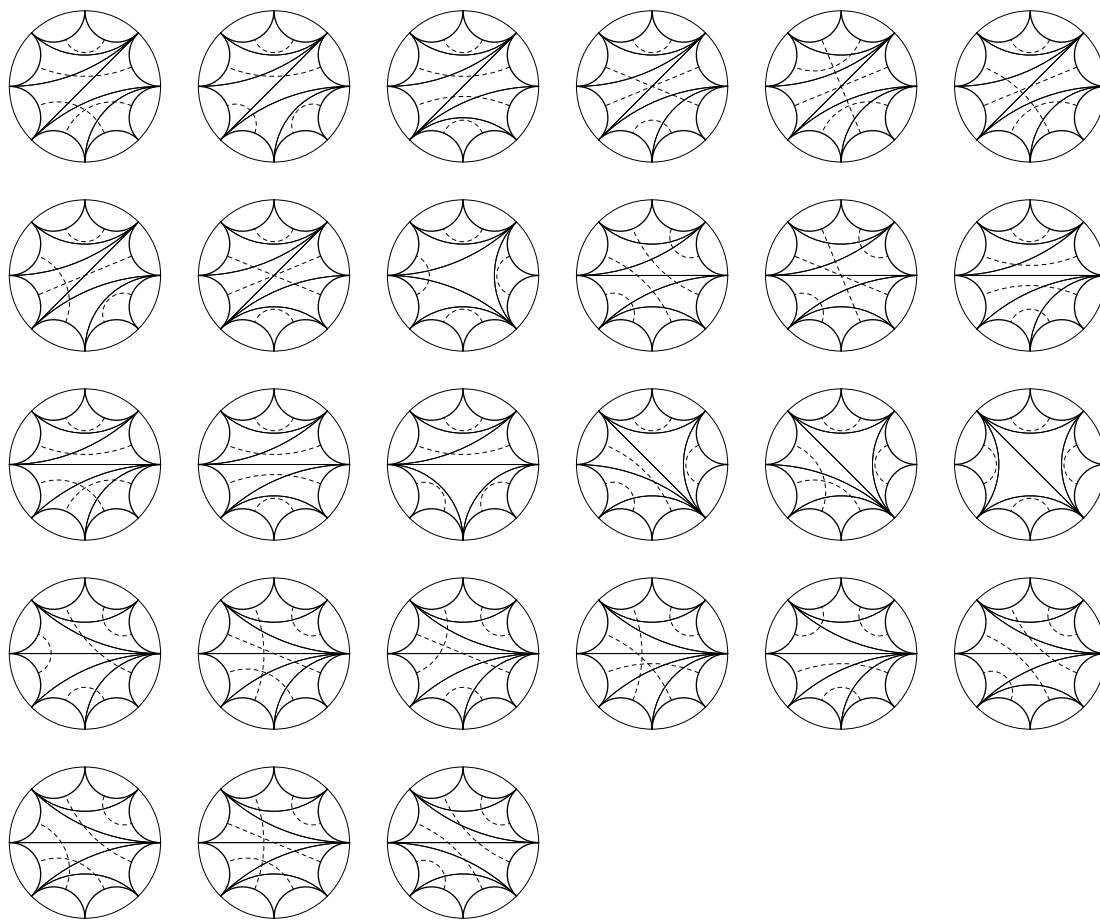


Table 3.11. The eighty-one triangular maps with six faces (last part, continued from Table 3.10).

$$\begin{aligned}
\tilde{M}_3^\bullet(t) = & 5t^6 + 60t^{12} + 1105t^{18} + 27120t^{24} + 828250t^{30} + 30220800t^{36} \\
& + 1282031525t^{42} + 61999046400t^{48} + 3366961243750t^{54} \\
& + 202903221120000t^{60} + 13437880555850250t^{66} + 970217083619328000t^{72} \\
& + 75849500508999712500t^{78} + 6383483988812390400000t^{84} \\
& + 575440151532675686278125t^{90} + 55318762960656722780160000t^{96} \\
& + 5649301494178851172304968750t^{102} \\
& + 610768380520654474629120000000t^{108} \\
& + 69692599846542054607811528918750t^{114} \\
& + 8370071726919812448859648819200000t^{120} + o(t^{120})
\end{aligned}$$

Table 3.12. Development of the generating series $\tilde{M}_3^\bullet(t)$, up to order one hundred and twenty. It gives as the coefficient of t^{6n} the number of connected unrooted unlabeled triangular maps with $6n$ arcs, thus $3n$ undirected edges and $2n$ triangular faces (A062980). If we denote by a_n that coefficient, the recurrence is as follows: $a_1 = 5$ and for $n \geq 1$, $a_{n+1} = (6n + 6)a_n + \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k}$.

$$\begin{aligned}
\tilde{M}_3(t) = & 3t^6 + 11t^{12} + 81t^{18} + 1228t^{24} + 28174t^{30} + 843186t^{36} + 30551755t^{42} \\
& + 1291861997t^{48} + 62352938720t^{54} + 3381736322813t^{60} \\
& + 203604398647922t^{66} + 13475238697911184t^{72} + 972429507963453210t^{78} \\
& + 75993857157285258473t^{84} + 6393779463050776636807t^{90} \\
& + 576237114190853665462712t^{96} + 55385308766655472416299110t^{102} \\
& + 5655262782600929403228668176t^{108} \\
& + 611338595145132827847686253456t^{114} \\
& + 69750597724332100283681465962492t^{120} + o(t^{120})
\end{aligned}$$

Table 3.13. Order one hundred and twenty development of the generating series $\tilde{M}_3(t)$ giving the number of connected unrooted unlabeled triangular maps with $6n$ arcs, thus $3n$ undirected edges and $2n$ triangular faces (A129114).

| | 2 | 4 | 6 | 8 | 10 | 12 | 14 |
|---|---|----|-----|-------|--------|----------|-----------|
| 0 | 4 | 32 | 336 | 4096 | 54912 | 786432 | 11824384 |
| 1 | 1 | 28 | 664 | 14912 | 326496 | 7048192 | 150820608 |
| 2 | 0 | 0 | 105 | 8112 | 396792 | 15663360 | 544475232 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 50050 | 6722816 | 518329776 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 56581525 |

Table 3.14. The number of *rooted* triangular maps by genus (0 to 4) and number of faces (2 to 14).

| | 2 | 4 | 6 | 8 | 10 | 12 | 14 |
|---|---|---|----|-----|-------|--------|----------|
| 0 | 2 | 6 | 26 | 191 | 1904 | 22078 | 282388 |
| 1 | 1 | 5 | 46 | 669 | 11096 | 196888 | 3596104 |
| 2 | 0 | 0 | 9 | 368 | 13448 | 436640 | 12974156 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1726 | 187580 | 12350102 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1349005 |

Table 3.15. The number of *unrooted* triangular maps by genus (0 to 4) and number of faces (2 to 14).

Tables 3.12 and 3.13 give the number of rooted triangular maps and unrooted triangular maps in the form of generating series. They are also part of [67] under the references (A062980) and (A129114). Their computation is very similar to that of tables 3.6 and 3.7, which is explained in detail in [77]. We shall explain in [76] in a unified fashion how one can compute generating series for rooted and unrooted unlabeled maps of various kind and in chapter 2 the unexpected relation of this sequence to the asymptotics of the Airy function.

As another byproduct of the exhaustive list obtained from the generating algorithm, one can get the precise number of rooted and unrooted triangular map having a given genus and a given number of triangular faces. Tables 3.14 and 3.15 summarize those results for a small number of faces. Recently, M. Krikun [45] kindly communicated us recurrence relations satisfied by the entries of Table 3.14 which he obtained by a clever recursive decomposition of rooted triangular maps. Those recurrence relations make it possible to evaluate easily those numbers without running the generator algorithm. Unfortunately, no general recurrence relation is known for the entries of Table 3.15. The thesis [80] and articles [84, 82] contain the first enumerations of rooted maps of a given genus.

Some lines of those two tables were previously known. For instance, the first line of Table 3.14 is the number of spherical rooted triangular maps counted by the number of their faces [57]. The first line of Table 3.15 is its unrooted counterpart. It is computed by impressive closed formulae in a recent paper by Liskovets, Gao and Wormald [51]. The diagonal terms of those two tables also received close attention. For instance, in [36] Harer and Zagier computed the Euler-Wall characteristic of the mapping class group of singly rooted genus g closed oriented surfaces by a remarkable combinatorial reduction of the problem in which rooted combinatorial maps with one vertex are counted by genus yielding the diagonal sequence of the first table 1, 105, 50050, 56581525, The diagonal sequence of the second table: 1, 9, 172, 1349005, gives the number of unrooted triangular maps of genus g with only one vertex. It has been studied at depth in the article [7] by A. Vdovina and R. Bacher.

3.6 Concluding Remarks and Perspectives

The generating algorithm presented in this chapter (Section 3.3) may lead to trivial adaptations to generate wider classes of diagrams and combinatorial maps, possibly with prescribed degree lists for vertices or faces. Basically it can be simply generalized to produce any connected pair of permutations with prescribed cyclic types, up to simultaneous conjugacy.

Another way to extend the study would be to modify the DISPATCH procedure (Algorithm 3.3.2 of Section 3.3) to generate not an exhaustive cover of the partial cases, but instead a single case of them picked at random. This would result, in a fairly straightforward fashion, in a random sampler algorithm of the corresponding combinatorial structures instead of an exhaustive generator. The difficulty there, is to precompute precise conditional probability tables in order to control the probability distribution of the generated structures by bayesian techniques. Such tables of conditional probabilities could be computed with the help of generating series techniques, namely by following the particular recursive structure of the algorithm and translating this recursive structure into functional equations on the generating series. This calls for a further investigation and could be dealt within a subsequent paper.

If one designs the Dispatch procedure to pick at random a case with uniform probability this would unfortunately not result in a uniform distribution of the output structures but it can still prove useful to produce test cases for many algorithms operating on triangulations. A much better approach but still not perfect is to generate at random the two permutations σ_{\bullet} and σ_{\circ} having the right cycle types with uniform distribution and rejecting each time the resulting map is not connected. This procedure produces each map with probability proportional to $1/A$ where A is the number of its automorphisms. Since the maps have no automorphism other than identity in the vast majority of cases, that statistical bias is in practice unnoticeable.

Conclusion Générale

Dans cette thèse nous avons abordé plusieurs aspects de la combinatoire des cartes et nous avons obtenu plusieurs résultats nouveaux.

Dans le premier chapitre nous avons présenté une méthode originale de comptage s'appuyant sur la théorie des espèces de Joyal et découvert quelques notions qui nous ont paru intéressantes comme celle d'espèce séparable. L'extrême rareté des travaux portant sur le dénombrement des cartes combinatoires non-enracinées semble due à la difficulté de la question. A l'heure actuelle aucune méthode n'est connue pour contrôler simultanément et en toute généralité le nombre de sommets n_s , le nombre d'arêtes n_a , le nombre de faces n_f et le genre g (au sens de la graduation des séries génératrices). Un contrôle simultané sur trois de ces paramètres suffirait à contrôler le quatrième puisqu'ils sont reliés entre eux par la relation d'Euler [32, chap. 8, sec. 8a],

$$1 - \frac{n_s - n_a + n_f}{2} = g.$$

Notre méthode souffre également de ce défaut puisqu'elle ne permet de contrôler que deux de ces paramètres, le nombre d'arêtes et le nombre de faces, ou ce qui revient au même en utilisant la dualité de Poincaré, le nombre de sommets et le nombre d'arêtes. Un apport intéressant de notre méthode, outre qu'elle constitue une approche radicalement nouvelle du problème, est qu'elle permet un contrôle particulièrement précis du degré de chaque face. La table 3.17 page 130 donne les premiers termes de la série génératrice du nombre de cartes connexes non-étiquetées non-enracinées suivant la liste des degrés des faces. Le détail des calculs fait l'objet d'un article en cours de rédaction.

Dans le second chapitre nous avons relié la combinatoire des cartes triangulaires à l'asymptotique de la fonction de Airy d'une façon inédite et originale et donné un procédé de décomposition récursive des cartes triangulaires. Ces

résultats ajoutés à plusieurs autres coïncidences frappantes semblent être des parties émergées d'une vaste théorie qu'il reste encore à découvrir.

Dans le troisième chapitre nous avons détaillé et analysé un algorithme capable de dresser une liste exhaustive des cartes triangulaires enracinées d'une taille donnée et des diagrammes trivalents pointés en temps amorti constant. La preuve de la complexité fait intervenir un lemme très simple sur les arbres et semble applicable dans son principe à une vaste classe de générateurs exhaustifs procédant par backtrack.

$$\begin{aligned}
\tilde{M}^\bullet(t, u_1, u_2, \dots) &= (u_2 + u_1^2) t + (2 u_1^2 u_2 + u_2^2 + 4 u_1 u_3 + 3 u_4) t^2 \\
&+ (u_2^3 + 15 u_6 + 2 u_3 u_1^3 + 9 u_2 u_4 + 9 u_1^2 u_4 + 3 u_1^2 u_2^2 + 18 u_1 u_5 + 12 u_2 u_1 u_3 + 5 u_3^2) t^3 \\
&+ \left(\begin{aligned} &u_2^4 + 18 u_4 u_2^2 + 56 u_5 u_3 + 60 u_2 u_6 + 20 u_2 u_3^2 + 60 u_1^2 u_6 + 16 u_1^3 u_5 \\ &+ 16 u_1^2 u_3^2 + 2 u_1^4 u_4 + 105 u_8 + 72 u_2 u_1 u_5 + 36 u_2 u_1^2 u_4 + 64 u_4 u_1 u_3 \\ &+ 8 u_2 u_3 u_1^3 + 24 u_2^2 u_1 u_3 + 120 u_1 u_7 + 4 u_1^2 u_2^3 + 24 u_4^2 \end{aligned} \right) t^4 \\
&+ \left(\begin{aligned} &320 u_2 u_4 u_1 u_3 + 10 u_2 u_1^4 u_4 + 945 u_{10} + 2 u_5 u_1^5 + 450 u_5 u_1 u_4 + 180 u_2^2 u_1 u_5 \\ &+ 50 u_1 u_3^3 + 5 u_1^2 u_2^4 + 80 u_2 u_1^3 u_5 + 90 u_2^2 u_1^2 u_4 + 1050 u_1 u_9 + 280 u_2 u_5 u_3 \\ &+ 20 u_2^2 u_3 u_1^3 + 189 u_5^2 + u_2^5 + 150 u_1^3 u_7 + 25 u_1^4 u_6 + 120 u_1^2 u_4^2 + 5 u_1^4 u_3^2 \\ &+ 125 u_4 u_3^2 + 375 u_6 u_4 + 450 u_7 u_3 + 525 u_1^2 u_8 + 70 u_1^3 u_4 u_3 + 250 u_1^2 u_5 u_3 \\ &+ 600 u_2 u_1 u_7 + 300 u_2 u_1^2 u_6 + 80 u_2 u_1^2 u_3^2 + 500 u_6 u_1 u_3 + 120 u_2 u_4^2 \\ &+ 50 u_2^2 u_3^2 + 30 u_4 u_2^3 + 40 u_2^3 u_1 u_3 + 525 u_2 u_8 + 150 u_2^2 u_6 \end{aligned} \right) t^5 \\
&+ \left(\begin{aligned} &840 u_5 u_3 u_2^2 + 240 u_5 u_1^3 u_2^2 + 1800 u_7 u_1 u_2^2 + 5040 u_8 u_1 u_3 + 60 u_3^4 + 360 u_4^2 u_2^2 \\ &+ 900 u_6 u_1^2 u_2^2 + 64 u_3^3 u_1^3 + 45 u_4 u_2^4 + 6 u_1^2 u_2^5 + 11340 u_1 u_{11} + 30 u_4 u_1^4 u_2^2 \\ &+ 1695 u_6^2 + 4068 u_6 u_1 u_5 + 2016 u_5 u_4 u_3 + 1500 u_5 u_3 u_1^2 u_2 + 12 u_4 u_1^5 u_3 + u_2^6 \\ &+ 1130 u_6 u_3^2 + 900 u_7 u_1^3 u_2 + 654 u_4 u_1^2 u_3^2 + 360 u_5 u_1 u_2^3 + 4320 u_7 u_1 u_4 \\ &+ 684 u_5 u_4 u_1^3 + 60 u_3 u_1 u_2^4 + 40 u_3 u_1^3 u_2^3 + 240 u_3^2 u_1^2 u_2^2 + 30 u_3^2 u_1^4 u_2 \\ &+ 720 u_4^2 u_1^2 u_2 + 1188 u_4^2 u_1 u_3 + 750 u_4 u_2 u_3^2 + 3150 u_8 u_1^2 u_2 + 6300 u_9 u_1 u_2 \\ &+ 150 u_6 u_1^4 u_2 + 2520 u_7 u_3 u_1^2 + 297 u_4^3 + 12 u_5 u_1^5 u_2 + 10395 u_{12} + 740 u_6 u_3 u_1^3 \\ &+ 2700 u_7 u_3 u_2 + 3564 u_7 u_5 + 36 u_7 u_1^5 + 2 u_6 u_1^6 + 300 u_6 u_2^3 + 1134 u_5^2 u_2 \\ &+ 1080 u_5^2 u_1^2 + 100 u_3^2 u_2^3 + 63 u_4^2 u_1^4 + 3000 u_6 u_2 u_1 u_3 + 2700 u_5 u_4 u_1 u_2 \\ &+ 960 u_4 u_2^2 u_1 u_3 + 420 u_4 u_2 u_3 u_1^3 + 2250 u_6 u_2 u_4 + 2250 u_6 u_1^2 u_4 + 1272 u_5 u_1 u_3^2 \\ &+ 132 u_5 u_3 u_1^4 + 300 u_3^3 u_1 u_2 + 1575 u_8 u_2^2 + 315 u_8 u_1^4 + 3780 u_8 u_4 + 4620 u_9 u_3 \\ &+ 1680 u_9 u_1^3 + 5670 u_{10} u_2 + 5670 u_{10} u_1^2 + 180 u_4 u_1^2 u_2^3 \end{aligned} \right) t^6 \\
&+ o(t^6)
\end{aligned}$$

Table 3.16. Série $\tilde{M}^\bullet(t, u_1, u_2, \dots)$ dont le coefficient du monôme $u_1^{n_1} \dots u_k^{n_k} t^n$ est le nombre exact de cartes combinatoires non-étiquetées enracinées comportant exactement n_1 boucles, n_2 fuseaux, n_3 faces triangulaires... n_k faces de degré k et n arêtes. Chaque monôme vérifie la contrainte combinatoire $2n = n_1 + \dots + kn_k$.

$$\begin{aligned}
\tilde{M}(t, u_1, u_2, \dots) &= (u_1^2 + u_2) t + (u_1 u_3 + 2 u_4 + u_2^2 + u_1^2 u_2) t^2 \\
&+ (u_1^2 u_2^2 + u_3 u_1^3 + 2 u_4 u_2 + 2 u_4 u_1^2 + 3 u_1 u_5 + 3 u_3^2 + 2 u_3 u_1 u_2 + 5 u_6 + u_2^3) t^3 \\
&+ \left(\begin{aligned} &9 u_6 u_1^2 + 18 u_8 + 7 u_5 u_3 + 7 u_4^2 + 5 u_4 u_1^2 u_2 + 8 u_4 u_1 u_3 + 2 u_5 u_1^3 + 15 u_1 u_7 \\ &+ 9 u_5 u_1 u_2 + 9 u_6 u_2 + u_1^2 u_2^3 + 4 u_4 u_2^2 + u_2^4 + 3 u_1^2 u_3^2 + 3 u_3 u_1 u_2^2 \\ &+ u_3 u_1^3 u_2 + 4 u_3^2 u_2 + u_4 u_1^4 \end{aligned} \right) t^4 \\
&+ \left(\begin{aligned} &105 u_{10} + 56 u_2 u_8 + 16 u_1^2 u_4^2 + 29 u_5^2 + 56 u_1^2 u_8 + u_2^5 + 28 u_5 u_3 u_2 \\ &+ 25 u_5 u_3 u_1^2 + 5 u_1 u_3^3 + u_1^2 u_2^4 + 105 u_1 u_9 + 4 u_4 u_2^3 + 15 u_4 u_3^2 \\ &+ 18 u_5 u_1 u_2^2 + 8 u_5 u_1^3 u_2 + 45 u_5 u_1 u_4 + 10 u_4 u_1^2 u_2^2 + u_4 u_1^4 u_2 \\ &+ 7 u_4 u_3 u_1^3 + 4 u_3 u_1 u_2^3 + 2 u_3 u_1^3 u_2^2 + 9 u_3^2 u_1^2 u_2 + u_5 u_1^5 + 16 u_4^2 u_2 \\ &+ 8 u_3^2 u_2^2 + u_3^2 u_1^4 + 60 u_7 u_1 u_2 + 45 u_7 u_3 + 15 u_7 u_1^3 + 50 u_1 u_3 u_6 \\ &+ 32 u_4 u_3 u_1 u_2 + 31 u_6 u_1^2 u_2 + 18 u_6 u_2^2 + 40 u_6 u_4 + 3 u_6 u_1^4 \end{aligned} \right) t^5 \\
&+ \left(\begin{aligned} &902 u_{12} + 174 u_6^2 + 36 u_4^3 + 11 u_3^4 + u_2^6 + 525 u_1 u_9 u_2 + 225 u_7 u_3 u_2 \\ &+ 945 u_1 u_{11} + u_1^2 u_2^5 + 6 u_3^3 u_1^3 + 6 u_4 u_2^4 + 41 u_4^2 u_2^2 + 104 u_6 u_3^2 \\ &+ u_5 u_1^5 u_2 + 20 u_5 u_1^3 u_2^2 + 57 u_5 u_1^3 u_4 + 101 u_1^2 u_5^2 + 3 u_1^5 u_7 \\ &+ 225 u_5 u_1 u_2 u_4 + 324 u_4 u_8 + 70 u_5 u_3 u_2^2 + 150 u_1 u_7 u_2^2 + 75 u_1^3 u_7 u_2 \\ &+ 142 u_2^2 u_8 + 79 u_1^2 u_2^2 u_6 + 13 u_1^4 u_2 u_6 + 35 u_1^3 u_3 u_4 u_2 + 13 u_3^2 u_2^3 \\ &+ 30 u_1 u_5 u_2^3 + 11 u_1^4 u_5 u_3 + 106 u_1 u_5 u_3^2 + 339 u_1 u_5 u_6 + 5 u_3 u_1 u_2^4 \\ &+ 4 u_3 u_1^3 u_2^3 + 23 u_3^2 u_1^2 u_2^2 + 30 u_2^3 u_6 + 29 u_1^4 u_8 + 3 u_3^2 u_1^4 u_2 \\ &+ 25 u_3^3 u_1 u_2 + 99 u_1 u_3 u_4^2 + u_1^5 u_3 u_4 + 63 u_1^3 u_3 u_6 + 80 u_1 u_3 u_4 u_2^2 \\ &+ 297 u_7 u_5 + u_1^6 u_6 + 389 u_9 u_3 + 191 u_4 u_6 u_2 + 191 u_4 u_6 u_1^2 \\ &+ 66 u_4 u_3^2 u_2 + 58 u_4 u_1^2 u_3^2 + 267 u_1^2 u_2 u_8 + 420 u_1 u_3 u_8 \\ &+ 250 u_1 u_3 u_6 u_2 + 65 u_4^2 u_1^2 u_2 + 3 u_4 u_1^4 u_2^2 + 16 u_4 u_1^2 u_2^3 + 7 u_4^2 u_1^4 \\ &+ 107 u_5^2 u_2 + 485 u_{10} u_2 + 485 u_{10} u_1^2 + 210 u_7 u_3 u_1^2 + 168 u_5 u_4 u_3 \\ &+ 360 u_7 u_1 u_4 + 142 u_1^3 u_9 + 125 u_5 u_3 u_1^2 u_2 \end{aligned} \right) t^6 \\
&+ o(t^6)
\end{aligned}$$

