

Implémentation de tables de valeurs de multizêtas

Olivier Bouillot, L.I.G.M., équipe de combinatoire et calcul formel

30 septembre 2025

1 Motivation

La fonction ζ de Riemann est définie par $\zeta(s) = \sum_{n>0} \frac{1}{n^s}$ pour tout nombre complexe s tel que $\Re(s) > 1$. Elle se prolonge par une autre expression à tout le plan complexe privé de $s = 1$. Rappelons que la fonction ζ possède des liens fondamentaux avec les nombres premiers. Elle est aussi au cœur d'un des problèmes du millénaire (problèmes récompensés par un prix de 1 000 000 \$) les plus célèbres : les zéros de la fonction ζ sont conjecturés tous être de partie réelle égale à $\frac{1}{2}$.

Au XVII^e siècle, Euler a déjà calculé explicitement $\zeta(2n)$, $n \in \mathbb{N}^*$; en particulier, il sait que $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$ et $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$. Mais le calcul de cette fonction aux entiers impairs lui résista. Il pensait pouvoir écrire $\zeta(3)$ sous la forme $r\pi^3$, $r \in \mathbb{Q}$, ce que l'on ne sait toujours pas faire aujourd'hui !

En réalité, Euler n'était probablement pas loin de la conjecture suivante, selon laquelle il n'existerait aucune relation polynomiale liant π et les nombres $\zeta(2n+1)$, $n \in \mathbb{N}^*$.

Conjecture 1. *Les nombres π , $\zeta(3)$, $\zeta(5)$, $\zeta(7)$, $\zeta(9)$, ... sont algébriquement indépendants sur $\mathbb{C}$.*

Cette conjecture pourrait être considérée comme faisant partie du folklore mathématique. Néanmoins, elle a déjà permis, ces dernières années, le développement d'une branche entière de la théorie des nombres extrêmement féconde. Le point de départ est encore du à Euler : en définissant les "double zêtas" par $\zeta(s, t) = \sum_{n>0} \sum_{m>n} \frac{1}{n^s m^t}$, il découvre que ces nombres vérifiaient, par exemple, $\zeta(2, 1) = \zeta(3)$, $\zeta(3, 1) + \zeta(2, 2) = \zeta(4)$, ou encore, $2\zeta(3, 1) + \zeta(2)^2 = 3\zeta(4)$.

Dans les années 1990, la généralisation aux nombres **multizêtas** a été proposée :

Définition 1. *Les nombres multizêtas (MZV pour abréger) sont définis pour tout $r \in \mathbb{N}^*$ par :*

$$\zeta(s_1, \dots, s_r) = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_r \in \mathbb{N}^* \\ 0 < n_r < \dots < n_1}} \frac{1}{n_1^{s_1} \dots n_r^{s_r}} \quad , \text{ où } s_1, \dots, s_r \in \mathbb{N}^*, \text{ avec } s_1 \geq 2 . \quad (1)$$

De nombreuses recherches ont été effectuées sur la recherche de relations entre MZVs. Cette question est même loin d'être complètement élucidée : sinon, la Conjecture 1 serait un théorème ! Ainsi, avoir des tables de ces nombres est extrêmement important pour les chercheurs. Historiquement, deux tentatives ont été couronnées de succès :

- En 2000, Minh et Petitot ont tabulé les MZVs pour $s_1, \dots, s_r \in \mathbb{N}^*$ vérifiant $s_1 \geq 2$ et $s_1 + \dots + s_r \leq 16$. Malheureusement, les programmes **C** ont été perdus avec le temps... (cf [5])
- En 2010, s'inspirant de la même méthode, en la raffinant légèrement, Blümlein, Broadhurst et Vermaseren ont produit des tables pour $s_1 + \dots + s_r \leq 22$. (cf. [1] et [2])

L'idée du projet est de reproduire ce travail pour obtenir des tables de MZV les plus riches possibles.

