Arbres et dérivée d'une fonction composée

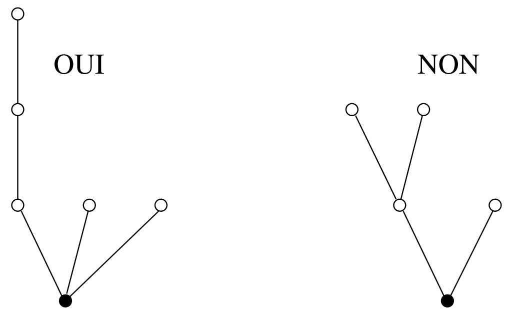
Nous allons voir ici comment l'on peut représenter les dérivées successives d'une fonction composée par un ensemble d'arbres finis. f et g désigneront deux fonction indéfiniment dérivables, et nous allons nous intéresser au dérivées successives de $f \circ g$.

1 Représentation par des arbres

1.1 Une classe d'arbres

Un arbre est par définition un graphe connexe sans cycle. Parler d'arbre avec racine, c'est distinguer un sommet particulier de l'arbre. On peut alors représenter les sommets de l'arbre sur différent niveaux, en fonction de leur distance à la racine.

Nous allons nous restreindre ici à une sous-classe particulière $\mathcal{T}$ de l'ensemble des arbres finis avec racine : les arbres avec racine et sans noeuds ailleurs qu'à la racine. Autrement dit, seule la racine peut avoir plusieurs fils.



Nous noterons également $\mathcal{T}_n$ l'ensemble des arbres de $\mathcal{T}$ à $n+1$ sommets (la racine plus n descendants). Ainsi, l'arbre précédent (celui de gauche) est dans $\mathcal{T}_5$.

Dans toute la suite, nous utiliserons le terme de *branche* pour désigner l'ensemble formé par l'un des fils de la racine et tout ses descendants. Le nombre de branche est donc le nombre de fils de la racine. La *hauteur* d'une branche est le nombre de sommets de cette branche. Enfin, le terme *feuille* désigne le sommet qui est à l'extrémité d'une branche.

1.2 Correspondance avec des fonctions

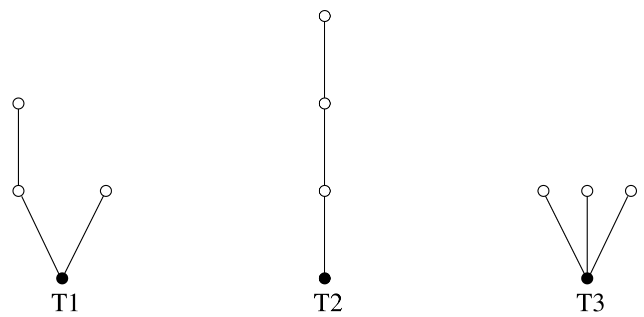
À chaque arbre T de $\mathcal{T}$, nous allons associer une fonction. Si r désigne le nombre de fils de la racine, l'arbre T possède exactement r branches. Soient

$i_1, i_2, \ldots, i_r$ leurs longueurs respectives. Alors nous allons associer à T le produit :

$$\left(f^{(r)} \circ g\right) \times g^{(i_1)} \times \ldots \times g^{(i_r)}$$

C'est-à-dire que l'on regarde le nombre d'embranchements à la racine, qui nous donne l'ordre de dérivation de la fonction f. Ensuite, à chaque feuille de l'arbre on associe un terme du produit, qui est une dérivée de g d'ordre la hauteur de la feuille.

Exemple :



À l'arbre T_1 correpond le produit $(f'' \circ g)\,.g''.g'$. À T_2 correspond $(f' \circ g)\,.g'''$, et à T_3 correspond $(f''' \circ g)\,.(g')^3$.