Table 3.17. Série $\tilde{M}(t, u_1, u_2, \dots)$ dont le coefficient du monôme $u_1^{n_1} \dots u_k^{n_k} t^n$ est le nombre exact de cartes combinatoires non-étiquetées non-enracinées comportant exactement n_1 boucles, n_2 fuseaux, n_3 faces triangulaires... n_k faces de degré k et n arêtes. Chaque monôme vérifie la contrainte combinatoire $2n = n_1 + \dots + k n_k$.

$$\begin{aligned}
M^*(t) &= {}_2F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{2}, 1 \\ - \end{array} \middle| 2t^2 \right) \\
M_3^*(t) &= {}_2F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{6}, \frac{5}{6} \\ - \end{array} \middle| 6t^6 \right) \\
M_4^*(t) &= {}_4F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \\ - \end{array} \middle| 4t^4 \right) \\
M_5^*(t) &= {}_4F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{10}, \frac{3}{10}, \frac{7}{10}, \frac{9}{10} \\ - \end{array} \middle| 10^3 t^{10} \right) \\
M_6^*(t) &= {}_3F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{6}, \frac{1}{2}, \frac{5}{6} \\ - \end{array} \middle| 6t^6 \right) \\
M_7^*(t) &= {}_6F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{14}, \frac{3}{14}, \frac{5}{14}, \frac{9}{14}, \frac{11}{14}, \frac{13}{14} \\ - \end{array} \middle| 14^5 t^{14} \right) \\
M_8^*(t) &= {}_4F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{5}{8}, \frac{7}{8} \\ - \end{array} \middle| 8^3 t^8 \right) \\
M_9^*(t) &= {}_8F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{18}, \frac{1}{6}, \frac{5}{18}, \frac{7}{18}, \frac{11}{18}, \frac{13}{18}, \frac{5}{6}, \frac{17}{18} \\ - \end{array} \middle| 18^7 t^{18} \right) \\
M_{10}^*(t) &= {}_5F_0 \left(\begin{array}{c} \frac{1}{10}, \frac{3}{10}, \frac{1}{2}, \frac{7}{10}, \frac{9}{10} \\ - \end{array} \middle| 10^4 t^{10} \right)
\end{aligned}$$

Table 3.18. Nature hypergéométrique des séries génératrices des cartes combinatoires. Le coefficient du monôme $\frac{t^{2n}}{(2n)!}$ est à chaque fois le nombre exacte de cartes combinatoires étiquetées non-enracinées non-nécessairement connexes comportant n arêtes et soumises à diverses contraintes de degré. La série $M^*(t)$ correspond aux cartes sans contrainte de degré, et les séries $M_k^*(t)$ aux cartes n'ayant que des faces de degré k .

$$\tilde{M}^\bullet(t) = 2t + 10t^2 + 74t^3 + 706t^4 + 8162t^5 + 110410t^6 + 1708394t^7 \\ + 29752066t^8 + 576037442t^9 + 12277827850t^{10} + o(t^{10})$$

$$\tilde{M}_3^\bullet(t) = 5t^3 + 60t^6 + 1105t^9 + 27120t^{12} + 828250t^{15} + 30220800t^{18} \\ + 1282031525t^{21} + 61999046400t^{24} + 3366961243750t^{27} \\ + 202903221120000t^{30} + o(t^{30})$$

$$\tilde{M}_4^\bullet(t) = 3t^2 + 24t^4 + 297t^6 + 4896t^8 + 100278t^{10} + 2450304t^{12} + 69533397t^{14} \\ + 2247492096t^{16} + 81528066378t^{18} + 3280382613504t^{20} \\ + 145009234904922t^{22} + 6986546222800896t^{24} \\ + 364418301804218028t^{26} + 20459842995693256704t^{28} \\ + 1230262900677124568397t^{30} + o(t^{30})$$

$$\tilde{M}_5^\bullet(t) = 189t^5 + 869400t^{10} + 16482741030t^{15} + 811815704093520t^{20} \\ + 82428779884228798041t^{25} + 14987637044586056537983800t^{30} \\ + 4438122232105976899960948809420t^{35} \\ + 1998996880327869592350459728071408800t^{40} \\ + 1300772228637464354810371940980750446850116t^{45} \\ + 1174611244368635468934806695142536970482225836000t^{50} + o(t^{50})$$

$$\tilde{M}_6^\bullet(t) = 15t^3 + 1695t^6 + 472200t^9 + 242183775t^{12} + 198147676875t^{15} \\ + 236869405180500t^{18} + 389616942676537500t^{21} \\ + 844097335215098919375t^{24} + 2329896471102350138203125t^{27} \\ + 7982322432441532563075684375t^{30} + o(t^{30})$$

$$\tilde{M}_7^\bullet(t) = 19305t^7 + 103694490900t^{14} + 6501575656434733875t^{21} \\ + 2092997263930120824035760000t^{28} \\ + 2303968083011209046843582476183003125t^{35} \\ + 6795345400655020443487958743692389942080875000t^{42} \\ + o(t^{42})$$

Table 3.19. Séries génératrices ordinaires où le coefficient du monôme t^n est le nombre exacte de cartes combinatoires non-étiquetée enracinées et connexes comportant n arêtes et soumises à diverses contraintes de degré. La série $\tilde{M}^\bullet(t)$ correspond aux cartes sans contrainte de degré, et les séries $\tilde{M}_k^\bullet(t)$ aux cartes n'ayant que des faces de degré k . Par un argument combinatoire très simple on a $\tilde{M}^\bullet(t) = M^\bullet(t)$ et $\tilde{M}_k^\bullet(t) = M_k^\bullet(t)$, les espèces correspondantes étant *rigides*.

$$\begin{aligned}\tilde{M}(t) = & 2t + 5t^2 + 20t^3 + 107t^4 + 870t^5 + 9436t^6 + 122840t^7 + 1863359t^8 \\ & + 32019826t^9 + 613981447t^{10} + 12989756316t^{11} + 300559406027t^{12} \\ & + 7550660328494t^{13} + 204687564072918t^{14} + 5955893472990664t^{15} \\ & + o(t^{10})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{M}_3(t) = & 3t^3 + 11t^6 + 81t^9 + 1228t^{12} + 28174t^{15} + 843186t^{18} + 30551755t^{21} \\ & + 1291861997t^{24} + 62352938720t^{27} + 3381736322813t^{30} \\ & + 203604398647922t^{33} + 13475238697911184t^{36} \\ & + 972429507963453210t^{39} + 75993857157285258473t^{42} + o(t^{42})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{M}_4(t) = & 2t^2 + 7t^4 + 36t^6 + 365t^8 + 5250t^{10} + 103801t^{12} \\ & + 2492164t^{14} + 70304018t^{16} + 2265110191t^{18} \\ & + 82013270998t^{20} + 3295691020635t^{22} + 145553281837454t^{24} \\ & + 7008046130978980t^{26} + 365354356543414133t^{28} \\ & + 20504381826687810441t^{30} + 1232562762503125498772t^{32} + o(t^{32})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{M}_5(t) = & 29t^5 + 44106t^{10} + 549530780t^{15} + 20295421909475t^{20} \\ & + 1648575609240648557t^{25} + 249793950749168438672432t^{30} \\ & + 63401746172946552016801544036t^{35} \\ & + 24987461004098373175802500801970565t^{40} + o(t^{40})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{M}_6(t) = & 5t^3 + 174t^6 + 26614t^9 + 10107019t^{12} + 6605320523t^{15} \\ & + 6579728772912t^{18} + 9276594775469270t^{21} \\ & + 17585361213957551946t^{24} + 43146230949730084319048t^{27} \\ & + 133038707207639820811320335t^{30} + o(t^{30})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{M}_7(t) = & 1475t^7 + 3703659517t^{14} + 154799423421448637t^{21} \\ & + 37374951141682121102711647t^{28} \\ & + 32913829757302989565946187616246792t^{35} \\ & + 80896969055416910041748259100185879499267652t^{42} + o(t^{42})\end{aligned}$$

Table 3.20. Séries génératrices ordinaires où le coefficient du monôme t^n est le nombre exacte de cartes combinatoires non-étiquetée non-enracinées et connexes comportant n arêtes et soumises à diverses contraintes de degré. La série $\tilde{M}(t)$ correspond aux cartes sans contrainte de degré, et les séries $\tilde{M}_k(t)$ aux cartes n'ayant que des faces de degré k .

Annexe A

Réseaux de Pétri stochastiques

Les réseaux de Pétri sont utilisés dans de nombreux domaines : programmation concurrente, sûreté de fonctionnement, architectures clients–serveurs, conduite d’atelier, réseaux de régulation de gènes etc. On peut les décrire par des graphes *bipartis* mais il m’a semblé plus intuitif pour l’utilisateur de les voir comme des *systèmes de réactions chimiques*.

Si l’on veut étudier les performances d’un réseau de Pétri, il convient d’introduire une *temporisation* des transitions. Ce point est délicat et il existe plusieurs solutions non équivalentes dans la littérature. Pour l’application visée, principalement la modélisation des réseaux de régulation de gènes, la temporisation stochastique retenue est basée sur la loi exponentielle. Techniquement, elle est obtenue en transformant tout réseau de Pétri en une chaîne de Markov en temps continu admettant le même espace d’état. Pour cela, il suffit de définir une *constante cinétique* pour chaque réaction chimique, ce qui est tout à fait naturel pour les chimistes : ils le font déjà pour obtenir un modèle déterministe en utilisant la *loi d’action de masse*. Un tel réseau de Pétri temporisé est dit *stochastique*.

L’étude des chaînes de Markov nous amène à revisiter certaines techniques mathématiques utilisées en physique quantique, en particulier l’usage des séries génératrices (en plusieurs variables commutatives) et des propagateurs. On utilise des expressions comme *équation de Schrödinger*, *hamiltonien*, *propagateur* etc. bien que l’on soit très loin de la philosophie de la physique quantique et

de la dualité onde–corpuscule. Par contre, au niveau mathématique, l’analogie est assez frappante.

Dans ce travail préliminaire, j’étudie les techniques du calcul symbolique (séries formelles, calcul non commutatif dans les algèbres d’opérateurs etc.) en vue de produire du code numérique efficace pour calculer l’évolution, au cours du temps t , des moments (moyenne, variance, covariance etc.) associés à la variable aléatoire $N(t)$. Cette variable

$$N(t) := (N_1(t), N_2(t), \dots, N_n(t))$$

compte le nombre de molécules des différentes espèces chimiques présentes à l’instant $t \in \mathbb{R}$.

Pour les systèmes très complexes, les ingénieurs se limitent le plus souvent à exécuter des simulations, dites Monte–Carlo, car celles–ci sont basées sur l’utilisation de générateurs de nombres aléatoires. Cette méthode est mal adaptée, en particulier dans l’étude des événements qui se produisent avec une faible probabilité. Dans ce cas, les simulations Monte–Carlo doivent être répétées un si grand nombre de fois, que le temps de calcul en devient rédhibitoire. La méthode *mixte* proposée ici (symbolique, numérique) résout cette question en permettant de traiter correctement les événements rares.

Le calcul de la probabilité $P_{\nu, \nu'}(t)$ d’atteindre un état (marquage) ν' en partant d’un état ν et cela en un temps donné $t > 0$ est abordée à partir de la méthode de Wei–Norman. Elle facilite la résolution de l’équation de Schrödinger

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi(t, z) = H \varphi(t, z).$$

lorsque l’hamiltonien appartient à une algèbre de Lie de dimension finie. Je vais essayer dans le futur de généraliser cette méthode en dimension infinie.

Cette question contient le problème de l’accessibilité (pour les réseaux de Pétri non temporisés) car si l’état ν' est accessible depuis l’état ν en un certain temps positif, il est également accessible en un temps arbitrairement petit. Ceci résulte du fait que, dans une chaîne de Markov, le temps mis pour aller d’un état à un autre est distribué comme une somme de lois exponentielles. La question de l’accessibilité se résout donc en testant l’égalité à zéro de la probabilité $P_{\nu, \nu'}(t_0)$ sachant que le résultat du test ne dépend pas du temps $t_0 > 0$ fixé. Ce travail ne fait que commencer.

Voici ce que dit C. Reutenauer, à propos du problème de l’accessibilité, dans son livre [63] sur les réseaux de Pétri :

“Ce problème se formule très simplement : il s’agit de déterminer si un marquage donné peut être atteint, dans un réseau de Pétri, à partir d’un marquage initial. L’importance de cette question, à la fois sur le plan théorique et le plan pratique, est évidente, et c’est pourquoi la question de savoir s’il existe un algorithme pour y répondre a été posée très tôt.

La première mention de ce problème remonte à 1969 (Karp et Miller). Divers chercheurs ont attaqué cette question en présentant des solutions partielles ; mentionnons Van Leeuwen (1974) et Hopcroft et Pansiot (1979). Une première preuve de la décidabilité, proposée par Sacerdote et Tenney (1977) n’a pas résisté à un examen détaillé. Deux démonstrations complètes ont été publiées de façon indépendante par Mayr (1981, 1984) et par Kosaraju (1982). C’est à l’exposé de cette dernière démonstration qu’est consacré ce livre.

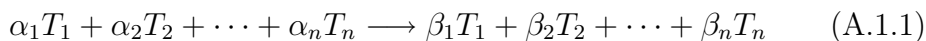
La preuve est fort complexe, et fait intervenir des concepts et des résultats empruntés à des disciplines diverses, comme l’arithmétique¹, la logique, la théorie des langages formels.”

A.1 Réseaux de Pétri

A.1.1 Systèmes de réactions chimiques

Definition A.1. Un système de réactions chimiques [29, 38] est la donnée

- (i) d’un ensemble d’espèces chimiques (T_1, T_2, \dots, T_n)
- (ii) d’un ensemble de réactions chimiques, chacune de la forme



où $\alpha := (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ et $\beta := (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$ sont des multi-indices formés d’entiers naturels.

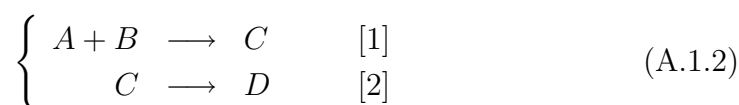
Un tel système, noté \mathcal{R} , comporte en général plusieurs réactions ; c’est donc un ensemble fini de couples $(\alpha, \beta) \in \mathbb{N}^n \times \mathbb{N}^n$. On peut aussi coder le système

1. C. Reutenauer fait remarquer que cette théorie est équivalente à l’arithmétique de Presburger

\mathcal{R} par un couple de deux matrices $[\alpha]$ et $[\beta]$ de même taille, chaque ligne contenant un multi–indice.

L'état du système $\nu := (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n) \in \mathbb{N}^n$ est le nombre de molécules des diverses espèces chimiques présentes à un instant donné. Quand une réaction telle que (A.1.1) se produit, le vecteur d'état passe instantanément de la valeur ν à la nouvelle valeur $\nu - \alpha + \beta$. Le vecteur α indique les quantités des diverses espèces consommées par la réaction tandis que le vecteur β indique les quantités produites. Il est clair qu'une telle réaction ne peut se produire que si $\alpha \leq \nu$.

Exemple 2.



En renommant les espèces chimiques (A, B, C, D) par (T_1, \dots, T_4) , ce système est codé par les deux matrices entières

$$[\alpha] := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } [\beta] := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

A.1.2 Réseaux de Pétri

Definition A.2. Un réseau de Pétri [63] est un graphe fini *biparti*.

Il y a deux sortes de noeuds dans le graphe, les *places* et les *transitions*.

Les places sont notées (T_1, T_2, \dots, T_n) . A tout instant, la place T_k , $(1 \leq k \leq n)$ est supposée contenir ν_k jetons supposés indistinguables. Le vecteur d'état $\nu := (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n) \in \mathbb{N}^n$ est le nombre de jetons présents, à un instant donné, dans les diverses places du réseau.²

A chaque transition, on associe un couple de deux multi–indices $(\alpha, \beta) \in \mathbb{N}^n \times \mathbb{N}^n$. L'entier naturel α_k , $k = 1 \dots n$, désigne le nombre de flèches (dites

2. Introduits vers 1930, les réseaux de Pétri ont souvent servi à modéliser les chaînes de fabrication dans les usines. Les places représentent les divers stocks de pièces détachées et les transitions les diverses machines transformant ces pièces détachées. Dans ce formalisme, les jetons représentent les pièces détachées. Chaque machine, à condition d'être correctement approvisionnée, est capable de produire de nouvelles pièces qui seront stockées dans des places situées en aval de celle-ci, en consommant des pièces (fabriquées par d'autres machines) stockées en amont.

entrantes) allant la place T_k jusqu'à la transition considérée. L'entier naturel β_k , $k = 1 \dots n$, désigne le nombre de flèches (dites sortantes) allant de la transition considérée jusqu'à la place T_k . Une transition (α, β) est dite *admissible* lorsque l'état ν du réseau satisfait la condition $\alpha \leq \nu$. Lorsque cette transition est effectuée, l'état du réseau passe instantanément de la valeur ν à la nouvelle valeur $\nu' := \nu - \alpha + \beta$.

La catégorie des réseaux de Pétri est strictement équivalente à la catégorie des systèmes de réactions chimiques. On a la correspondance

| | | |
|------------|-----------------------|-------------------|
| jeton | \longleftrightarrow | molécule chimique |
| place | \longleftrightarrow | espèce chimique |
| transition | \longleftrightarrow | réaction chimique |

A chaque transition, on associe une réaction chimique telle que (A.1.1) codée par le couple de multi-indices $(\alpha, \beta) \in \mathbb{N}^n \times \mathbb{N}^n$.

Exemple 3. Le système de réactions chimiques (A.1.2) correspond au réseau de Pétri de la figure A.1.

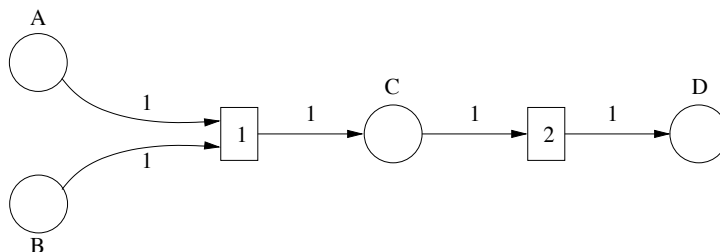


Figure A.1. Réseau de Pétri du système (A.1.2)

Definition A.3. L'état $\nu' \in \mathbb{N}^n$ est dit *accessible* à partir de l'état $\nu \in \mathbb{N}^n$ s'il existe une liste finie de transitions admissibles menant de ν à ν' .

Theorem A.1 ([63]). Soient ν et ν' deux valeurs quelconques du vecteur d'état d'un réseau de Pétri. Le problème de l'accessibilité de l'état ν' en partant de l'état ν est décidable.

