

Sommutation et intégration symboliques des fonctions spéciales

NOTES DE FRÉDÉRIC CHYZAK

Résumé

Dans ce chapitre, nous décrivons un algorithme qui peut se voir comme une extension de l'algorithme de Zeilberger pour des sommants ∂ -finis, et qui traite dans le même formalisme sommation et intégration. Les quelques sommes et intégrales suivantes, que nous envisageons de traiter avec cet algorithme, montrent une variété d'applications qui vont de la combinatoire à la physique mathématique en passant par la théorie des fonctions spéciales :

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n \left(\sum_{j=0}^k \binom{n}{j} \right)^3 &= n2^{3n-1} + 2^{3n} - 3n2^{n-2} \binom{2n}{n}, \\ \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)H_n(y) \frac{u^n}{n!} &= \frac{\exp\left(\frac{4u(xy-u(x^2+y^2))}{1-4u^2}\right)}{\sqrt{1-u^2}}, \\ \frac{1}{2}J_0(x)^2 + J_1(x)^2 + J_2(x)^2 + \dots &= \frac{1}{2}, \\ \int_{-1}^{+1} \frac{e^{-px}T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx &= (-1)^n \pi I_n(p), \\ \int_0^{+\infty} x e^{-px^2} J_n(bx)I_n(cx) dx &= \frac{1}{2p} \exp\left(\frac{c^2-b^2}{4p}\right) J_n\left(\frac{bc}{2p}\right), \\ \int_0^{+\infty} x J_1(ax)I_1(ax)Y_0(x)K_0(x) dx &= -\frac{\ln(1-a^4)}{2\pi a^2}, \\ \sum_{k=0}^n \frac{q^{k^2}}{(q; q)_k (q; q)_{n-k}} &= \sum_{k=-n}^n \frac{(-1)^k q^{(5k^2-k)/2}}{(q; q)_{n-k} (q; q)_{n+k}}. \end{aligned}$$

Ici, J , Y , I et K sont des variantes de fonctions de Bessel, qui apparaissent fréquemment pour décrire des modèles physiques à symétrie cylindrique ou sphérique; H et T sont des familles de polynômes orthogonaux de Hermite et Tchébichev; $(q; q)_n$ représente le produit $(1-q) \cdots (1-q^n)$. La première identité intervient dans une discrétisation d'une question de probabilités sur la position du maximum de trois variables aléatoires gaussiennes; la dernière est une variante finie d'une des identités de Rogers-Ramanujan, en théorie des partitions.

1. Expression de la création télescopique en termes d'algèbres de Ore rationnelles

On a déjà exposé dans ce cours la méthode de la création télescopique, en l'appliquant à la sommation hypergéométrique définie par une combinaison de l'algorithme de Gosper et d'une idée due à Zeilberger. Cette approche se généralise en des algorithmes de sommation et intégration pour les suites et fonctions ∂ -finies.

Rappelons le principe de la méthode. Soit à évaluer une somme paramétrée

$$F_n = \sum_{k=a}^b f_{n,k}.$$

En toute généralité, le principe de la création télescopique est de déterminer une suite auxiliaire $g = (g_{n,k})$ ainsi que des coefficients η_0, \dots, η_r , fonctions de la variable n , tels que se trouve vérifiée la relation

$$\eta_r(n)f_{n+r,k} + \dots + \eta_0(n)f_{n,k} = g_{n,k+1} - g_{n,k}.$$

Ici, nous ne faisons pas plus d'hypothèses sur les η_i et g que celle de pouvoir évaluer la relation ci-dessus pour tout n quand k décrit les entiers de a à b . Dans ce cas, une sommation sur k fournit l'égalité

$$\eta_r(n)F_{n+r} + \dots + \eta_0(n)F_n = g_{n,b+1} - g_{n,a}.$$

Si le membre de droite n'est pas déjà nul, on recherche un opérateur annulateur de ce second membre; par composition, on obtient une récurrence homogène sur F . Dans bien des cas, on sait prédire à partir de conditions analytiques sur f la nullité du terme $g_{n,b+1} - g_{n,a}$.

