UNIVERSITÉ LAVAL

# Approches spectrales et conditions structurelles pour réduire la dimension des systèmes complexes

**Thèse**

**Vincent Thibeault**

**Doctorat en physique**
Philosophiæ doctor (Ph. D.)

Québec, Canada

© Vincent Thibeault, 2026

# Approches spectrales et conditions structurelles pour réduire la dimension des systèmes complexes

**Thèse**

**Vincent Thibeault**

Sous la direction de:

Antoine Allard, directeur de recherche
Patrick Desrosiers, codirecteur de recherche

# Résumé

Les systèmes complexes sont constitués d'un grand nombre d'éléments en interaction dont l'évolution temporelle non linéaire conduit à l'émergence de phénomènes collectifs gouvernant leur fonctionnement global. Par exemple, le cerveau humain contient près de $10^{11}$ neurones, un ordre de grandeur comparable au nombre d'étoiles dans la Voie lactée. De plus, les neurones sont connectés dans un réseau complexe de $10^{14}$ synapses, qui possèdent une activité électrochimique extrêmement riche. Ces caractéristiques donnent au cerveau la capacité d'accomplir des fonctions essentielles telles que la cognition ou la mémoire, mais elles obscurcissent aussi la compréhension et la prédiction de comportements anormaux comme les crises d'épilepsie.

Modéliser mathématiquement et numériquement les systèmes complexes pour identifier les mécanismes à l'origine de tels phénomènes représente un défi colossal en raison de la grande quantité de variables à considérer ou autrement dit, à cause de leur haute dimensionnalité. Une pratique courante chez les modélisateurs consiste alors à réduire ce nombre de variables dont l'évolution dans le temps est régie par des équations différentielles couplées via une matrice, représentant le réseau d'interactions. Toutefois, des hypothèses sur les réseaux sont souvent faites sans justification théorique et sans vérification expérimentale pour en arriver à de telles réductions dimensionnelles, ce qui met en doute leur validité.

Dans cette thèse, nous identifions des conditions structurelles pour lesquelles il est possible de réduire la dimension des dynamiques non linéaires sur des réseaux complexes. Pour ce faire, nous utilisons différentes approches spectrales basées sur les graphes, les matrices aléatoires et la théorie de Koopman. D'abord, nous introduisons l'« hypothèse de bas rang des systèmes complexes » et démontrons sa prévalence dans la littérature. Pour vérifier sa validité, des réseaux complexes empiriques d'origines diverses sont rassemblés et analysés, ce qui révèle (1) leur basse dimension effective, (2) des opportunités pour réduire la dimension de leurs dynamiques et (3) des mécanismes menant à l'émergence d'interactions d'ordre supérieur. Ensuite, nous revisitons la réduction dimensionnelle d'un modèle emblématique d'oscillateurs capables de se synchroniser. Bien qu'une telle réduction soit traditionnellement associée à des ensembles d'oscillateurs identiques, cette association s'avère restrictive. Nous établissons des conditions plus générales sous lesquelles une réduction dimensionnelle exacte demeure possible, dévoilant un lien clair entre la structure des interactions et les quantités conservées.

# Abstract

Complex systems consist of a large number of interacting elements whose nonlinear temporal evolution gives rise to collective phenomena governing their global behavior. For example, the human brain contains nearly $10^{11}$ neurons, an order of magnitude comparable to the number of stars in the Milky Way. Moreover, neurons are connected through a complex network of approximately $10^{14}$ synapses exhibiting extraordinarily rich electrochemical activity. While these features enable the brain to perform essential functions such as cognition and memory, they also obscure our ability to understand and predict abnormal behaviors, including epileptic seizures.

Mathematical and numerical modeling of complex systems, aimed at identifying the mechanisms underlying such phenomena, poses a formidable challenge due to the large number of variables involved — that is, their high dimensionality. A common strategy therefore consists in reducing the number of variables whose temporal evolution is governed by coupled differential equations, where the coupling is encoded in a matrix representing a network. However, hypotheses about such networks that enable dimensionality reduction are often introduced without theoretical justification or experimental validation, thereby raising concerns regarding their validity.

In this thesis, we identify structural conditions under which the dimension of nonlinear dynamics on complex networks can be reduced. To this end, we adopt different spectral approaches rooted in graph theory, random matrix theory, and Koopman operator theory. First, we introduce the low-rank hypothesis of complex systems and demonstrate its prevalence in the literature. To assess its validity, empirical complex networks from diverse domains are compiled and analyzed, revealing (1) their low effective dimensionality, (2) opportunities for dimensional reduction of their dynamics, and (3) mechanisms leading to the emergence of higher-order interactions. We then revisit the dimension reduction of an emblematic model of synchronizing oscillators. Although such reduction is often associated with identically coupled oscillators, this association proves to be restrictive. We establish more general conditions under which an exact dimension reduction remains possible, revealing a clear connection between interaction patterns and conserved quantities.

# Table des matières

**Résumé** ii

**Abstract** iii

**Table des matières** iv

**Liste des tableaux** viii

**Liste des figures** ix

**Liste des contributions** xi

**Notation, abréviations et symboles** xii

**Remerciements - De la dévotion** xxi

**Avant-propos** xxiv

**Introduction - À la recherche d'observables** 1

**1 Décomposition en valeurs singulières** 7
- 1.1 Introduction à la factorisation de rang . . . 8
- 1.2 Définition de la SVD . . . 12
- 1.3 Lien entre différentes factorisations . . . 18
- 1.4 Théorème de Weyl et factorisation de bas rang optimale . . . 24
- 1.5 Rangs effectifs . . . 31

**2 Théorie spectrale des graphes** 37
- 2.1 Graphes . . . 38
- 2.2 Propriétés spectrales des graphes . . . 48
- 2.3 Théorie spectrale des graphes aléatoires . . . 56
- 2.4 SVD et graphes . . . 63

**3 Perspectives sur les systèmes dynamiques** 72
- 3.1 Systèmes dynamiques . . . 72
- 3.2 Théorie de Koopman . . . 77
- 3.3 Propriétés spectrales du générateur de Koopman . . . 84
- 3.4 Généralités sur la réduction dimensionnelle . . . 95

**4 L'hypothèse de bas rang des systèmes complexes** **105**
4.1 Avant-propos . . . 106
4.2 Résumé . . . 108
4.3 Abstract . . . 108
4.4 Introduction . . . 109
4.5 Evidence of the hypothesis for network models . . . 111
4.6 Verification of the hypothesis for real networks . . . 114
4.7 Induced low-dimension hypothesis . . . 114
4.8 Emergence of higher-order interactions . . . 117
4.9 Conclusions and outlook . . . 120
4.10 Methods . . . 121
4.10.1 Random graphs . . . 121
4.10.2 Effective ranks . . . 123
4.10.3 Dimension reduction of dynamical systems . . . 125
4.10.4 Emergence of higher-order interactions . . . 128
4.10.5 *Integration and properties of the dynamics . . . 128
4.11 Appendix: SVD in the study of complex systems . . . 130
4.11.1 SVD of random graphs . . . 130
4.11.2 Exponential decrease of singular values in soft configuration models . 141
4.11.3 Impact of singular value distribution and density on effective ranks . 150
4.11.4 *Adaptive networks . . . 166
4.11.5 *SVD for dynamical systems . . . 167
4.12 Appendix: Dimension reduction of complex systems . . . 167
4.12.1 Emergence of higher-order interactions . . . 168
4.12.2 Upper bound on the alignment error and exact dimension reduction 177
4.12.3 *Computation of the upper bound on the alignment error . . . 183
4.12.4 *Global observables . . . 188
4.12.5 *Numerical efficiency . . . 190
4.12.6 *Numerical integration of the dynamics . . . 191
4.13 *Appendix: Real network dataset . . . 193

**5 Symétries des équations différentielles** **196**
5.1 Invariance et groupe de symétrie . . . 197
5.2 Prolongation d'une fonction et espace $n$-jet . . . 200
5.3 Prolongation et condition infinitésimale de symétrie . . . 203
5.4 Calcul des symétries pour les systèmes dynamiques . . . 210

**6 Quantités conservées, symétries et motifs d'oscillateurs de Kuramoto** **225**
6.1 Avant-propos . . . 226
6.2 Résumé . . . 226
6.3 Abstract . . . 227
6.4 Introduction . . . 227
6.5 Constants of motion and network motifs . . . 230
6.6 Symmetry-generated constants of motion . . . 238
6.7 Examples and applications . . . 243
6.8 Discussion . . . 247
6.9 Methods . . . 248
6.10 Appendix: Introduction to the Kuramoto model under Koopman's perspective 251

6.10.1 Different descriptions for the Kuramoto model . . . 252
6.10.2 Koopman generator for the Kuramoto model . . . 254
6.11 Appendix: Monomial eigenfunctions and their conservation . . . 255
6.11.1 Proof of Theorem 1: Monomial eigenfunctions . . . 256
6.11.2 Procedure for constructing the monomial eigenfunction exponent $\boldsymbol{\mu}$ . 259
6.11.3 Monomials as constants of motion . . . 260
6.11.4 Basic examples for Theorem 1 and the conservation of monomials . . 261
6.12 Appendix: Vandermonde-ratio eigenfunctions . . . 262
6.12.1 Proof of Theorem 2: Vandermonde-ratio eigenfunction . . . 263
6.12.2 Conserved quantity for Janus and excitation-inhibition oscillators . . 265
6.13 Appendix: Conservation of cross-ratios . . . 267
6.13.1 *Introduction to cross-ratios . . . 267
6.13.2 *Cross-ratios as joint invariants of the special linear algebra . . . 269
6.13.3 *Functional independence of cross-ratios . . . 270
6.13.4 Proof of Theorem 3: Cross-ratios as constants of motion . . . 273
6.13.5 Basic examples for Theorem 3 . . . 281
6.13.6 Corollaries of Theorem 3 . . . 283
6.13.7 WS integrals to Darboux functions . . . 287
6.14 Appendix: Lie symmetries and the generation of new constants of motion . 289
6.14.1 Proof of the Lemma: Symmetry criterion under Koopman's perspective 289
6.14.2 Basic symmetries of the Kuramoto model . . . 293
6.14.3 General determining equations for the Kuramoto model . . . 294
6.14.4 Symmetry generators from determining-matrix singular vectors . . . 297
6.14.5 Proof of Theorem 4: Peripheral constants of motion . . . 299
6.14.6 Basic examples for Theorem 4 . . . 302
6.14.7 Explicit form for the symmetry transformation related to $\mathcal{S}_\eta$ . . . 305
6.14.8 Parametrized families of conserved quantities . . . 307

**7 Intégration partielle du modèle de Kuramoto** **313**
7.1 Avant-propos . . . 314
7.2 Résumé . . . 314
7.3 Abstract . . . 315
7.4 Introduction . . . 315
7.5 Operator-theoretic description of the Kuramoto model . . . 317
7.6 Construction of the partially integrable model . . . 318
7.7 Partial integration . . . 322
7.8 Conclusion . . . 331
7.9 Appendix : From the Kuramoto model to Riccati equations . . . 332
7.10 Appendix : Matone's formula for the projective special unitary group . . . 333
7.11 *Appendix : Details on the partial integration of the cross-ratio parts . . . 335
7.12 *Appendix : Partial integration of basic dynamics with conserved cross-ratios 343

**Conclusion et perspectives** **346**

**Annexes** **349**

**A Complément d'algèbre linéaire et d'analyse fonctionnelle** **350**
A.1 Inégalités sur le rang . . . 350
A.2 Théorème de Gershgorin et ses conséquences . . . 351
A.3 Résultats préliminaires au théorème de Hoffman . . . 353
A.4 Bornes spectrales sur les différences de matrices . . . 356
A.5 Espace des observables et algèbre de Banach . . . 358

**B Topologie et compactification du plan complexe** **360**
B.1 Concepts de base en topologie . . . 360
B.2 Caractérisation topologique du plan complexe . . . 362
B.3 Projection stéréographique . . . 365
B.4 Compactification du plan complexe et sphère de Riemann . . . 367
B.5 Continuité et holomorphicité à l'infini . . . 371

**C Groupes d'automorphismes en analyse complexe** **374**
C.1 Transformations conformes . . . 374
C.2 Automorphismes et transformations de Möbius . . . 377
C.3 Groupes d'automorphismes de la sphère de Riemann et du disque unité . . . 382
C.4 Variété différentielle et groupe de Lie . . . 387

**D Méthode des caractéristiques** **391**
D.1 Courbes et équations caractéristiques . . . 391
D.2 Illustration de la méthode en 2D . . . 393
D.3 Cas général en $N$ dimensions . . . 399
D.4 Changement de coordonnées basé sur les symétries . . . 405

**Bibliographie** **407**

# Liste des tableaux


4.1 Low-rank formulation of various random graphs . . . . . 122
4.2 Different effective ranks of a matrix . . . . . 123
4.3 Vector fields of typical nonlinear dynamics on a network and their least-square optimal reduced dynamics . . . . . 126
4.4 Average evaluation time of reduced vector fields . . . . . 191

5.1 Relations de commutation de la sous-algèbre de Lie reliée aux symétries d'un système linéaire . . . . . 223

6.1 Eigenfunctions and constants of motion of the Koopman generator for the Kuramoto model . . . . . 230

7.1 Random matrix admitting monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios in the Kuramoto model . . . . . 321
7.2 Summary of the partially integrated Kuramoto dynamics on the random graph defined in Table 7.1. . . . . 330

# Liste des figures


1.1 Interprétation géométrique de la SVD pour une matrice réelle de dimension $2 \times 2$. 13
1.2 Illustration simple du rang à l'aide de drapeaux. . . . . 15
1.3 La SVD tronquée à $k < r$ termes est l'approximation de bas rang optimale . . . 26
1.4 Compression de deux drapeaux ayant différents niveaux de détails. . . . . 35

2.1 Réseau du connectome partiel de la mouche à fruit . . . . . 38
2.2 Convergence de la distribution de la valeur propre dominante du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ vers une densité gaussienne . . . . . 57
2.3 Densité spectrale d'un SBM à deux communautés . . . . . 58
2.4 Distribution de la valeur propre dominante du modèle Chung-Lu . . . . . 58
2.5 ESD du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ dans le régime dense . . . . . 60
2.6 ESD du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ dans le régime creux et des modèles de Watts-Strogatz et Barabási-Albert . . . . . 60
2.7 Convergence de la distribution spectrale empirique du modèle de type $\mathcal{G}(N,p)$ pondéré et orienté vers la loi circulaire . . . . . 61
2.8 Densités spectrales complexes des connectomes . . . . . 63
2.9 Une petite perturbation d'une matrice de poids d'un graphe fait augmenter son rang. . . . . 63
2.10 Décroissance des valeurs singulières de la matrice d'adjacence de différents graphes 64
2.11 Une « étoile perturbée » de 9 sommets où deux paires de sommets en périphérie sont connectées . . . . . 65
2.12 Centralités d'autorité et du hub et vecteurs singuliers dominants . . . . . 66
2.13 Loi de Marchenko-Pastur pour différentes valeurs de ratio des dimensions $\lambda$ de la matrice. . . . . 68
2.14 La distribution des valeurs singulières au carré pour le modèle $\mathcal{G}(N,p)$ orienté suit la loi de Marchenko-Pastur. . . . . 69