A.2 Les Réseaux de Pétri stochastiques

Comme les réseaux de Pétri sont souvent utilisés pour modéliser les systèmes complexes (chaînes de montage, réseaux de communication, architectures clients–serveurs etc.) dans le but d’analyser non seulement les disfonctionnements éventuels mais aussi les performances (nombre de pièces fabriquées, temps d’attente des clients dans les diverses files d’attente d’un système clients–serveurs etc.), le problème de la *temporisation* des réseaux de Pétri s’est posé naturellement. Cette question est en fait assez complexe et a reçu différentes réponses selon les applications visées.

Dans la suite, je vais construire la temporisation “standard” d’un réseau de Pétri en lui associant une chaîne de Markov en temps continu $\{N(t); t \in \mathbb{R}_{\geq 0}\}$, la variable aléatoire $N(t)$ comptant, à l’instant t , le nombre de jetons présents dans les places du réseau. Soit $\pi_\nu(t)$ la probabilité que le processus soit dans l’état ν à l’instant t , ce qui revient à poser

$$\pi_\nu(t) := \text{prob}(N(t) = \nu)$$

On sait que pour une telle chaîne de Markov, le temps de séjour dans l’état courant ν est une variable aléatoire distribuée selon la loi exponentielle dont le paramètre est le taux de sortie de l’état ν .

A.2.1 Chaîne de Markov définissant la temporisation

Soit un entier naturel quelconque $n \in \mathbb{N}$. Un multi–indice $\alpha \in \mathbb{N}^n$ est une liste $\alpha := (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ formée de n entiers naturels (positifs ou nuls). L’ensemble \mathbb{N}^n est muni d’une structure de monoïde commutatif partiellement ordonné. La somme de deux multi–indices $\alpha, \beta \in \mathbb{N}^n$ est définie en posant

$$(\alpha + \beta)_i := \alpha_i + \beta_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Cette somme est commutative et admet comme élément neutre le multi–indice $0 := (0, 0, \dots, 0) \in \mathbb{N}^n$. La relation d’ordre (partielle) notée $\alpha < \beta$ est définie en posant $\alpha_i < \beta_i$ pour $i = 1, \dots, n$. Cette relation est compatible avec l’addition, i.e.

$$\nu < \nu' \implies \alpha + \nu < \alpha + \nu', \quad \alpha, \nu, \nu' \in \mathbb{N}^n.$$

Un réseau de Pétri \mathcal{R} , temporisé de manière *standard*, est un ensemble de triplets $(c, \alpha, \beta) \in \mathbb{R}_{>0} \times \mathbb{N}^n \times \mathbb{N}^n$. Chaque réaction chimique (α, β) est donc enrichie par la donnée d'une constante *cinétique* réelle $c > 0$. Pour tout couple de multi-indices $(\alpha, \nu) \in \mathbb{N}^n \times \mathbb{N}^n$, on définit le produit de coefficients binomiaux :

$$\binom{\nu}{\alpha} := \binom{\nu_1}{\alpha_1} \binom{\nu_2}{\alpha_2} \cdots \binom{\nu_n}{\alpha_n} \quad (\text{A.2.1})$$

La chaîne de Markov $\{N(t); t \in \mathbb{R}_{\geq 0}\}$, associée à ce réseau de Pétri temporisé \mathcal{R} , est définie sur l'espace d'états discret \mathbb{N}^n . Pour chaque triplet $(c, \alpha, \beta) \in \mathcal{R}$ et pour chaque état $\nu \geq \alpha$, on construit une flèche allant de ν à $\nu - \alpha + \beta$ qui est étiquetée avec le taux de transition $c \binom{\nu}{\alpha}$. Lorsque $\nu < \alpha$, ce taux de transition est supposé nul.

Exemple 4. Par exemple, le réseau de Pétri temporisé



correspond au processus de naissances et de morts défini par la chaîne de Markov définie en figure A.2.

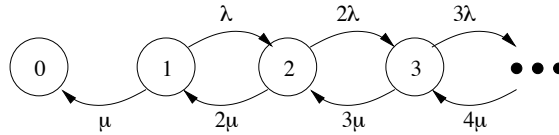


Figure A.2. Le processus de naissances et de morts défini par (A.2.2)

A.2.2 Master-equation

Soit $\pi_\nu(t)$, $\nu \in \mathbb{N}^n$, $t \in \mathbb{R}$, la probabilité que le processus soit dans l'état ν à l'instant t . La *master-equation* d'une chaîne de Markov est une équation différentielle linéaire qui gouverne l'évolution, au cours du temps, du vecteur ligne $\pi(t) := (\pi_\nu(t); \nu \in \mathbb{N}^n)$. Elle s'écrit sous la forme

$$\dot{\pi}(t) = \pi(t) A . \quad (\text{A.2.3})$$

La matrice A est appelée le *générateur infinitésimal* de la chaîne de Markov. On supposera qu'elle ne dépend pas du temps t . Lorsque $\nu' \neq \nu$, le nombre

réel $A_{\nu,\nu'} \geq 0$ est appelé le *taux de transition* de l'état ν vers l'état ν' . On pose

$$A_{\nu,\nu} := - \sum_{\nu' \neq \nu} A_{\nu,\nu'} .$$

La somme figurant en partie droite est appelée le *taux de sortie* de l'état ν .

La chaîne de Markov associée à un réseau de Pétri peut être de dimension infinie, autrement dit, le générateur infinitésimal A est une matrice carrée qui a, dans certains cas, un nombre infini de lignes et de colonnes. Afin d'obtenir une représentation finie, on remplace la matrice A par un opérateur aux différences³ agissant sur les fonctions $f : \mathbb{N}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Cette section a pour but de définir l'opérateur d'évolution, associé à un réseau de Pétri temporisé.

Pour toute réaction chimique $(c, \alpha, \beta) \in \mathcal{R}$ et tout état $\nu \in \mathbb{N}^n$, on associe les deux flèches (avec les taux de transition associés), l'une entrant et l'autre sortant de l'état ν :

$$(\nu + \alpha - \beta) \xrightarrow{c \binom{\nu + \alpha - \beta}{\alpha}} (\nu) \xrightarrow{c \binom{\nu}{\alpha}} (\nu - \alpha + \beta)$$

Ces flèches définissent le système d'équations linéaires différentielles (A.2.3) qui gouverne l'évolution, au cours du temps, des probabilités $\{\pi_\nu(t); \nu \in \mathbb{N}^n\}$:

$$\dot{\pi}_\nu(t) = \sum_{(c,\alpha,\beta) \in \mathcal{R}} c \binom{\nu + \alpha - \beta}{\alpha} \pi_{\nu + \alpha - \beta}(t) - \sum_{(c,\alpha,\beta) \in \mathcal{R}} c \binom{\nu}{\alpha} \pi_\nu(t) \quad (\text{A.2.4})$$

A cause des coefficients binomiaux, le premier terme de la somme est nul lorsque $\beta > \nu$ et que le deuxième est nul lorsque $\alpha > \nu$. Ce système différentiel comporte une infinité d'équations. Dans le but d'obtenir des formules plus compactes, on introduit, pour tout multi-indice $\alpha \in \mathbb{N}^n$, les opérateurs E^α (*shift*), $E^{-\alpha}$ et C_α (multiplication par un coefficient *multinomial*). Ils agissent sur les fonctions $f : \mathbb{N}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $\nu \mapsto f(\nu)$ conformément aux règles :

$$\begin{aligned} E^\alpha f(\nu) &:= f(\nu + \alpha) \\ E^{-\alpha} f(\nu) &:= \begin{cases} f(\nu - \alpha) & \text{si } \alpha \leq \nu \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ C_\alpha f(\nu) &:= \binom{\nu}{\alpha} f(\nu) \end{aligned} \quad (\text{A.2.5})$$

3. Le logiciel MAPLE contient une librairie, implantée par F. Chysak, permettant de calculer dans diverses algèbres d'opérateurs linéaires : algèbres aux différences, algèbres de Weyl etc.

Le système différentiel (A.2.4) s'écrit maintenant

$$\frac{d}{dt}\pi_\nu(t) = \sum_{(c,\alpha,\beta)\in\mathcal{R}} c (E^\alpha E^{-\beta} - 1) C_\alpha \pi_\nu(t) \quad (\text{A.2.6})$$

A.2.3 Analogie de l'équation de Schrödinger

Rappels sur l'algèbre de Weyl

Pour obtenir une équation, ayant la forme de l'équation de Schrödinger en physique quantique, on remplace les opérateurs aux différences, figurant dans la master-equation (A.2.6), par des opérateurs différentiels pris dans l'algèbre de Weyl

$$\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z) := \mathbb{R}[z_1, z_2, \dots, z_n] [\partial_{z_1}, \partial_{z_2}, \dots, \partial_{z_n}]. \quad (\text{A.2.7})$$

Ces opérateurs agissent sur les fonctions $f(z)$ en la variable $z := (z_1, z_2, \dots, z_n)$.

Pour tout $\alpha, \beta \in \mathbb{N}^n$, on adopte la notation classique $z^\alpha := z_1^{\alpha_1} z_2^{\alpha_2} \dots z_n^{\alpha_n}$ et $\partial_z^\beta := \partial_{z_1}^{\beta_1} \partial_{z_2}^{\beta_2} \dots \partial_{z_n}^{\beta_n}$. Un élément de l'algèbre $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$ s'écrit de façon unique comme une combinaison linéaire finie (à coefficients dans \mathbb{R}) d'éléments homogènes de la forme $z^\alpha \partial_z^\beta$. L'algèbre $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$ est associative mais non commutative. On a les relations de commutation pour tout $i, j = 1, \dots, n$ et tout polynôme $f \in \mathbb{R}[z_1, \dots, z_n]$:

$$[\partial_{z_i}, \partial_{z_j}] = 0, \quad [\partial_{z_i}, f(z)] = \frac{\partial f(z)}{\partial z_i}, \quad [z_i, z_j] = 0.$$

Ces relations impliquent l'isomorphisme de \mathbb{R} -algèbres (les produits tensoriels sont définis au-dessus de \mathbb{R}) :

$$\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z) \simeq \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z_1) \otimes \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z_2) \otimes \dots \otimes \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z_n) \quad (\text{A.2.8})$$

L'algèbre de Weyl est graduée par le *degré* et filtrée par l'*ordre* (au sens des opérateurs différentiels). Le degré et l'ordre sont définis en posant pour toute lettre z_k , ($k = 1 \dots n$)

$$\deg z_k = 1, \quad \deg \frac{\partial}{\partial z_k} = -1, \quad \text{ord} z_k = 0, \quad \text{ord} \frac{\partial}{\partial z_k} = 1.$$

On en déduit que l'élément $z^\alpha \partial_z^\beta$ est de degré $|\alpha - \beta|$ et d'ordre $|\beta|$, en posant $|\beta| := \beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_n$. Les opérateurs d'Euler $\theta_k := z_k \frac{\partial}{\partial z_k}$ sont donc de degré 0 et d'ordre 1.

On vérifie que le produit AB de deux éléments $A, B \in \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$ homogènes pour le degré, est un élément homogène de degré $\deg(A) + \deg(B)$.

La composante $\mathcal{F}_q \subset \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$, $q \in \mathbb{N}$, de la filtration croissante

$$\mathcal{F} : \mathcal{F}_0 \subset \mathcal{F}_1 \subset \mathcal{F}_2 \subset \dots \quad (\text{A.2.9})$$

est le \mathbb{R} -espace vectoriel engendré par les éléments $z^\alpha \partial_z^\beta$ d'ordre *au plus* q , i.e. tels que $|\beta| \leq q$. Pour tout entier q strictement négatif, on pose $\mathcal{F}_q := (0)$. On vérifie que \mathcal{F} est bien une filtration, autrement dit que $\mathcal{F}_k \mathcal{F}_l \subset \mathcal{F}_{k+l}$ pour tout $k, l \in \mathbb{Z}$. On définit le *gradué* associé à la filtration \mathcal{F} en posant

$$\text{gr Weyl}_{\mathbb{R}}(z) := \mathcal{F}_0/\mathcal{F}_{-1} \oplus \mathcal{F}_1/\mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_2/\mathcal{F}_1 \oplus \dots \quad (\text{A.2.10})$$

Lemma A.2. *Le gradué associé à la filtration croissante \mathcal{F} est commutatif.*

Ce lemme est classique [24]. Il se démontre en vérifiant que $[\mathcal{F}_k, \mathcal{F}_\ell] \subset \mathcal{F}_{k+\ell-1}$ pour tout $k, \ell \in \mathbb{N}$.

La fin de la section est consacrée à l'étude de la commutation des opérateurs de la forme θ^α , $\alpha \in \mathbb{N}^n$ avec les termes z^ν , pour $\nu \in \mathbb{Z}^n$. Nous aurons besoin du lemme suivant pour calculer des éléments de la forme $A^m B$, $m \in \mathbb{N}$:

Lemma A.3. *Soient A et B deux éléments de $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$. Alors*

$$A^m B = \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} \text{ad}_A^k(B) A^{m-k} \quad (\text{A.2.11})$$

Démonstration. Soit t une indéterminée. On a l'identité classique entre séries formelles en t (représentation adjointe)

$$\exp(tA) B \exp(-tA) = \exp(t \text{ad}_A)(B)$$

que l'on peut réécrire $\exp(tA) B = \exp(t \text{ad}_A)(B) \exp(tA)$, autrement dit

$$\sum_{m \geq 0} \frac{t^m}{m!} A^m B = \sum_{k, \ell \geq 0} \frac{t^k t^\ell}{k! \ell!} \text{ad}_A^k(B) A^\ell .$$

On identifie les coefficients de t^m dans chaque membre. □

Lemma A.4. *Pour tout entier $p, m \in \mathbb{Z}$ et $k \in \mathbb{N}$, on a*

$$(p + \theta)^k z^m = z^m (p + m + \theta)^k \text{ avec } \theta = z \frac{\partial}{\partial z}$$

Démonstration. Ce lemme résulte du lemme précédent en remarquant que

$$[p + \theta, z^m] = [\theta, z^m] = mz^m$$

□

Pour tout multi-indice $\nu \in \mathbb{Z}^n$ et $\kappa \in \mathbb{N}^n$, on adopte la notation

$$(\nu + \theta)^\kappa := (\nu_1 + \theta_1)^{\kappa_1} (\nu_2 + \theta_2)^{\kappa_2} \cdots (\nu_n + \theta_n)^{\kappa_n}$$

De plus, on associe au multi-indice $\nu \in \mathbb{Z}^n$, le nouveau multi-indice $\overset{\rhd}{\nu} \in \mathbb{Z}^n$

$$\overset{\rhd}{\nu} := (\nu_1 + \nu_2 + \cdots + \nu_n, \nu_2 + \nu_3 + \cdots + \nu_n, \dots, \nu_{n-1} + \nu_n, \nu_n)$$

Il est clair que la transformation $\nu \mapsto \overset{\rhd}{\nu}$ est une correspondance bijective, dont l'inverse est donnée par la formule

$$\nu := \left(\overset{\rhd}{\nu}_1 - \overset{\rhd}{\nu}_2, \overset{\rhd}{\nu}_2 - \overset{\rhd}{\nu}_3, \dots, \overset{\rhd}{\nu}_{n-1} - \overset{\rhd}{\nu}_n, \overset{\rhd}{\nu}_n \right).$$

Lemma A.5. *Avec les notations précédentes, pour $\kappa \in \mathbb{N}^n$ et $\nu \in \mathbb{Z}^n$, la relation de commutation entre θ^κ et z^ν dans l'algèbre $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z_1, z_2, \dots, z_n)$ s'écrit*

$$\theta^\kappa z^\nu = z^\nu \left(\overset{\rhd}{\nu} + \theta \right)^\kappa$$

Démonstration. Nous allons faire la preuve pour $n = 2$ en laissant la preuve complète au lecteur. Le calcul donne en utilisant plusieurs fois le lemme A.4 et l'isomorphisme (A.2.8) :

$$\begin{aligned} \theta_1^{\kappa_1} \theta_2^{\kappa_2} z_1^{\nu_1} z_2^{\nu_2} &= \theta_1^{\kappa_1} z_1^{\nu_1} \theta_2^{\kappa_2} z_2^{\nu_2} \\ &= z_1^{\nu_1} (\nu_1 + \theta_1)^{\kappa_1} z_2^{\nu_2} (\nu_2 + \theta_2)^{\kappa_2} \\ &= z_1^{\nu_1} z_2^{\nu_2} (\nu_1 + \nu_2 + \theta_1)^{\kappa_1} (\nu_2 + \theta_2)^{\kappa_2} \\ &= z^\nu \left(\overset{\rhd}{\nu} + \theta \right)^\kappa \end{aligned}$$

□

Le dictionnaire fondamental

On définit la *transformée en z* de la distribution $\{\pi_\nu(t); \nu \in \mathbb{N}^n\}$:

$$\varphi(t, z) := \sum_{\nu \geq 0} \pi_{\nu_1, \dots, \nu_n}(t) z_1^{\nu_1} z_2^{\nu_2} \cdots z_n^{\nu_n} \quad (\text{A.2.12})$$

Pour calculer l'équation *d'évolution* qui gouverne cette transformée en z , on considère l'opérateur (résiduel par le monome z^α) suivant :

$$R_{z^\alpha} z^\nu := \begin{cases} z^{\nu-\alpha} & \text{si } \alpha \leq \nu \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.2.13})$$

Désignons par $\langle f(z); z^\nu \rangle$ le coefficient de z^ν dans la série formelle $f(z)$. On démontre que l'opérateur R_{z^α} est aussi l'adjoint de l'opérateur de multiplication par z^α , autrement dit,

$$\langle R_{z^\alpha} f(z); z^\nu \rangle = \langle f(z); z^{\alpha+\nu} \rangle$$

Les opérations E^α et C_α effectuées sur les suites indexées par $\nu \in \mathbb{N}^n$ se traduisent par des opérations équivalentes effectuées sur les séries formelles en les indéterminées $z := (z_1, z_2, \dots, z_n)$.

Le dictionnaire suivant est valide :

| | |
|-----------------------------|--|
| suites a_ν | séries $\widehat{a}(z) := \sum_{\nu \geq 0} a_\nu z^\nu$ |
| $b_\nu = E^\alpha a_\nu$ | $\widehat{b}(z) = R_{z^\alpha} \widehat{a}(z)$ |
| $b_\nu = E^{-\alpha} a_\nu$ | $\widehat{b}(z) = z^\alpha \widehat{a}(z)$ |
| $b_\nu = C_\alpha a_\nu$ | $\widehat{b}(z) = \frac{1}{\alpha!} z^\alpha \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^\alpha \widehat{a}(z)$ |

Démonstration. On adopte la notation classique $\alpha! := \alpha_1! \alpha_2! \dots \alpha_n!$. La convention sur les puissances tombantes

$$x^p := x(x-1)(x-2) \cdots (x-p+1), \quad (p \in \mathbb{N})$$

permet d'écrire le coefficient binomial $\binom{x}{p} = \frac{1}{p!} x^p$.

L'opérateur d'Euler $\theta_k := z_k \frac{\partial}{\partial z_k}$, ($k = 1 \dots n$), admet le monome z^ν comme fonction propre

$$\theta_k z^\nu = \nu_k z^\nu, \quad (k = 1 \dots n, \nu \in \mathbb{N}^n).$$

Soit $\theta^\alpha := \theta_1^{\alpha_1} \theta_2^{\alpha_2} \dots \theta_n^{\alpha_n}$. On démontre alors l'égalité entre opérateurs différentiels

$$\theta^\alpha = z^\alpha \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^\alpha \quad \text{pour tout } \alpha \in \mathbb{N}^n$$

en comparant l'action de ces opérateurs sur les monômes z^ν , $\nu \in \mathbb{N}^n$. La preuve détaillée est laissée au lecteur. \square

L'hamiltonien d'un réseau de Pétri stochastique

Proposition A.6. La master-equation (A.2.4) est équivalente [38, 29] à l'équation de Schrödinger

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi(t, z) = H \varphi(t, z) \quad (\text{A.2.14})$$

où l'hamiltonien H est un opérateur linéaire agissant sur les séries formelles en les indéterminées (z_1, z_2, \dots, z_n) . On a

$$H = \sum_{(c, \alpha, \beta) \in \mathcal{R}} \frac{c}{\alpha!} (z^{\beta - \alpha} - 1) \theta^\alpha \quad (\text{A.2.15})$$

$$= \sum_{(c, \alpha, \beta) \in \mathcal{R}} \frac{c}{\alpha!} (z^\beta - z^\alpha) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^\alpha \quad (\text{A.2.16})$$

Démonstration. On part de la formule (A.2.6) et on utilise le dictionnaire entre les suites et les séries. \square

Exemple 5. Pour le système de réactions chimiques (A.1.2), l'hamiltonien vaut

$$\begin{aligned} H &= \lambda \left(\frac{z_3}{z_1 z_2} - 1 \right) \theta_1 \theta_2 + \mu \left(\frac{z_4}{z_3} - 1 \right) \theta_3 \\ &= \lambda (z_3 - z_1 z_2) \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\partial}{\partial z_2} + \mu (z_4 - z_3) \frac{\partial}{\partial z_3} \end{aligned}$$

Réduction de modèle en présence de lois de conservation

Une *loi de conservation* I est une combinaison linéaire, à coefficients dans \mathbb{Z} , de la forme

$$I(\nu) = \lambda_1 \nu_1 + \lambda_2 \nu_2 + \dots + \lambda_n \nu_n, \quad (\nu \in \mathbb{N}^n)$$

qui est conservée pour chaque transition dans le réseau de Pétri considéré. Il est clair que cette notion est indépendante de la temporisation, c'est à dire des constantes cinétiques associées à chaque réaction chimique.