2 L'opération de dérivation

2.1 Dérivée d'un produit de fonctions

La dérivée d'un produit de fonctions, c'est la somme de produits déduits du produit d'origine par remplacement de l'un des termes du produit par sa dérivée : la dérivée d'un produit $\prod_{i=1}^{n} f_i$ s'écrit ainsi

$$\sum_{i=1}^{n} f_i' \cdot \prod_{j \neq i} f_j$$

Dans le cas particulier des produits qui nous intéressent, la dérivée d'un produit de la forme $\left(f^{(r)} \circ g\right).g^{(i_1)}.\ldots.g^{(i_r)}$ s'écrit :

$$\left(f^{(r+1)} \circ g\right) \cdot g' \cdot \prod_{k=1}^{r} g^{(i_k)} + \sum_{j=1}^{r} \left(f^{(r)} \circ g\right).g^{(i_j+1)}.\prod_{k \neq j} g^{(i_k)}$$

Nous allons voir que chaque terme de cette somme correspond à un arbre, et qu'il y a une opération simple qui nous permet de passer de l'arbre du produit $\left(f^{(r)} \circ g\right).g^{(i_1)}.\ldots.g^{(i_r)}$ à tous les arbres des termes sommés dans sa dérivée.

2.2 Opération sur les arbres

En effet, nous avons vu que l'arbre de $\left(f^{(r)} \circ g\right).g^{(i_1)}.\ldots.g^{(i_r)}$ était l'arbre à r branches, de longueurs respectives $i_1, i_2, \ldots, i_r$.

Or, l'arbre correspondant au premier terme de la dérivée, à savoir le produit $\left(f^{(r+1)} \circ g\right).g'.g^{(i_1)}.\ldots.g^{(i_r)}$, est l'arbre à $r+1$ branches, de longueurs respectives $1, i_1, \ldots, i_r$. Pour passer de l'arbre précédent à celui-ci, on a tout simplement rajouté un fils à la racine.

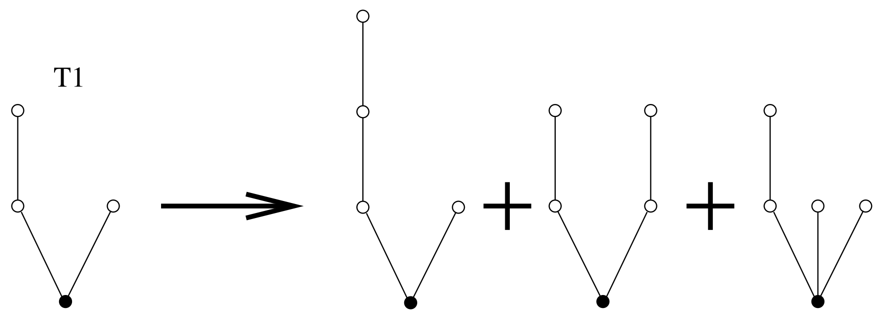
Ensuite, pour chaque autre terme de la dérivée, *i.e.* chaque terme de la forme $\left(f^{(r)} \circ g\right).g^{(i_j+1)}.\prod_{k \neq j} g^{(i_k)}$, l'arbre associé est l'arbre à r branches, de longueurs $i_1, \ldots, i_{j-1}, i_j + 1, i_{j+1}, \ldots, i_r$. Chacun de ces arbres se déduit donc de l'arbre d'origine en rajoutant un fils à l'une des feuilles.

En résumé, on passe de l'arbre d'un produit aux arbres des termes de sa dérivée en écrivant tous les arbres obtenus par l'ajout d'exactement un sommet, soit comme fils de la racine, soit comme fils de l'une des feuilles de l'arbre.

Exemple : Considérons le produit $(f'' \circ g).g''.g'$, associé à l'arbre T_1. Nous pouvons calculer sa dérivée, qui est la fonction :

$$((f''' \circ g).g').g''.g' + (f'' \circ g).g'''.g' + (f'' \circ g).g''.g''$$

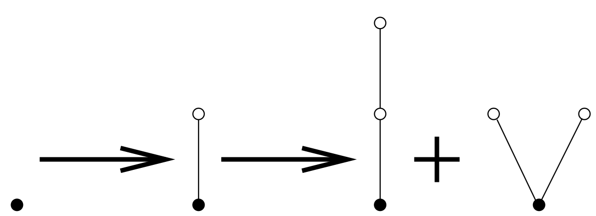
L'opération correspondante sur les arbres est alors :