3.1 Deux perspectives sur les systèmes dynamiques . . . . . 83
3.2 Matrice de réduction $M$, son projecteur associé $P$ et ses sous-espaces vectoriels induits . . . . . 99

4.1 Emergent higher orders . . . . . 107
4.2 Experimental verification of the low-rank hypothesis for real networks . . . . . 110
4.3 Three indicators of the low-rank hypothesis for random graphs . . . . . 113
4.4 The low-rank hypothesis of complex systems and the emergence of higher-order interactions . . . . . 115
4.5 Dimension reduction errors for nonlinear dynamics on real complex networks in relation with their singular values and effective ranks . . . . . 118

4.6 Rescaled singular values for typical (non-random) graphs and three random graphs . . . 137
4.7 Upper bounds on the singular values of the expected matrix of the directed soft configuration model . . . 149
4.8 Singular-value envelopes and their impact on the asymptotics of effective ranks 163
4.9 Singular values of *C. elegans*' connectome at different developmental stages . . 167
4.10 Global observable at equilibrium of the complete and reduced Wilson-Cowan dynamics on the *C. elegans* connectome . . . 182
4.11 The upper bounds on the alignment error of the neuronal dynamics . . . 186
4.12 The upper bounds on the alignment error of the microbial dynamics . . . 188
4.13 Different effective ranks vs. the number of vertices for 679 real networks . . . 195
4.14 Different effective ranks vs. the density for 679 real networks . . . 195

5.1 Représentation de la surface associée à une équation différentielle . . . 203
5.2 Transformation d'une solution de la dynamique de l'oscillateur non uniforme sous l'action de différentes symétries . . . 219

6.1 The Kuramoto model, its constants of motion, and its Lie symmetries under Koopman's perspective . . . 228
6.2 Network of Kuramoto oscillators with motifs supporting various constants of motion . . . 233
6.3 Illustration of constants of motion, Lie symmetries, and the synchronization of 101 conformist-contrarian oscillators . . . 244
6.4 Presence of network motifs admitting conserved quantities in empirical networks 246
6.5 Cross-ratio as a projective invariant . . . 268
6.6 Simplified history of weight matrices in WS theory . . . 283
6.7 4-vertices motifs admitting a conserved cross-ratio . . . 285
6.8 5-vertices motifs admitting two conserved cross-ratios . . . 285
6.9 Illustration of a graph with symmetry generators $\mathcal{S}_1, ..., \mathcal{S}_r$ . . . 300
6.10 Basic example with coexisting conserved quantities of different types . . . 304

7.1 Illustration of a random graph instance admitting conserved monomials and cross-ratios . . . 322
7.2 Summary of the procedure to get the partially integrated system from the model admitting monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios. . . . 326
7.3 Principal branch of the function $\nu$ in Matone's formula and its derivative . . . 341

A.1 Illustration du théorème de Gershgorin . . . 352

B.1 Projection stéréographique de la sphère excluant un pôle sur le plan complexe . 366

C.1 Surface d'Enneper . . . 375

# Liste des contributions

Les articles dans la liste suivante ont été soumis ou publiés durant le doctorat et ceux qui sont identifiés d'une étoile sont contenus dans cette thèse.

⋆ Operator-theoretic approach to the partial integration of randomly coupled phase oscillators
*V. Thibeault*, B. Claveau, A. Allard, P. Desrosiers, arXiv (2026)

⋆ Kuramoto meets Koopman: Constants of motion, symmetries and network motifs
*V. Thibeault*, B. Claveau, A. Allard, P. Desrosiers, arXiv (2025)

– On the reconstructability of complex networks from dynamics
C. Murphy, S. Lizotte, F. Thibault, *V. Thibeault*, P. Desrosiers, A. Allard, arXiv (2025)

⋆ The low-rank hypothesis of complex systems
*V. Thibeault*, A. Allard, P. Desrosiers, Nat. Phys., **20**, 294 (2024)
Page couverture de Nature Physics (février 2024) et présentation dans News & Views.

– Duality between predictability and reconstructability in complex systems
C. Murphy, *V. Thibeault*, A. Allard, P. Desrosiers, Nat. Commun., **15**, 4478 (2024)

– Dimension reduction of dynamics on modular and heterogeneous directed networks
M. Vegué, *V. Thibeault*, P. Desrosiers, A. Allard, PNAS Nexus, **2**, pgad150 (2023)

– Social confinement and mesoscopic localization of epidemics on networks
G. St-Onge, *V. Thibeault*, A. Allard, L. J. Dubé, and L. Hébert-Dufresne, Phys. Rev. Lett., **126**, 098301 (2021)

– Master equation analysis of mesoscopic localization in contagion dynamics on higher-order networks
G. St-Onge, *V. Thibeault*, A. Allard, L. J. Dubé, and L. Hébert-Dufresne, Phys. Rev. E, **103**, 032301 (2021)

– Threefold way to the dimension reduction of dynamics on networks: An application to synchronization
*V. Thibeault*, G. St-Onge, L. J. Dubé, and P. Desrosiers, Phys. Rev. Res., **2**, 043215 (2020)

# Notation, abréviations et symboles

## Notation

Un vecteur d'un espace vectoriel de dimension $N$ est noté par une lettre minuscule et le caractère gras est généralement favorisé pour éviter la confusion avec les scalaires, bien que non systématiquement. Par exemple, $\boldsymbol{v} = (v_1 \quad v_2 \quad \dots \quad v_N)^\top$ où $v_j$ est la $j$-ième composante du vecteur et $^\top$ est la transposition matricielle. Le vecteur (colonne) de 1 est noté $\mathbf{1}$, alors que $\mathbb{1}_X$ est la fonction indicatrice sur $X \subset \mathbb{R}$ avec $\mathbb{1}_X(x) = 1$ si $x \in X$ et 0 si $x \notin X$. Une étoile $\star$ dans une matrice signifie une valeur arbitraire. Un $+$ en exposant d'une matrice est la pseudoinversion de Moore-Penrose, $\dagger$ est la transposition hermitienne et un point suscrit au-dessus d'une lettre signifie la dérivée par rapport au temps.

Nous emploierons souvent la même notation pour une fonction et sa valeur, comme par exemple, $x(t) = x$. Ce sera aussi le cas pour une valeur propre $\lambda_i \in \mathbb{C}$ ou une valeur singulière $\sigma_i \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ d'une matrice $A$, qui seront aussi écrites $\lambda_i(A)$ et $\sigma_i(A)$. Par abus de langage, nous dirons que les graphes ont des valeurs propres et des valeurs singulières.

La notation $\mathbb{E}[X]$ ou $\langle X \rangle$ est utilisée pour l'espérance d'une variable aléatoire $X$ et $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ est la densité de probabilité gaussienne (normale) de moyenne $\mu$ et de variance $\sigma^2$.

## Abréviations

| | |
|---|---|
| i.i.d. | indépendantes et identiquement distribuées |
| SVD | Singular Value Decomposition |
| PCA | Principal Component Analysis |
| SCM | Soft Configuration Model |
| SBM | Stochastic Block Model |
| ESD | Empirical Spectral Distribution |
| BBP | Baik-Ben Arous-Péché |
| RNN | Réseaux de neurones récurrents |
| WS | Watanabe-Strogatz |
| DART | Dynamics Approximate Reduction Technique |
| RMSE | Root Mean-Squared Error |
| EDO | Équation Différentielle Ordinaire |

# Symboles généraux

## Ensembles et constantes

| | |
|---|---|
| $\varnothing$ | Ensemble vide. |
| $\mathbb{N}$ | Ensemble des naturels incluant 0. |
| $\mathbb{Z}$ | Ensemble des entiers. |
| $\mathbb{R}$ | Ensemble des réels. |
| $\mathbb{C}$ | Ensemble des complexes. |
| $\mathbb{T}$ | 1-tore, c'est-à-dire le cercle unité. |
| $\mathcal{P}(E)$ | Ensemble des parties (ensemble puissance) d'un ensemble $E$. |
| $\mathbb{D}$ | Disque unité ouvert. |
| $\mathscr{C}^k$ | Classe de différentiabilité d'une fonction [section C.4]. |
| $\pi$ | Pi (3.14159...). |
| $e$ | Constante d'Euler (2.71828...). |
| $i$ | Nombre imaginaire ($\sqrt{-1}$) ou indice, dépendant du contexte. |

## Opérations et relations

| | |
|---|---|
| $\circ$ | Composition de fonctions ou produit matriciel de Hadamard. |
| $\times$ | Produit cartésien. |
| $\#$ | Cardinalité. |
| $\sim$ | Relation d'équivalence. |
| $\simeq$ | Isomorphisme. |
| $\subset$ | Inclusion. |
| $[\cdot\,,\cdot\,]$ | Commutateur, tel que $[A,B] = AB - BA$ pour des opérateurs $A, B$. |

## Modes de convergence

| | |
|---|---|
| $\xrightarrow{a.s.}$ | Convergence presque sûrement |
| $\xrightarrow{p}$ | Convergence en probabilité |
| $\xrightarrow{d}$ | Convergence en distribution |

## Comparaison asymptotique

| | |
|---|---|
| $f(N) = o(g(N))$ | $f$ est asymptotiquement dominé par $g$, $\lim_{N\to\infty}(f(N)/g(N)) = 0$ |
| $f(N) = O(g(N))$ | $\limsup_{N\to\infty}(\lvert f(N)\rvert / g(N)) < \infty$ |

## Chapitre 1 :
## Décomposition en valeurs singulières

| | |
|---|---|
| $\lambda_i$ | $i$-ième valeur propre. |
| $r$ | Rang d'une matrice $A$, $r = \text{rank}(A)$. |
| $U$ | Matrice unitaire des vecteurs singuliers gauches. |
| $V$ | Matrice unitaire des vecteurs singuliers droits. |
| $\Sigma$ | Matrice rectangulaire diagonale des valeurs singulières $\sigma_1$, $\sigma_2$, ..., $\sigma_r$. |
| $U_n$ | Version tronquée de $U$ contenant les $n$ premiers vecteurs singuliers gauches. |
| $V_n$ | Version tronquée de $V$ contenant les $n$ premiers vecteurs singuliers droits. |
| $\Sigma_n$ | Version tronquée de $\Sigma$ contenant les $n$ premières valeurs singulières. |
| srank | Rang stable. |
| nrank | Rang nucléaire. |
| energy | Rang effectif du ratio d'énergie. |
| elbow | Rang du coude. |
| erank | Rang effectif de Roy et Vetterli basé sur l'entropie de Shannon. |

## Chapitre 2 :
## Théorie spectrale des graphes

| | |
|---|---|
| $\bar{\mathcal{G}}$ | Graphe non dirigé. |
| $\mathcal{G}$ | Graphe dirigé. |
| $\mathcal{V}$ | Ensemble des sommets $\{1, ..., N\}$. |
| $\bar{\mathcal{E}}$ | Ensemble des arêtes non dirigées $\{i, j\}$. |
| $\mathcal{E}$ | Ensemble des arêtes dirigées $(i, j)$. |
| $N$ | Nombre de sommets d'un graphe. |
| $W$ | Matrice de poids d'un graphe. |
| $A$ | Matrice d'adjacence d'un graphe $\bar{\mathcal{G}}$. |
| $L$ | Matrice Laplacienne d'un graphe $\bar{\mathcal{G}}$. |
| $\partial i$ | Voisinage du sommet $i$. |
| $k_i$ | Degré du sommet $i$ dans un graphe $\bar{\mathcal{G}}$. |
| $k_i^{\text{in}}$ | Degré entrant du sommet $i$. |
| $k_i^{\text{out}}$ | Degré sortant du sommet $i$. |
| $s_i^{\text{in}}$ | Force entrante du sommet $i$. |
| $s_i^{\text{out}}$ | Force sortante du sommet $i$. |

| | |
|---|---|
| $C_i$ | Coefficient d'agglomération local du sommet $i$. |
| $C$ | Coefficient d'agglomération global. |
| $\mathcal{H}$ | Hypergraphe. |
| $\Xi$ | Ensemble d'hyperarcs. |
| $R$ | Matrice aléatoire d'espérance nulle (ou matrice de bruit). |
| $\mathcal{G}(\cdot)$ | Graphe aléatoire. |
| $p_W$ | Polynôme caractéristique de $W$. |
| spec($W$) | Spectre de $W$. |
| $\rho(W)$ | Rayon spectral de $W$. |
| $\mu_A$ | Fonction décrivant la ESD de la matrice aléatoire $A$. |
| thrank | Rang effectif du seuil optimal. |
| shrank | Rang effectif du débruitage optimal. |

## Chapitre 3 :
## Perspectives sur les systèmes dynamiques

| | |
|---|---|
| $t$ | Temps. |
| $\boldsymbol{x}$ | État ou trajectoire (abus de notation). |
| $\mathscr{T}$ | Intervalle réel de temps. |
| $\mathscr{X}$ | Espace des états. |
| $\phi$ | Flot. |
| $\boldsymbol{F}$ | Champ vectoriel. |
| $f$ | Observable. |
| $\mathscr{O}$ | Espace des observables, défini comme une algèbre de Banach commutative. |
| $K_\phi$ | Opérateur de Koopman, un opérateur de composition avec $\phi$. |
| $\mathcal{K}$ | Générateur infinitésimal du semi-groupe d'opérateurs de Koopman, plus simplement appelé « générateur de Koopman ». |
| $R_\lambda(\mathcal{K})$ | Résolvant de $\mathcal{K}$ au point $\lambda$. |
| $\rho(\mathcal{K})$ | Ensemble des valeurs régulières de $\mathcal{K}$. |
| $\sigma(\mathcal{K})$ | Spectre de l'opérateur $\mathcal{K}$. |
| $\sigma_{\mathrm{p}}(\mathcal{K})$ | Spectre ponctuel de $\mathcal{K}$. |
| $\sigma_{\mathrm{c}}(\mathcal{K})$ | Spectre continu de $\mathcal{K}$. |
| $\sigma_{\mathrm{r}}(\mathcal{K})$ | Spectre résiduel de $\mathcal{K}$. |
| $\psi$ | Fonction propre de $K_{\phi_t}$ et $\mathcal{K}$. |
| $M$ | Matrice de réduction (ou d'agrégation). |
| $P$ | Projecteur $M^+M$. |