Lemma A.7. Soit un réseau de Pétri \mathcal{R} défini par les matrices $[\alpha]$ et $[\beta]$. Le vecteur colonne $\lambda := (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{Z}^n$ définit une loi de conservation ssi $\lambda \in \ker([\beta] - [\alpha])$.

Démonstration. Quand la réaction chimique $(\alpha, \beta) \in \mathcal{R}$ se produit, la transition suivante est effectuée

$$\nu \longrightarrow \nu' := \nu + \beta - \alpha$$

On doit avoir $I(\nu) = I(\nu')$, ie. $\langle \beta - \alpha; \lambda \rangle = 0$ et cela pour toute réaction chimique $(\alpha, \beta) \in \mathcal{R}$. Donc $([\beta] - [\alpha])\lambda = 0$ ie. $\lambda \in \ker([\beta] - [\alpha])$. \square

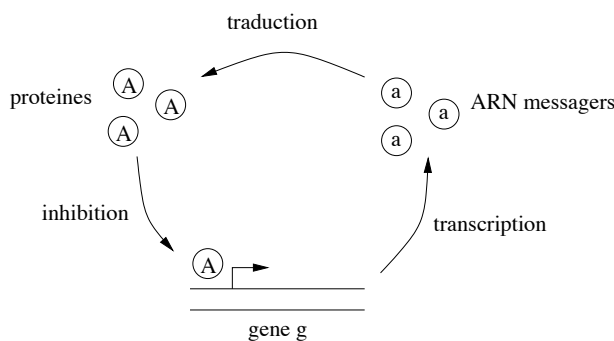
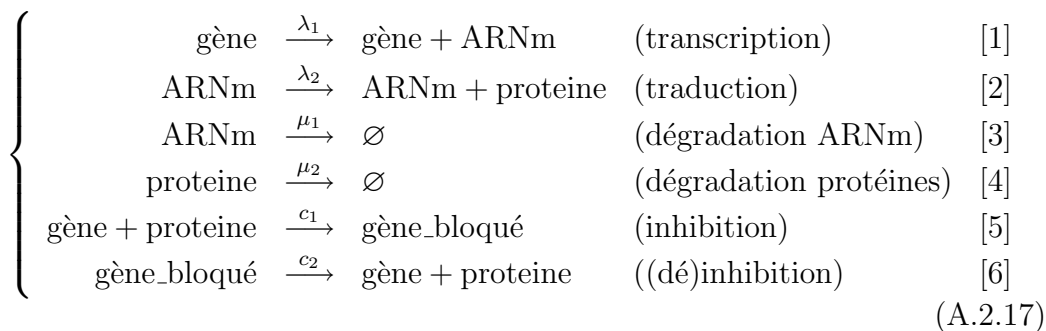


Figure A.3. Gène autorégulé

Exemple 6. Voici un modèle de gène *autorégulé*. La transcription du gène produit des ARN messagers, lesquels sont traduits en protéines. Si une protéine vient se positionner sur le gène à l’initiation de la transcription, celle-ci est bloquée (voir figure A.3).



Les quatre espèces chimiques sont numérotées :

$$T_1 := \text{ARNm}, \quad T_2 := \text{gène}, \quad T_3 := \text{gène_bloqué}, \quad T_4 := \text{protéine}.$$

Il admet la loi de conservation $I(\nu) := \nu_2 + \nu_3$, ce qui signifie que le nombre total de “molécules” du type *gène* et *gène_bloqué* est constant. En pratique, il y a un seul gène concerné donc le réseau de Pétri est initialisé en supposant $\nu_2 + \nu_3 = 1$.

On vérifie que l'hamiltonien de ce système est d'après (A.2.16)

$$\begin{aligned} H = & \lambda_1 (z_1 - 1) \theta_2 + \lambda_2 (z_4 - 1) \theta_1 + \mu_1 \left(\frac{1}{z_1} - 1 \right) \theta_1 \\ & + \mu_2 \left(\frac{1}{z_4} - 1 \right) \theta_4 + c_1 \left(\frac{z_3}{z_2 z_4} - 1 \right) \theta_2 \theta_4 + c_2 \left(\frac{z_2 z_4}{z_3} - 1 \right) \theta_3 \end{aligned}$$

Puisqu'à tout instant t , $\nu_2 + \nu_3 = 1$, on se propose d'éliminer la variable d'état ν_3 en posant $\nu_3 := 1 - \nu_2$. On obtient alors un nouveau modèle où les variables d'état sont $(\nu_1, \nu_2, \nu_4) \in \mathbb{N}^3$.

Essentiellement, il s'agit de remplacer les deux transitions associées à la réaction chimique [6] :

$$(\nu_1, \nu_2 - 1, \nu_3 + 1, \nu_4 - 1) \xrightarrow{c_2(\nu_3+1)} (\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4) \xrightarrow{c_2\nu_3} (\nu_1, \nu_2 + 1, \nu_3 - 1, \nu_4 + 1)$$

par les deux transitions :

$$(\nu_1, \nu_2 - 1, \nu_4 - 1) \xrightarrow{c_2((1-\nu_2)+1)} (\nu_1, \nu_2, \nu_4) \xrightarrow{c_2(1-\nu_2)} (\nu_1, \nu_2 + 1, \nu_4 + 1)$$

Compte-tenu du dictionnaire développé en section A.2.3, la substitution $\nu_3 \mapsto 1 - \nu_2$ se traduit par la substitution sur les opérateurs d'Euler $\theta_3 \mapsto 1 - \theta_2$ puis par la substitution $z_3 \mapsto 1$ qui traduit la disparition de la variable ν_3 du modèle. Le nouvel hamiltonien est alors

$$\begin{aligned} H = & \lambda_1 (z_1 - 1) \theta_2 + \lambda_2 (z_4 - 1) \theta_1 + \mu_1 \left(\frac{1}{z_1} - 1 \right) \theta_1 \\ & + \mu_2 \left(\frac{1}{z_4} - 1 \right) \theta_4 + c_1 \left(\frac{1}{z_2 z_4} - 1 \right) \theta_2 \theta_4 + c_2 (z_2 z_4 - 1) (1 - \theta_2) \end{aligned}$$

A.3 Calcul du propagateur

L'équation de Schrödinger, définie par (A.2.14) est une équation d'évolution qui est souvent résolue en calculant un *propagateur*, c'est à dire un opérateur $P(t_1, t_0)$ qui relie linéairement les valeurs de la transformée en z , $\varphi(t, z)$, entre les deux instants t_0 et t_1 :

$$\varphi(t_1, z) = P(t_1, t_0) \varphi(t_0, z), \quad t_1 > t_0, \quad t_0, t_1 \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.3.1})$$

On a la loi de composition partielle

$$P(t_2, t_0) = P(t_2, t_1) \circ P(t_1, t_0),$$

qui montre que les propagateurs forment un groupoïde. L'équation (A.2.16) est satisfaite ssi le propagateur vérifie l'équation différentielle ordinaire

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}P(t, t_0) = H P(t, t_0) \\ P(t_0, t_0) = 1 \end{cases} \quad (\text{A.3.2})$$

Dans le cas des réseaux de Pétri, d'après (A.2.16), l'hamiltonien H ne dépend pas du temps et par suite, l'équation (A.3.2) est invariante par translation temporelle $t \mapsto t+C$, $t_0 \mapsto t_0+C$, pour une constante réelle C quelconque. Donc le propagateur $P(t_1, t_0)$ ne dépend que de la différence $t_1 - t_0$. En posant $U(t_1 - t_0) := P(t_1, t_0)$, on a la relation $U(t + t') = U(t) \circ U(t')$, ce qui prouve que les propagateurs $\{U(t); t \in \mathbb{R}\}$ forment un groupe⁴. Le propagateur $U(t)$ est un opérateur agissant sur les séries formelles appartenant à $\mathbb{R}[[z_1, z_2, \dots, z_n]]$ et qui est solution de l'équation différentielle ordinaire

$$\begin{cases} \dot{U}(t) = H U(t) \\ U(0) = 1 \end{cases} \quad (\text{A.3.3})$$

D'après (A.2.16), l'hamiltonien H (qui ne dépend pas du temps t) est un élément de l'algèbre $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$. Cette algèbre *associative* est vue comme un algèbre de Lie réelle pour le crochet $[A, B] := AB - BA$ avec $A, B \in \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$.

Soit $\mathfrak{g} \subset \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$ une sous-algèbre de Lie réelle de dimension finie r admettant une base notée (X_1, X_2, \dots, X_r) et telle que $H \in \mathfrak{g}$. Alors le troisième théorème de Lie nous dit que le propagateur $U(t) := \exp(tH)$ appartient au groupe de Lie connexe et simplement connexe G admettant \mathfrak{g} comme algèbre de Lie.

Pour des valeurs du temps $t \in \mathbb{R}$ suffisamment petites, le propagateur cherché s'écrit sous les deux formes

$$U(t) = \exp\left(t(c_1X_1 + c_2X_2 + \dots + c_rX_r)\right) \quad (\text{A.3.4})$$

$$= \exp\left(f_1(t)X_1\right) \exp\left(f_2(t)X_2\right) \cdots \exp\left(f_r(t)X_r\right) \quad (\text{A.3.5})$$

4. Dans la théorie générale, un processus stochastique est défini comme un semi-groupe $\{U(t), t \in \mathbb{R}\}$ car on suppose que la fonction $t \mapsto U(t)$ est dérivable à droite à tout instant t (mais pas forcément à gauche). Dans le cas des réseaux de Pétri temporisés, cette restriction semble inutile.

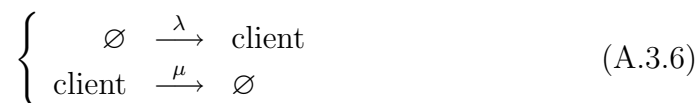
La formule de Wei–Norman permet de calculer le système d'équations différentielles ordinaires à coefficients réels qui détermine les fonctions $(f_1(t), f_2(t), \dots, f_r(t))$ en fonction des constantes c_1, \dots, c_r .

Lorsque l'algèbre de Lie \mathfrak{g} est résoluble, on prouvera que ce système différentiel est polynomial et triangulaire en les inconnues (f_1, f_2, \dots, f_r) . On a alors à calculer séparément le flot de chacun des vecteurs X_1, \dots, X_r , en espérant que le calcul, ainsi *découplé*, soit plus simple que le calcul direct du flot de $H := c_1 X_1 + \dots + c_r X_r$.

A.3.1 Exemple : la file $M/M/\infty$

La file $M/M/\infty$ correspond [31] à une architecture clients–serveurs comportant une infinité de serveurs travaillant en parallèle. Il n'y a pas de file d'attente : elle serait de toute façon inutile. Les clients se présentent à l'entrée du système selon un processus de Poisson de paramètre λ et le temps de service suit la loi exponentielle de paramètre μ . Soit $N(t)$ le nombre de serveurs occupés à l'instant t . La chaîne de Markov $\{N(t); t \in \mathbb{R}\}$ est représentée en figure A.4. Nous allons calculer *explicitement* la probabilité $\pi_\nu(t) := \text{prob}(N(t) = \nu)$.

Il faut imaginer un réseau de Pétri avec une seule place. Les jetons présents à cette place matérialisent les serveurs occupés. L'arrivée (respectivement la sortie) d'un client incrémente (respectivement décrémente) le nombre de serveurs occupés. Ce mécanisme correspond au système de réactions chimiques suivant :



Il en découle d'après (A.2.16) que l'hamiltonien de la file $M/M/\infty$ est

$$H = \lambda \underbrace{(z - 1)}_A + \mu \underbrace{(1 - z)}_B \partial_z \quad (\text{A.3.7})$$

L'hamiltonien H est une combinaison linéaire de deux opérateurs A et B qui engendrent, à cause de la relation de commutation $[A, B] = A$, une \mathbb{R} -algèbre de Lie résoluble \mathfrak{g} de dimension 2. Ces deux opérateurs forment donc une *base adaptée* pour le drapeau d'algèbres de Lie

$$(0) \subset \text{span}_{\mathbb{R}}(A) \subset \text{span}_{\mathbb{R}}(A, B) = \mathfrak{g} \quad (\text{A.3.8})$$

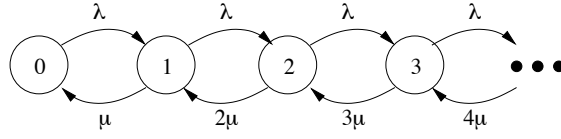


Figure A.4. La chaîne de Markov associée à la file $M/M/\infty$ (A.3.6)

On cherche les solutions de l'équation $\dot{U}(t) = HU(t)$ sous la forme

$$U(t) = e^{tH} = e^{f(t)A} e^{g(t)B} \quad (\text{A.3.9})$$

Afin d'obtenir les équations différentielles qui définissent les fonctions $f(t)$ et $g(t)$, on dérive l'opérateur $U(t)$ en utilisant la relation de Leibnitz, ce qui donne

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \dot{f}A e^{fA} e^{gB} + \dot{g}e^{fA} B e^{gB} \\ &= \left(\dot{f}A + \dot{g}e^{f \text{ad} A}(B) \right) U \end{aligned}$$

La deuxième ligne, obtenue en considérant l'action adjointe d'un groupe sur son algèbre de Lie, se simplifie en utilisant le drapeau (A.3.8). On a en effet

$$\begin{aligned} e^{fA} B e^{-fA} &= e^{f \text{ad} A}(B) \\ &= \left(1 + f \text{ad}_A + \frac{1}{2} f^2 \text{ad}_A^2 + \dots \right) B \\ &= B + f [A, B] + \frac{1}{2} f^2 [A, [A, B]] + \dots \\ &= B + fA \end{aligned}$$

La deuxième ligne est obtenue en effectuant un développement de Taylor formel de l'exponentielle $\exp(f \text{ad}_A)$ et la quatrième ligne est obtenue en utilisant la relation de commutation $[A, B] = A$, ce qui implique $[A, [A, B]] = 0$. Le système différentiel définissant les fonctions $f(t)$ et $g(t)$ est obtenu par l'identification

$$\dot{f}A + \dot{g}(B + fA) \equiv \lambda A + \mu B$$

ce qui donne

$$\begin{cases} \dot{f}(t) + \mu f(t) = \lambda \\ \dot{g}(t) = \mu \\ f(0) = g(0) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.3.10})$$

Le lecteur vérifiera que les solutions de ce système sont

$$g(t) = \mu t \text{ et } f(t) = \rho (1 - e^{-\mu t}) \text{ en posant } \rho := \frac{\lambda}{\mu}. \quad (\text{A.3.11})$$

Pour obtenir l'opérateur de transport $U(t)$ dont la forme est fixée en (A.3.9), il nous faut calculer le flot de chacun des opérateurs A et B .

- (i) L'opérateur $A := z - 1$ agit sur les fonctions par multiplication, donc d'après la formule de Taylor, son exponentielle $\exp(tA)$ est l'opérateur de multiplication par $\exp(t(z - 1))$.
- (ii) L'opérateur $B := (1 - z)\partial_z$ agit sur les fonctions comme une dérivée de Lie, donc son exponentielle $\exp(tB)$ agit sur les fonctions comme le pullback du difféomorphisme $\varphi^t : z \mapsto \bar{z}(t)$ où la fonction $\bar{z}(t)$ est solution du système différentiel

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\bar{z}(t) = 1 - \bar{z}(t) \\ \bar{z}(0) = z \end{cases}$$

La solution de ce système différentiel est

$$\bar{z}(t) = ze^{-t} + 1 - e^{-t}$$

En partant de l'état initial $\nu := n_0$, autrement dit, pour $\varphi(0, z) := z^{n_0}$, le calcul donne

$$\begin{aligned} \varphi(t, z) &= e^{f(t)A} e^{\mu t B} z^{n_0} \\ &= e^{f(t)A} \bar{z}(\mu t)^{n_0} \\ &= e^{f(t)A} [p(t)z + q(t)]^{n_0} \text{ en posant } p(t) := e^{-\mu t} \text{ et } q(t) := 1 - e^{-\mu t} . \end{aligned}$$

Finalement, on trouve

$$\boxed{\varphi(t, z) = \exp(\rho q(t)(z - 1)) [p(t)z + q(t)]^{n_0}} \quad (\text{A.3.12})$$

Cette formule signifie que la variable aléatoire $\{N(t); t \in \mathbb{R}\}$, qui compte le nombre de serveurs occupés à un instant donné t , est la somme de deux variables aléatoires indépendantes, ie. $N(t) = N_A(t) + N_B(t)$ ayant pour lois respectives

$$\text{loi } N_A(t) = \mathcal{P}(\rho q(t)), \quad \text{loi } N_B(t) = \mathcal{B}(n_0, p(t)) .$$

Le processus $N_B(t)$ (loi binomiale⁵) suit la même loi que le processus de morts $S \xrightarrow{\mu} \emptyset$, considéré isolément, et initialisé pour l'état $\nu = n_0$. Le processus $N_B(t)$ (loi de Poisson⁶) résulte de l'interaction entre les deux processus

5. La loi binomiale $\mathcal{B}(n, p)$ correspond à la distribution $\pi_k := \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$, autrement dit, à la transformée en z , $\varphi(t, z) = (pz + 1 - p)^n$.

6. La loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda)$ correspond à la distribution $\pi_k := e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}$, autrement dit, à la transformée en z , $\varphi(t, z) = \exp(\lambda(z - 1))$.

(naissances et morts). On calcule donc la probabilité $\pi_\nu(t) := \text{prob}(N(t) = \nu)$ par une convolution additive discrète⁷ entre une distribution binomiale et une distribution de Poisson.

Il est remarquable que la relation de commutation $[A, B] = A$ entre les deux hamiltoniens (naissances et morts) ait une interprétation aussi simple en termes de variables aléatoires.

A.3.2 Méthode de Wei–Norman

Les deux systèmes de coordonnées exponentielles

Soit G un groupe de dimension r à coefficients réels, \mathfrak{g} la \mathbb{R} -algèbre de Lie associée à G et (X_1, X_2, \dots, X_r) une base du \mathbb{R} -espace vectoriel \mathfrak{g} . Un propagateur $U(t) \in G$ admet deux systèmes de coordonnées exponentielles, selon que l'on adopte la décomposition (A.3.4) ou la décomposition (A.3.5). Dans le premier cas, $U(t)$ est vu comme l'exponentielle d'une somme (une combinaison linéaire des r vecteurs de base), dans le deuxième cas, comme un produit de r exponentielles. En algèbre commutative, il n'y a pas lieu de distinguer les deux systèmes de coordonnées puisque si $[X_1, X_2] = 0$, alors

$$\exp(c_1 X_1 + c_2 X_2) = \exp(c_1 X_1) \exp(c_2 X_2), \quad (c_1, c_2 \in \mathbb{R}).$$

La proposition suivante (Magnus, Wei–Norman) permet de comprendre le passage d'un système de coordonnées⁸ à l'autre, dans le cas d'une algèbre de Lie de dimension finie.

Proposition A.8. *Soit \mathfrak{g} son algèbre de Lie réelle de base (X_1, X_2, \dots, X_r) . Soit $U(t)$ un propagateur de la forme (A.3.5), où les fonctions réelles (f_1, f_2, \dots, f_r) sont C^1 :*

$$U(t) = \exp\left(f_1(t)X_1\right) \exp\left(f_2(t)X_2\right) \cdots \exp\left(f_r(t)X_r\right)$$

Alors, le générateur infinitésimal $H(t) := \dot{U}(t)U^{-1}(t)$ est de la forme

$$H(t) = \dot{f}_1(t) Y_1 + \dot{f}_2(t) Y_2 + \cdots + \dot{f}_r(t) Y_r ,$$

7. On utilise la convolution sur les distributions $(a * b)_n := \sum_{i+j=n} a_i b_j$.

8. Dans la littérature, on définit les coordonnées de première et de deuxième espèce

où (Y_1, Y_2, \dots, Y_r) sont des éléments de \mathfrak{g} obtenus en posant

$$Y_k := e^{f_1 \text{ ad } X_1} e^{f_2 \text{ ad } X_2} \dots e^{f_{k-1} \text{ ad } X_{k-1}}(X_k) \quad k = 1 \dots r . \quad (\text{A.3.13})$$

Démonstration. Le calcul de la dérivée de $U(t)$ par rapport à t donne :

$$\begin{aligned} \dot{U}(t) &= \dot{f}_1 X_1 e^{f_1 X_1} e^{f_2 X_2} \dots e^{f_r X_r} \\ &\quad + \dot{f}_2 e^{f_1 X_1} X_2 e^{f_2 X_2} e^{f_3 X_3} \dots e^{f_r X_r} \\ &\quad + \dot{f}_3 e^{f_1 X_1} e^{f_2 X_2} X_3 e^{f_3 X_3} e^{f_4 X_4} \dots e^{f_r X_r} \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \dot{f}_r e^{f_1 X_1} e^{f_2 X_2} \dots e^{f_{r-1} X_{r-1}} X_r e^{f_r X_r} \end{aligned}$$

Il convient de faire apparaître $U(t)$, dans chacun des termes du second membre, en utilisant judicieusement l'identité :

$$e^{fA} B e^{-fA} = e^{f \text{ ad } A}(B) \quad \text{pour tout } f \in \mathbb{R} \text{ et } A, B \in \mathfrak{g} . \quad (\text{A.3.14})$$

Le premier terme est égal à

$$\begin{aligned} \dot{f}_1 X_1 e^{f_1 X_1} e^{f_2 X_2} \dots e^{f_r X_r} &= \dot{f}_1 X_1 U \\ &= \dot{f}_1 Y_1 U \end{aligned}$$

Le deuxième terme est égal à

$$\begin{aligned} \dot{f}_2 e^{f_1 X_1} X_2 e^{-f_1 X_1} e^{f_1 X_1} e^{f_2 X_2} \dots e^{f_r X_r} &= \dot{f}_2 e^{f_1 \text{ ad } X_1}(X_2) U \\ &= \dot{f}_2 Y_2 U \end{aligned}$$

Le calcul du troisième terme donne

$$\begin{aligned} \dot{f}_3 e^{f_1 X_1} e^{f_2 X_2} X_3 e^{-f_2 X_2} e^{-f_1 X_1} e^{f_1 X_1} \dots e^{f_r X_r} &= \dot{f}_3 e^{f_1 \text{ ad } X_1} e^{f_2 \text{ ad } X_2}(X_3) U \\ &= \dot{f}_3 Y_3 U \end{aligned}$$

et ainsi de suite pour les autres termes. On a démontré que $\dot{U}(t) = H(t) U(t)$ où $H(t)$ a bien la forme requise. \square

Mise en oeuvre pratique

La formule de Wei–Norman (A.3.13), utilisable dans n’importe quelle algèbre d’opérateurs de dimension finie \mathfrak{g} , permet de calculer la matrice de changement de base $\Xi(f_1, f_2, \dots, f_r)$ telle que

$$(Y_1, Y_2, \dots, Y_r) = (X_1, X_2, \dots, X_r) \Xi(f_1, f_2, \dots, f_r). \quad (\text{A.3.15})$$

Pour cela, on calcule les matrices des applications linéaires $(\text{ad}_{X_1}, \text{ad}_{X_2}, \dots, \text{ad}_{X_r})$ puis une forme de Jordan pour chacune d’elles. On sait que chaque bloc de Jordan est de la forme $D + N$ où D est une matrice diagonale qui commute avec la matrice nilpotente N . L’exponentielle d’une matrice diagonale est diagonale, l’exponentielle d’une matrice nilpotente N est un polynôme en N et les deux exponentielles commutent⁹.