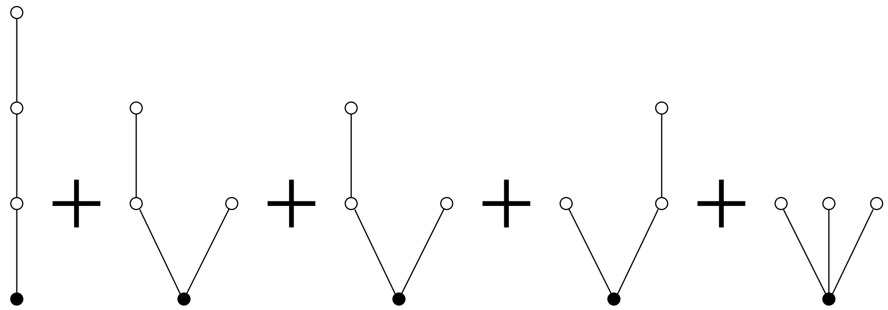
2.3 Les dérivées successives de $f \circ g$

Le terme $f \circ g$ étant représenté par un arbre réduit à sa racine, on peut ainsi construire récursivement les ensembles d'arbres correspondant aux ensembles des termes des dérivées successives de $f \circ g$, ce en appliquant à chaque fois le principe précédent. On construit ainsi tous les arbres possibles à chaque étape, et par la correspondance on obtient immédiatement la dérivée de $f \circ g$ à l'ordre voulu.

Ainsi les arbres obtenus après i dérivations sont des arbres ayant i sommets en plus de la racine, c'est-à-dire des arbres de $\mathcal{T}_i$. Voici les arbres obtenus lors des premières étapes de ce procédé :



Ce qui nous donne cinq arbres à l'ordre 3. Les deux premiers arbres sont obtenus à partir du premier arbre de la dérivée seconde, les trois dernier à partir du second.



La dérivée d'ordre 3 de $f \circ g$ sera alors la somme des termes correspondat aux 5 arbres obtenus, c'est-à-dire :

$$f' \circ g \times g''' + 3f'' \circ g \times g' \times g'' + f''' \circ g \times (g')^3$$

3 Evitons les étapes intermédiaires

La démarche précédemment décrite est assez lourde : il faut faire attention à ne pas oublier d'arbre à aucune étape. La difficulté est du même ordre que lorsque l'on dérive successivement "à la main", voire plus grande. On s'aperçoit notamment assez vite qu'il est facile de se tromper dans les multiplicités. Nous allons voir que cette représentation par les arbres permet de trouver directement la dérivée n-ième de $f \circ g$ sans calculer les dérivées précédentes.

3.1 Forme de la dérivée n-ième

Lemme 3.1 *La dérivée n-ième $(f \circ g)^{(n)}$ de $f \circ g$ s'écrit sous la forme :*

$$(f \circ g)^{(n)} = \sum_{r=1}^{n} \sum_{\substack{i_1 \geq \ldots \geq i_r \\ i_1 + \ldots + i_r = n}} t_{i_1,\ldots,i_r} f^{(r)} \circ g \cdot \prod_{k=1}^{r} g^{(i_k)}$$

où les coefficients $t_{i_1,\ldots,i_r}$ sont des entiers naturels.

Démonstration Par récurrence sur n. Le résultat est évident à l'ordre 1. Supposons le à l'ordre n. Alors la dérivée $(n+1)$-ième de $f \circ g$ n'est autre que la somme des dérivées des termes de la forme $t_{i_1,\ldots,i_r} f^{(r)} \circ g \cdot \prod_{k=1}^{r} g^{(i_k)}$.