## Chapitre 4 :
## L'hypothèse de bas rang des systèmes complexes

| | |
|---|---|
| $N$ | Nombre de sommets et dimension de la dynamique complète. |
| $n$ | Nombre de sommets réduit et dimension de la dynamique réduite. |
| $R$ | Matrice aléatoire (de bruit). |
| $L$ | Matrice de bas rang. |
| $\Phi$ | Fonction de $L$ associée à une matrice de poids espérée d'un graphe aléatoire. |
| $x$ | État ou trajectoire de la dynamique complète. |
| $X$ | État ou trajectoire de la dynamique réduite. |
| $f$ | Champ vectoriel $\mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ de la dynamique complète. |
| $F$ | Champ vectoriel $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ de la dynamique réduite. |
| $\varepsilon(x)$ | Erreur d'alignement des champs vectoriels dans $\mathbb{R}^N$ avec $x \in \mathbb{R}^N$. |
| $\mathcal{E}(x)$ | Erreur d'alignement des champs vectoriels dans $\mathbb{R}^n$ avec $x \in \mathbb{R}^N$. |
| $\mathcal{D}$ | Matrice réduite $n \times n$ de paramètres dynamiques. |
| $\mathcal{W}$ | Matrice de poids réduite $n \times n$. |
| $\mathcal{T}$ | Tenseur représentant les interactions d'ordre supérieur entre les observables. |

## Chapitre 5 :
## Symétries de Lie des équations différentielles

| | |
|---|---|
| $G$ | Groupe. |
| $\mathrm{SO}(n)$ | Groupe de rotations de dim. $n$ (matrices orthogonales de déterminant 1). |
| $R_\theta$ | Matrice de rotation par un angle $\theta$, élément de $\mathrm{SO}(2)$. |
| $p$ | Nombre de variables indépendantes. |
| $q$ | Nombre de variables dépendantes. |
| $X$ | Sous-variété de $\mathbb{R}^p$ des variables indépendantes. |
| $U$ | Sous-variété de $\mathbb{R}^q$ des variables dépendantes. |
| $x$ | Variables indépendantes $(x^1, ..., x^p)$. |
| $u$ | Variables dépendantes $(u^1, ..., u^q)$ où $u^\alpha = f^\alpha(x^1, ..., x^p)$. |
| $\tilde{x}$ | Variables indépendantes transformées sous l'action du groupe. |
| $\tilde{u}$ | Variables dépendantes transformées sous l'action du groupe. |

| | |
|---|---|
| $p_k$ | Nombre de dérivées partielles d'ordre $k$. |
| $J$ | Multi-indice non ordonné d'entiers. |
| $u_J^\alpha$ | Valeur de la dérivée $\partial_J f^\alpha$ à $x$. |
| $U_k$ | Sous-variété de $\mathbb{R}^{qp_k}$ des dérivées d'ordre $k$. |
| $U^{(n)}$ | $U \times U_1 \times ... \times U_n \subset \mathbb{R}^{qp^{(n)}}$ avec $p^{(n)} = \binom{p+n}{n}$. |
| $\mathrm{pr}^{(n)} f$ | $n$-ième prolongation ($\mathrm{pr}^{(n)} f : X \to U^{(n)}$) d'une fonction $f : X \to U$. |
| $M^{(n)}$ | Espace $n$-jet de $M$, soit $M \times U_1 \times ... \times U_n$ avec $M \subset X \times U$. |
| $D_J$ | Dérivée totale sur l'espace $n$-jet. |
| $\Delta$ | Fonction de $M^{(n)}$ vers $\mathbb{R}^\ell$ servant à décrire les équations différentielles. |
| $\mathrm{pr}^{(n)} v$ | $n$-ième prolongation d'un champ vectoriel $v$. |
| $\xi, \phi$ | Coefficients des générateurs infinitésimaux. |

## Chapitre 6 :
## Quantités conservées, symétries et motifs d'oscillateurs de Kuramoto

| | |
|---|---|
| $\theta_j$ | Phase du $j$-ième oscillateur. |
| $z_j$ | Exponentielle complexe de $\theta_j$, soit $e^{i\theta_j}$. |
| $W_{jk}$ | Élément $(j,k)$ de la matrice de poids $W$, couplage de l'oscillateur $k$ à $j$. |
| $\alpha_{jk}$ | Élément $(j,k)$ de la matrice de déphasages $\alpha$. |
| $\omega_j$ | Fréquence naturelle du $j$-ième oscillateur. |
| $A_{jk}$ | Élément $(j,k)$, égal à $\frac{1}{2}(W_{jk}e^{i\alpha_{jk}} + i\omega_j\delta_{jk})$, de la matrice de poids $A$. |
| $C$ | Constante du mouvement, une fonction scalaire du temps $t$ et $z_1, ..., z_N$. |
| $z^{\boldsymbol{\mu}}$ | Monôme $z_1^{\mu_1}...z_N^{\mu_N}$ où $\mu_j \in \mathbb{R}$ pour tout $j$. |
| $\mathcal{W}$ | Sous-ensemble non vide de sommets. |
| $\mathcal{K}$ | Générateur de Koopman du modèle de Kuramoto général. |
| $\mathcal{K}_{\mathrm{id}}$ | Générateur de Koopman pour les oscillateurs de Kuramoto identiques. |
| $c_{abcd}$ | Birapport ou rapport anharmonique. |
| $C^{\mathrm{ws}}_{i_1...i_N}$ | Constante du mouvement de Watanabe-Strogatz. |
| $\mathcal{A}_\mu$ | Poids des arêtes du sommet $\mu$ vers les autres sommets, au sein d'un motif admettant un birapport conservé. |
| $\mathcal{S}$ | Générateur infinitésimal de symétrie. |
| $D(A)$ | Matrice déterminante dépendante de $A$. |
| $\mathcal{S}_\eta$ | Générateur infinitésimal de symétrie correspondant à l'évolution temporelle d'oscillateurs en périphérie d'une source. |
| PSU(1,1) | Groupe spécial unitaire projectif. |

## Chapitre 7 :
## Intégration partielle du modèle de Kuramoto

| | |
|---|---|
| $A$ | Voir Tableau 7.1. |
| $\Omega_\gamma$ | Fréquence naturelle effective au sein d'une partie $\mathcal{C}_\gamma$. |
| $\mathcal{K}_\gamma$ | Générateur de Koopman d'une partie $\mathcal{C}_\gamma$. |
| $\mathcal{J}_\tau$ | Générateur de Koopman d'une partie $\mathcal{M}_\tau$. |
| $\mathcal{K}_{\mathrm{NI}}$ | Générateur de Koopman d'une partie non intégrable. |
| $\boldsymbol{\mu}$ | Vecteur d'exposants des fonctions propres monomiales. |
| $\boldsymbol{\nu}$ | Vecteur d'exposants des monômes conservés. |
| $\phi_j$ | Coordonnées issues de l'intégration partielle des parties monomiales. |
| $\xi_j$ | Exponentielle complexe de $\phi_j$, soit $e^{i\phi_j}$. |
| $V$ | Matrice du changement des coordonnées $(\theta_j)_{j\in\mathcal{M}}$ vers $(\phi_j)_{j\in\mathcal{M}}$. |
| $\kappa_\eta$ | Constante dépendante des constantes du mouvement monomiales. |
| $\mathcal{R}_\gamma(t)$ | Générateur de Koopman de la dynamique de Riccati associé à $\mathcal{K}_\gamma$. |
| $Z_\gamma$ | Coordonnée sur $\mathbb{D}$ issue de l'intégration partielle des oscillateurs reliés à $\mathcal{C}_\gamma$. |
| $\zeta_\gamma$ | Coordonnée sur $\mathbb{T}$ issue de l'intégration partielle des oscillateurs reliés à $\mathcal{C}_\gamma$. |

*À mes enfants,*
*Henri et Marguerite,*
*et leur maman, Sarah*

The good life is one inspired by
love and guided by knowledge.

---

Bertrand Russell [510]

# Remerciements - De la dévotion

L'élaboration de cette thèse a été appuyée par des collaborations précieuses et un soutien exceptionnel de plusieurs personnes dévouées que je tiens à remercier explicitement.

D'abord, il n'est pas exagéré de dire que mes directeurs de recherche, Antoine Allard et Patrick Desrosiers, ont bravé les maladies et une pandémie pour superviser les membres du groupe Dynamica. Je salue leur courage. Je les remercie aussi de la liberté qu'ils m'ont accordée tout au long de mon doctorat et pour leur compréhension rassurante de mes contraintes familiales.

Patrick est depuis le début de mon baccalauréat (cours de physique-mathématique I en 2014) le guide numéro 1, incontesté, de mes connaissances en physique, en mathématique et leur éducation. C'est le meilleur professeur que je connais : j'ai répété à plusieurs reprises que ce qu'il enseignait se gravait directement dans mon esprit. J'ai pu découvrir ma manière d'approcher les problèmes en physique, soit au travers de mathématiques avec une notation plus claire et détaillée. Il s'est d'ailleurs chargé de m'appuyer et de m'enseigner pratiquement tous les volets de mathématiques formelles que j'ai voulu apprendre. Ce serait déjà beaucoup si ça s'arrêtait ici. Mais ma première exposition sérieuse à la recherche scientifique s'est fait en 2016 dans un stage d'été supervisé principalement par lui. Cette supervision s'est étalée sur 10 ans faisant aussi de lui le mentor numéro 1, incontesté, de ma formation en recherche. La solide complicité scientifique que nous avons développée au fil des années est à l'origine des projets de cette thèse. C'est avec un profond sentiment d'amitié et de gratitude que je le remercie pour sa générosité, sa patience et sa dévotion inconditionnelle.

Antoine a été une force optimiste tout au long de mon doctorat. Son soutien infaillible dans mes entreprises scientifiques a facilité l'atteinte de mon autonomie en recherche. Malgré toutes les tâches qu'un jeune professeur doit accomplir, il a su être présent et patient dans les longues discussions, souvent sur des sujets techniques, mais aussi sur les nombreux questionnements que j'aie eus sur mon parcours académique et sa saine poursuite. Je lui dois plusieurs nouvelles relations avec la communauté de la science des réseaux. Je suis reconnaissant pour le local lumineux et chaleureux qu'il a su trouver pour les étudiants gradués en physique.

Je tiens d'ailleurs à exprimer ma gratitude aux membres de mon jury, Jean-François Fortin, Nicolas Doyon et Renaud Lambiotte pour avoir accepté de lire et d'évaluer ma thèse. En parti-

culier, je remercie Jean-François pour sa prélecture rapide malgré la longueur de la thèse, ainsi que Renaud, pour avoir accepté d'agir à titre d'évaluateur externe et pour avoir généreusement appuyé mes applications postdoctorales.

J'ai aussi la chance d'avoir eu des mentors étudiants qui ont fortement enrichi mon parcours académique. Guillaume St-Onge me partage sa sagesse et son matériel scientifique depuis le début de mes études aux cycles supérieurs. Ses invitations à participer à des projets collaboratifs, à des révisions d'articles et à présenter à l'institut NetSI ont significativement enrichi mon expérience scientifique. Les entraînements musculaires au PEPS et l'entraînement du foie au scotch demeurent de beaux souvenirs du début de mon doctorat. C'est Charles Murphy qui m'aura permis de maintenir des travaux collaboratifs à l'Université Laval, alors que j'habitais à Matane. Plus nous avons cheminé ensemble, plus nous nous comprenions intellectuellement. Les articles Midynet reflètent bien notre émergente complicité, mais surtout son leadership et sa détermination. L'organisation du Zoo à Matane a été une belle réussite grâce à lui et courir le demi-marathon de Lévis à ses côtés était une expérience de fraternité mémorable.

Mon doctorat aurait été incomplet si je n'avais pas eu la chance de partager plus pleinement, à au moins un plus jeune étudiant, les connaissances que j'ai reçues de mes mentors. À ce titre, je me compte privilégié d'avoir pu travailler avec un étudiant aussi réceptif et talentueux que Benjamin Claveau. Sa contribution aux derniers projets de la thèse est significative, ce qui est le fruit d'une belle chimie et de sa persévérance dans l'étude de la théorie de Koopman. Je le remercie pour sa présence positive et sa confiance.

Je suis choyé d'avoir fait partie du groupe Dynamica, dont l'atmosphère détendue et amicale a rendu mon expérience comme étudiant plus agréable. Les randonnées de vélo, les symposiums Dynamica, les conférences, le cours de géométrie différentielle, les soupers de Noël et les Pedantix sont de beaux souvenirs que je garderai précieusement en mémoire. En plus des étudiants déjà mentionnés, je remercie Ariane, François, Marina, Antoine L., Benhaz, Olivier, Jérémi, Jordan, Francis, Béatrice, Ilhem, Jeson, Pierre-Luc et Arthur avec qui j'ai appris tant sur le plan scientifique que relationnel. L'héritage de M. Dubé aura aussi contribué à trouver ma voie, bien que je n'en trouverai jamais la fin.

Mes moments de solitude, consacrés à la recherche, ont été plus réjouissants et fructueux lorsqu'ils ont été entremêlés d'interactions amicales et familiales.

Du secondaire au doctorat, j'ai eu le privilège de cheminer aux côtés de Pierre-Marc, un ami passionné, humble et humain. Qui aurait cru que notre volonté au secondaire d'effectuer un doctorat se réaliserait ? Cet accord scellé par le sang en était peut-être le présage. Son parcours académique témoigne admirablement de sa persévérance et de sa résilience, rappelant avec justesse, et non sans émotion, que ὁ βίος βραχὺς, ἡ δὲ τέχνη μακρή. Ses travaux sur le rôle de DNJ-12 me rappellent sans cesse les difficultés de l'expérimentation et les beautés de la génétique [199,200]. Je reste marqué par nos discussions philosophiques et scientifiques, menées

au fil de nos entraînements à distance, puis prolongées par l'écoute de Clone Wars.

En physique, c'est Xavier, mon célébrant et mon bro, qui m'aura accompagné le plus longtemps. Son exigence de rigueur et son désir d'une compréhension limpide ont renforcé ma passion pour la physique et la science en général. Simon est, pour sa part, l'exemple parfait d'un ami dévoué. Entreprenant et présent, il a su me faire décrocher à maintes reprises de mes obsessions pour m'amener à des endroits calmes et paisibles de mon esprit. Je dois beaucoup à son érudition de même qu'à celle de Francis et Pierre-Marc, « parce que c'était eux, parce que c'était nous ». Merci aussi à l'Anti-Mike, les Garçons et l'équipe de Physio Bravo pour tous les beaux moments que nous avons passés ensemble.

Sur le plan familial, je ne peux parler de dévotion sans parler de Lucie et Stéphane, qui ont fait preuve d'une générosité sans fin envers Sarah, Marguerite, Henri et moi, comme quoi ma gratitude envers eux n'a plus de limites non plus. Leur support, agrémenté de celui de Élise, Marc-André, Étienne, Catherine, a été déterminant dans le maintien de notre unité familiale, notre santé mentale et par conséquent, l'écriture de cette thèse. Merci du fond du cœur.