Des algorithmes d'efficacités différentes ont été donnés selon le domaine de recherche des η_i et de g , et selon le compromis choisi entre efficacité et richesse de la classe de suites f en entrée. En particulier, l'algorithme de Zeilberger, optimisé pour une suite f hypergéométrique, revient à rechercher des η_i polynomiaux et une suite g similaire à f , c'est-à-dire un multiple ϕf pour une fraction rationnelle ϕ en n et k . La suite $g = \phi f$ devant être une somme indéfinie, la recherche de ϕ et des η_i se fait par une variante paramétrée de l'algorithme de Gosper. Notons que le domaine de recherche de g est l'espace vectoriel $\mathbb{C}(n, k)f$, qui n'est autre, dans le cas hypergéométrique, que le module engendré par f sur l'algèbre de Ore $A = \mathbb{C}(n, k)(\partial_n, \partial_k; S_n, S_k)$. Nous considérons ici la généralisation au cas où f est une fonction ∂ -finie et où le module $A \cdot f$ est un espace vectoriel de dimension finie sur $\mathbb{C}(n, k)$, mais pas forcément de dimension 1. Soit v_1, \dots, v_d les éléments d'une base vectorielle de $A \cdot f$; l'algorithme de Zeilberger étendu recherche g sous la forme indéterminée $\phi_1 v_1 + \dots + \phi_d v_d$, pour des fractions rationnelles ϕ_i en n et k . Cette recherche se fait par une extension ∂ -finie de la variante paramétrée de l'algorithme de Gosper.

Tout ce qui a été dit s'étend au monde différentiel pour l'évaluation d'une intégrale paramétrée

$$F(x) = \int_a^b f(x, y) dy.$$

On cherche alors une relation

$$\eta_r(x) \frac{\partial^r f}{\partial x^r}(x, y) + \dots + \eta_0(n) f(x, y) = \frac{\partial g}{\partial y}(x, y),$$

qui après intégration fournit l'égalité

$$\eta_r(n)F^{(r)}(x) + \dots + \eta_0(n)F(x) = \int_a^b g(x, y) dy.$$

La même méthode permet aussi de traiter des sommes paramétrées continûment,

$$F(x) = \sum_{k=a}^b f_k(x),$$

et des suites d'intégrales de la forme

$$F_n = \int_a^b f_n(y) dy.$$

EXERCICE 1. Formuler la relation entre f et g à rechercher dans ces deux derniers cas.

2. L'algorithme sur l'exemple $\frac{1}{2}J_0(x)^2 + J_1(x)^2 + J_2(x)^2 + \dots = \frac{1}{2}$

Nous allons montrer que la famille paramétrée des fonctions de Bessel de première espèce, J_ν , où chaque J_ν est une solution que nous allons préciser de l'équation de Bessel

$$x^2y''(x) + xy'(x) + (x^2 - \nu^2)y(x) = 0,$$

a une somme $\frac{1}{2}J_0(x)^2 + J_1(x)^2 + J_2(x)^2 + \dots$ qui s'évalue à $\frac{1}{2}$.

L'équation de Bessel et les fonctions de Bessel peuvent être considérées pour des valeurs complexes du paramètre ν , mais vu la nature de la somme à étudier, nous nous limiterons dorénavant à des valeurs entières $\nu \in \mathbb{N}$. En étudiant l'équation indicelle de l'équation de Bessel, on s'aperçoit qu'il existe pour chaque ν des solutions dans les séries formelles $\mathbb{C}[[x]]$ et que ces solutions constituent un espace vectoriel de dimension 1 sur \mathbb{C} de séries. Une base de ces solutions formelles est donnée par la série de Bessel

$$J_\nu(x) = (z/2)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (z/2)^{2n}}{n! (n + \nu)!},$$

de valuation ν , qui vu la décroissance de ses coefficients est pour chaque entier ν une série entière.