Lemma A.9. *La matrice $\Xi(f)$, $f \in \mathbb{R}^r$, caractérisée par (A.3.13) et (A.3.15), est définie pour tout $f \in \mathbb{R}^r$ et ses entrées sont des fonctions analytiques en (f_1, f_2, \dots, f_r) . Elle est invertible au voisinage de l’élément neutre, autrement dit, lorsque les coordonnées $f_1 = f_2 = \dots = f_r$ sont suffisamment petites.*

Démonstration. Soit A une matrice. L’exponentielle $\exp(tA)$ est donnée par le développement de Taylor $\exp(tA) = 1 + tA + 1/2 t^2 A^2 + \dots$ qui converge, quelque soit $t \in \mathbb{R}$. Les entrées de cette matrice exponentielle sont donc des fonctions analytiques en t . Donc les entrées de la matrice $\Xi(f)$ dépendent analytiquement des coordonnées (f_1, f_2, \dots, f_r) . Au point de coordonnées $f = (0, 0, \dots, 0)$, la matrice $\Xi(f)$ est égale à l’identité, donc elle est invertible. On en déduit que la matrice inverse $\Xi^{-1}(f)$ est définie dans un voisinage du point $f = 0$; ses entrées sont également des fonctions analytiques de (f_1, f_2, \dots, f_r) . \square

Example 7. Dans le cas du groupe $G := \text{SU}(2)$, on peut choisir la base [3] de $\mathfrak{g} := \text{su}(2)$ formée par les matrices ($i^2 = -1$)

$$X_1 := \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad X_2 := \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad X_3 := \frac{1}{2} \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}$$

9. L’algorithme devrait pouvoir être optimisé en remarquant que l’on a pas besoin de connaître l’exponentielle complète, mais seulement l’action de cette exponentielle sur certains vecteurs.

Il existe d’autres méthodes de calcul de l’exponentielle d’une matrice qui ne nécessite pas la décomposition de Jordan.

dans laquelle, on a la relation de commutation $[X_1, X_2] = X_3$ et les deux autres obtenues par permutation circulaire. Les matrices de la représentation adjointe dans la base (X_1, X_2, X_3) sont

$$\text{ad}_{X_1} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ad}_{X_2} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ad}_{X_3} := \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Les exponentielles de ces 3 matrices sont des matrices de rotation appartenant au groupe $\text{SO}(3)$. D'après (A.3.13), seules les 2 premières exponentielles interviennent dans le calcul de la matrice de changement de base (A.3.15) :

$$\exp(f_1 \text{ad}_{X_1}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos f_1 & -\sin f_1 \\ 0 & \sin f_1 & \cos f_1 \end{bmatrix} \quad \exp(f_2 \text{ad}_{X_2}) = \begin{bmatrix} \cos f_2 & 0 & \sin f_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin f_2 & 0 & \cos f_2 \end{bmatrix}$$

On obtient finalement :

$$\Xi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \sin f_2 \\ 0 & \cos f_1 & -\cos f_2 \sin f_1 \\ 0 & \sin f_1 & \cos f_1 \cos f_2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.3.16})$$

On vérifie que cette matrice est invertible au voisinage de $f = 0$ en calculant le déterminant $\det \Xi = \cos f_2$, lequel s'annule pour $f_2 = \pi/2 + 2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$.

Lemma A.10 (Wei-Norman [86]). *Soit \mathfrak{g} une algèbre de Lie réelle, (X_1, \dots, X_r) une base de \mathfrak{g} et un élément $H \in \mathfrak{g}$ de la forme $H = \sum_{k=1}^r c_k X_k$ avec $c_1, \dots, c_r \in \mathbb{R}$. Soit $U(t) := \exp(tH)$ le groupe à un paramètre associé. Alors, il existe r fonctions réelles $(f_1(t), \dots, f_r(t))$, analytiques au voisinage de $t = 0$, telles que*

$$U(t) = \exp(f_1(t) X_1) \exp(f_2(t) X_2) \cdots \exp(f_r(t) X_r).$$

Ces fonctions sont solutions du système différentiel ordinaire

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_r \end{bmatrix} = \Xi^{-1}(f_1, \dots, f_r) \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_r \end{bmatrix} \quad \text{avec } f_1(0) = \dots = f_r(0) = 0, \quad (\text{A.3.17})$$

où la matrice $\Xi(f)$ est caractérisée par les formules (A.3.13) et (A.3.15).

Démonstration. La proposition A.8 ramène le calcul de $U(t)$ à la décomposition de l'hamiltonien H dans deux bases de \mathfrak{g} :

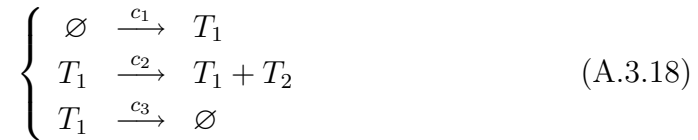
$$H = \sum_{k=1}^r \dot{f}_k Y_k = \sum_{i=1}^r c_i X_i$$

On a

$$(c_1, \dots, c_r)^T = \Xi(f_1, \dots, f_r) (\dot{f}_1, \dots, \dot{f}_r)^T .$$

La condition initiale $f_1(0) = \dots = f_r(0) = 0$ en $t = 0$ découle de la condition initiale sur le propagateur $U(0) = 1$. D'après le lemme A.9, la matrice $\Xi(f)$ est invertible pour $|f|$ suffisamment petit. Le système différentiel analytique (A.3.17) est donc bien défini au voisinage de la condition initiale. Le théorème de Cauchy-Kovalewska assure de l'existence et l'unicité de solutions $(f_1(t), \dots, f_r(t))$, localement analytiques en $t = 0$. \square

Example 8. On considère le réseau de Pétri stochastique



D'après (A.2.16), l'hamiltonien associé est $H = c_1 H_1 + c_2 H_2 + c_3 H_3$ avec

$$H_1 = z_1 - 1, \quad H_2 = (z_1 z_2 - z_1) \frac{\partial}{\partial z_1}, \quad H_3 = (1 - z_1) \frac{\partial}{\partial z_1} . \quad (\text{A.3.19})$$

Ce système est particulier : la dérivation $\frac{\partial}{\partial z_2}$ n'apparaît pas dans l'hamiltonien. Ceci traduit le fait que la dynamique sur l'espèce chimique T_2 n'influence pas la dynamique sur l'espèce T_1 (par contre la dynamique de T_1 influence celle de T_2). Pour simplifier les calculs, on pose

$$\begin{aligned} X_1 &:= H_1 \\ X_3 &:= c_2 H_2 + c_3 H_3 = (c_3 + k z_1) \frac{\partial}{\partial z_1} \text{ avec } k := k(z_2) := c_2(z_2 - 1) - c_3 \end{aligned}$$

On simplifie légèrement les calculs en choisissant l'unité de temps telle que $\boxed{c_3 = 1}$.

La $\mathbb{Q}[k]$ -algèbre de Lie \mathfrak{g} engendrée par les 2 opérateurs X_1 et X_3 admet pour base

$$\left\{ \begin{array}{l} X_1 = z_1 - 1 \\ X_2 = 1 + k z_1 \\ X_3 = (1 + k z_1) \frac{\partial}{\partial z_1} \end{array} \right. \quad (\text{A.3.20})$$

avec les relations de commutation

$$[X_1, X_2] = 0, \quad [X_1, X_3] = -X_2, \quad [X_2, X_3] = -kX_2 .$$

On en déduit que \mathfrak{g} est une algèbre résoluble de dimension 3. Dans la base adaptée (X_1, X_2, X_3) , l'hamiltonien se décompose sous la forme $H = c_1X_1 + X_3$.

On cherche le propagateur $U(t) := \exp(tH)$ sous la forme

$$U(t) = \exp(f_1(t)X_1) \exp(f_2(t)X_2) \exp(f_3(t)X_3) .$$

Les matrices de la représentation adjointe $\text{ad} : \mathfrak{g} \rightarrow \text{gl}(\mathfrak{g})$ dans la base (X_1, X_2, X_3) s'écrivent

$$\text{ad}_{X_1} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ad}_{X_2} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -k \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ad}_{X_3} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & k & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

D'après (A.3.13), seules les 2 premières exponentielles interviennent dans le calcul de la matrice de changement de base (A.3.15) :

$$\exp(f_1 \text{ad}_{X_1}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -f_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \exp(f_2 \text{ad}_{X_2}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -kf_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

ce qui donne les matrices de changement de base

$$\Xi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -f_1 - kf_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \Xi^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & f_1 + kf_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Ces deux matrices sont polynomiales, triangulaires supérieures, avec des 1 sur la diagonale. La matrice de passage $\Xi(f)$ est donc globalement (i.e. pour toute valeur de f) invertible : c'est un cas particulier qui est lié au fait que l'algèbre de Lie \mathfrak{g} est résoluble.

Le système (A.3.17) s'écrit

$$\begin{cases} \dot{f}_1(t) = c_1 \\ \dot{f}_2(t) = f_1(t) + kf_2(t) \\ \dot{f}_3(t) = 1 \end{cases}$$

avec la condition initiale $f_1(0) = f_2(0) = f_3(0) = 0$ et se résoud sous la forme

$$f_1(t) = c_1 t \quad f_2(t) = \frac{c_1}{k^2} (e^{kt} - kt - 1) \quad f_3(t) = t . \quad (\text{A.3.21})$$

Un calcul de routine montre que le flot du champ de vecteur $\exp(tX_3)$ est le groupe de difféomorphismes $(z_1, z_2) \mapsto (\bar{z}_1(t), \bar{z}_2(t))$ avec

$$\bar{z}_1(t) = z_1 e^{kt} + \frac{1}{k} (e^{kt} - 1) \text{ et } \bar{z}_2(t) = z_2. \quad (\text{A.3.22})$$

Finalement, la transformée en z , calculée pour une condition initiale $\varphi(0, z) := \varphi_0(z_1, z_2)$ quelconque, est

$$\boxed{\varphi(t, z) = e^{f_1(t)(z_1-1)} e^{f_2(t)(1+kz_1)} \varphi_0(\bar{z}_1(t), \bar{z}_2(t))} \quad (\text{A.3.23})$$

où les fonctions $(\bar{z}_1(t), \bar{z}_2(t))$ sont données par la formule (A.3.22) et les coordonnées exponentielles par la formule (A.3.21).

A.4 Moments à l'instant t

Soit $\{N(t); t \in \mathbb{R}\}$ le processus de comptage des jetons, présents à l'instant t , dans les n places d'un réseau de Pétri stochastique défini par un hamiltonien H .

On pose $N(t) = (N_1(t), N_2(t), \dots, N_n(t))$. Le but de cette section est de calculer, à tout instant t , les moyennes $E N_k(t)$, $k = 1 \dots n$, et, pour $1 \leq i, j \leq n$, les covariances $\text{Cov}(N_i(t), N_j(t))$ associées à la v.a. $N(t)$. On note

$$E z^{N(t)} := \varphi(t, z) := \sum_{\nu \in \mathbb{N}^n} \text{prob}(N(t) = \nu) z_1^{\nu_1} z_2^{\nu_2} \dots z_n^{\nu_n} \quad (\text{A.4.1})$$

la transformée en z associée à la v.a. $N(t)$.

A.4.1 Formules utilisées

Soit un polynôme (en variables commutatives) $f \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$. Il est loisible d'interpréter $f(\theta)$ comme un polynôme en les opérateurs d'Euler $(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n)$ et donc comme un élément de l'algèbre $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$ définie en (A.2.7).

Ce polynôme définit également la fonction polynomiale $f : \mathbb{N}^n \rightarrow \mathbb{R}$ associant la valeur $f(\nu)$ à tout multi-indice $\nu \in \mathbb{N}^n$. Comme l'ensemble discret

\mathbb{N}^n est un espace muni d'une loi de probabilité (variant au cours du temps t), on définit la variable aléatoire $f(N(t))$ qui prend la valeur réelle $f(\nu)$ lorsque la v.a. $N(t)$ prend la valeur ν . La moyenne de la v.a. $f(N(t))$ est définie par la formule

$$\mathbb{E} f(N(t)) := \sum_{\nu} f(\nu) \text{prob}(N(t) = \nu) . \quad (\text{A.4.2})$$

Lemma A.11. *Pour toute polynôme $f \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$, on a*

$$\mathbb{E} f(N(t)) = f(\theta) \mathbb{E} z^{N(t)}|_{z=1} \quad (\text{A.4.3})$$

où $f(\theta)$ est interprété comme un opérateur agissant sur la série génératrice (A.4.1), le résultat étant évalué au point $z_1 = z_2 = \dots = z_n = 1$.

Démonstration. On vérifie que pour tout $\nu \in \mathbb{N}^n$, on a $f(\theta) z^\nu = f(\nu) z^\nu$. On en déduit que

$$f(\theta) \varphi(t, z) = \sum_{\nu} f(\nu) \text{prob}(N(t) = \nu) z^\nu .$$

En évaluant au point $z = 1$, on retrouve le formule (A.4.2). \square

Lemma A.12. *Pour toute polynôme $f \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$, on a*

$$\frac{d}{dt} \mathbb{E} f(N(t)) = \mathbb{E} f_H(N(t)) ,$$

où le polynôme $f_H \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$ est le commutateur évalué en $z = 1$:

$$f_H(\theta) := [f(\theta), H]_{z=1} .$$

Démonstration. On part de l'équation de Schrödinger $\frac{\partial}{\partial t} \varphi(t, z) = H \varphi(t, z)$. En remarquant que la dérivation partielle $\frac{\partial}{\partial t}$ commute par rapport à l'opérateur $f(\theta)$, ainsi qu'à l'évaluation en $z = 1$, on en déduit

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\theta) \varphi(t, z)|_{z=1} = f(\theta) H \varphi(t, z)|_{z=1} .$$

Le premier membre est égal à $d/dt \mathbb{E} f(N(t))$ d'après le lemme A.11.

Dans le second membre on peut remplacer le produit d'opérateurs $f(\theta)H$ par le commutateur $[f(\theta), H] := f(\theta)H - Hf(\theta)$ car d'après la formule (A.2.15), l'hamiltonien H d'un réseau de Pétri est nul au point $z = 1$. \square

A.4.2 Ordre d'un système

Definition A.4. Soit $q \in \mathbb{N}$. Un système de réactions chimiques est dit *d'ordre* q , lorsque chaque réaction chimique comporte au plus q espèces chimiques en partie gauche.

Si l'on pose $|\alpha| := \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$ pour tout multi-indice $\alpha \in \mathbb{N}^n$, alors pour toute réaction $(c, \alpha, \beta) \in \mathcal{R}$, on a $|\alpha| \leq q$.

Lemma A.13. *Un système de réactions chimiques est d'ordre q ssi son hamiltonien H appartient à la composante \mathcal{F}_q de la filtration de l'algèbre de Weyl définie en (A.2.9).*

Démonstration. Résulte directement de valeur de H dans la formule (A.2.16). □

Tout polynôme $f \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$, homogène de degré total d , définit un moment $E f(N(t))$ que l'on dira de degré d .

Proposition A.14. *Dans un système de réactions chimiques d'ordre q , la dérivée par rapport au temps d'un moment de degré d dépend uniquement des autres moments de degré au plus $q + d - 1$.*

Démonstration. Soit $H \in \text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z_1, z_2, \dots, z_n)$ un opérateur d'ordre q , i.e. $H \in \mathcal{F}_q$. Si $f \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$ est un polynôme homogène de degré d , alors l'élément $[f(\theta), H] \in \mathcal{F}_{q+d-1}$. L'évaluation au point $z = 1$ fournit un élément $[f(\theta), H]_{z=1} \in \mathbb{R}[\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]$ de degré au plus $q + d - 1$. □

Par exemple, les systèmes (A.2.2), (A.3.6) et (A.3.18) et sont d'ordre 1. Pour le système $M/M/\infty$ (voir sect. A.3.1), l'hamiltonien est

$$H = \lambda(z - 1) + \mu \left(\frac{1}{z} - 1 \right) \theta \text{ avec } \theta := z \frac{\partial}{\partial z} .$$

Le calcul donne $[\theta, H]_{z=1} = \lambda - \mu\theta$ et $[\theta^2, H]_{z=1} = \lambda + (2\lambda + \mu)\theta - 2\mu\theta^2$.

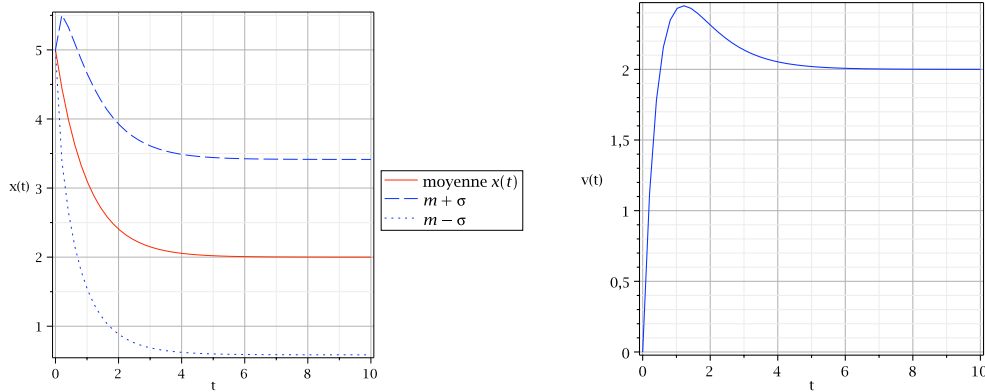
L'application des formules (A.4.2) et (A.4.3) donne

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathbb{E} N(t) &= \lambda - \mu \mathbb{E} N(t) \\ \frac{d}{dt} \mathbb{E} N^2(t) &= \lambda + (2\lambda + \mu) \mathbb{E} N(t) - 2\mu \mathbb{E} N^2(t) \end{cases}$$

On calcule la variance par $\text{Var} N(t) := \mathbb{E} N^2(t) - (\mathbb{E} N(t))^2$. La dynamique sur la moyenne $x(t) := \mathbb{E} N(t)$ et la variance $v(t) := \text{Var} N(t)$ en découle directement

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} x(t) &= \lambda - \mu x(t) \\ \frac{d}{dt} v(t) &= \lambda + \mu x(t) - 2\mu v(t) \end{cases}$$

Il est facile de simuler numériquement un tel système d'équations ordinaires (voir figure A.5). Dans ce cas (très) particulier, on trouve assez facilement une formule close donnant la solution générale de ce système linéaire avec second membre.



(a) Nombre moyen $x(t)$ de serveurs occupés en fonction du temps t

(b) Variance $v(t)$ du nombre de serveurs occupés en fonction du temps t

Figure A.5. La file $M/M/\infty$ pour un état initial $n_0 = 5$, $\lambda = 2$ et $\mu = 1$. En régime stationnaire, on montre que la v.a. $N(t)$ suit la loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda/\mu)$. On en déduit que $\mathbb{E} N(t) = \text{Var} N(t)$, ce qui est vérifié sur cette simulation.

Proposition A.15. Dans un système de réactions chimiques, la dynamique sur les moyennes $\mathbb{E} N_k(t)$, $k = 1 \dots n$, (i.e. les moments d'ordre 1) s'écrit

$$\frac{d}{dt} \mathbb{E} N_k(t) = \sum_{(c, \alpha, \beta) \in \mathcal{R}} \frac{c}{\alpha!} (\beta_k - \alpha_k) \mathbb{E} N(t)^\alpha \quad (k \in \mathbb{N}, \alpha, \beta \in \mathbb{N}^n)$$

Pour un système d'ordre 1, cette dynamique est linéaire en les variables $E N_k(t)$.