2 Les grandes familles connues de relations entre MZV

L'idée est de "remonter" les nombres à un cadre formel : celui des polynômes non commutatifs : les indéterminées (ou variables) de ces polynômes sont des éléments d'un ensemble $V = \{v_1, v_2, \dots\}$ qui ne commutent pas entre eux : $v \cdot w \neq w \cdot v$ pour $v, w \in V$ sauf si $v = w$! Les opérations classiques sur les polynômes (+, -, multiplication par un scalaire, multiplications des polynômes) se généralisent à l'identique sur les polynômes non commutatifs. Par exemple, nous avons :

$$(v_1 v_2 + 3v_2^3) \cdot (2v_1^2 v_2 - v_2) = 2v_1 v_2 v_1^2 v_2 + 6v_2^3 v_1^2 v_2 - v_1 v_2^2 - 3v_2^4 . \quad (2)$$

Dans la suite, nous considérerons deux ensembles d'indéterminées, $X = \{x_0, x_1\}$ et $Y = \{y_1, y_2, y_3, \dots\}$, qui se correspondront par $x_0^{i-1} x_1 \xrightarrow{\pi_Y} y_i$ et $y_i \xrightarrow{\pi_X} x_0^{i-1} x_1$ si $i \geq 1$.

Le lecteur intéressé pourra consulter [4], [8], ou encore [9], pour plus de précision. Bien sûr, l'étudiant qui choisirait le sujet sera initié immédiatement à la manipulation de ces polynômes.

2.1 Une multiplication par des intégrales

Il est désormais bien connu que les multizêtas peuvent aussi s'écrire comme des intégrales itérées. Par exemple :

$$\mathcal{Z}e^2 = \int_0^1 \left(\int_0^v \frac{du}{1-u} \right) \frac{dv}{v} = \int_{0 < u < v < 1} \frac{du dv}{(1-u)v} .$$

On peut alors multiplier ces nombres en exprimant autrement l'ensemble d'intégration. Cela se modélise au niveau des polynômes non commutatifs sur l'alphabet X par un produit $\sqcup$ (lire *shuffle* signifiant "mélange" en français, pour mettre l'accent sur l'idée que les variables d'intégration vont se mélanger de la même manière que deux jeux de cartes se mélangent). Celui-ci est défini récursivement sur des monômes m et m' par :

$$\begin{aligned} m \sqcup \varepsilon &= \varepsilon \sqcup m = m \\ (x_i m) \sqcup (x_j m') &= x_i (m \sqcup (x_j m')) + x_j ((x_i m) \sqcup m') \end{aligned}$$

Par exemple, on a : $(x_0 x_1) \sqcup (x_0 x_1) = 2x_0 x_1 x_0 x_1 + 4x_0^2 x_1^2$, représentant toutes les manières de mélanger deux jeux de cartes à deux cartes différentes. Une fois envoyé dans l'alphabet Y , le résultat s'écrit $2y_2^2 + 4y_3 y_1$. On en déduit alors la relation quadratique suivante :

$$(\zeta(2))^2 = 2\zeta(2, 2) + 4\zeta(3, 1) . \quad (3)$$

2.2 Une multiplication directe

Comme Euler l'a remarqué lui-même, on peut écrire successivement :

$$(\zeta(2))^2 = \sum_{p, q \in \mathbb{N}^*} \frac{1}{p^2 q^2} = \sum_{\substack{p, q \in \mathbb{N}^* \\ 0 < p < q}} \frac{1}{p^2 q^2} + \sum_{\substack{p, q \in \mathbb{N}^* \\ 0 < p = q}} \frac{1}{p^2 q^2} + \sum_{\substack{p, q \in \mathbb{N}^* \\ 0 < q < p}} \frac{1}{p^2 q^2} = 2\zeta(2, 2) + \zeta(4) .$$