EXERCICE 2. Vérifier ces résultats.

On vérifie par simple substitution et évaluation que ces fonctions J_ν satisfont aussi aux relations

$$xJ'_\nu(x) + xJ_{\nu+1}(x) - \nu J_\nu(x) = 0 \quad \text{et} \quad xJ_{\nu+2}(x) - 2(\nu+1)J_{\nu+1}(x) + xJ_\nu(x) = 0.$$

En introduisant l'algèbre de Ore $A = \mathbb{C}(\nu, x)\langle \partial_\nu, \partial_x; S_\nu, I, 0, D_x \rangle$ où S_ν est le décalage avant sur ν et D_x est la dérivation par rapport à x , on a donc un système d'annulateurs pour J ,

$$p_1 = x^2\partial_x^2 + x\partial_x + x^2 - \nu^2,$$

$$p_2 = x\partial_x + x\partial_\nu - \nu,$$

$$p_3 = x\partial_\nu^2 - 2(\nu+1)\partial_\nu + x.$$

Les deux premiers forment une base de Gröbner de l'idéal engendré pour l'ordre $\text{lex}(\partial_\nu, \partial_x)$; les deux derniers pour l'ordre $\text{lex}(\partial_x, \partial_\nu)$.

EXERCICE 3. Pour chacun des idéaux $Ap_1 + Ap_2$ et $Ap_2 + Ap_3$, calculer la base de Gröbner minimale réduite pour chacun des deux ordres $\text{lex}(\partial_\nu, \partial_x)$ et $\text{lex}(\partial_x, \partial_\nu)$.

Bien évidemment, J est une fonction ∂ -finie. Le module $A \cdot J$ est donné, par exemple, comme l'espace vectoriel sur $\mathbb{C}(\nu, x)$ de base $(J, \partial_\nu \cdot J)$. Pour représenter le carré de J en vue d'une sommation, on peut observer que, en tant qu'espace vectoriel, le module $A \cdot J^2$ admet la base $(J^2, J \times (\partial_\nu \cdot J), (\partial_\nu \cdot J)^2)$ et utiliser l'algorithme de clôture par produit pour obtenir une base de Gröbner. En fait, le calcul qui suit n'a même pas besoin d'une représentation aussi explicite de $f = J^2$: pour calculer la somme $\frac{1}{2}J_0(x)^2 + J_1(x)^2 + J_2(x)^2 + \dots$ comme fonction de x , on recherche une fonction η de x , indépendante de ν , telle que $f' + \eta f$ soit la différence finie en ν d'un élément g de $A \cdot J^2$. Pour la suite du calcul, nous fixons cet élément sous la forme indéterminée donnée par

$$g(\nu) = \phi_0(\nu)J_\nu^2 + \phi_1(\nu)J_{\nu+1}^2 + \phi_2(\nu)J_\nu J_{\nu+1},$$

où nous avons omis de faire référence à la variable x dans les évaluations de g , des ϕ_i et de J , car cette variable ne va intervenir que comme paramètre dans le calcul des fractions rationnelles ϕ_i . (On peut penser qu'on travaille temporairement dans l'algèbre de Ore $A' = \mathbb{C}(\nu, x)\langle \partial_\nu; S_\nu \rangle$.)