Or un produit de cette forme a pour dérivée :

$$t_{i_1,\ldots,i_r} \left(\left(f^{(r+1)} \circ g\right) \cdot g' \cdot \prod_{k=1}^{r} g^{(i_k)} + \sum_{j=1}^{r} \left(f^{(r)} \circ g\right) . g^{(i_j+1)} . \prod_{k \neq j} g^{(i_k)} \right)$$

Tous ces termes sont bien de la forme voulue. En rassemblant les termes identiques provenant des dérivées de termes différents, on obtient le résultat voulu. Le coefficient de chaque terme est alors une somme d'entiers naturels, donc encore un entier naturel.

□

3.2 Calcul direct des coefficients

Muni du résultat précédent, la seule chose à faire pour exprimer directement la dérivée n-ième de $f \circ g$ est de pouvoir calculer les coefficients $t_{i_1,\ldots,i_r}$ à partir de l'arbre. En effet, chaque terme de la somme correspond à un arbre différent de $\mathcal{T}_n$, l'ensemble des arbres à $n+1$ sommets (la racine plus n descendants). Et l'on sait construire directement tous les arbres possibles de $\mathcal{T}^n$, ce de façon systématique (on construit d'abord celui, unique, dont la plus grande branche est de longueur n, puis $n-1$, puis les deux arbres dont la plus longue branche est de longueur $n-2$, et ainsi de suite).

L'entier $t_{i_1,\ldots,i_r}$ correspond quant à lui au nombre de fois, après n dérivations sur les arbres, où l'on a obtenu l'arbre à r branches de longueurs $i_1, \ldots, i_r$. En d'autres termes, c'est le nombre de façons de construire cet arbre par notre procédé de construction, qui consiste à partir de la seule racine, puis à rajouter successivement les n sommets, chacun étant placé comme fils de la racine ou du sommet alors à l'extrémité d'une branche.

Théorème 3.2 *Le coefficient $t_{i_1,\ldots,i_r}$ est donné par la formule :*

$$t_{i_1,\ldots,i_r} = \frac{n!}{\prod_{k=1}^{r} i_k! \times \prod_{k=1}^{n} j_k!}$$

où j_k désigne le nombre de branches de longueur k.

Démonstration *A posteriori*, nous sommes ramenés à compter le nombre de façons de numéroter les sommets de notre arbre, modulo deux contraintes. D'abord, tout sommet doit être numéroté avant son fils, puisque notre procédé de construction fait qu'il apparaît nécessairement avant. Ensuite, lorsque deux branches ont même longueur, elles sont interchangeables vis à vis de notre procédé de construction, c'est-à-dire qu'on les distingue par le fait que l'une des deux commence avant l'autre. Autrement dit, dans l'arbre à r branches de longueurs $i_1 \geq \ldots \geq i_r$, il nous faut imposer de plus que si $k < l$ et $i_k = i_l$, alors le premier sommet de la k-ième branche est numéroté avant celui de la l-ième branche.

En fait, cette dernière contrainte correspond à diviser par le nombre d'automorphisme de notre arbre, c'est-à-dire le nombre de permutations des branches qui laissent l'arbre inchangé. Pour laisser l'arbre inchangé, une permutation des branche ne doit échanger entre elles que des branches de même longueur. Si $j_1, \ldots, j_n$ désignent le nombre de branches de longueur $1, \ldots, n$, il y a donc $\prod_{k=1}^{n} j_k!$ façons de ce faire.

Reste à compter le nombre de façon de numéroter les sommets de l'arbre en respectant la première contrainte. Or, une telle numérotation correspond à une partition de l'ensemble $\{1, \ldots, n\}$ des numéros disponibles en r parties, de cardinaux respectifs $i_1, \ldots, i_r$. En effet, muni d'une telle partition, nous avons un procédé canonique pour numéroter les sommets de l'arbre : les entiers de la première partie, à i_1 éléments, servent à numéroter (dans l'ordre) les sommets de la première branche, de même pour les autres parties.