Pour modéliser cette relation, nous allons considérer un produit $\sqcup$ (lire *stuffle*, nom issu d'un jeu de mots construit à partir de *shuffle*, signifiant "mélange" en français, et *stuff* pour "truc" désignant explicitement le terme ajouté par rapport au produit de shuffle) défini récursivement sur les monômes m et m' des polynômes non commutatifs construits sur l'alphabet Y :

$$\begin{aligned} m \sqcup \varepsilon &= \varepsilon \sqcup m = m \\ (y_i m) \sqcup (y_j m') &= y_i (m \sqcup (y_j m')) + y_j ((y_i m) \sqcup m') + y_{i+j} (m \sqcup m') \end{aligned}$$

Par exemple, $y_2 \sqcup y_2 = y_2 (\varepsilon \sqcup y_2) + y_2 (y_2 \sqcup \varepsilon) + y_4 (\varepsilon \sqcup \varepsilon) = 2y_2^2 + y_4$. L'équation non commutative précédente représente alors la relation quadratique suivante :

$$\zeta(2)^2 = 2\zeta(2, 2) + \zeta(4) . \quad (4)$$

2.3 Les relations de double shuffle

Nous avons démontré les relations (3) et (4) qui permettent d'affirmer que $\zeta(3, 1) = \frac{1}{4}\zeta(4)$. En termes équationnels, cette dernière provient du calcul de

$$\pi_Y(\pi_X(y_2) \sqcup \pi_X(y_3)) - y_2 \sqcup y_3 .$$

De manière générale, on montre aussi le théorème suivant (cf. [8]) :

Théorème 1. *Pour tout entier $r \in \mathbb{N}^*$ et tout r -uplet $(s_1, \dots, s_r) \in (\mathbb{N}^*)^r$ avec $s_1 \geq 2$, l'expression*

$$\pi_Y(\pi_X(y_1) \sqcup \pi_X(y_{s_1} \cdots y_{s_r})) - y_1 \sqcup y_{s_1} \cdots y_{s_r}$$

produit une relation nulle entre multizêtas.

Par exemple, pour $r = 2$ et $(s_1, s_2) = (2, 1)$, on trouve :

$$\begin{aligned} \pi_Y(\pi_X(y_1) \sqcup \pi_X(y_2 y_1)) - y_1 \sqcup y_2 y_1 &= \pi_Y(x_1 \sqcup x_0 x_1^2) - (y_1 y_2 y_1 + 2y_2 y_1^2 + y_3 y_1 + y_2^2) \\ &= \pi_Y(x_1 x_0 x_1^2 + 3x_0 x_1^3) - (y_1 y_2 y_1 + 2y_2 y_1^2 + y_3 y_1 + y_2^2) \\ &= (y_1 y_2 y_1 + 3y_2 y_1^2) - (y_1 y_2 y_1 + 2y_2 y_1^2 + y_3 y_1 + y_2^2) \\ &= y_2 y_1^2 - y_3 y_1 - y_2^2 \end{aligned}$$

D'où :

$$\zeta(2, 1, 1) = \zeta(3, 1) + \zeta(2, 2) . \quad (5)$$

3 Établissements des tables

En utilisant la relation de double shuffle pour $r = 1$ et $s_1 = 3$, on trouve aussi :

$$\zeta(2, 2) + \zeta(3, 1) = \zeta(4) . \quad (6)$$

Ainsi, en utilisant les équations (3)-(6), *i.e.* les trois types de relations, nous avons prouvé :

$$\begin{aligned} \zeta(4) &= \frac{2}{5}\zeta(2)^2 & \zeta(3, 1) &= \frac{1}{4}\zeta(4) = \frac{1}{10}\zeta(2)^2 \\ \zeta(2, 2) &= \frac{3}{4}\zeta(4) = \frac{3}{10}\zeta(2)^2 & \zeta(2, 1, 1) &= \zeta(4) = \frac{2}{5}\zeta(2)^2 \end{aligned}$$

La conjecture suivante explique que l'on obtienne tous les multizêtas de poids 4, c'est-à-dire tels que $s_1 + \dots + s_r = 4$:

Conjecture 2. *Toutes les relations entre multizêtas proviennent des trois familles de relations précédentes.*

En exploitant astucieusement ces trois familles de relations (cf. [4] et [5]), et du temps de calcul, on peut alors tabuler les multizêtas.