En supposant le problème résolu, on a alors par construction la relation $f' + \eta f = (\partial_\nu - 1) \cdot g$, puis, après réduction de chaque occurrence des dérivées et décalées de J par la base de Gröbner $\{p_2, p_3\}$,

$$\begin{aligned} 2J_\nu J'_\nu + \eta J_\nu^2 &= (\partial_\nu - 1) \cdot (\phi_0(\nu)J_\nu^2 + \phi_1(\nu)J_{\nu+1}^2 + \phi_2(\nu)J_\nu J_{\nu+1}) \\ &= \phi_0(\nu + 1)J_{\nu+1}^2 - \phi_0(\nu)J_\nu^2 + \phi_1(\nu + 1)x^{-2}(2(\nu + 1)J_{\nu+1} - xJ_\nu)^2 - \phi_1(\nu)J_{\nu+1}^2 \\ &\quad + \phi_2(\nu + 1)x^{-1}J_{\nu+1}(2(\nu + 1)J_{\nu+1} - xJ_\nu) - \phi_2(\nu)J_\nu J_{\nu+1}, \end{aligned}$$

laquelle se récrit

$$\begin{aligned} &(2\nu x^{-1} + \eta)J_\nu^2 - 2J_\nu J_{\nu+1} \\ &= (\phi_1(\nu + 1) - \phi_0(\nu))J_\nu^2 - (4(\nu + 1)x^{-1}\phi_1(\nu + 1) + \phi_2(\nu + 1) + \phi_2(\nu))J_\nu J_{\nu+1} \\ &\quad + (\phi_0(\nu + 1) + 4(\nu + 1)^2 x^{-2}\phi_1(\nu + 1) - \phi_1(\nu) + 2(\nu + 1)x^{-1}\phi_2(\nu + 1))J_{\nu+1}^2. \end{aligned}$$

De l'indépendance linéaire des fonctions J_ν^2 , $J_{\nu+1}^2$ et $J_\nu J_{\nu+1}$ sur $\mathbb{C}(\nu, x)$, on déduit les relations nécessaires

$$-\phi_0(\nu) + \phi_1(\nu + 1) = 2\nu x^{-1} + \eta,$$

$$4(\nu + 1)x^{-1}\phi_1(\nu + 1) + \phi_2(\nu) + \phi_2(\nu + 1) = 2,$$

$$\phi_0(\nu + 1) - \phi_1(\nu) + 4(\nu + 1)^2 x^{-2}\phi_1(\nu + 1) + 2(\nu + 1)x^{-1}\phi_2(\nu + 1) = 0.$$

En résolvant les deux premières respectivement en ϕ_0 et en ϕ_1 , puis en substituant dans la dernière, on trouve la récurrence

$$\begin{aligned} &x^2(\nu + 1)\phi_2(\nu + 3) - (\nu + 1)(4\nu^2 + 20\nu + 24 - x^2)\phi_2(\nu + 2) \\ &+ (\nu + 3)(4\nu^2 + 12\nu + 8 - x^2)\phi_2(\nu + 1) - x^2(\nu + 3)\phi_2(\nu) = -4x(\eta\nu^2 + 4\eta\nu + 3\eta + x). \end{aligned}$$

Nous résolvons maintenant celle-ci en ses solutions rationnelles par l'algorithme d'Abramov, dans sa variante paramétrée qui résoud en $\phi_2 \in \mathbb{C}(n, \nu)$ et simultanément en $\eta \in \mathbb{C}$. Les coefficients extrêmes de la partie homogène indiquent que toute solution rationnelle doit être polynomiale, puisque le p. g. c. d. entre $(\nu - 3) + 1$

et $x + 3$ vaut 1. La mise sous forme de différences finies de la partie homogène indique que l'opérateur associé accroît de 2 le degré d'un polynôme. Le degré de la partie inhomogène étant 2, toute solution rationnelle ne peut être qu'une constante. On trouve $\phi_2 = 1$ et $\eta = 0$, d'où après report $\phi_1 = 0$ et $\phi_0 = -2\nu/x$. Autrement dit, on a

$$\partial_x \cdot J_\nu^2 = (\partial_\nu - 1) \cdot (J_\nu J_{\nu+1} - 2\nu x^{-1} J_\nu^2),$$

qui par sommation fournit

$$\partial_x \cdot \sum_{\nu=0}^N J_\nu^2 = J_{N+1}(J_{N+2} - 2(N+1)x^{-1}J_{N+1}) - J_0 J_1.$$