Mais nous savons désormais calculer ceci : pour diviser l'ensemble $\{1, \ldots, n\}$ en r parties de cardinaux respectifs $i_1, \ldots, i_r$, on choisi i_1 éléments parmis n, puis i_2 éléments parmis les $n - i_1$ restant, et ainsi de suite. Le nombre recherché est ici

$$\mathrm{C}_n^{i_1} \times \mathrm{C}_{n-i_1}^{i_2} \times \ldots \times \mathrm{C}_{i_{r-1}+i_r}^{i_{r-1}} \times \mathrm{C}_{i_r}^{i_r} = \frac{n!}{i_1! \times i_2! \times \ldots \times i_{r-1}! \times i_r!}$$

D'où

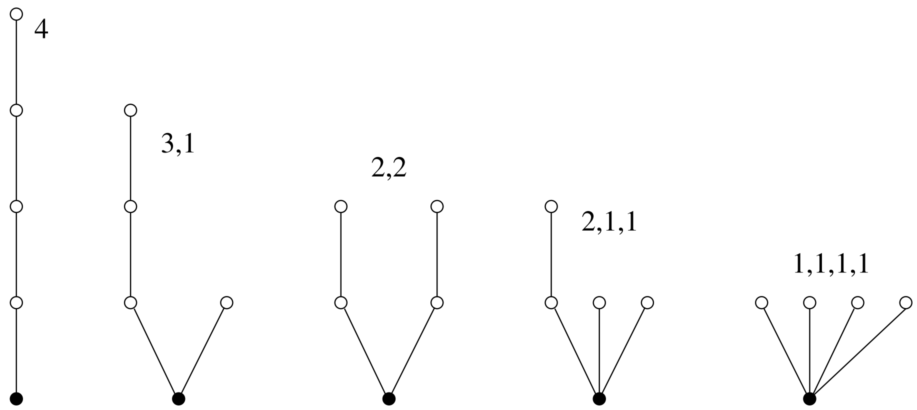
$$t_{i_1,\ldots,i_r} = \frac{n!}{\prod\limits_{k=1}^{r} i_k! \times \prod\limits_{k=1}^{n} j_k!}$$

où j_k désigne toujours le nombre de branches de longueur k.

$\square$

EXEMPLE

A l'ordre 4, les arbres de $\mathcal{T}_4$ sont les suivants :



On peut donc écrire $(f \circ g)^{(4)}$ sous la forme :

$$t_4 f' \circ g \times g^{(4)} + t_{3,1} f'' \circ g \times g' \times g^{(3)} + t_{2,2} f'' \circ g \times (g'')^2$$
$$+ t_{2,1,1} f^{(3)} \circ g \times (g')^2 \times g'' + t_{1,1,1,1} f^{(4)} \circ g \times (g')^4$$

Et l'on calcule les coefficients grâce à la formule établie précédemment :

$$t_4 = \mathrm{C}_4^4 = 1, \quad t_{3,1} = \mathrm{C}_4^3 = 4, \quad t_{2,2} = \frac{\mathrm{C}_4^2}{2!} = 3$$

$$t_{2,1,1} = \frac{\mathrm{C}_4^2 \times \mathrm{C}_2^1}{2!} = 6, \quad t_{1,1,1,1} = \frac{\mathrm{C}_4^1 \times \mathrm{C}_3^1 \times \mathrm{C}_2^1}{4!} = 1$$

On obtient alors comme expression de $(f \circ g)^{(4)}$:

$$f' \circ g \times g^{(4)} + 4 f'' \circ g \times g' \times g^{(3)} + 3 f'' \circ g \times (g'')^2 + 6 f^{(3)} \circ g \times (g')^2 \times g'' + f^{(4)} \circ g \times (g')^4$$

On peut bien sûr vérifier cette formule en dérivant 4 fois $f \circ g$, et en utilisant les règles classiques de dérivation.

Conclusion :

Ce type de formalisme prend tout son sens lorsque l'on s'intéresse à des équations différentielles de la forme $y' = f(y)$. L'analogie et l'opérateur de dérivation sur les arbres ne sont plus les mêmes, mais ce type de procédés permet entre autre de définir des solutions formelles de l'équation, de travailler autour de méthodes numériques... Ces idées sont au coeur de préoccupations modernes de la recherche.