Mes parents, Martine et Jerry, ont tissé un filet de sécurité robuste pour mon développement tout en cultivant ce qu'il y avait de plus vrai en moi. Cette thèse est le fruit de nombreuses années d'études au cours desquelles j'ai continuellement été rassuré par leur appui, merci profondément. Ma sœur Myriam m'a soutenu et encouragé tout au long de mes études. Elle est allée jusqu'au bout de ce soutien en contribuant à la conception d'une page couverture associée au chapitre 4. Je suis très heureux de t'avoir dans ma vie ; notre complicité ne cesse de grandir avec les années. Léandre et Juliette, j'ai toujours eu beaucoup de plaisir à jouer avec vous au fil de ces années d'études.

Henri et Marguerite, je vous aime à l'infini non dénombrable. J'apprends tant de vous ; j'espère vous en redonner autant. Merci d'attendrir mon cœur chaque jour. Je remercie finalement ma fleur de sel, Sarah, pour son soutien conditionnel qui me rappelle qu'il y a deux parties à mon épigraphe. Je suis sincèrement reconnaissant de t'avoir à mes côtés dans la quête de sagesse.

> Truth is a shining goddess, always veiled, always distant, never wholly approachable, but worthy of all the devotion of which the human spirit is capable.
> - Bertrand Russell [511, 512]

# Avant-propos

Trois articles ont été insérés dans la thèse, pour lesquels j'ai agi à titre de premier auteur. Des modifications mineures à leur contenu ont été appliquées pour se conformer au format de la Faculté des études supérieures et postdoctorales de l'Université Laval. Pour l'article incorporé au chapitre 4, des parties de son matériel supplémentaire ont été traduites en français et déplacées dans les trois premiers chapitres pour faciliter la lecture de la thèse.

⋆ Chapitre 4

The low-rank hypothesis of complex systems

*V. Thibeault*, A. Allard, P. Desrosiers, Nat. Phys., **20**, 294 (2024)

Tous les auteurs ont contribué à l'élaboration de l'étude, à l'interprétation des résultats et à la rédaction de l'article. V.T. et P.D. ont obtenu les résultats mathématiques et conçu les fondements conceptuels du projet. V.T. a mené la rédaction du manuscrit, rédigé le matériel supplémentaire à l'aide de P.D., conçu les figures, développé le code et réalisé les expériences numériques qui ont permis de produire les résultats. V.T., A.A. et P.D. ont contribué au code et analysé les données ayant servi à générer la Fig. 4.2.

⋆ Chapitre 6

Kuramoto meets Kooman: Constants of motion, symmetries and network motifs

*V. Thibeault*, B. Claveau, A. Allard, P. Desrosiers, arXiv (2025). Soumission : 27/11/2025

V.T. a conceptualisé le projet avec P.D., rédigé le manuscrit, écrit le matériel supplémentaire avec le support de B.C. et P.D., conçu les figures, développé le code à l'aide de B.C. et réalisé les expériences numériques qui ont permis de produire les résultats. Les trois théorèmes ont été formulés et démontrés par V.T. et B.C. avec les raffinements et corrections de P.D., alors que le lemme est issue de V.T. et P.D. Tous les auteurs ont contribué à l'élaboration de l'étude, à l'interprétation des résultats et à l'édition de l'article.

⋆ Chapitre 7

Operator-theoretic approach to the partial integration of randomly coupled phase oscillators

*V. Thibeault*, B. Claveau, A. Allard, P. Desrosiers (2026). Soumission : 30/06/2026.

Article invité au « Focus on the Kuramoto Model » dans J. Phys. Complex., 21/10/2025

V.T. a conceptualisé le projet, écrit l'article et obtenu les résultats. La figure 7.1 a été réalisée avec B.C. Tous les auteurs ont contribué à l'interprétation des résultats.

### Déclaration sur l'utilisation de l'intelligence artificielle (IA) générative

Les idées originales de la thèse, son contenu et les algorithmes servant à générer ses résultats n'ont pas été produits par l'IA. Vers la fin du doctorat, l'IA générative a été utilisée pour éditer, corriger et aider à la traduction de certaines phrases de la thèse. Elle a aussi permis d'identifier des fautes de langues, des imprécisions mathématiques et des erreurs de code Python servant à générer des figures. Les correctifs suggérés par l'IA générative ont été rigoureusement vérifiés et aucune suggestion scientifique n'a été considérée sans appui de références de qualité (articles scientifiques publiés et revus par les paires ou livres écrits par des experts). L'utilisation responsable et intelligente de l'IA générative a été discutée et approuvée par les superviseurs.

### Sur les références

S'aventurer librement dans une démarche scientifique est une expérience transformatrice que la lecture vient approfondir. Apprendre, réinterpréter et généraliser les techniques anciennes comme nouvelles assure la pérennité des connaissances scientifiques, à une époque où la quantité d'articles croît rapidement. C'est dans cet esprit que la thèse a été écrite. Loin de prétendre avoir lu en détail chacun des articles et livres cités, je me suis efforcé d'en avoir au moins une connaissance sommaire, me permettant de juger de leur pertinence pour les propos scientifiques que j'avance. L'ensemble des références sert de guide pour les explorateurs d'articles voulant voir au-delà du contenu de la thèse. Ce guide n'est évidemment pas exhaustif et j'aurai certainement omis plusieurs références pertinentes, ce dont je m'excuse d'avance.

# Introduction
# À la recherche d'observables

La maturité d'un physicien consiste peut-être à retrouver sa fascination pour les théories effectives. Sous le charme de la relativité d'Einstein, un jeune physicien peut critiquer hâtivement la théorie du mouvement de Newton en raison de ses approximations, notamment sa validité restreinte aux vitesses non relativistes. Il pourrait aussi minimiser l'intérêt des modèles de Kuramoto [332] ou de Wilson–Cowan [634] en neuroscience théorique, en comparaison avec la richesse descriptive des modèles de type Hodgkin–Huxley [266]. Pourtant, les théories effectives sont, par nature, limitées et c'est dans la maîtrise des approximations que se révèle toute leur beauté. Certains disent même que le but de la science est de dresser la liste minimale des plus simples principes qui prédisent le plus possible le monde naturel [186].

Il est toutefois difficile d'atteindre une telle simplicité : la prédiction de phénomènes collectifs exige souvent la prise en compte d'un grand nombre de variables interreliées qui influencent de manière significative la dynamique globale du système [622]. Par exemple, dans un écosystème, constitué d'une multitude de populations animales et végétales en interaction, l'extinction d'une espèce peut entraîner l'effondrement inattendu de la biodiversité [173]. De même, dans le cerveau humain, des fonctions essentielles telles que la mémoire émergent de l'activité électrochimique riche et des interactions hétérogènes entre des milliards de neurones [109]. Enfin, au sein des populations humaines, un virus comme le SARS-CoV-2 se propage via le réseau de transport aérien et peut conduire à une pandémie à l'échelle mondiale [550].

### Systèmes complexes

Ces systèmes se regroupent sous la catégorie des *systèmes complexes*. Ceux-ci sont composés de plusieurs parties en interaction dont le comportement collectif ne s'infère pas directement des parties individuellement [432]. Cela s'explique par l'émergence, à différentes échelles, de phénomènes collectifs distincts de ceux observés au niveau des parties [20, 47, 501]. Il n'y a pas d'incohérence entre les phénomènes au niveau des parties et ceux des échelles supérieures, mais il y a une difficulté à établir un lien entre ces niveaux de description [21].

L'étude des systèmes complexes s'inscrit dans un héritage intellectuel riche, marqué par Nor-

bert Wiener (cybernétique [627]), Warren Weaver (complexité organisée [622]), Ludwig von Bertalanffy (théorie générale des systèmes [611]), Herbert Simon (hiérarchies quasi décomposables [541]), John von Neumann (automates cellulaires et autoréplication [613, 614]), Philip Anderson (émergence [20, 21]), Ilya Prigogine (structures dissipatives [486]), John Holland (systèmes adaptatifs [270, 271]), parmi plusieurs autres figures marquantes [322].

Malgré cet héritage, la définition d'un système complexe est encore un sujet délicat sur le plan épistémologique [62, 174, 322, 339, 557]. Il n'est pas évident d'énoncer proprement des attributs nécessaires et suffisants permettant d'étiqueter un système comme complexe ou non. Récemment, Ernesto Estrada a proposé de définir un système comme *complexe* s'il y a une non-séparabilité entre l'identité des parties et l'identité du tout : l'identité du tout étant déterminée par les parties et l'identité des parties étant déterminée par le tout via leurs interactions moriniennes [1] [174]. S'appuyant sur plusieurs références scientifiques et philosophiques, il justifie comment cette définition contient implicitement des attributs qui sont classiquement associés à la complexité (notamment, l'émergence) tout en rejetant les attributs qui sont plus vagues (par exemple, un « grand » nombre d'éléments) ou non nécessaires, comme la non-linéarité (suivant Ladyman et Wiesner [339]).

Sans adopter une position tranchée sur cette définition, les modèles des systèmes complexes utilisés dans la thèse seront des systèmes dynamiques non linéaires sur des réseaux donnant lieu à l'émergence de phénomènes collectifs [2]. Cette approche n'est pas incompatible avec la position d'Estrada, ces modèles contiennent bel et bien des propriétés observées dans plusieurs systèmes complexes, mais ça ne veut pas dire qu'elles sont nécessaires et suffisantes. C'est un cadre théorique spécifique, mathématiquement basé sur les systèmes d'équations différentielles ordinaires couplées.

### Observables

Dans ce cadre, l'émergence d'un phénomène collectif se traduit par la bifurcation d'une *observable* selon un certain paramètre du système dynamique, une observable étant définie comme une fonction scalaire des variables du système. Par exemple, l'ampleur d'une pandémie se mesure par la fraction d'individus infectés au sein d'une population, et son émergence dépend du taux d'infection entre les individus en contact. De façon analogue, si $\theta_1, ..., \theta_N$ représente les phases de $N$ oscillateurs, alors l'observable $\left|\sum_{j=1}^{N} e^{i\theta_j}/N\right|$ mesure la synchronisation entre les oscillateurs, ce qui dépend de leur couplage.

La recherche d'observables est centrale dans l'élaboration de théories effectives. C'est en trouvant des observables comme la température, l'entropie ou l'énergie qu'une théorie aussi puis-

1. Traduit librement de la Réf. [174] : « Soient $A$ et $B$ deux éléments d'un ensemble d'éléments $V$. Une interaction morinienne entre $A$ et $B$ est une relation —, telle que $\overline{AB}$ est distincte de la simple union de $A$ et $B$. Cela implique nécessairement que l'interaction modifie la nature des éléments en interaction ainsi que celle du tout qu'ils produisent. »

2. Par abus de langage, nous dirons parfois que les systèmes complexes *sont* ces modèles.

sante que la thermodynamique a pu voir le jour. Ce n'est que plus tard dans l'histoire de la science, avec la physique statistique, qu'un pont entre la thermodynamique et une description microscopique s'est établi. Par exemple, la température est proportionnelle à la moyenne du carré de la vitesse des particules dans la théorie cinétique des gaz.

Néanmoins, dans les systèmes complexes, trouver des observables et formuler des théories effectives décrivant les phénomènes émergents est un défi majeur. Le problème est que contrairement à la température, dont le concept s'est d'abord imposé qualitativement par notre expérience sensible du chaud et du froid, les observables dans les systèmes complexes ne se manifestent pas toujours de façon évidente à l'observateur.

Suivant la démarche cartésienne, il est donc utile de décomposer les systèmes complexes afin d'en analyser les constituants les plus simples (première approche), puis remonter peu à peu jusqu'à la connaissance des plus composés (deuxième approche) [141]. Pour la première approche, plusieurs disciplines scientifiques ont déjà accompli un travail remarquable, mettant en lumière des observables à des échelles plus fines, comme les niveaux moléculaire, génétique et cellulaire. Cependant, la décomposition d'un système complexe est souvent extrêmement difficile, même avec la technologie moderne. Il suffit de penser au cerveau : bien qu'un progrès exceptionnel ait été accompli dans la cartographie des connexions neuronales chez des organismes tels que le ver *C. elegans* et la mouche à fruit *D. melanogaster*, nous n'en sommes qu'aux débuts de cette cartographie chez les vertébrés, notamment avec le poisson-zèbre, et plus encore les mammifères [1].

Les travaux de cette thèse s'inscrivent dans la deuxième approche, fondée sur les acquis de la première, qui a identifié des constituants dans divers systèmes complexes, leur dynamique et leur organisation en réseaux complexes [43, 433]. En effet, cette identification permet de définir des systèmes dynamiques sur des graphes, ouvrant la voie à une recherche mathématique d'observables. Concernant cette recherche, je rejoins ceux qui considèrent que des progrès substantiels restent à accomplir.

> Although we have made much progress on identifying microscopic mechanisms, we have made rather less progress on identifying the "order parameters" that are characteristic of the macroscopic state.
> - W. Bialek [59]

Peu importe la perspective adoptée, le choix des observables n'est ni unique ni neutre [539] : il dépend du phénomène étudié, de l'échelle d'observation et des contraintes expérimentales. Il en est de même pour les techniques qui permettent d'extraire ces observables, en particulier, les méthodes de réduction dimensionnelle [261, 580, 581].

### Réductions dimensionnelles

La *réduction dimensionnelle* d'un système dynamique est une procédure par laquelle le nombre de variables décrivant le système est réduit à un nombre inférieur d'observables. Il en découle une simplification de la description du système, souvent obtenue en exploitant ses régularités ou la redondance dans le comportement de certaines de ses variables.

> Most of the complex structures found in the world are enormously redundant, and we can use this redundancy to simplify their description. But to use it, to achieve the simplification, we must find the right representation.
> - Herbert Simon [541]

Un exemple en physique est une chaîne ou une grille de spins, dont la régularité structurelle permet l'application de transformations de renormalisation [247, 296, 636]. Celles-ci réduisent progressivement le nombre de degrés de liberté en agrégeant les spins, conduisant à une description effective à plus grande échelle. Les réseaux complexes ne présentent toutefois pas une telle régularité, mais de nombreux articles ont adapté les techniques de renormalisation [211, 219, 545, 603], sans toutefois considérer la dynamique non linéaire du système.