4 Objectif du projet

Bien que le contexte du projet paraisse être purement mathématique, le projet se situe sur la frontière maths / info. Le travail demandé s'oriente de prime abord beaucoup plus vers de l'implémentation et de l'optimisation de code. Néanmoins, le sujet est suffisamment riche pour que l'étudiant choisissant ce sujet puisse s'y épanouir en favorisant ses goûts scientifiques.

Tel que pensé et présenté ici, l'objectif primaire du projet est de :

1. produire une bibliothèque Python de calculs sur les polynômes non commutatifs ; en particulier :
 - elle devra implémenter les opérations usuelles sur les polynômes ;
 - elle permettra de simplifier les polynômes ;
 - elle devra implémenter les produits de shuffle et de stuffle ;
2. coder une classe **Expression** permettant de créer une expression formelle basée sur les polynômes non commutatifs qu'il sera possible d'évaluer le moment venu. Celle-ci devra se baser sur une structure d'arbre.
3. implémenter l'écriture de toutes les relations produites (dans un ordre intelligent) à un poids donné.
4. analyser les résultats.

Dans un second temps, on cherchera à optimiser le code au maximum :

- en mettant en place un cache pour les calculs de produit de shuffle ou de stuffle ;
- en utilisant un profiler (cf. [6]) ;
- en limitant la mémoire utilisée (cf. [6]) ;
- en déléguant un certain nombre de tâches à de la programmation en C (cf [3]) ou en **Cython** ;
- ...

L'étudiant choisissant ce sujet développerait de solides connaissances en optimisation de code. D'un point de vue scientifique, un tel projet permettra d'apporter à la communauté de nouvelles tables de multizêtas, utilisable par des chercheurs du monde entier, avec en perspective, une publication envisageable si les limites sont repoussées suffisamment loin.

Références

- [1] J. BLÜMLEIN, D. J. BROADHURST, J. A. M. VERMASEREN : *The Multiple Zeta Value Data Mine*, Computer Physics Communications, Volume 181 Issue 3, 2010, p. 582-625.
- [2] J. BLÜMLEIN, D. J. BROADHURST, J. A. M. VERMASEREN : *The Multiple Zeta Value Data Mine Website*, <https://www.nikhef.nl/form/datamine/>
- [3] B. W. KERNIGHAN, D. M. RITCHIE : *The C programming language*, Prentice Hall Software Series, Englewood Cliffs, Pearson Education, 2nd ed., 1988, 272p.
- [4] G. JACOB., N. E. OUSSOUS, M. PETITOT : *Calcul formel*, cours de DEA de l'Université de Lille 1, 2000, disponible sur demande à l'auteur du projet.
- [5] H. N. MINH, M. PETITOT : *Lyndon words, polylogarithms and the Riemann ζ function*, Discrete Mathematics, Volume 217, Issues 1-3, 2000, p. 273-292.
- [6] B. SLATKIN : *Effective Python - 90 Specific Ways to Write Better Python*, Addison-Wesley Professional, 2nd ed., 2019, 256p.
- [7] K. W. SMITH : *Cython*, O'Reilly Media, 2014, 256p.
- [8] M. WALDSCHMIDT : *Valeurs zêta multiples. Une introduction*, Journal de Théorie des Nombres de Bordeaux, Volume 12 (2000), p. 581-592.
- [9] W. ZUDILIN *Multiple zeta values, Tasting notes*, version du 14/04/2025, 113p., disponible sur la page professionnelle de l'auteur : <https://www.math.ru.nl/zudilin/PS/MZV.pdf>