Démonstration. A partir de la formule (A.2.16), on déduit

$$\theta_k H = \sum_{(c,\alpha,\beta) \in \mathcal{R}} \frac{c}{\alpha!} (\beta_k - \alpha_k) z^{\beta-\alpha} \theta^\alpha + \frac{c}{\alpha!} (z^{\beta-\alpha-1}) \theta_k \theta^\alpha$$

En évaluant en $z = 1$, on trouve

$$\theta_k H|_{z=1} = \sum_{(c,\alpha,\beta) \in \mathcal{R}} \frac{c}{\alpha!} (\beta_k - \alpha_k) \theta^\alpha$$

ce qui démontre la formule cherchée en appliquant les lemmes A.11 et A.12.

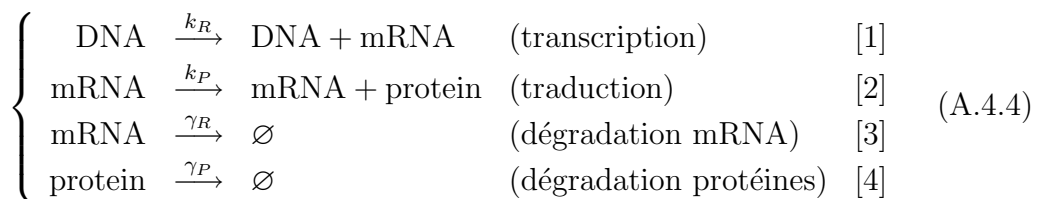
Quand les réactions chimiques sont d'ordre 1, on a $|\alpha| \leq 1$. Donc $\alpha! = 1$ et $N(t)^\alpha = N(t)^\alpha$. De plus $N(t)^\alpha = 1$ ssi $\alpha = 0$ et $N(t)^\alpha = N_j(t)$ si $\alpha = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$, le "1" figurant en j^{ieme} position. \square

On retrouve le modèle *déterministe* utilisé classiquement en cinétique chimique (loi d'action de masse). Donc pour un système d'ordre 1, le modèle déterministe correspond à une moyennisation *sans biais* des variables aléatoires $N_k(t)$ du modèle stochastique. Il ne tient pas compte de la matrice de covariance $\text{Cov}(N_i(t), N_j(t))$ pour $i, j = 1 \dots n$.

A.4.3 Gène non régulé

Voici un modèle de gène *non* régulé [59] que m'a communiqué C. Kuttler. Ce modèle est intéressant car il a donné lieu à des vérifications expérimentales par les biologistes du MIT et montré l'importance des phénomènes aléatoires dans l'expression des gènes.

La transcription du gène produit des ARN messagers, lesquels sont traduits en protéines :



Les trois espèces chimiques sont numérotées :

$$T_1 := \text{DNA}, \quad T_2 := \text{mRNA}, \quad T_3 := \text{protein.}$$

On vérifie que l'hamiltonien de ce système est d'après (A.2.16)

$$H = k_R (z_2 - 1) \theta_1 + k_P (z_3 - 1) \theta_2 + \gamma_R (z_2^{-1} - 1) \theta_2 + \gamma_P (z_3^{-1} - 1) \theta_3$$

Il admet la loi de conservation $\nu_1 = 1$, ce qui signifie qu'il y a un seul gène concerné dans le réseau (à tout instant t). On effectue la réduction de modèle en posant la relation $\theta_1 = 1$ et $z_1 = 1$. L'hamiltonien réduit est égal à

$$H = k_R (z_2 - 1) + k_P (z_3 - 1) \theta_2 + \gamma_R (z_2^{-1} - 1) \theta_2 + \gamma_P (z_3^{-1} - 1) \theta_3$$

Il ne subsiste que deux variables d'état $\nu := (\nu_2, \nu_3) \in \mathbb{N}^2$, le nombre d'ARN messagers et le nombre de protéines à l'instant t .

Soit $N(t) := (N_2(t), N_3(t))$, $t \in \mathbb{R}$, le processus stochastique associé au système (A.4.4). Nous allons calculer les moyennes $x_2(t) := \mathbb{E} N_2(t)$ et $x_3(t) := \mathbb{E} N_3(t)$ et la matrice de covariance $x_{ij}(t) := \text{Cov}(N_i(t), N_j(t))$ pour $i, j = 2, 3$. Conformément aux formules (A.11) et (A.12), notre logiciel calcule les commutateurs évalués au point $z_2 = z_3 = 1$

$$\begin{aligned} [\theta_2, H]_{z=1} &= k_R - \gamma_R \theta_2 \\ [\theta_3, H]_{z=1} &= k_P \theta_2 - \gamma_P \theta_3 \\ [\theta_2^2, H]_{z=1} &= k_R + (2k_R + \gamma_R) \theta_2 - 2\gamma_R \theta_2^2 \\ [\theta_2 \theta_3, H]_{z=1} &= k_R \theta_3 + k_P \theta_2^2 + (-\gamma_R - \gamma_P) \theta_2 \theta_3 \\ [\theta_3^2, H]_{z=1} &= k_P \theta_2 + \gamma_P \theta_3 + 2k_P \theta_2 \theta_3 - 2\gamma_P \theta_3^2 \end{aligned}$$

et génère le système qui décrit l'évolution dans le temps des moyennes et des (co)variances cherchées :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x_2(t) &= k_R - \gamma_R x_2(t) \\ \frac{d}{dt} x_3(t) &= k_P x_2(t) - \gamma_P x_3(t) \\ \frac{d}{dt} x_{2,2}(t) &= \gamma_R x_2(t) + k_R - 2\gamma_R x_{2,2}(t) \\ \frac{d}{dt} x_{2,3}(t) &= (-\gamma_R - \gamma_P) x_{2,3}(t) + k_P x_{2,2}(t) \\ \frac{d}{dt} x_{3,3}(t) &= k_P x_2(t) - 2\gamma_P x_{3,3}(t) + 2k_P x_{2,3}(t) + \gamma_P x_3(t) \end{aligned} \tag{A.4.5}$$

Comme le système de réactions chimiques est d'ordre 1, on obtient un système *linéaire* et le phénomène de cascade infinie ne se produit pas. Pour simplifier, on choisit l'unité de temps telle que $\gamma_R = 1$. Le calcul sur machine des moyennes et des variances en régime *stationnaire* donne :

$$x_2 = k_R, \quad x_3 = \frac{k_P k_R}{\gamma_P}, \quad x_{2,2} = k_R, \quad x_{2,3} = \frac{k_P k_R}{1 + \gamma_P}, \quad x_{3,3} = \frac{k_P k_R (\gamma_P + k_P + 1)}{\gamma_P (1 + \gamma_P)}$$

Ce calcul est obtenu sans aucune approximation. Les mêmes formules figurent dans [59] et sont démontrées en utilisant la technique de Langevin : les deux premières équations de (A.4.5) sont vues comme un modèle *déterministe* (découlant de la loi d'action de masse) puis on ajoute dans les membres de droite deux bruits blancs de moyenne nulle. Cette technique est difficile à justifier rigoureusement.

En résolvant symboliquement les équations (A.4.5), par exemple en utilisant une transformée de Laplace, on obtient le calcul exact des moyennes et des variances en régime *transitoire*

$$\begin{aligned} x_2(t) &= k_R (-e^{-t} + 1) \\ x_3(t) &= \frac{k_P k_R (-1 + e^{-\gamma_P t} + \gamma_P (-e^{-t} + 1))}{\gamma_P (-1 + \gamma_P)} \\ x_{2,2}(t) &= k_R (-e^{-t} + 1) \\ x_{2,3}(t) &= \frac{(-e^{-t} (1 + \gamma_P) + \gamma_P + e^{-(1+\gamma_P)t}) k_R k_P}{\gamma_P (1 + \gamma_P)} \\ x_{2,3}(t) &= \dots \end{aligned}$$

Ce résultat (obtenu sans aucune approximation) est impossible à obtenir par des simulations Monte-Carlo.

A.4.4 Systèmes d'ordre 2

La principale difficulté (proposition A.14) vient du fait que la dynamique sur les moments de degré d fait intervenir les moments de degré $q + d - 1$, i.e. $d + 1$ pour $q = 2$. La dynamique des moments de degré 1 fait intervenir les moments de degré 2, celle de degré 2 les moments de degré 3 \dots , ce que l'on nommera une *cascade infinie*. Ce phénomène est impossible pour des systèmes chimiques d'ordre $q = 1$.

Pour briser une cascade infinie, il y a au moins trois méthodes possibles :

1. On fait une approximation. Par exemple, on suppose que les moments centrés de degré $d+1$ sont nuls. Cette approximation est légitime lorsque le nombre de jetons dans chacune des places (le nombre de molécules chimiques des différentes espèces chimiques) est élevé à tout instant t .
2. On dispose de relations exprimant les moments de degré $d+1$ en fonction des moments de degré au plus d . C'est en particulier le cas pour des variables aléatoires ne prenant que les valeurs 0 ou 1. Soit $X(t)$ une telle variable, dite booléenne. On a alors, à tout instant $t \in \mathbb{R}$, $X(t) = X^2(t)$. Par suite, $E X^2(t) = E X(t)$, ce qui s'écrit aussi $\text{Var } X(t) = x(t)(1-x(t))$ en posant $x(t) := E X(t)$.

On verra que ce genre de relations se généralise lorsque le nombre de jetons, à tout instant t , est borné a priori.

3. Les réactions chimiques d'ordre $q \geq 2$ se produisent avec une fréquence plus grande que les réactions d'ordre $q \leq 1$. Rappelons que le temps T qui sépare deux occurrences d'une même réaction $(c, \alpha, \beta) \in \mathbb{R}$ est une v.a. qui suit la loi exponentielle de paramètre $\lambda := c \binom{\alpha}{\nu}$ où c est le coefficient cinétique et $\nu \in \mathbb{N}^n$ l'état courant. On en déduit que le temps moyen est $E(T) = 1/\lambda$. Si ce temps $E(T)$ est petit, il est raisonnable d'effectuer une *moyennisation*. Ce procédé est applicable pour un gène autorégulé lorsque le gène oscille rapidement entre l'état actif et l'état bloqué.

Le gène autorégulé

Il y a un seul gène qui est soit *libre*, soit *bloqué* (voir modèle (A.2.17)). Il y a donc une loi de conservation, $\nu_2 + \nu_3 = 1$, ce qui permet de se ramener à un réseau de Pétri comportant les trois places (espèces chimiques) (T_1, T_2, T_4) . L'hamiltonien du système réduit s'obtient en effectuant la substitution $\theta_3 \mapsto 1 - \theta_2$. On note $(N_1(t), N_2(t), N_4(t))$ les v.a. qui comptent le nombre de jetons présents à l'instant t . Soient les moyennes $x_i(t) := E N_i(t)$ pour $i = 1, 2, 4$ et la matrice de covariance $x_{ij}(t) := \text{Cov}(N_i(t), N_j(t))$ pour $i, j = 1, 2, 4$.

De plus, la variable aléatoire $N_2(t)$ est booléenne. On a donc $E N_2(t) = E N_2^2(t)$, ce que l'on traduit, compte-tenu de la formule (A.4.2) par l'égalité entre opérateurs $\theta_2 = \theta_2^2$.

Calculons la dynamique sur les moments de degré 1 et 2 en utilisant la formule (A.4.3). Le calcul, effectué automatiquement par notre logiciel, dans l'algèbre de Weyl ainsi quotientée donne :

$$\begin{aligned}
[\theta_1, H]_{z=1} &= -\mu_1\theta_1 + \lambda_1\theta_2 \\
[\theta_2, H]_{z=1} &= c_2 - c_2\theta_2 - c_1\theta_2\theta_4 \\
[\theta_4, H]_{z=1} &= c_2 + \lambda_2\theta_1 - c_2\theta_2 - \mu_2\theta_4 - c_1\theta_2\theta_4 \\
[\theta_1^2, H]_{z=1} &= \mu_1\theta_1 + \lambda_1\theta_2 - 2\mu_1\theta_1^2 + 2\lambda_1\theta_1\theta_2 \\
[\theta_2\theta_1, H]_{z=1} &= c_2\theta_1 + \lambda_1\theta_2 - (\mu_1 + c_2)\theta_1\theta_2 - c_1\theta_1\theta_2\theta_4 \\
\dots &= \dots
\end{aligned}$$

Il y a une cascade infinie car la dynamique sur les moments de degré 2 fait intervenir deux moments de degré 3, à savoir les moments codés par les opérateurs $\theta_1\theta_2\theta_4$ et $\theta_2\theta_4^2$. Pour briser cette cascade, on peut par exemple poser comme principe d'approximation, que tous les moments centrés de degré 3 sont nuls. Soient 3 v.a. (X_1, X_2, X_3) de moyenne respectives (x_1, x_2, x_3) . Un calcul de routine donne le moment centré d'ordre 3 :

$$\begin{aligned}
E((X_1 - x_1)(X_2 - x_2)(X_3 - x_3)) &= E(X_1X_2X_3) - x_1x_2x_3 \\
&\quad - x_1 \text{Cov}(X_2X_3) - x_2 \text{Cov}(X_3X_1) - x_3 \text{Cov}(X_1X_2) .
\end{aligned}$$

Nous n'avons pas la preuve que cette approximation soit la plus pertinente. On trouve finalement un système d'équations différentielles ordinaires *non linéaires* :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}x_1(t) &= -\mu_1x_1(t) + \lambda_1x_2(t) \\
\frac{d}{dt}x_2(t) &= c_2 - c_2x_2(t) - c_1x_4(t)x_2(t) - c_1x_{2,4}(t) \\
\frac{d}{dt}x_4(t) &= c_2 + \lambda_2x_1(t) - c_2x_2(t) - c_1x_4(t)x_2(t) - \mu_2x_4(t) - c_1x_{2,4}(t) \\
\frac{d}{dt}x_{1,1}(t) &= \mu_1x_1(t) + 2\lambda_1x_{1,2}(t) + \lambda_1x_2(t) - 2\mu_1x_{1,1}(t) \\
\frac{d}{dt}x_{1,2}(t) &= \lambda_1x_2(t) - c_1x_{1,4}(t)x_2(t) - c_1x_4(t)x_{1,2}(t) - (\mu_1 + c_2)x_{1,2}(t) - \lambda_1x_2(t)^2 \\
\dots &= \dots
\end{aligned}$$

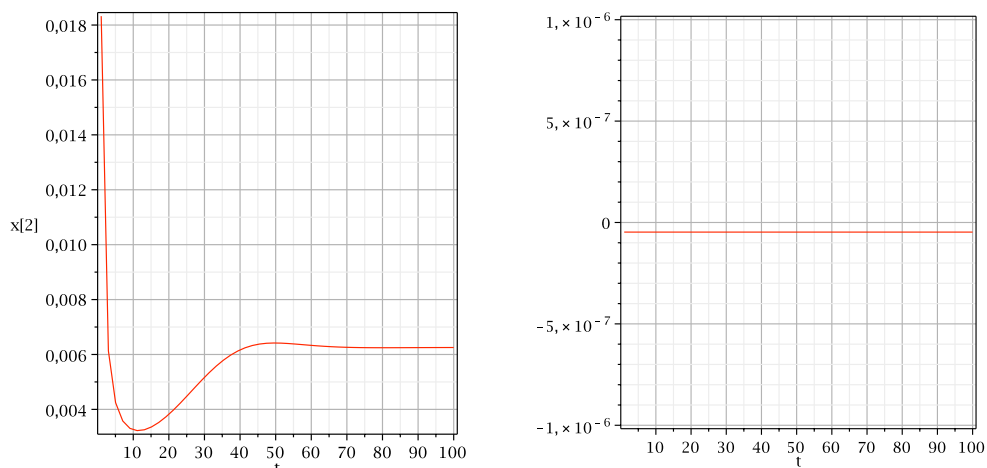
Les simulations numériques obtenues à partir de ce système d'équations pour les constantes cinétiques

$$\lambda_1 = 30.0, \lambda_2 = 10.0, \mu_1 = 0.1, \mu_2 = 0.1, c_1 = 1.0, c_2 = 1.0,$$

et les conditions initiales

$$x_1(0) = 0 \text{ (ARNm)}, \quad x_2(0) = 1 \text{ (gene)}, \quad x_4(0) = 0 \text{ (proteine)}$$

sont en figures A.6, A.7 et A.8.



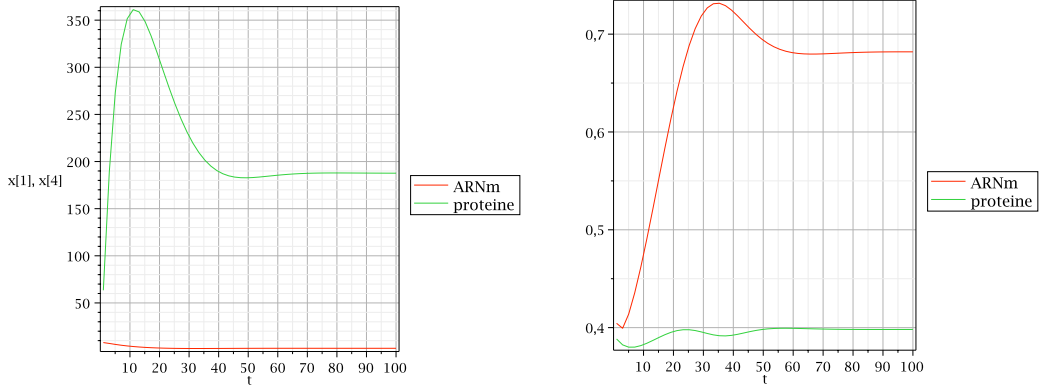
(a) Taux moyen d'expression du gène en fonction du temps t

(b) Test d'erreur sur la relation entre la moyenne et la variance

Figure A.6. Gène autorégulé (v.a. booléenne). Pour toute v.a. booléenne X , on a la relation $\text{Var } X = x(1 - x)$ pour $x := \text{E} X$, ce qui est vérifié par le test.

Moyennisation pour le gène autorégulé

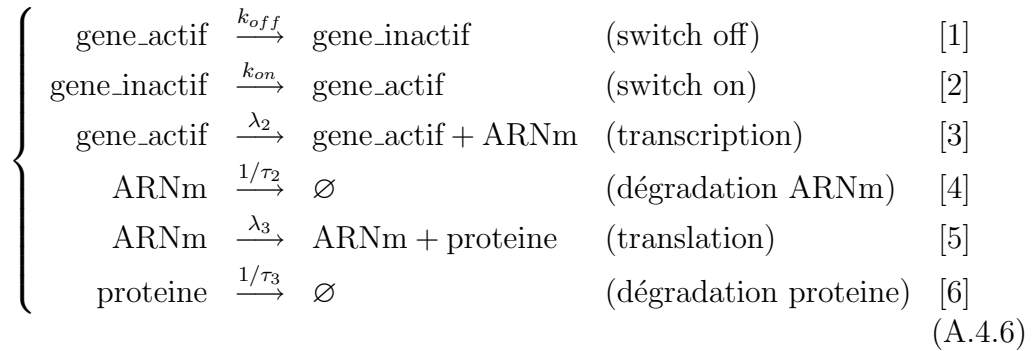
On suppose que le gène régulé bascule rapidement de l'état actif à l'état inactif. On ajuste les paramètres du modèle *moyennisé* de telle sorte que la fréquence d'oscillation du gène en régime stationnaire soit identique à celle observée sur le modèle de départ. On obtient alors un modèle d'ordre 1, iden-



(a) Nombre moyen d'ARNm et de protéines à l'instant t (b) Écart-type relatif moyen à l'instant t

Figure A.7. Evolution conjointe du nombre d'ARNm et de protéines. L'écart-type relatif d'une v.a. X est σ/x avec $\sigma^2 = \text{Var } X$ et $x := \text{E } X$.

tique¹⁰ à celui utilisé par Paulsson dans [60].

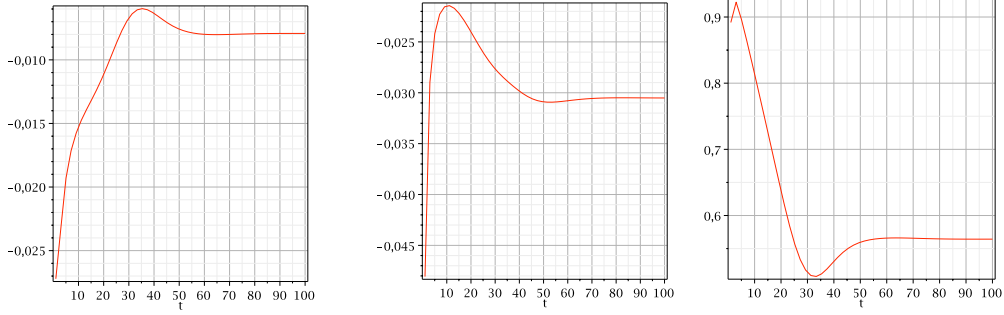


Les quatre espèces chimiques sont numérotées :

$$T_1 := \text{gene_actif}, \quad T_2 := \text{gene_inactif}, \quad T_3 := \text{ARNm}, \quad T_4 := \text{protéine}.$$

Il admet la loi de conservation $\nu_1 + \nu_2 = N$, ce qui signifie que le nombre total de “gènes” (actifs ou inactifs) est constant. En pratique, il y a le plus souvent un seul gène concerné donc $N = 1$. On effectue une réduction de modèle en ne conservant que les espèces (T_1, T_3, T_4) . L'hamiltonien du système réduit est obtenu en effectuant dans l'hamiltonien initial la substitution $\theta_2 \mapsto N - \theta_1$ et $z_2 = 1$.