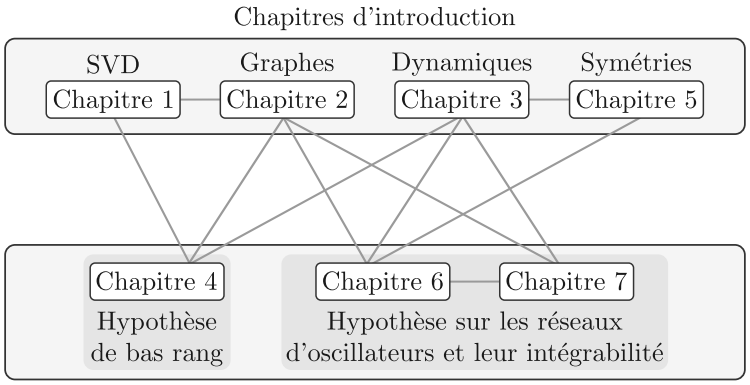
Du côté des neurosciences, en considérant le réseau pylorique du homard et un modèle détaillé de type Hodgkin-Huxley, Prinz, Bucher et Marder ont montré qu'il était possible de générer des courbes d'activités électriques réalistes et essentiellement indistinguables, avec des combinaisons très différentes de paramètres. C'est le phénomène de dégénérescence [487]. Une constatation similaire a été faite en physique. En particulier, à l'aide de la géométrie de l'information, Sethna et ses collaborateurs ont montré que plusieurs modèles avec de nombreux paramètres sont dits « sloppy », c'est-à-dire que leur comportement est contrôlé par un petit nombre de combinaisons de paramètres [86, 379, 490, 491, 494, 589]. Ces idées font écho à une remarque célèbre de von Neumann, rapportée par Dyson après sa rencontre avec Fermi [157] : « With four parameters I can fit an elephant, and with five I can make him wiggle his trunk. »

En ce sens, il semble plausible d'obtenir des théories effectives par la réduction dimensionnelle. Toutefois, malgré la remarque de Herbert Simon citée ci-dessus, il est loin d'être évident d'établir dans quelle mesure cela est possible pour les dynamiques non linéaires sur des réseaux complexes. Historiquement, en essayant de déceler les observables qui caractérisent les phénomènes émergents, les chercheurs dans divers domaines ont fait des hypothèses sur la structure des interactions, souvent dans le but de réduire la dimension de telles dynamiques. Ces hypothèses ne sont toutefois pas toujours justifiées rigoureusement.

L'objectif du doctorat est d'identifier des conditions structurelles et dynamiques qui permettent de réduire la dimension d'un système complexe et ainsi, déterminer la dynamique des observables caractérisant l'émergence de différents phénomènes collectifs. À cette fin, la thèse est organisée comme suit.

### Organisation de la thèse

La thèse est composée de sept chapitres. Les chapitres 1, 2, 3 et 5 sont principalement de nature introductive, bien qu'ils contiennent chacun une part de contenu original. Les chapitres 4, 6 et 7 correspondent, quant à eux, à des articles originaux publiés ou en voie de l'être. L'organisation est schématisée par le graphe ci-dessous, où un lien représente une dépendance conceptuelle explicite entre les chapitres.




Trois articles, deux hypothèses

Les chapitres 1, 2 et 3 présentent les concepts et les résultats mathématiques essentiels pour démontrer les résultats du chapitre 4. En particulier, le chapitre 1 est consacré à la décomposition en valeurs singulières (SVD), utilisée au chapitre 2 dans le cadre de la théorie spectrale des graphes et des graphes aléatoires.

Ensuite, au chapitre 3, différentes perspectives sur la modélisation des systèmes dynamiques sont décrites et chacune d'elles est utilisée dans la thèse. Étant donné l'importance de la recherche d'observables dans les systèmes complexes, une question naturelle quant à leur description par des systèmes dynamiques se pose : pourquoi les décrire au moyen d'équations différentielles non linéaires sur un espace d'états, comme en mécanique classique, plutôt qu'au moyen d'opérateurs linéaires agissant sur un espace d'observables, à l'image de la mécanique quantique ? Le chapitre présente les avantages et les inconvénients des différentes perspectives, dont celle de Koopman. Il se conclut enfin par quelques généralités sur la réduction dimensionnelle, qui conduisent directement au chapitre suivant.

Au chapitre 4, une hypothèse est formulée, mettant en évidence une tendance commune à plusieurs domaines, de la science des réseaux aux neurosciences et à l'apprentissage automatique : les systèmes complexes sont fréquemment modélisés par des dynamiques gouvernées par des matrices d'interaction de bas rang. La validité et les implications d'une telle hypothèse y sont ensuite examinées en détail au moyen de réseaux empiriques et de la réduction dimensionnelle.

Le chapitre 5 introduit ensuite les symétries de Lie des équations aux dérivées partielles générales aux équations différentielles ordinaires.

Le chapitre 6 tire son inspiration d'une deuxième hypothèse présente dans la littérature, selon laquelle l'intégration partielle du modèle de Kuramoto est essentiellement limitée aux oscillateurs identiquement ou globalement couplés. À l'aide de la théorie de Koopman, de nouvelles quantités conservées dépendantes du réseau d'oscillateurs sont identifiées. Ces résultats, exposés dans quatre théorèmes, montrant que l'hypothèse est en réalité restrictive. En s'appuyant sur le chapitre 5, une condition générale de commutation pour l'existence de symétries de Lie dans les systèmes dynamiques est introduite, comparable à celle rencontrée en mécanique hamiltonienne, ce qui permet aussi d'identifier d'autres quantités conservées.

Finalement, le chapitre 7 introduit un graphe aléatoire admettant les constantes du mouvement déterminées au chapitre 6 et développe une méthode d'intégration partielle pour le modèle de Kuramoto sur ce graphe aléatoire.

### Guide de lecture

Il y a plusieurs manières de lire cette thèse, dans laquelle je suppose un certain bilinguisme du lecteur [3]. L'une d'elles est de suivre les chapitres dans l'ordre chronologique en sautant les preuves des théorèmes, des lemmes, des corollaires, de même que les annexes et les sections identifiées par une étoile dans la table des matières. Cette approche permet d'avoir une vision essentiellement complète de la thèse. C'est notamment en raison de cette possibilité que les preuves ont été conservées dans le texte principal, au détriment de sa longueur. C'est aussi par souci de présenter des arguments plus rigoureux, malgré les limites de mes capacités : « La rigueur n'a jamais eu pour objet que de sanctionner et de légitimer les conquêtes de l'intuition » [4]. Il s'agit enfin de conserver le contenu généré durant le doctorat. La thèse est en ce sens le recueil de ce travail et une référence avec une valeur éducative pour l'auteur dans l'avenir. Ainsi, nul besoin d'employer son loisir à une entreprise si frivole. À Dieu donq.

3. Le texte de certaines figures n'a pas été traduit. Quelques citations sont laissées dans leur langue d'origine par souci de fidélité au texte original.

4. Extrait d'une lettre de Jacques Hadamard à Émile Borel ; cité par ce dernier dans « L'infini mathématique et la réalité. », La Revue du mois 18, No 103, (1914), p. 73.

# Chapitre 1

# Décomposition en valeurs singulières

> I personally believe that many more people need linear algebra than calculus. Isaac Newton might not agree ! But he isn't teaching mathematics in the 21st century.
> - G. Strang [562]

La décomposition en valeurs singulières (SVD) remonte aux travaux de Beltrami (1873) et Jordan (1874), et est devenue depuis un outil incontournable dans de nombreux domaines scientifiques, en partie en raison de son rôle clé dans la réduction dimensionnelle [160, 530, 560] [89, Chapitre 1]. Bien que les comparaisons doivent être menées avec prudence [218], la SVD comporte plusieurs liens avec des techniques telles que l'analyse en composantes principales (PCA) [2, 132, 185, 280, 281, 293, 642], la transformation de Karhunen-Loève (KLT) [177, 302, 360], la décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD) [307, 334, 609] ou encore les fonctions orthogonales empiriques (EOF) [369, 413]. En apprentissage automatique, certains autoencodeurs se révèlent au mieux équivalents à la SVD [79, 80].

Bien que la SVD soit relativement ancienne, elle fait toujours l'objet de nombreux développements, notamment en théorie des matrices aléatoires [40, 51, 57, 67, 151, 215, 216, 574, 577], où la distribution des valeurs singulières est souvent appelée la distribution des valeurs propres des ensembles de matrices chirales, de Wishart, de Laguerre [192, Chap. 3] ou des matrices de covariance d'échantillons [40, Chap. 3].

En raison de son rôle central dans cette thèse, et dans un souci de clarté et de complétude, nous rassemblons ici plusieurs théorèmes fondamentaux liés à la SVD. Ceux-ci seront utiles pour démontrer les principaux résultats mathématiques au chapitre 4. Le présent chapitre ne se limite pas à rapporter des résultats connus, mais possède aussi une certaine originalité par son exposition, la formulation de ses résultats mathématiques et l'exhaustivité de certaines parties. Le chapitre est structuré comme suit.

D'abord, la SVD est intimement reliée au rang, le nombre maximal de lignes (colonnes) linéairement indépendantes d'une matrice. En particulier, celle-ci conduit directement à une

factorisation de rang. Il y a toutefois plusieurs manières d'écrire une factorisation en rang, ce que nous abordons à la section 1.1. La définition de la SVD, la factorisation de rang qui lui est directement associée de même que quelques conséquences simples sont exposées à la section 1.2. La SVD offre également la possibilité d'approximer une matrice de façon optimale en conservant seulement un nombre réduit de termes dans la décomposition. La section 1.4 est consacrée à la preuve de cette propriété d'optimalité à partir du théorème de Weyl. Une conséquence directe sur la projection optimale est ensuite présentée au théorème 1.27, dont l'énoncé et la preuve sont originaux, bien que le résultat semble relever du folklore. Afin de clarifier les différentes factorisations en rang possibles, quelques liens seront établis entre celles-ci à la section 1.3. Finalement, des versions moins strictes de la notion de rang seront abordées, à savoir les rangs effectifs (section 1.5). Ceux-ci dépendent logiquement des valeurs singulières et peuvent prendre plusieurs formes. Le regroupement de ces rangs effectifs constitue l'une des contributions originales de cette thèse, dont la portée se révélera pleinement au chapitre 4.

## 1.1 Introduction à la factorisation de rang

Il existe une grande quantité de factorisations (ou décompositions) matricielles et leur champ d'applications est très vaste, notamment dans l'élaboration d'algorithmes [279, 632]. L'idée générale d'une factorisation matricielle est de décomposer une matrice $A$ en un produit de matrices avec des propriétés désirables. Par exemple, la décomposition LU est la factorisation d'une matrice carrée $A$ en une matrice triangulaire inférieure $L$ multipliée par une matrice triangulaire supérieure $U$. Cette factorisation et ses variantes sont entre autres utiles dans la résolution d'un système d'équations linéaires ou le calcul du déterminant. Il y a aussi la décomposition QR qui factorise une matrice $A$ en un produit d'une matrice unitaire $Q$ et une matrice triangulaire $R$. Celle-ci est au centre d'un algorithme utile pour calculer les composantes d'une autre factorisation : la décomposition en valeurs propres. Dans certains cas, une factorisation qui ferait intervenir des matrices avec des valeurs négatives est insensée ou rend difficile l'interprétation des résultats (ex., Réf. [583]). À cet effet, les factorisations en matrices non négatives (NMF, de l'anglais *nonnegative matrix factorization*, et ses variantes) sont utiles [6, 147, 148].

Les factorisations de rang résident parmi cette grande famille de factorisations matricielles et comme nous le répéterons à maintes reprises, celles-ci sont fondamentales pour la réduction dimensionnelle dans pratiquement toutes ses formes. Toute matrice admet une décomposition basée sur son rang. En effet, si $A$ est une matrice de dimension $m \times n$ et de rang $r$, alors il existe une factorisation de rang telle que décrite dans le lemme suivant.

**Lemme 1.1.** *Soit une matrice complexe $A$ de dimension $m \times n$ et de rang $r \geq 1$.*

1. *Il existe une factorisation de rang de $A$, c'est-à-dire une décomposition de la forme*

$$A = LM, \tag{1.1}$$

*où $L$ et $M$ sont des matrices de dimension $m \times r$ et $r \times n$, respectivement.*

2. *La factorisation de rang $A = LM$ n'est pas unique.*
3. *Il existe $r$ vecteurs lignes $\boldsymbol{m}_i$ et $r$ vecteurs colonnes $\boldsymbol{\ell}_i$ tels que $A = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{\ell}_i \boldsymbol{m}_i$.*

*Démonstration.*

1. Soit $A = (\boldsymbol{a}_1 \ ... \ \boldsymbol{a}_n)$, où $\boldsymbol{a}_j = (A_{1j} \ ... \ A_{mj})^\top$. Il y a $r$ colonnes linéairement indépendantes ou autrement dit, l'image de $A$ forme l'espace des colonnes de dimension $\dim(\text{image}(A)) = r$. La base de cet espace est composée de $r$ vecteurs colonnes de longueur $m$, notés $\boldsymbol{\ell}_1$,...,$\boldsymbol{\ell}_r$, et chaque colonne $j$ de $A$ s'exprime alors comme $\boldsymbol{a}_j = M_{1j}\boldsymbol{\ell}_1 + ... + M_{rj}\boldsymbol{\ell}_r$ où $M_{\mu j} \in \mathbb{C}$ pour tout $\mu \in \{1, ..., r\}$ et $j \in \{1, ..., n\}$. Sous forme matricielle, $A = LM$ où $L = (\boldsymbol{\ell}_1 \ ... \ \boldsymbol{\ell}_r)$.
2. Soit une factorisation de rang $A = L_1 M_1$, une matrice non singulière $C$ de dimension $r \times r$, $L_2 = L_1 C$ et $M_2 = C^{-1} M_1$. Alors, $L_2 M_2 = L_1 C C^{-1} M_1 = A$ forme une autre factorisation de rang de $A$.
3. C'est une conséquence directe de 1. En effet, définir les colonnes $\boldsymbol{\ell}_i := (L_{1i} \ ... \ L_{mi})^\top$ et les lignes $\boldsymbol{m}_i := (M_{i1} \ ... \ M_{in})$ donne directement le résultat escompté.

□

Le rang $r$ est donc la valeur minimale de $q$ parmi toutes les factorisations de la forme $A = LM$ avec $L$ de dimension $m \times q$ et $M$ de dimension $q \times n$, puisque $r$ est la dimension de la base de l'espace des colonnes (lignes). Autrement dit, si $q < r$, alors il n'est plus possible de générer l'ensemble des colonnes (lignes) de $A$. Dans un tel cas, la factorisation ne pourrait qu'être approximative.

Il existe une procédure simple afin de construire $L$ et $M$ explicitement. En calculant la matrice échelonnée réduite $R$ de la matrice $A$, $L$ s'obtient en retirant les colonnes qui ne sont pas des pivots, alors que $M$ s'obtient en éliminant les lignes de zéro de $R$.

Une autre approche, pour les matrices réelles symétriques, consiste à utiliser la décomposition en valeur propre.