Comme la série $J_N \in \mathbb{C}[[x]]$ a valuation N , le membre droit tend vers $-J_0 J_1 = \frac{1}{2} \partial_x \cdot J_0^2$ quand N tend vers ∞ pour la topologie usuelle donnée par la métrique $|s| = 2^{-v}$ pour toute série non nulle s de valuation v . On a donc

$$\partial_x \cdot \left(\frac{1}{2} J_0(x)^2 + J_1(x)^2 + J_2(x)^2 + \dots \right) = 0$$

qui caractérise la somme par une condition initiale. Une simple évaluation en 0 montre que la somme vaut $\frac{1}{2}$, ce qui achève la preuve de l'identité annoncée.

3. Bases de Gröbner de modules et découplage de systèmes

Dans l'exemple qui précède, on a pour le moment effectué le découplage « à la main », mais un procédé systématique et automatique est disponible, par le biais des bases de Gröbner de modules, qui généralisent la notion de base de Gröbner pour les idéaux. Cette notion existe tant dans le domaine des polynômes commutatifs que dans le cadre non commutatif des algèbres de Ore ; nous la présentons directement dans ce second cas.

Dans le cas d'un idéal I d'une algèbre de Ore A , les éléments de I s'interprètent comme autant d'équations vérifiées par une fonction inconnue ϕ . Dans une perspective algorithmique, chaque idéal est engendré par un nombre fini de générateurs. Une question naturelle est celle de systèmes linéaires sur un vecteur de fonctions inconnues (ϕ_1, \dots, ϕ_d) , à coefficients dans A . On considère des systèmes d'un nombre fini d'équations de la forme $g_i = g_{i,1} \cdot \phi_1 + \dots + g_{i,d} \cdot \phi_d$ pour des polynômes tordus $g_{i,j}$ de A . Un tel système se représente de façon compacte par une matrice $(g_{i,j})$ à entrées dans A . Les questions qui sont alors naturelles sont celle de l'algèbre linéaire pour ces matrices, dont en particulier celle de donner un algorithme du pivot de Gauss pour des coefficients dans A , c'est-à-dire non plus dans un corps, mais dans un anneau, et non commutatif de surcroît.

Pour ce faire, au lieu de considérer simplement un ordre monomial sur les monômes ∂^a d'une algèbre de Ore $A = k(x)\langle \partial; \sigma, \delta \rangle$, pour lequel tout idéal à gauche admet une base de Gröbner, on s'intéresse plus généralement à un module libre de rang fini sur A , donné par une base sous la forme $A^d = Ae_1 + \dots + Ae_d$ et muni d'un ordre sur les $\partial^a e_i$, dans lequel on va étendre la notion de base de Gröbner pour des sous-modules à gauche de A^d . La notion d'ordre monomial conserve formellement la même définition, si ce n'est que les e_i ne peuvent apparaître que linéairement dans les monômes $\partial^a e_i$ et qu'ils ne peuvent servir pour des multiplications à gauche. La notion de S-polynôme s'étend aussi mot pour mot, à ceci près que deux polynômes de tête $\partial^a e_i$ et $\partial^b e_j$ ont un S-polynôme nul dès lors que i et j sont différents. Les définitions et caractérisations équivalentes des bases de Gröbner d'idéaux restent alors valables pour les sous-modules du module libre A^d .

L'algorithme de Buchberger, modifié pour suivre ces nouvelles définitions, termine sur tout sous-module en fournissant une base de Gröbner. Pour certains ordres, ce calcul correspond à l'algorithme de Gauss.

Un point de vue presque équivalent, mais qui donne une variante des calculs avec un peu plus de réductions, est que le calcul est celui d'une base de Gröbner dans l'anneau $A[e_1, \dots, e_d]$ des polynômes en les indéterminées commutatives e_i à coefficients dans l'anneau A pour l'idéal à gauche engendré par les g_i initiaux et tous les produits $e_i e_j = 0$.