¹⁰. Les notations sont inspirées de [60] : prendre $N = 1$ pour le nombre total de gènes actifs ou inactifs.



(a) Corrélation gène-ARNm à l'instant t (b) Corrélation gène-protéine à l'instant t (c) Corrélation ARNm-protéine à l'instant t

Figure A.8. Evolution des taux de corrélation au cours du temps. Le taux de corrélation $c(X, Y)$ entre 2 v.a. X et Y est défini en posant $c(X, Y) := \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma(X)\sigma(Y)}$.

On vérifie que l'hamiltonien de ce système est d'après (A.2.16)

$$H = k_{off} (z_1^{-1} - 1) \theta_1 + k_{on} (z_1 - 1) (N - \theta_1) + \lambda_2 (z_3 - 1) \theta_1 + \frac{1}{\tau_2} (z_3^{-1} - 1) \theta_3 + \lambda_3 (z_4 - 1) \theta_3 + \frac{1}{\tau_3} (z_4^{-1} - 1) \theta_4$$

Notre logiciel calcule la dynamique de la moyenne $x_i(t) := \mathbb{E} N_i(t)$ et de la matrice de covariance $x_{i,j}(t) := \text{Cov}(N_i(t), N_j(t))$, $t \in \mathbb{R}$ et $i, j = 1 \dots 4$. On trouve

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x_1(t) &= k_{on} N - (k_{on} + k_{off}) x_1(t) \\ \frac{d}{dt} x_3(t) &= \lambda_2 x_1(t) - \frac{x_3(t)}{\tau_2} \\ \frac{d}{dt} x_4(t) &= \lambda_3 x_3(t) - \frac{x_4(t)}{\tau_3} \\ \frac{d}{dt} x_{1,1}(t) &= (-k_{on} + k_{off}) x_1(t) + k_{on} N - 2(k_{on} + k_{off}) x_{1,1}(t) \\ \frac{d}{dt} x_{1,3}(t) &= -\frac{(k_{off}\tau_2 + k_{on}\tau_2 + 1) x_{1,3}(t)}{\tau_2} + \lambda_2 x_{1,1}(t) \\ \frac{d}{dt} x_{1,4}(t) &= -\frac{(k_{off}\tau_3 + k_{on}\tau_3 + 1) x_{1,4}(t)}{\tau_3} + \lambda_3 x_{1,3}(t) \\ \frac{d}{dt} x_{3,3}(t) &= \lambda_2 x_1(t) - 2 \frac{x_{3,3}(t)}{\tau_2} + 2 \lambda_2 x_{1,3}(t) + \frac{x_3(t)}{\tau_2} \\ \frac{d}{dt} x_{3,4}(t) &= \lambda_2 x_{1,4}(t) + \lambda_3 x_{3,3}(t) - \frac{(\tau_3 + \tau_2) x_{3,4}(t)}{\tau_2 \tau_3} \\ \frac{d}{dt} x_{4,4}(t) &= \lambda_3 x_3(t) - 2 \frac{x_{4,4}(t)}{\tau_3} + 2 \lambda_3 x_{3,4}(t) + \frac{x_4(t)}{\tau_3} \end{aligned}$$

Ce système différentiel ordinaire linéaire est ensuite intégré symboliquement (par transformée de Laplace) ou numériquement pour la moyenne et la matrice de covariance à tout instant t .

On peut calculer symboliquement la moyenne et la covariance en régime stationnaire en posant nulles toutes les dérivées par rapport au temps t et en résolvant le système d'équations linéaires ainsi obtenu. En notant $\tau_1 := (k_{on} + k_{off})^{-1}$ le temps caractéristique pour le changement d'activité d'un gène, on obtient

$$\begin{aligned}
 x_1 &= \frac{k_{on}}{k_{on} + k_{off}} N && \text{nombre moyen de gènes actifs} \\
 x_3 &= \tau_2 \lambda_2 x_1 && \text{nombre moyen de ARNm} \\
 x_4 &= \tau_3 \lambda_3 x_3 && \text{nombre moyen de protéines} \\
 \frac{x_{1,1}}{x_1^2} &= \left(\frac{1}{x_1} - \frac{1}{N} \right) && \text{fluctuation du nombre de gènes actifs} \\
 \frac{x_{3,3}}{x_3^2} &= \frac{1}{x_3} + \left(\frac{1}{x_1} - \frac{1}{N} \right) \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} && \text{fluctuation du nombre de ARNm} \\
 &\vdots &&
 \end{aligned}$$

On retrouve ainsi exactement les formules (4–6) figurant dans [60].

Dégradation du second ordre

Soit le système de réactions chimiques



Par une dilatation du temps, on se ramène au cas $\mu = 1$. L'hamiltonien est alors égal à

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{z^2} - 1 \right) \theta(\theta - 1) \text{ avec } \theta := z \frac{\partial}{\partial z} \\
 &= \frac{1}{2} (1 - z^2) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^2
 \end{aligned}$$

Sur cet exemple, la dynamique sur les moments $\mathbb{E} N(t)^k$, $k = 1 \dots 4$ est codée par

$$\begin{aligned} [\theta, H]_{|z=1} &= -\theta^2 + \theta \\ [\theta^2, H]_{|z=1} &= -2\theta^3 + 4\theta^2 - 2\theta \\ [\theta^3, H]_{|z=1} &= -3\theta^4 + 9\theta^3 - 10\theta^2 + 4\theta \\ [\theta^4, H]_{|z=1} &= -4\theta^5 + 16\theta^4 - 28\theta^3 + 24\theta^2 - 8\theta \end{aligned} \tag{A.4.8}$$

Lemma A.16. *Avec les notations précédentes, on a pour tout entier $m \in \mathbb{N}$*

$$[\theta^m, H]_{z=1} = \theta^m H_{|z=1} = \frac{1}{2} [(-2 + \theta)^m - \theta^m] \theta (\theta - 1) \tag{A.4.9}$$

Démonstration. On a, d'après la formule (A.2.11)

$$\theta^m z^{-2} = \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} (-2)^i z^{-2} \theta^{m-i}$$

Au point $z = 1$, cet opérateur s'écrit $(-2 + \theta)^m$, ce qui donne la formule cherchée. \square

On note la moyenne $x(t) := \mathbb{E} N(t)$ et la variance $v(t) := \text{Var} N(t)$. L'approximation développée précédemment, obtenue en tuant les moments centrés d'ordre 3, donne alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x(t) &= x(t) - v(t) - (x(t))^2 \\ \frac{d}{dt} v(t) &= -2x(t) + 4v(t) + 2(x(t))^2 - 4v(t)x(t) \end{aligned}$$

Cette méthode d'approximation fonctionne mal aux instants t où $\mathbb{E} N(t)$ est proche de 1 (voir figure A.9) et la situation ne s'améliore pas sensiblement si on conserve les moments centrés jusqu'à un ordre élevé.

Nous allons montrer comment obtenir la dynamique rigoureusement exacte sur les moments d'ordre quelconque. Supposons, à titre d'exemple, que l'état initial soit $n_0 = 8$. Au cours du temps, le processus passe par les états $\nu = 8, 6, 4, 2, 0$ et par suite la fonction $f(\nu) := \nu(\nu - 2)(\nu - 4)(\nu - 6)(\nu - 8)$ est nulle à tout instant t . Compte-tenu des lemmes A.11 et A.12, il nous faut quotienter l'algèbre $\text{Weyl}_{\mathbb{R}}(z)$ par l'idéal à gauche engendré par la relation $f(\theta) = 0$, ce qui donne

$$f(\theta) = \theta (\theta - 2) (\theta - 4) (\theta - 6) (\theta - 8) = \theta^5 - 20\theta^4 + 140\theta^3 - 400\theta^2 + 384\theta$$

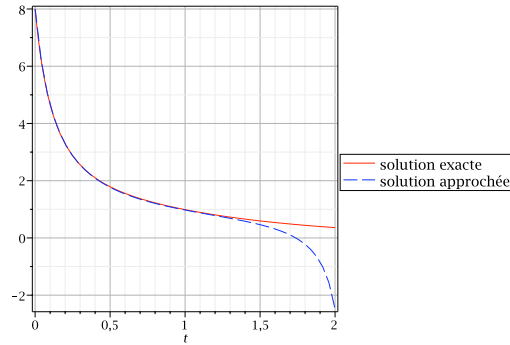


Figure A.9. Evolution de la moyenne $x(t) := \mathbb{E} N(t)$ au cours du temps, en partant de l'état $n_0 = 8$. L'approximation est mauvaise lorsque $x(t)$ se rapproche de 1.

Cette relation supplémentaire ajoutée au système (A.4.8) permet de tirer le moment d'ordre 5 en fonction des moments d'ordre au plus 4. On obtient ainsi la dynamique exacte de l'évolution, au cours du temps, des moments $x_k(t) := \mathbb{E} N^k(t)$, $k = 1 \dots 4$:

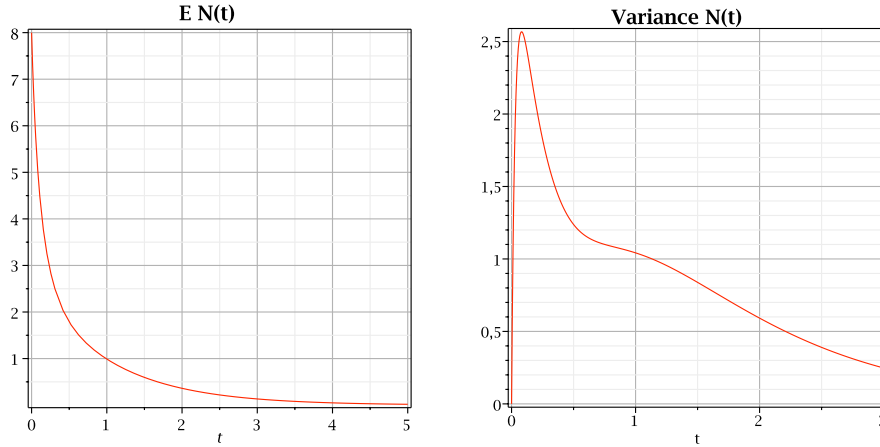
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x_1(t) &= x_1(t) - x_2(t) \\ \frac{d}{dt} x_2(t) &= -2x_1(t) + 4x_2(t) - 2x_3(t) \\ \frac{d}{dt} x_3(t) &= 4x_1(t) - 10x_2(t) + 9x_3(t) - 3x_4(t) \\ \frac{d}{dt} x_4(t) &= 1528x_1(t) - 1576x_2(t) + 532x_3(t) - 64x_4(t) \end{aligned}$$

avec la condition initiale $x_1(0) = 8$, $x_2(0) = 64$, $x_3(0) = 512$, $x_4(0) = 4096$.

Ces équations différentielles linéaires se résolvent par transformée de Laplace :

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \frac{8}{3} e^{-t} + \frac{112}{33} e^{-6t} + \frac{64}{39} e^{-15t} + \frac{128}{429} e^{-28t} \\ x_2(t) &= \frac{16}{3} e^{-t} + \frac{784}{33} e^{-6t} + \frac{1024}{39} e^{-15t} + \frac{3712}{429} e^{-28t} \\ x_3(t) &= \dots \end{aligned} \tag{A.4.10}$$

La cascade infinie est donc brisée par une méthode exacte (voir les simulations en figure A.10) !



(a) Moyenne $x(t) := EN(t)$ à l'instant t

(b) Variance $v(t)$ à l'instant t

Figure A.10. Simulation du système (A.4.7), en partant de l'état $n_0 = 8$. Les courbes correspondent très précisément à celles obtenues en partant de la résolution explicite en sect. A.4.4.

Résolution explicite de la master-équation La chaîne de Markov (A.4.7) est formée des flèches ($\nu \in \mathbb{N}$) :

$$(\nu + 2) \xrightarrow{\binom{\nu+2}{2}} (\nu) \xrightarrow{\binom{\nu}{2}} (\nu - 2)$$

Pour simplifier l'exposé, supposons que l'état de départ soit *pair* (le cas impair se traiterai de manière similaire). Dans cette hypothèse, le système reste à tout instant t dans un état pair. On réduit l'espace d'état en supprimant les états impairs qui sont inaccessibles. On obtient la chaîne de Markov

$$(k + 1) \xrightarrow{\lambda_{k+1}} (k) \xrightarrow{\lambda_k} (k - 1)$$

en posant, pour tout entier naturel k

$$\nu = 2k \text{ et } \lambda_k = \binom{\nu}{2} = 2k^2 - k \quad (\text{A.4.11})$$

Le calcul donne $\lambda := (0, 1, 6, 15, 28, \dots)$.

Soit $\pi_k(t) := \text{prob}(N(t) = 2k)$. La master-équation s'écrit maintenant

$$\dot{\pi}_k(t) = -\lambda_k \pi_k(t) + \lambda_{k+1} \pi_{k+1}(t), \quad k \in \mathbb{N} \quad (\text{A.4.12})$$

Elle est de la forme $\dot{\pi}(t) = \pi(t)A$ où la matrice A est de la forme

$$A = \begin{pmatrix} -\lambda_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \lambda_1 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_3 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

La solution de la master-équation (A.4.12) est $\pi(t) = \pi(0)P(t)$ où la matrice $P(t) := \exp(tA)$ est solution de l'équation différentielle

$$\begin{cases} \dot{P}(t) = AP(t) \\ P(0) = 1 \end{cases} \quad (\text{A.4.13})$$

Considérons la transformation de Laplace de la matrice exponentielle $P(t)$

$$\widehat{P}(s) = \int_0^\infty \exp(-st) P(t) dt$$

Cette transformée vérifie l'équation non différentielle $s\widehat{P}(s) - 1 = A\widehat{P}(s)$ d'où l'on tire

$$\widehat{P}(s) = (s\text{Id} - A)^{-1}.$$

La matrice de transfert $\widehat{P}(s)$ est triangulaire inférieure de la forme

$$\widehat{P}(s) = \begin{pmatrix} \frac{1}{s + \lambda_0} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{\lambda_1}{(s + \lambda_0)(s + \lambda_1)} & \frac{1}{s + \lambda_1} & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{\lambda_1\lambda_2}{(s + \lambda_0)\cdots(s + \lambda_2)} & \frac{\lambda_2}{(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)} & \frac{1}{s + \lambda_2} & 0 & \cdots \\ \frac{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}{(s + \lambda_0)\cdots(s + \lambda_3)} & \frac{\lambda_2\lambda_3}{(s + \lambda_1)\cdots(s + \lambda_3)} & \frac{\lambda_3}{(s + \lambda_2)(s + \lambda_3)} & \frac{1}{s + \lambda_3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

L'élément en position $i, j \in \mathbb{N}$ est donné par la formule générale :

$$\widehat{P}_{ij}(s) = \frac{1}{s + \lambda_i} \cdot \frac{\lambda_{i+1}}{s + \lambda_{i+1}} \cdot \frac{\lambda_{i+2}}{s + \lambda_{i+2}} \cdots \frac{\lambda_j}{s + \lambda_j} \text{ pour } i \leq j \text{ et } 0 \text{ sinon.}$$

On sait que la transformation de Laplace inverse de la fraction $\frac{1}{s+\lambda}$ est la fonction $\exp(-\lambda t)$. On dispose de formules closes pour décomposer en éléments simples les éléments de la matrice de transfert $\widehat{P}(s)$:

$$\left(\prod_{k=a}^b (s + \lambda_k) \right)^{-1} = \sum_{k=a}^b \frac{\Delta_{ab}(k)}{s + \lambda_k} \text{ avec } \Delta_{ab}(k) := \prod_{k'=a\dots b, k' \neq k} \frac{1}{\lambda_{k'} - \lambda_k}$$

Ainsi, par exemple, la transformée de Laplace inverse de $\widehat{f}(s) := \frac{1}{(s + \lambda_0)(s + \lambda_1)(s + \lambda_2)}$ vaut

$$f(t) = \frac{\exp(-\lambda_0 t)}{(\lambda_1 - \lambda_0)(\lambda_2 - \lambda_0)} + \frac{\exp(-\lambda_1 t)}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_0 - \lambda_1)} + \frac{\exp(-\lambda_2 t)}{(\lambda_0 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_2)}$$

La formule suivante détermine la matrice $P(t) := \exp(tA)$:

$$P_{ij}(t) = \lambda_{i+1} \lambda_{i+2} \dots \lambda_j \sum_{k=i}^j \Delta_{ij}(k) e^{-\lambda_k t} \quad (i, j \in \mathbb{N}).$$

Les probabilités $\pi_i(t) := \text{prob}(N(t) = 2i)$, $i \in \mathbb{N}$, sont donc des combinaisons linéaires en les exponentielles $\exp(-\lambda_k t)$ où la valeur propre λ_k est définie en (A.4.11), les coefficients dépendants de l'état de départ n_0 en $t = 0$. Pour $n_0 = 8$, on obtient

$$\begin{aligned} \pi_0(t) &= 1 - \frac{4}{3} e^{-t} + \frac{14}{33} e^{-6t} - \frac{4}{39} e^{-15t} + \frac{5}{429} e^{-28t} \\ \pi_1(t) &= \frac{4}{3} e^{-t} - \frac{28}{11} e^{-6t} + \frac{20}{13} e^{-15t} - \frac{140}{429} e^{-28t} \\ \pi_2(t) &= \frac{70}{33} e^{-6t} - \frac{140}{39} e^{-15t} + \frac{210}{143} e^{-28t} \\ \pi_3(t) &= \frac{28}{13} e^{-15t} - \frac{28}{13} e^{-28t} \\ \pi_4(t) &= e^{-28t} \end{aligned}$$

Ces formules permettent de calculer explicitement les moments d'ordre $k \in \mathbb{N}$. On retrouve exactement les formules (A.4.10).

A.5 Conclusion

En reprenant des techniques classiques de physique mathématique (séries génératrices en plusieurs variables, algèbres de Lie etc.), on a montré comment calculer l'évolution au cours du temps des moments de la variable aléatoire

$$N(t) := (N_1(t), \dots, N_n(t))$$

qui compte le nombre de jetons présents à l'instant t dans les diverses places d'un réseau de Pétri stochastique.

Ces réseaux sont décrits, non par des graphes bipartis comme c'est la coutume, mais par des systèmes de réactions chimiques, ce qui est plus naturel pour l'utilisateur. Un tel réseau est complètement décrit par un hamiltonien H qui vit une algèbre de Weyl engendrée par n variables indépendantes.

L'algorithme, implanté en MAPLE, permet de traiter des exemples significatifs dans la modélisation des réseaux de régulation de gènes. Ceci est du au bon équilibre entre la partie numérique et la partie symbolique de l'algorithme.

La partie symbolique est basée sur une implantation des calculs de base dans l'algèbre de Weyl à coefficients dans le corps librement engendré $\mathbb{Q}[c_1, c_2, \dots, c_m]$. Dans certains cas, quand la valeur de certaines composantes de $N(t)$ est bornée supérieurement, les calculs sont effectués en quotientant cette algèbre de Weyl par un idéal à gauche, ce qui est possible si l'on dispose d'une implantation [17] des bases de Groebner (dans les algèbres de Weyl).

Le problème de la *cascade infinie* (connu en physique statistique), a été abordé à partir de la filtration canonique de l'algèbre de Weyl, mais les techniques d'approximation pour briser cette cascade doivent encore être étudiées plus à fond.

Nous avons montré comment la méthode de Wei-Norman, permet dans certains cas, de résoudre symboliquement l'analogie de l'équation de Schrödinger

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi(t, z) = H \varphi(t, z).$$

Nous sommes en train d'essayer de généraliser cette méthode pour aborder concrètement le calcul de la probabilité $P_{\nu, \nu'}(t)$ de transiter de l'état ν à l'état ν' en un temps t . Ce problème difficile (mais important pour les applications) contient la question de l'accessibilité dans un réseau de Pétri non temporisé, problème que l'on sait décidable.