**Corollaire 1.2.** *Si $A$ est une matrice $n \times n$ réelle, symétrique, semi-définie positive et de rang $r$, alors il existe une matrice réelle $L$ de dimension $n \times r$ telle que*

$$A = LL^\top. \tag{1.2}$$

*Si $A$ n'est pas semi-définie positive, $L$ peut être complexe.*

*Démonstration.* Par le théorème spectral, $A$ se diagonalise par une matrice orthogonale telle que $A = PDP^\top$ où $D = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_n)$ et $P = (\boldsymbol{v}_1 \ ... \ \boldsymbol{v}_n)$. Si $A$ est semi-définie positive,

alors les valeurs propres $\lambda_i$ sont non négatives (théorème 4.1.8 [279]) de sorte que $\sqrt{\lambda_i} \geq 0$. Ceci implique que

$$A = PDP^\top = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\top = \sum_{i=1}^{n} \left( \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{v}_j \delta_{ji} \sqrt{\lambda_i} \right) \left( \sum_{k=1}^{n} \sqrt{\lambda_i} \delta_{ik} \boldsymbol{v}_k^\top \right) = (PD^{1/2})(D^{1/2}P^\top),$$

où $PD^{1/2}$ est $n \times n$. Puisque $A$ est normale, le lemme 1.18, introduit plus bas, nous dit que nous pouvons ordonner les valeurs propres en ordre décroissant de leur module pour obtenir l'égalité avec les valeurs singulières $\sigma_i = |\lambda_i|$ pour tout $i \in \{1, ..., n\}$. Le nombre de valeurs propres non nulles est alors égal au nombre de valeurs singulières non nulles et donc au rang $r$ de $A$. Il s'ensuit que nous pouvons tronquer $D$ tel que $\Delta = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_r)$ et $P$ tel que $O = (\boldsymbol{v}_1 \ ... \ \boldsymbol{v}_r)$ sans perdre d'information sur $A$. En effet, avec $\lambda_i = 0$ pour tout $i > r$, nous avons

$$A = \sum_{i=1}^{n} \left( \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{v}_j \delta_{ji} \sqrt{\lambda_i} \right) \left( \sum_{k=1}^{n} \sqrt{\lambda_i} \delta_{ik} \boldsymbol{v}_k^\top \right) = \sum_{i=1}^{n} \left( \sum_{j=1}^{r} \boldsymbol{v}_j \delta_{ji} \sqrt{\lambda_i} \right) \left( \sum_{k=1}^{r} \sqrt{\lambda_i} \delta_{ik} \boldsymbol{v}_k^\top \right) = LL^\top,$$

où $L := O\Delta^{1/2}$ est la matrice $n \times r$ réelle recherchée. Si $A$ n'est pas semi-définie positive, alors il existe une valeur propre $\lambda_i < 0$. La racine carrée de $\lambda_i$ est donc imaginaire de sorte que $\Delta^{1/2}$ contient au moins une valeur imaginaire sur sa diagonale. La matrice $L = O\Delta^{1/2}$ est donc complexe et la factorisation $A = LL^\top$ tient toujours. □

En se basant sur les mêmes principes que le dernier corollaire, la factorisation suivante est aussi obtenue pour les matrices symétriques.

**Corollaire 1.3.** *La matrice réelle $A$ de dimension $n \times n$ et de rang $r$ est symétrique si et seulement si la factorisation suivante existe :*

$$A = O\Delta O^\top, \tag{1.3}$$

*où $O$ est une matrice $n \times r$ réelle et $\Delta$ est une matrice $r \times r$ réelle, symétrique et potentiellement diagonale. La factorisation n'est pas unique et si $A$ est en plus semi-définie positive, alors la factorisation du corollaire 1.2 est obtenue.*

*Démonstration.* ($\Rightarrow$) Par le théorème spectral, une matrice symétrique se diagonalise comme $A = PDP^\top$ où $D = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_n)$ est une matrice $n \times n$ diagonale contenant des valeurs propres réelles $\lambda_i$ et $P = (\boldsymbol{v}_1 \ ... \ \boldsymbol{v}_n)$ est une matrice orthogonale de vecteurs propres. Du lemme 1.18, les valeurs singulières sont $\sigma_i = |\lambda_i|$ pour tout $i \in \{1, ..., n\}$ et le nombre de valeurs propres non nulles est alors égal au rang $r$ de $A$. Il s'ensuit que nous pouvons tronquer $D$ tel que $\Delta = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_r)$ et $P$ tel que $O = (\boldsymbol{v}_1 \ ... \ \boldsymbol{v}_r)$ pour obtenir la factorisation de rang $A = O\Delta O^T$ (comme détaillée dans la preuve du corollaire 1.2). De plus, encore une fois par le théorème spectral, il existe une relation de similarité orthogonale entre la matrice

diagonale $\Delta$ et une certaine matrice $r \times r$ symétrique, c'est-à-dire $\Delta_s = X\Delta X^\top$ où $X$ est une matrice $r \times r$ orthogonale. L'inversion de cette dernière relation donne $\Delta = X^\top \Delta_s X$ et alors, $A = O\Delta O^\top = OX^\top \Delta_s X O^\top = O_s \Delta_s O_s^\top$ avec $O_s := OX^\top$.

($\Leftarrow$) Nous avons simplement $A^\top = (O\Delta O^\top)^\top = O\Delta O^\top = A$, puisque $\Delta^\top = \Delta$.

La non-unicité de la factorisation est héritée directement du lemme 1.1. Si $A$ est semi-définie positive, il suffit de définir la matrice réelle $L := O\Delta^{1/2}$ pour obtenir la factorisation $A = LL^\top$. □

Des résultats similaires s'obtiennent avec une démarche analogue pour les matrices hermitiennes. Par exemple, le résultat suivant implique aussi une factorisation de rang.

**Lemme 1.4.** *Une matrice $A$ hermitienne est semi-définie positive si et seulement s'il existe une matrice $B$ telle que $A = BB^\dagger$.*

*Démonstration.* ($\Rightarrow$) Par le théorème spectral, $A$ se diagonalise par une matrice unitaire telle que $A = UDU^\dagger$. Puisqu'elle est semi-définie positive, alors les valeurs propres composant $D$ sont non négatives (théorème 4.1.8 [279]) de sorte que $D^\dagger = \bar{D} = D$. Ceci implique que

$$A = UDU^\dagger = (UD^{1/2})(D^{1/2}U^\dagger) = (UD^{1/2})[U(D^{1/2})^\dagger]^\dagger = (UD^{1/2})(UD^{1/2})^\dagger = BB^\dagger$$

avec $B := UD^{1/2}$ et où la quatrième égalité ne serait pas possible si $A$ n'était pas semi-définie positive.

($\Leftarrow$) Si la factorisation existe, alors $A^\dagger = (BB^\dagger)^\dagger = BB^\dagger = A$. De plus, pour tout $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$, $\boldsymbol{x}^\dagger A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^\dagger BB^\dagger \boldsymbol{x} = \|B^\dagger \boldsymbol{x}\|^2 \geq 0$, signifiant que $A$ est semi-définie positive. □

En effet, il suffit de tronquer la matrice $B$ de manière à retirer les colonnes reliées aux valeurs propres nulles pour obtenir la factorisation de rang, ce qui revient à la généralisation du corollaire 1.2.

Les corollaires précédents présentent des factorisations de rang pour des familles de matrices particulières. Le lemme 1.1 était pour sa part général, mais les matrices $L$ et $M$ de la factorisation $A = LM$ donnent une représentation relativement abstraite de la matrice en termes des vecteurs de base et de leurs coefficients qui génèrent les colonnes de $A$. La section suivante introduit formellement la décomposition en valeurs singulières et met en évidence son interprétation géométrique élégante, ainsi que ses conséquences naturelles, allant de la factorisation de rang à la définition des normes matricielles.

## 1.2 Définition de la SVD

Une matrice $A$ quelconque n'est pas nécessairement diagonalisable par similarité ($A = PDP^{-1}$). En effet, il n'existe pas toujours assez de vecteurs propres linéairement indépendants et la diagonalisation par similarité ne s'applique qu'aux matrices carrées. Remarquons toutefois que les matrices $AA^\dagger$ et $A^\dagger A$ sont toujours carrées. De plus, ces matrices sont hermitiennes et donc normales, ce qui implique qu'elles sont diagonalisables par des matrices unitaires. En exploitant cette remarque, il se trouve que toute matrice $A$ possède une diagonalisation par équivalence unitaire, à savoir la décomposition en valeurs singulières.

**Théorème 1.5.** *Soit une matrice complexe $A$ de dimension $m \times n$ et de rang $r$. Il existe alors une décomposition en valeurs singulières, définie par*

$$A = U\Sigma V^\dagger \tag{1.4}$$

*où les matrices unitaires $U = (\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_m)$ et $V = (\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_n)$ de dimensions respectives $m \times m$ et $n \times n$, contiennent respectivement les vecteurs propres $\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_m$ de $AA^\dagger$ et les vecteurs propres $\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_n$ de $A^\dagger A$. De plus, $\Sigma$ est une matrice rectangulaire diagonale de taille $m \times n$ telle que*

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & ... \\ 0 & \sigma_2 & ... \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad avec \quad \begin{array}{l} \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_r > 0 \\ \sigma_{r+1} = ... = \sigma_q = 0 \end{array} \tag{1.5}$$

*où $q = \min(m, n)$ et $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ avec $\lambda_i$ désignant la $i$-ème valeur propre de $A^\dagger A$ ou $AA^\dagger$. Si, de surcroît, tous les éléments de $A$ sont réels, alors il existe des matrices orthogonales réelles $U$ et $V$ satisfaisant $A = U\Sigma V^\top$.*

*Démonstration.* Voir le théorème 3.1.1 de la Réf. [278], le théorème 2.6.3 de la Réf. [279], ou le théorème 1.3.9 de la Réf. [574]. □

Les nombres non négatifs $\sigma_1, ..., \sigma_q$ du théorème précédent sont appelés les *valeurs singulières* de $A$ tandis que les vecteurs $\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_m$ et $\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_n$ sont respectivement appelés les *vecteurs singuliers gauches et droits* de $A$. Ceux-ci satisfont $A\boldsymbol{v}_i = \sigma_i \boldsymbol{u}_i$ et $A^\dagger \boldsymbol{u}_i = \sigma_i \boldsymbol{v}_i$ pour tout $i \in \{1, ..., r\}$. La notation $\sigma_i(A)$, où $\sigma_i$ est plutôt une fonction de $A$, sera aussi utilisée lorsque plusieurs matrices sont impliquées dans un calcul.

**Remarque 1.6.** Des facteurs de phase peuvent être introduits pour modifier les vecteurs singuliers gauches et droits. En effet, avec $D_{\boldsymbol{\phi}} := \text{diag}(e^{i\phi_1}, ..., e^{i\phi_N})$, $U_{\boldsymbol{\phi}} := UD_{\boldsymbol{\phi}}$ et $V_{\boldsymbol{\phi}} = VD_{\boldsymbol{\phi}}$, la SVD s'écrit $W = U\Sigma V^\dagger = U\Sigma D_{\boldsymbol{\phi}} D_{\boldsymbol{\phi}}^\dagger V^\dagger = U_{\boldsymbol{\phi}} \Sigma V_{\boldsymbol{\phi}}^\dagger$ puisque $\Sigma D_{\boldsymbol{\phi}} = D_{\boldsymbol{\phi}} \Sigma$. Cette propriété sera utilisée à la section 4.12.4 pour définir des observables globales intuitives. ■

Le théorème 1.5 est formulé pour les matrices complexes et s'applique donc aux matrices réelles directement. Dans un tel cas, les matrices unitaires de vecteurs singuliers deviennent plus spécifiquement des matrices orthogonales.

**Corollaire 1.7.** *Si $A$ est une matrice réelle de dimension $m \times n$, alors il existe une décomposition en valeurs singulières telle que*

$$A = U\Sigma V^\top \tag{1.6}$$

*où $U$ et $V$ sont des matrices orthogonales réelles de dimension $m \times m$ et $n \times n$ respectivement.*

*Démonstration.* Puisque $A$ est réelle, nous avons $A^\dagger A = A^\top A$, $AA^\dagger = AA^\top$ et ces matrices sont donc symétriques et diagonalisables par des matrices orthogonales réelles (corollaire 2.5.11 [279]). Ainsi, les matrices $U$ et $V$ sont réelles. □

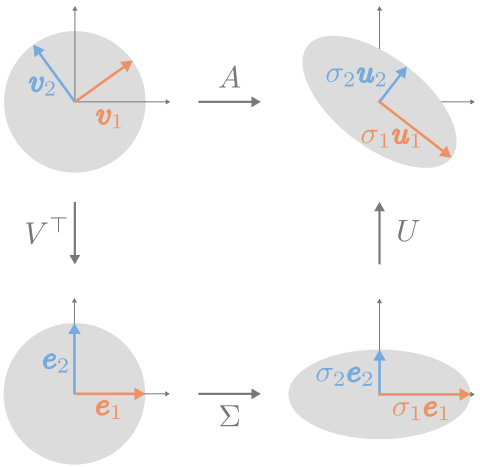



FIGURE 1.1 – Interprétation géométrique de la SVD pour une matrice réelle de dimension $2 \times 2$.

Géométriquement, la SVD se visualise efficacement pour une matrice réelle $A$ de dimension $2 \times 2$ où $U = (\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2)$, $V = (\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)$, $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2)$. En effet, la figure 1.1 montre comment $A$ transforme les deux vecteurs singuliers droits $\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$ et comment cette transformation se décompose en trois opérations géométriques successives données par $V^\top$, $\Sigma$ puis $U$. Un disque unité gris centré à l'origine est illustré en arrière-plan pour mieux voir l'effet des transformations. Puisque $V$ est une matrice orthogonale, c'est-à-dire $V^\top V = I = (\boldsymbol{e}_1\ \boldsymbol{e}_2)$, alors $V^\top$ effectue une rotation de $\boldsymbol{v}_1$ et $\boldsymbol{v}_2$ pour donner $\boldsymbol{e}_1$ et $\boldsymbol{e}_2$ respectivement. La matrice de valeurs singulières $\Sigma$ étire ou compresse ensuite le disque dans les directions de $\boldsymbol{e}_1$ et $\boldsymbol{e}_2$, ce qui crée une ellipse. Les vecteurs $\sigma_1\boldsymbol{e}_1$ et $\sigma_2\boldsymbol{e}_2$ forment alors respectivement le demi-grand axe et le demi-petit axe de l'ellipse. La matrice de vecteurs singuliers gauches effectue finalement une rotation de l'ellipse qui, mise ensemble avec les autres transformations, donne l'action complète de $A$. Cette action (haut de la figure 1.1) se résume ainsi : $A$ envoie chaque vecteur singulier droit $\boldsymbol{v}_j$ sur le vecteur singulier gauche correspondant $\boldsymbol{u}_j$ mis à l'échelle par $\sigma_j$, $AV = U\Sigma$.