Reprenons l'exemple du découplage des relations entre les coordonnées ϕ_i donnant g dans la section précédente sur la somme des carrés fonctions de Bessel. Ces relations se recodent par les éléments

$$\begin{aligned} g_1 &:= -e_0 + \partial_\nu e_1 - (2\nu x^{-1} + \eta)e_3, \\ g_2 &:= 4(\nu + 1)x^{-1}\partial_\nu e_1 + (\partial_\nu + 1)e_2 - 2e_3, \\ g_3 &:= \partial_\nu e_0 + (4(\nu + 1)^2 x^{-2} \partial_\nu - 1)e_1 + 2(\nu + 1)x^{-1}\partial_\nu e_2, \\ g_4 &:= (\partial_\nu - 1)e_3, \end{aligned}$$

du module libre A^4 pour l'algèbre de Ore $A = \mathbb{C}(n, k)\langle \partial_n, \partial_k; S_n, S_k \rangle$. Ici, chaque e_i représente la fonction rationnelle inconnue ϕ_i , et l'on a astucieusement représenté les second membres de équations inhomogènes d'origine comme multiple d'une nouvelle inconnue représentée par e_3 et contrainte par g_4 à être constante.

Le découplage effectué dans la section précédente revient au calcul d'une base de Gröbner pour l'ordre $\text{lex}(e_0, e_1, e_2, e_3, \partial_\nu)$. Les monômes de tête respectifs des g_i sont $e_0, \partial_\nu e_1, \partial_\nu e_0$ et $\partial_\nu e_3$, si bien que le seul S-polynôme non nul est $\text{Spoly}(g_1, g_3)$. Il est donné par

$$\begin{aligned} \text{Spoly}(g_1, g_3) &= \partial_\nu g_1 + g_3 \\ &= (\partial_\nu^2 + 4(\nu + 1)^2 x^{-2} \partial_\nu - 1)e_1 + 2(\nu + 1)x^{-1}\partial_\nu e_2 - (2(\nu + 1)x^{-1} + \eta)\partial_\nu e_3. \end{aligned}$$

Après réductions par g_2 et g_3 , ce polynôme devient

$$g_5 = -e_1 - \left(\frac{x}{4(\nu + 2)} \partial_\nu^2 + \frac{x^2 - 4\nu^2 - 12\nu - 8}{4x(\nu + 2)} \partial_\nu + \frac{\nu + 1}{x} \right) e_2 + \left(\frac{x}{2(\nu + 2)} - \eta \right) e_3,$$

qui est adjoint à la base de Gröbner en cours de calcul. L'unique nouvel S-polynôme à considérer est celui entre ce g_5 et g_2 , qui est $\text{Spoly}(g_2, g_4) = g_2 + 4(\nu + 1)x^{-1}\partial_\nu g_5$ et a pour monôme de tête $\partial_\nu^3 e_2$. Après réduction par e_3 et renormalisation, le dernier polynôme introduit dans la base de Gröbner est

$$\begin{aligned} &((\nu + 1)x^2 \partial_\nu^3 + (\nu + 1)(x^2 - 4\nu^2 - 20\nu - 24)\partial_\nu^2 \\ &\quad - (\nu + 3)(x^2 - 4\nu^2 - 12\nu - 8)\partial_\nu - (\nu + 3)x^2)e_2 \\ &\quad + 4((\nu^2 + 4\nu + 3)\eta + x)xe_3. \end{aligned}$$

Ce polynôme n'est autre qu'un recodage de l'équation inhomogène du troisième ordre qui a permis de déterminer ϕ_2 dans la section précédente.

Bibliographie

- [1] Chyzak (Frédéric). – An extension of Zeilberger's fast algorithm to general holonomic functions. *Discrete Mathematics*, vol. 217, n° 1-3, 2000, pp. 115–134.