List of Algorithms

| | |
|--|-----|
| 3.2.1 VISIT ($x : X$) | 91 |
| 3.2.2 RELABEL ($x : X$) | 91 |
| 3.3.1 GENERATE () | 98 |
| 3.3.2 DISPATCH ($s : integer$) | 99 |
| 3.3.3 TRYCLOSEDWHITE ($s : integer$) | 100 |
| 3.3.4 TRYFORWARD ($s : integer$) | 101 |
| 3.3.5 TRYCLOSEDBLACK ($s : integer$) | 102 |
| 3.3.6 TRYBACKWARD ($s, t : integer$) | 102 |
| 3.3.7 RECURSE () | 103 |

Table des figures

| | | |
|-----|---|-----|
| 1.1 | Tessellation of the Poincaré half-plane \mathcal{H} by the fundamental domain \mathcal{F} under the action of the modular group $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ | 25 |
| 2.1 | The five base cases of the recursive decomposition. | 69 |
| 2.2 | The first eight inductive cases of the recursive decomposition. | 70 |
| 2.3 | The last two inductive cases of the recursive decomposition. | 71 |
| 2.4 | Level line plot of the real part of $h(x + iy)$ | 77 |
| 3.1 | A trivalent diagram is conveniently described by a diagram like the one above, hence the name. The actual cyclic orientation of the vertices are conveniently rendered implicit by adopting the counter-clockwise orientation of the figure. | 86 |
| 3.2 | If one gives as input to the relabeling algorithm (Algorithm 3.2.2) the rooted diagram shown on the left with an arbitrary initial labeling on the arbitrary alphabet $X = \{a, b, c, d, e, f, g, h, i\}$, it produces the characteristic relabeling shown on the right with numbers from 1 to 9 according to the depth-first traversal order of Algorithm 3.2.1. Note the <i>natural cutting</i> between the edges labeled by 2 and 8 that arises from the depth-first traversal. | 90 |
| 3.3 | Overall structure of the generating algorithm. | 96 |
| 3.4 | A picture of the result of the action of the two elementary moves A and B on the edges incident to the various sorts of vertices. | 108 |

| | | |
|------|--|-----|
| 3.5 | We see in this example the result of iterating the elementary move T on the edges of a binary tree. The edges are labeled by a_k where $a_{k+1} = a_k \cdot T$. This can be used to implement depth-first traversals in a purely iterative way. | 109 |
| A.1 | Réseau de Pétri du système (A.1.2) | 139 |
| A.2 | Le processus de naissances et de morts défini par (A.2.2) | 141 |
| A.3 | Gène autorégulé | 148 |
| A.4 | La chaîne de Markov associée à la file $M/M/\infty$ (A.3.6) | 152 |
| A.5 | La file $M/M/\infty$ pour un état initial $n_0 = 5$, $\lambda = 2$ et $\mu = 1$. En régime stationnaire, on montre que la v.a. $N(t)$ suit la loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda/\mu)$. On en déduit que $EN(t) = \text{Var } N(t)$, ce qui est vérifié sur cette simulation. | 163 |
| A.6 | Gène autorégulé (v.a. booléenne). Pour toute v.a. booléenne X , on a la relation $\text{Var } X = x(1 - x)$ pour $x := EX$, ce qui est vérifié par le test. | 169 |
| A.7 | Evolution conjointe du nombre d'ARNm et de protéines. L'écart-type relatif d'une v.a. X est σ/x avec $\sigma^2 = \text{Var } X$ et $x := EX$ | 170 |
| A.8 | Evolution des taux de corrélation au cours du temps. Le taux de corrélation $c(X, Y)$ entre 2 v.a. X et Y est défini en posant $c(X, Y) := \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma(X)\sigma(Y)}$ | 171 |
| A.9 | Evolution de la moyenne $x(t) := EN(t)$ au cours du temps, en partant de l'état $n_0 = 8$. L'approximation est mauvaise lorsque $x(t)$ se rapproche de 1. | 174 |
| A.10 | Simulation du système (A.4.7), en partant de l'état $n_0 = 8$. Les courbes correspondent très précisément à celles obtenues en partant de la résolution explicite en sect. A.4.4. | 175 |

Liste des tableaux

| | | |
|------|---|-----|
| 1.1 | Trivalent diagrams of size up to five, up to isomorphism. | 37 |
| 1.2 | Trivalent diagrams of size six, up to isomorphism. | 38 |
| 1.3 | Trivalent diagrams of size seven, up to isomorphism. | 38 |
| 1.4 | Trivalent diagrams of size eight, up to isomorphism. | 39 |
| 1.5 | Trivalent diagrams of size nine, up to isomorphism. | 40 |
| 1.6 | Order six recurrence relation satisfied by the coefficients of the series $D_3^*(t)$ | 51 |
| 1.7 | Order fifty development of the generating series $\tilde{D}_3^\bullet(t)$ | 52 |
| 1.8 | Cycle index series of the species S_2 | 57 |
| 1.9 | Cycle index series of the species S_3 | 57 |
| 1.10 | Cycle index series of the species $S_2 \times S_3$ | 58 |
| 1.11 | Order fifty development of the generating series $\tilde{D}_3(t)$ | 64 |
| 1.12 | Five hundred order terms of the series $\tilde{D}_3^\bullet(t)$ and $\tilde{D}_3(t)$ | 64 |
| 3.1 | Trivalent diagrams of size up to five, up to isomorphism. | 110 |
| 3.2 | Trivalent diagrams of size six, up to isomorphism. | 110 |
| 3.3 | Trivalent diagrams of size seven, up to isomorphism. | 111 |
| 3.4 | Trivalent diagrams of size eight, up to isomorphism. | 111 |
| 3.5 | Trivalent diagrams of size nine, up to isomorphism. | 112 |
| 3.6 | Order fifty development of the generating series $\tilde{D}_3^\bullet(t)$ giving as the coefficient of t^n the number of connected rooted trivalent diagrams with n edges (A005133) which is also the number of index n subgroups in the modular group $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ | 113 |

| | | |
|------|---|-----|
| 3.7 | Order fifty development of the generating series $\tilde{D}_3(t)$ giving as the coefficient of t^n the number of connected unrooted trivalent diagrams with n edges (A121350) which is also the number of conjugacy classes of index n subgroup in the modular group $\text{PSL}_2(\mathbb{Z})$ | 114 |
| 3.8 | The three triangular maps with two faces together with their incidence diagrams. The triangular map in the middle row corresponds to the only way to build a torus using two triangles, and the two others, top and bottom rows, correspond to the two different ways to build a sphere using two triangles. | 118 |
| 3.9 | The eleven triangular maps with four faces. According to Table 3.15, six of them are spheres while five of them are toruses. This is easily checked using Euler's formula $\chi_E = n_v - n_e + n_f = 2 - 2g$ [32, chap. 8, sec. 8a]. | 119 |
| 3.10 | The eighty-one triangular maps with six faces (first part). | 120 |
| 3.11 | The eighty-one triangular maps with six faces (last part, continued from Table 3.10). | 121 |
| 3.12 | Development of the generating series $\tilde{M}_3^\bullet(t)$, up to order one hundred and twenty. It gives as the coefficient of t^{6n} the number of connected unrooted unlabeled triangular maps with $6n$ arcs, thus $3n$ undirected edges and $2n$ triangular faces (A062980). If we denote by a_n that coefficient, the recurrence is as follows: $a_1 = 5$ and for $n \geq 1$, $a_{n+1} = (6n + 6) a_n + \sum_{k=1}^{n-1} a_k a_{n-k}$ | 122 |
| 3.13 | Order one hundred and twenty development of the generating series $\tilde{M}_3(t)$ giving the number of connected unrooted unlabeled triangular maps with $6n$ arcs, thus $3n$ undirected edges and $2n$ triangular faces (A129114). | 122 |
| 3.14 | The number of <i>rooted</i> triangular maps by genus (0 to 4) and number of faces (2 to 14). | 123 |
| 3.15 | The number of <i>unrooted</i> triangular maps by genus (0 to 4) and number of faces (2 to 14). | 123 |

| | | |
|------|---|-----|
| 3.16 | Série $\tilde{M}^\bullet(t, u_1, u_2, \dots)$ dont le coefficient du monôme $u_1^{n_1} \dots u_k^{n_k} t^n$ est le nombre exact de cartes combinatoires non-étiquetées enracinées comportant exactement n_1 boucles, n_2 fuseaux, n_3 faces triangulaires... n_k faces de degré k et n arêtes. Chaque monôme vérifie la contrainte combinatoire $2n = n_1 + \dots + kn_k$ | 129 |
| 3.17 | Série $\tilde{M}(t, u_1, u_2, \dots)$ dont le coefficient du monôme $u_1^{n_1} \dots u_k^{n_k} t^n$ est le nombre exact de cartes combinatoires non-étiquetées non-enracinées comportant exactement n_1 boucles, n_2 fuseaux, n_3 faces triangulaires... n_k faces de degré k et n arêtes. Chaque monôme vérifie la contrainte combinatoire $2n = n_1 + \dots + kn_k$ | 130 |
| 3.18 | Hypergeometric nature of the generating series of the labeled unrooted not necessarily connected combinatorial maps under several degree constraints. | 131 |
| 3.19 | Generating series of the connected unlabeled rooted combinatorial maps under various degree constraints. | 132 |
| 3.20 | Generating series of the connected unlabeled unrooted combinatorial maps under various degree constraints. | 133 |

Bibliographie

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, 1965.
- [2] G. B. Airy. On the intensity of light in the neighbourhood of a caustic. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 6 :379–402, 1838.
- [3] C. Altafini. Explicit Wei-Norman formulae for matrix Lie groups via Putzer’s method. *Systems Control Lett.*, 54(11) :1121–1130, 2005.
- [4] D. Arquès. Une relation fonctionnelle nouvelle sur les cartes planaires pointées. *J. Combin. Theory Ser. B*, 39 :27–42, 1985.
- [5] D. Arquès and J.-F. Béraud. Énumération des cartes pointées sur la bouteille de Klein. *Inform. Théor. Appl.*, 31 :385–409, 1997.
- [6] D. Arquès and I. Jacques. Classification des cartes pointées de genre 1 et relation fonctionnelle associée. *Theoret. Comput. Sci.*, 117 :45–65, 1993.
- [7] R. Bacher and A. Vdovina. Counting 1-vertex triangulations of oriented surfaces. *Discrete Math.*, 246(1-3) :13–27, 2002.
- [8] D. Bar-Nathan. On associators and the grothendieck-teichmuller group I. *Selecta Mathematica, New Series*, 4 :183–212, 1998.
- [9] G. V. Belyi. On galois extensions of a maximal cyclotomic field. *Math. USSR Izvestija*, 14(2) :247–256, 1980.
- [10] E.A. Bender and E.R. Canfield. The asymptotic number of rooted maps on a surface. *J. Combin. Theory Ser. A*, 43 :244–257, 1986.
- [11] E.A. Bender and E.R. Canfield. The number of rooted maps on an orientable surface. *J. Combin. Theory Ser. B*, 53 :293–299, 1991.
- [12] E.A. Bender, E.R. Canfield, and L.B. Richmond. The asymptotic number of rooted maps on a surface ii. enumeration by vertices and faces. *J. Combin. Theory Ser. A*, 63 :318–329, 1993.

- [13] E.A. Bender, E.R. Canfield, and R.W. Robinson. The enumeration of maps on the torus and the projective plane. *Can. Math. Bull.*, 31 :257–271, 1988.
- [14] F. Bergeron, G. Labelle, and P. Leroux. *Théorie des espèces et combinatoire des structures arborescentes*. LACIM Montréal, 1994.
- [15] F. Bergeron, G. Labelle, and P. Leroux. *Combinatorial Species and Tree-like Structures*. Cambridge University Press, 1998. English edition of [14].
- [16] W.G. Brown. On the enumeration of non-planar maps. *Mem. Amer. Math. Soc.*, 65, 1966.
- [17] F. Chyzak. Groebner bases, symbolic summation and symbolic integration. In B. Buchberger and F. Winkler, editors, *Groebner Bases and Applications (Proc. of the Conference 33 Years of Gröbner Bases)*, volume 251 of *London Mathematical Society Lecture Notes Series*, pages 32–60. Cambridge University Press, 1998. ISBN 0-521-63298-6.
- [18] R. Cori. *Un code pour les graphes planaires et ses applications*, volume 27 of *Astérisque*. Société Mathématique de France, 1975.
- [19] R. Cori and A. Machì. Maps, hypermaps and their automorphisms : a survey I, II, III. *Expos. Math.*, 10(5) :403–427, 429–447, 449–467, 1992.
- [20] D. Arquès. Relations fonctionnelles et dénombrement des cartes pointées sur le tore. *J. Combin. Theory Ser. B*, 43 :244–257, 1987.
- [21] D. Arquès and A. Giorgetti. Counting rooted maps on a surface. *Theoret. Comput. Sci.*, 234 :255–272, 2000.
- [22] P. Deligne. Formes modulaires et représentations de $gl(2)$. In *Proc. Antwerpen Conference*, volume 2, page 55–105. Springer-Verlag, 1966.
- [23] Warren Dicks and M.J. Dunwoody. *Groups acting on graphs*, volume 17. Cambridge University Press, 1989.
- [24] J. Dixmier. *Algèbres enveloppantes*. Paris : Bordas (Gauthier Villars), 1974.
- [25] R. Douady and A. Douady. *Algèbre et théories galoisiennes*. Cassini, France, 2003.
- [26] V. G. Drinfel’d. Quasi-hopf algebras. *Leningrad Math. J.*, 1 :1419–1457, 1990.
- [27] V. G. Drinfel’d. On quasitriangular quasi-hopf algebras and a group closely connected with $\text{Gal}(\bar{\mathbb{Q}}/\mathbb{Q})$. *Leningrad Math. J.*, 2 :829–860, 1991.

- [28] S. Eilenberg and S. Mac Lane. The general theory of natural equivalences. *Trans. A. M. S.*, 58 :231–244, 1945.
- [29] P. Érdi and J. Tóth. *Mathematical models of chemical reactions*. Princeton University Press, 1989.
- [30] L. Euler. *Introduction to Analysis of the Infinite*. Springer, 1998. transl. by J. Blanton.
- [31] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications. Vol. I*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1957. 2nd ed.
- [32] W. Fulton. *Algebraic topology*. Springer, 1995.
- [33] A. Grothendieck. Esquisse d'un programme. In L. Schneps and P. Lochak, editors, *Geometric Galois Actions Vol. I*, number 242 in London Math. Soc. Lecture Notes, pages 5–48. Cambridge Univ. Press, 1997.
- [34] F. Harary and E.M. Palmer. *Graphical Enumeration*. Academic Press New York/London, 1973.
- [35] G. H. Hardy and S. Ramanujan. Asymptotic formulae in combinatory analysis. *Proc. London Math. Soc.*, 17 :75–115, 1918.
- [36] J. Harer and D. Zagier. The euler characteristic of the moduli space of curves. *Invent. Math.*, 85 :457–486, 1986.
- [37] A. Joyal. Une théorie combinatoire des séries formelles. *Adv. Math.*, 42 :1–82, 1981.
- [38] A. V. Kalinkin. Markov branching processes with interaction. *Russian Math. Surveys*, 57(2(344)) :241–304, 2002.
- [39] D. König. Sur les correspondances multivoques des ensembles. *Fundamenta Math.*, 8 :114–134, 1926.
- [40] F. Klein. *Lectures on the Icosahedron and the Solution of Equations of the Fifth Degree*. Dover New York, 1956. 2nd and rev. ed.
- [41] D. E. Knuth. Dancing links. In *Millennial Perspectives in Computer Science*, pages 187–214, 2000. available online at : arXiv :cs/0011047v1 [cs.DS].
- [42] M. Koern, T. C. Elston, W. J. Blake, and J. J. Collins. Stochasticity in gene expression : from theories to phentypes. *Nature genetics*, 6 :451–464, june 2005.
- [43] L.M. Koganov, V.A. Liskovets, and T.R.S. Walsh. Total vertex enumeration in rooted planar maps. *Ars Comb.*, 54, 1999.

- [44] M. Kontsevich. Intersection theory on the moduli space of curves and the matrix airy function. *Commun. Math. Phys.*, 147 :1–23, 1992.
- [45] M. Krikun. Enumeration of triangulations by genus (incomplete draft). Private communication, 2007.
- [46] G. Labelle. Une nouvelle démonstration combinatoire des formules d’inversion de Lagrange. *Adv. Math.*, 42 :217–247, 1981.
- [47] S.K. Lando and A.K. Zvonkin. *Graphs on Surfaces and Their Applications*. Springer-Verlag, 2004.
- [48] S.K. Lando and A.K. Zvonkine. *Graphs on Surfaces and Their Applications*. Springer-Verlag, 2004.
- [49] S. Mac Lane. *Categories for the working mathematician*. Springer, 1998.
- [50] V. A. Liskovets. A census of nonisomorphic planar maps. In L. Lovasz and V.T. Sos, editors, *Algebraic methods in graph theory*, volume II, 1981. North-Holland, Amsterdam.
- [51] V. A. Liskovets, Z. Gao, and N. Wormald. Enumeration of unrooted odd-valent regular planar maps. To appear, 2005.
- [52] V.A. Liskovets and T.R.S. Walsh. Counting unrooted loopless planar maps. *Eur. J. Comb.*, 26(5) :651–663, 2005.
- [53] R. C. Lyndon and P. E. Schupp. *Combinatorial Group Theory*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, 2001. Reprint of the 1977 edition.
- [54] A. Mednykh. A new method for counting coverings over manifold with finitely generated fundamental group. *Doklady Mathematics*, 74(1) :498–502, 2006.
- [55] A. Mednykh and R. Nedela. Counting unrooted hypermaps on closed orientable surface. *Formal Power Series and Algebraic Combinatorics*, 2006.
- [56] A. Mednykh and R. Nedela. Enumeration of unrooted maps of a given genus. *J. Comb. Theory Ser. B*, 96(5) :706–729, 2006.
- [57] R. C. Mullin, E. Nemeth, and P. J. Schellenberg. The enumeration of almost cubic maps. In R. C. Mullin et al., editor, *Proceedings of the Louisiana Conference on Combinatorics*, volume 1 of *Graph Theory and Computer Science*, pages 281–295, 1970.
- [58] Newman and Morris. Asymptotic formulas related to free products of cyclic groups. *Math. Comp.*, 30(136) :838–846, 1976.

- [59] M. Ozbudak, M. Thattai, I. Kurtser, and A. D. Grossman. Regulation of noise in the expression of a single gene. *Nature genetics*, 31 :69–73, may 2002.
- [60] J. Paulsson. Models of stochastic gene expression. *Physics of life rev.*, 2 :157–175, may 2005.
- [61] G. Pólya. Kombinatorische anzahlbestimmungen für gruppen, graphen und chemische verbindungen. *Acta Math.*, 68 :145–254, 1937.
- [62] G. Pólya and R. C. Read. *Combinatorial enumeration of groups, graphs and chemical compounds*. Springer Verlag, New York, 1987.
- [63] C. Reutenauer. *Aspects mathématiques des réseaux de Pétri*. Masson, 1989.
- [64] L. Schneps. Dessins d’enfants on the Riemann sphere. In L. Schneps and P. Lochak, editors, *The Grothendieck Theory of Dessins d’Enfant*, number 200 in London Math. Soc. Lecture Notes, pages 5–48. Cambridge Univ. Press, 1994.
- [65] J.P. Serre. *Cours d’arithmétique*. Presses Universitaires de France, 1970.
- [66] J.P. Serre. *Trees*. Springer Monographs in Math. Springer-Verlag, 2003.
- [67] N. J. A. Sloane. The on-line encyclopedia of integer sequences. Available on the net at : <http://www.research.att.com/~njas/sequences/>, 2005.
- [68] W. Stothers. The number of subgroups of given index in the modular group. *Proc. Royal Soc Edinburgh*, 78A :105–112, 1977.
- [69] G. t’Hooft. A planer diagram theory for strong interactions. *Nuclear Physics B*, 72 :461–473, 1974.
- [70] W. Thurston. Three-dimensional manifolds, kleinian groups and hyperbolic geometry. *Bull. Amer. Math. Soc., New Series*, 6 :357–381, 1982.
- [71] W. T. Tutte. A census of planar triangulations. *Canad. J. Math.*, 14 :21–38, 1962.
- [72] W. T. Tutte. A census of planar maps. *Canad. J. Math.*, 15 :249–271, 1963.
- [73] W. T. Tutte. On the enumeration of planar maps. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 74 :64–74, 1968.
- [74] W. T. Tutte. The enumerative theory of planar maps. In J. N. Srivastava, editor, *A Survey of Combinatorial Theory*, pages 437–448. North-Holland, 1973.

- [75] S. A. Vidal. Asymptotics of the airy function and triangular maps decomposition. In preparation.
- [76] S. A. Vidal. Multiparametric enumeration of unrooted combinatorial maps. In preparation.
- [77] S. A. Vidal. Sur la classification et le dénombrement des sous-groupes du groupe modulaire et de leurs classes de conjugaison. *Pub. IRMA, Lille*, 66(II) :1–35, 2006. available online at : arXiv :math/0702223v1 [math.CO].
- [78] S. A. Vidal. An optimal algorithm to generate rooted rooted trivalent diagrams and triangular maps. To appear in *Theoretical Computer Science.*, 2010.
- [79] S. A. Vidal and M. Petitot. Counting rooted and unrooted triangular maps. To appear in the *Journal of Nonlinear Systems and Applications.*, 2010.
- [80] T. R. S. Walsh. *Combinatorial Enumeration of Non-Planar Maps*. PhD thesis, Univ. of Toronto, 1971.
- [81] T. R. S. Walsh. Counting rooted maps by genus III. *J. Comb. Th.*, 18(2) :222–259, 1975.
- [82] T. R. S. Walsh. Hypermaps versus bipartite maps. *J. Comb. Th.*, 18 :155–163, 1975.
- [83] T. R. S. Walsh. Generating nonisomorphic maps without storing them. *SIAM Journal on Algebraic and Discrete Methods*, 4(2) :161–178, 1983.
- [84] T. R. S. Walsh and A. B. Lehman. Counting rooted maps by genus. *J. Comb. Th.*, 13 :122–141 and 192–218, 1972.
- [85] G. N. Watson. The harmonic functions associated with the parabolic cylinder. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 17(2), 1918.
- [86] J. Wei and E. Norman. On global representations of the solutions of linear differential equations as a product of exponentials. *Proc. Am. Math. Soc.*, 15 :327–334, 1964.
- [87] Melanie Wood. Belyi-extending maps and the galois action on dessins d’enfants, 2003. to appear.
- [88] Y.N. Yeh. The calculus of virtual species and \mathbb{K} -species. In *Combinatoire énumérative*, pages 351–359. Springer-Verlag, 1966.

- [89] Y.N. Yeh. Solutions to some problems in the theory of combinatorial species. *Annales des Sciences Mathématiques du Québec*, 11 :363–369, 1987.