Pour une matrice réelle de taille arbitraire $m \times n$, les considérations géométriques précédentes se généralisent directement en utilisant un ellipsoïde. Lorsqu'une valeur singulière est nulle, la longueur de l'axe associé dans l'ellipsoïde est nulle aussi, ce qui implique que l'ellipsoïde vit en réalité dans un espace de dimension plus petite que $q = \min(m, n)$. Si $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, une interprétation analogue demeure valide en identifiant $A$ à une matrice réelle de taille $2m \times 2n$. De façon générale, la SVD à l'équation (1.4) s'écrit telle que

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \, \boldsymbol{u}_i \, \boldsymbol{v}_i^\dagger \,, \tag{1.7}$$

où il est clair que les termes de $i = r+1$ à $i = q$ ne contribuent pas à la décomposition puisque $\sigma_{r+1} = ... = \sigma_q = 0$. Cette forme met aussi en évidence que n'importe quelle matrice de rang $r$ est égale à la somme de $r$ matrices $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \, \boldsymbol{v}_1^\dagger$, ..., $\sigma_r \boldsymbol{u}_r \, \boldsymbol{v}_r^\dagger$ de rang 1, ordonnées de la plus grande à la plus petite contribution.

**Remarque 1.8.** De plus, l'équation (1.7) implique une équation explicite de la pseudoinverse de Moore-Penrose de $A$, soit

$$A^+ = \sum_{i=1}^{r} \frac{1}{\sigma_i} \, \boldsymbol{v}_i \, \boldsymbol{u}_i^\dagger \,, \tag{1.8}$$

ce qui montre du même coup que $A$ et $A^+$ possèdent le même rang. ■

Le corollaire suivant sur la décomposition compacte en valeur singulière découle aussi naturellement de l'équation (1.7).

**Corollaire 1.9.** *Soit une matrice complexe $A$ de dimension $m \times n$ et de rang $r$, une matrice $\Sigma_r = diag(\sigma_1, ..., \sigma_r)$ où $\sigma_i$ est la $i$-ème valeur singulière non nulle et les matrices tronquées de vecteurs singuliers $U_r = (\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_r)_{m \times r}$ et $V_r = (\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_r)_{n \times r}$ telles que $U_r^\dagger U_r = I_{r \times r}$ et $V_r^\dagger V_r = I_{r \times r}$ (orthonormalité par colonne). Alors, la matrice $A$ se factorise comme*

$$A = U_r \Sigma_r V_r^\dagger, \tag{1.9}$$

*ce qui est parfois appelée la décomposition compacte en valeurs singulières.*

La SVD est donc reliée de près à la notion de rang. Le nombre de valeurs singulières non nulles est égal au rang, alors que le nombre de valeurs propres non nulles est plus petit ou égal au rang [279, p.151] lorsque la matrice est diagonalisable. Si le rang d'une matrice est $r = q = \min(m, n)$, alors la matrice est dite de plein rang. Autrement, la matrice possède une déficience en rang.

La relation entre la SVD et la réduction dimensionnelle devient aussi plus claire avec la possibilité d'avoir une représentation plus compacte. À la sous-section 1.4, nous verrons que les matrices $U$, $V$, $\Sigma$ peuvent aussi être tronquées à $U_k$, $V_k$, $\Sigma_k$ avec $k < r$ pour donner une factorisation de bas rang et il se trouve que celle-ci est optimale (Théorème 1.25).

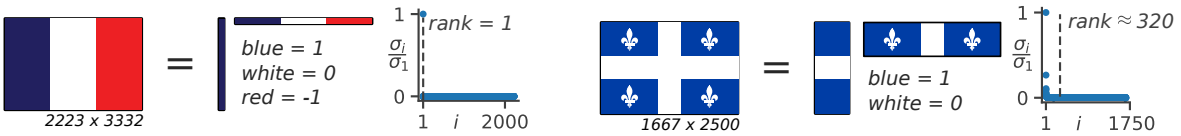



FIGURE 1.2 – Illustration simple du rang à l'aide de drapeaux.

**Exemple 1.10.** À la figure 1.2, les factorisations en rang du drapeau de la France et du drapeau du Québec sont illustrés ainsi que leurs valeurs singulières (voir aussi les exemples de la Réf. [563, Chapitre 7]). Pour les visualiser, il est commun d'en faire un nuage de points en gardant l'ordre décroissant, aussi nommé *scree plot* ou « diagramme d'éboulis » dans le contexte de l'analyse en composantes principales [2, 185]. Sous cette représentation, il y a même des critères géométriques qui sont définis pour établir le nombre de valeurs singulières « significatives », ce qui sera abordé à la section 1.5. ■

**Exemple 1.11.**

1. La SVD de $A = \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^\dagger$ est telle que $U$ contient les vecteurs propres de $AA^\dagger = \|\boldsymbol{y}\|^2\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\dagger$ et $V$ contient les vecteurs propres de $A^\dagger A = \|\boldsymbol{x}\|^2\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\dagger$. De plus, par le lemme 1.1 sur la factorisation de rang, le rang de $A$ doit être 1 et $\Sigma$ contient alors une seule valeur singulière non nulle, soit $\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$.
2. Pour une matrice carrée $A$ telle que $A = I$ ou $A$ est unitaire, $AA^\dagger = A^\dagger A = I$ et les $N$ valeurs propres de $AA^\dagger$ et $A^\dagger A$ sont 1 de même que les valeurs singulières. Le rang de $A$ est donc $N$.
3. Les matrices unitaires $U$ et $V$ dans la SVD de la matrice $A = J$ de dimension $n \times n$ contenant seulement des 1 sont composées de vecteurs propres de $AA^\dagger = A^\dagger A = nA$. Il y a une valeur propre non nulle pour $nA$, soit $n^2$, de sorte que la valeur singulière est $n$ et elle est reliée à un vecteur propre uniforme. Comme attendu, il n'y a qu'une seule valeur singulière non nulle pour $J$ puisqu'elle se factorise comme $J = \boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^\top$ où $\boldsymbol{e}$ est un vecteur colonne uniforme dont les éléments sont 1.
4. Les matrices $AA^\dagger$ et $A^\dagger A$ sont des matrices hermitiennes et leurs valeurs propres sont réelles non négatives. La conjugaison complexe et la transposition de $A$ n'ont donc aucun impact sur leurs valeurs propres. Par conséquent, les matrices $A$, $\bar{A}$, $A^\top$ et $A^\dagger$ ont les mêmes valeurs singulières.

■

Maintenant que la SVD est établie sur des bases plus précises et intuitives, nous présentons désormais quelques conséquences simples de celle-ci. Cela nous permettra au passage d'introduire certaines notions qui reviennent fréquemment au chapitre 4, comme les normes matricielles.

Lorsque les valeurs singulières d'une matrice sont connues, nous avons directement accès au module du déterminant et à la norme de Frobenius.

**Lemme 1.12.** *Soit une matrice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ de rang $r$. Alors,*

$$|\det(A)|^2 = \prod_{i=1}^{n} \sigma_i^2 \qquad et \qquad \|A\|_F^2 = \operatorname{tr}(A^\dagger A) = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2\,, \tag{1.10}$$

*où $\|\cdot\|_F$ est la norme de Frobenius et $\sigma_i$ est la $i$-ème valeur singulière de $A$.*

*Démonstration.* Soit la décomposition en valeurs singulières $A = U\Sigma V^\dagger$. D'une part, la multiplicativité du déterminant et du module impliquent

$$|\det(A)|^2 = |\det(U)|^2\,|\det(\Sigma)|^2\,|\det(V^\dagger)|^2.$$

Pour une matrice unitaire $X$, nous avons

$$|\det(X)|^2 = \det(X)\,\overline{\det(X)} = \det(XX^\dagger) = \det(I) = 1\,.$$

Le fait que la matrice $\Sigma$ soit diagonale et qu'elle soit composée de valeurs singulières donne le résultat escompté. Remarquons que s'il y a une ou plusieurs valeurs singulières nulles, le déterminant est nul. D'autre part, l'utilisation de la décomposition compacte en valeurs singulières, des propriétés de la trace et de $U_r^\dagger U_r = V_r^\dagger V_r = I$ mène à

$$\operatorname{tr}(A^\dagger A) = \operatorname{tr}(V_r\Sigma_r U_r^\dagger U_r \Sigma_r V_r^\dagger) = \operatorname{tr}(V_r\Sigma_r^2 V_r^\dagger) = \operatorname{tr}(\Sigma_r^2 V_r^\dagger V_r) = \operatorname{tr}(\Sigma_r^2) = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2.$$

□

Connaître les valeurs singulières d'une matrice est également pratique dans le calcul de bornes. Pour formuler ces bornes, il est utile d'introduire la norme matricielle induite par la norme euclidienne.

**Définition 1.13.** La 2-norme matricielle (ou *norme spectrale*, norme $L^2$) d'une matrice $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ est définie telle que

$$\|A\|_2 = \max_{\boldsymbol{x}\neq 0} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} = \max_{\boldsymbol{x}\neq 0} \sqrt{R(A^\dagger A, \boldsymbol{x})}, \tag{1.11}$$

où $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$, $\|\cdot\|$ est la 2-norme standard (norme euclidienne) et $R(M, \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}^\dagger M \boldsymbol{x})/(\boldsymbol{x}^\dagger \boldsymbol{x})$ est le quotient de Rayleigh.

Le résultat suivant donne l'analogue, pour la SVD, du théorème de Rayleigh pour les matrices hermitiennes [279, Theorem 4.2.2] et démontre que la 2-norme d'une matrice est égale à sa plus grande valeur singulière, de là son appellation « norme spectrale ».

**Lemme 1.14.** *Soit $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ dont la plus grande valeur singulière est $\sigma_1$. Alors,*

$$\|A\boldsymbol{x}\| \leq \sigma_1 \|\boldsymbol{x}\| \tag{1.12}$$

*pour tout* $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$. *De plus,* $|A_{ij}| \leq \sigma_1$ *pour tout* $i \in \{1, ..., m\}$, $j \in \{1, ..., n\}$ *et*

$$\sigma_1 = \max_{\boldsymbol{x} \neq 0} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}. \tag{1.13}$$

*Démonstration.* D'abord, si $A = 0_{m\times n}$, $\sigma_1 = 0$ et le résultat est immédiat. Supposons donc $A \neq 0_{m\times n}$ de sorte que $\sigma_1 > 0$. Il existe une SVD $A = U\Sigma V^\dagger$ par le théorème 1.5 et puisque $U$ est unitaire, alors $\|A\boldsymbol{x}\|^2 = \|U\Sigma V^\dagger \boldsymbol{x}\|^2 = \|\Sigma V^\dagger \boldsymbol{x}\|^2$. En définissant $\boldsymbol{y} := V^\dagger \boldsymbol{x} = (y_1, ..., y_n)$,

$$\|\Sigma \boldsymbol{y}\|^2 = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2 |y_i|^2 \leq \sigma_1^2 \sum_{i=1}^{\min(m,n)} |y_i|^2 \leq \sigma_1^2 \sum_{i=1}^{n} |y_i|^2 = \sigma_1^2 \|\boldsymbol{y}\|^2 \,,$$

ce qui découle notamment du fait que $\sigma_1$ est la plus grande valeur singulière. Puisque $V^\dagger$ est unitaire, $\|\boldsymbol{y}\| = \|\boldsymbol{x}\|$ et $\|A\boldsymbol{x}\|^2 \leq \sigma_1^2 \|\boldsymbol{x}\|^2$, ce qui complète la preuve de l'équation (1.12). De plus, soit $\boldsymbol{\alpha} = U^\dagger \boldsymbol{e}_i$, la colonne $i$ de $U^\dagger$, et $\boldsymbol{\beta} = V^\dagger \boldsymbol{e}_j$, la colonne $j$ de $V^\dagger$. Alors, $A_{ij} = \boldsymbol{e}_i^\dagger A \boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{\alpha}^\dagger \Sigma \boldsymbol{\beta} = \langle \boldsymbol{\alpha}, \Sigma\boldsymbol{\beta} \rangle$ où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire. L'inégalité de Cauchy-Schwarz et l'équation (1.12) impliquent ainsi

$$|A_{ij}| = |\langle \boldsymbol{\alpha}, \Sigma\boldsymbol{\beta} \rangle| \leq \|\boldsymbol{\alpha}\| \|\Sigma\boldsymbol{\beta}\| \leq \sigma_1 \|\boldsymbol{\alpha}\| \|\boldsymbol{\beta}\| = \sigma_1 \,,$$

puisque $\|\boldsymbol{\alpha}\| = \|\boldsymbol{\beta}\| = 1$. Finalement, un réarrangement de l'équation (1.12) donne

$$\sigma_1 \geq \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} = \sqrt{\frac{\boldsymbol{x}^\dagger A^\dagger A \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^\dagger \boldsymbol{x}}}. \tag{1.14}$$

Si $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}_1$, le premier vecteur singulier droit associé à la valeur singulière $\sigma_1$ et satisfaisant $A^\dagger A \boldsymbol{v}_1 = \sigma_1^2 \boldsymbol{v}_1$, alors le côté droit de l'équation (1.14) devient

$$\sqrt{\frac{\boldsymbol{v}_1^\dagger A^\dagger A \boldsymbol{v}_1}{\boldsymbol{v}_1^\dagger \boldsymbol{v}_1}} = \sigma_1.$$

Ainsi, pour $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}_1$, la valeur maximale $\sigma_1$ de $\sqrt{R(A^\dagger A, \boldsymbol{x})}$ à l'inégalité (1.14) est atteinte, ce qui prouve la relation (1.13). □

Tout comme la valeur singulière dominante au lemme 1.14, les autres valeurs singulières s'expriment aussi comme le minimum ou le maximum de la racine d'un quotient de Rayleigh. C'est l'analogue du théorème de Courant-Fischer local pour les valeurs singulières.

**Théorème 1.15.** *Soit la matrice* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *dont les valeurs singulières sont ordonnées telles que* $\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_n$ *et où les vecteurs singuliers droits associés sont* $\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_n$. *Alors,*

$$\sigma_k = \min_{\substack{\boldsymbol{x} \in V_k \\ \boldsymbol{x} \neq 0}} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} = \max_{\substack{\boldsymbol{x} \in W_{n-k+1} \\ \boldsymbol{x} \neq 0}} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}, \qquad \forall k \in \{1, ..., n\} \,, \tag{1.15}$$

*où* $V_k$ *est l'espace engendré par* $\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_k$ *et* $W_{n-k+1}$ *est l'espace engendré par* $\boldsymbol{v}_k, ..., \boldsymbol{v}_n$.

*Démonstration.* D'une part, tout vecteur $\boldsymbol{x} \in V_k$ s'exprime comme $\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{k} c_i \boldsymbol{v}_i$ avec $c_i \in \mathbb{C}$, de sorte que

$$R(A^\dagger A, \boldsymbol{x}) = \frac{\|A\boldsymbol{x}\|^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2} = \frac{\boldsymbol{x}^\dagger A^\dagger A \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^\dagger \boldsymbol{x}} = \frac{\sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2 |c_i|^2}{\sum_{i=1}^{k} |c_i|^2} \geq \sigma_k^2. \tag{1.16}$$

Or, il se trouve que $\boldsymbol{v}_k \in V_k$ et que $R(A^\dagger A, \boldsymbol{v}_k) = \sigma_k^2$. Ainsi,

$$\min_{\substack{\boldsymbol{x} \in V_k \\ \boldsymbol{x} \neq 0}} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} = \sigma_k. \tag{1.17}$$

La deuxième égalité du théorème se trouve de manière similaire à la première. □

Le théorème de Courant-Fischer global est démontré au théorème 7.3.8 de la Réf. [279].

## 1.3 Lien entre différentes factorisations

Il y a plusieurs liens à établir entre les différentes factorisations de rang de la section 1.1 et la SVD. Nous prenons soin d'établir quelques-uns de ces liens dans cette section.

D'abord, le lemme 1.1 énonce qu'une factorisation $A = LM$ existe toujours, ce qui se démontre aussi aisément à l'aide de la SVD. En effet, du corollaire 1.9, la SVD compacte $A = U_r \Sigma_r V_r^\dagger$ existe. Puisque les valeurs singulières sont non négatives, la matrice tronquée de valeurs singulières se sépare en deux matrices réelles $\Sigma_r^{1/2}$, ce qui implique

$$A = U_r \Sigma_r V_r^\top = (U_r \Sigma_r^{1/2})(\Sigma_r^{1/2} V_r^\top) = LM,$$

où les matrices $L := U_r \Sigma_r^{1/2}$ et $M := \Sigma_r^{1/2} V_r^\top$ sont réelles avec les dimensions désirées.

Le premier contact avec la SVD mène généralement à des questions sur le lien entre les valeurs singulières et les valeurs propres d'une matrice carrée. En général, il n'y a pas de relation évidente entre celles-ci. Il est toutefois possible d'établir des relations simples dans des cas particuliers.

Par exemple, le lemme 1.14 de la section 1.2 permet de borner supérieurement les valeurs propres d'une matrice avec la plus grande valeur singulière.

**Corollaire 1.16.** *Soit $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ de plus grande valeur singulière $\sigma_1$ et dont l'une des valeurs propres est $\lambda$. Alors, $|\lambda| \leq \sigma_1$.*

*Démonstration.* Du lemme 1.14, nous savons que $\|A\boldsymbol{x}\| \leq \sigma_1 \|\boldsymbol{x}\|$. Si $\boldsymbol{x}$ est un vecteur propre relié à la valeur propre $\lambda$, alors $\|A\boldsymbol{x}\| = |\lambda| \|\boldsymbol{x}\| \leq \sigma_1 \|\boldsymbol{x}\|$ et donc $|\lambda| \leq \sigma_1$. □

Pour les matrices de plein rang, il est aussi possible de borner inférieurement les valeurs propres d'une matrice avec la plus petite valeur singulière.

**Lemme 1.17.** *Soit $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ de plus petite valeur singulière $\sigma_n$ et dont l'une des valeurs propres est $\lambda$. Si $A$ est inversible, alors $0 < \sigma_n \leq |\lambda|$.*

*Démonstration.* Si $A$ est inversible, alors $\det(A) \neq 0$ et $\det(A^\dagger) = \overline{\det(A)} \neq 0$. Ainsi, par le lemme 1.12,

$$\det(AA^\dagger) = \det(A^\dagger A) = \det(A^\dagger)\det(A) = |\det(A)|^2 = \prod_{i=1}^{n} \sigma_i^2 > 0.$$

Il s'ensuit que $\sigma_n > 0$, comme c'est le cas pour toutes les valeurs singulières de $A$. De plus, $\|A\boldsymbol{x}\|^2 = \|U\Sigma V^\dagger \boldsymbol{x}\|^2 = \|\Sigma V^\dagger \boldsymbol{x}\|^2$, puisque $U$ est unitaire. En définissant $\boldsymbol{y} := V^\dagger \boldsymbol{x}$,

$$\|\Sigma \boldsymbol{y}\|^2 = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 |y_i|^2 \geq \sigma_n^2 \sum_{i=1}^{n} |y_i|^2 = \sigma_n^2 \|\boldsymbol{y}\|^2 = \sigma_n^2 \|\boldsymbol{x}\|^2 ,$$

où la dernière égalité découle du fait que $V^\dagger$ est unitaire et $\|\boldsymbol{y}\| = \|\boldsymbol{x}\|$. Par conséquent, si $\boldsymbol{x}$ est un vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda$, alors $\|A\boldsymbol{x}\| = |\lambda|\,\|\boldsymbol{x}\| \geq \sigma_n \|\boldsymbol{x}\|$ et donc, $|\lambda| \geq \sigma_n$. □

Au-delà des inégalités, il est intriguant d'examiner sous quelles conditions une équivalence entre les valeurs singulières et les valeurs propres est possible. Pour les matrices normales, il se trouve que les valeurs singulières sont données par le module des valeurs propres.

**Lemme 1.18.** *Si $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ est une matrice normale avec des valeurs singulières $\sigma_1, \ldots, \sigma_n$ et des valeurs propres $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, ordonnées telles que $|\lambda_1| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, alors,*

$$\sigma_i = |\lambda_i|, \qquad \forall\, i \in \{1, ..., n\}.$$

*Démonstration.* Puisque $A$ est normale, elle est diagonalisable par une matrice unitaire $U$ telle que $A = U\Lambda U^\dagger$ où $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_n)$. En général, les valeurs propres sont complexes et s'écrivent alors sous forme polaire comme $\lambda_j = |\lambda_j| e^{i\phi_j}$ pour une certaine phase $\phi_j$. Sous forme matricielle, écrivons $\Lambda = \Sigma\, e^{i\Phi}$ où $\Sigma = \mathrm{diag}(|\lambda_1|, ..., |\lambda_n|)$ et $e^{i\Phi} = \mathrm{diag}(e^{i\phi_1}, ..., e^{i\phi_n})$, c'est-à-dire l'exponentielle complexe de la matrice diagonale $\Phi = \mathrm{diag}(\phi_1, ..., \phi_n)$. Par conséquent, $A = U\Sigma V^\dagger$ où $V^\dagger := e^{i\Phi}U^\dagger$ est une nouvelle matrice unitaire, puisqu'elle est composée de deux matrices unitaires : $VV^\dagger = Ue^{-i\Phi}e^{i\Phi}U^\dagger = I$ et $V^\dagger V = e^{i\Phi}U^\dagger U e^{-i\Phi} = I$. Il en découle que $U\Sigma V^\dagger$ est la SVD de $A$ et $\Sigma = \mathrm{diag}(|\lambda_1|, ..., |\lambda_n|) = \mathrm{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_n)$. Par comparaison, le lien désiré est obtenu : $\sigma_i = |\lambda_i|$ pour tout $i \in \{1, ..., n\}$ avec $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_n$. □

La dernière démonstration est basée sur le fait que les phases des valeurs propres sont transférées à la matrice de vecteurs propres $U^\dagger$ (ou $U$) pour former la matrice de vecteurs singuliers droits (ou gauches), alors que les vecteurs singuliers gauches (ou droits) sont les vecteurs propres. Dans cette perspective, les phases des valeurs propres sont à l'origine de la différence

entre la matrice impliquée à gauche et à droite de $\Sigma = \mathrm{diag}(|\lambda_1|, ..., |\lambda_N|)$ dans la SVD des matrices normales.

Une conséquence directe de cette observation est que si les valeurs propres sont réelles et non négatives (ex., pour une matrice hermitienne semi-définie positive), alors les phases sont nulles et le lemme 1.18 (voir aussi sa preuve) garantit que les décompositions en valeurs propres et en valeurs singulières sont équivalentes.

Il y a aussi une autre situation particulière où il est possible d'avoir la même matrice impliquée de part et d'autre de $\Sigma$. En effet, pour les matrices symétriques complexes, il y a la factorisation de Autonne-Takagi (ou Takagi ou SVD symétrique) [39, 571].

**Théorème 1.19.** *Soit une matrice complexe $A$ de dimension finie $n \times n$ et symétrique. Alors la factorisation de Autonne-Takagi existe et s'écrit*

$$A = X\Sigma X^\top, \tag{1.18}$$

*où $\Sigma$ est la matrice diagonale des valeurs singulières de $A$ et $X$ est une matrice unitaire.*

*Démonstration.* La preuve ci-bas est inspirée de la Réf. [110]. Puisque la SVD $U\Sigma V^\dagger$ de la matrice $A$ existe (théorème 1.5) et que $A$ est symétrique, alors $U\Sigma V^\dagger = A = A^\top = \bar{V}\Sigma U^\top$. La multiplication par $U^\dagger$ et la transposition des deux côtés de l'équation donnent $\bar{V}\Sigma = U\Sigma V^\dagger \bar{U}$. En multipliant de nouveau par $U^\dagger$, il en découle $U^\dagger \bar{V}\Sigma = \Sigma V^\dagger \bar{U}$. Poser $Z := U^\dagger \bar{V}$ donne donc

$$Z\Sigma = \Sigma Z^\top, \tag{1.19}$$

où $Z$ est une matrice unitaire puisque $U$ et $V$ sont unitaires :

$$Z^\dagger Z = V^\top U U^\dagger \bar{V} = V^\top \bar{V} = (V^\dagger V)^\top = I\,, \quad ZZ^\dagger = U^\dagger \bar{V} V^\top U = U^\dagger (VV^\dagger)^\top U = U^\dagger U = I.$$

L'équation (1.19) implique aussi sa généralisation

$$Z^j \Sigma = Z^{j-1} Z\Sigma = Z^{j-2} Z\Sigma Z^\top = Z^{j-2}\Sigma \left(Z^\top\right)^2 = ... = \Sigma \left(Z^\top\right)^j,$$

où $j$ est un entier plus grand ou égal à 0. Ainsi,

$$q(Z)\Sigma = \Sigma q(Z^\top) = \Sigma q(Z)^\top \tag{1.20}$$

pour tout polynôme $q$.

Puisque $Z$ est unitaire, elle est diagonalisable par une matrice unitaire $W$ sous la forme $Z = WDW^\dagger$, où $D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ et $|\lambda_i| = 1$. Soient $\lambda'_1, \ldots, \lambda'_s$, les valeurs propres distinctes de $Z$. Pour chaque $\alpha \in \{1, ..., s\}$, choisissons donc $\theta_\alpha \in [0, 2\pi)$ tel que $\lambda'_\alpha = e^{i\theta_\alpha}$, puis posons $\mu_\alpha := e^{i\theta_\alpha/2}$. Ainsi, $\mu_\alpha^2 = \lambda'_\alpha$ et il y a $s$ couples $(\lambda'_1, \mu_1), ..., (\lambda'_s, \mu_s)$. Par interpolation de Lagrange, il existe un polynôme $p$ tel que $p(\lambda'_\alpha) = \mu_\alpha$ pour tout $\alpha \in \{1, ..., s\}$, soit

$$p(\lambda) = \sum_{\alpha=1}^{s} \mu_\alpha \prod_{\beta=1, \beta\neq\alpha}^{s} \frac{\lambda - \lambda'_\beta}{\lambda'_\alpha - \lambda'_\beta}\,.$$

Puisque $Z = WDW^\dagger$, le polynôme évalué à la matrice $Z$ satisfait $p(Z)^2 = Wp(D)^2W^\dagger$ avec $p(D)^2 = \text{diag}(p(\lambda_1)^2, ..., p(\lambda_n)^2)$. Par construction, en introduisant la surjection $\gamma$ d'indices de $\{1, ..., n\}$ vers $\{1, ..., s\}$, $p(\lambda_i)^2 = p(\lambda'_{\gamma(i)})^2 = \mu^2_{\gamma(i)} = \lambda'_{\gamma(i)} = \lambda_i$ pour tout $i \in \{1, ..., n\}$. Cela implique que $p(D)^2 = D$ et

$$p(Z)^2 = Z\,. \tag{1.21}$$

Les équations (1.19), (1.20) avec $q = p$ et (1.21) impliquent ensuite

$$A = U\Sigma V^\dagger = U\Sigma V^\dagger \bar{U}U^\top = U\Sigma Z^\top U^\top = UZ\Sigma U^\top = Up(Z)p(Z)\Sigma U^\top = Up(Z)\Sigma p(Z)^\top U^\top.$$

Puisque $U$ et $p(Z)$ sont des matrices unitaires, $X := Up(Z)$ est une matrice unitaire et $A = X\Sigma X^\top$ est bel et bien la décomposition escomptée. Notons qu'il est aussi possible de démontrer l'existence à partir d'une décomposition polaire et de la diagonalisation unitaire [110]. □

La factorisation de Autonne-Takagi est reliée directement à la décomposition en valeurs propres pour les matrices symétriques réelles. Ce lien est établi dans la preuve du lemme suivant.

**Lemme 1.20.** *Soit une matrice réelle symétrique $A$ de dimension $n \times n$. Alors la décomposition en valeurs propres implique la factorisation de Autonne-Takagi.*

*Démonstration.* Du théorème spectral pour les matrices réelles symétriques, la matrice $A$ est diagonalisable par une matrice orthogonale $P = (\boldsymbol{v}_1 \; ... \; \boldsymbol{v}_n)$ et possède des valeurs propres $\lambda_i$ réelles. Ainsi, $A = PDP^T$ avec $D = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_n)$ où les valeurs propres sont ordonnées telles que

$$|\lambda_1| \geq ... \geq |\lambda_r| > 0 = |\lambda_{r+1}| = ... = |\lambda_n|$$

où $r$ est le rang de $A$. Le corollaire 1.3 implique que nous pouvons aussi utiliser la version tronquée (factorisation de rang) de la décomposition en valeurs propres, soit $A = O\Delta O^\top$ où $O = (\boldsymbol{v}_1 \; ... \; \boldsymbol{v}_r)$ et $\Delta = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_r)$. De plus, du lemme 1.18 appliqué aux matrices symétriques, les valeurs singulières de $A$ sont $\sigma_i = |\lambda_i|$ pour tout $i$. Les valeurs singulières de $A$ peuvent être introduites comme suit :

$$\Delta_{\mu\nu} = \lambda_\mu \delta_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{\lambda_\mu}{|\lambda_\mu|}}|\lambda_\mu|\sqrt{\frac{\lambda_\mu}{|\lambda_\mu|}}\delta_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{\lambda_\mu}{|\lambda_\mu|}}\sigma_\mu\sqrt{\frac{\lambda_\mu}{|\lambda_\mu|}}\delta_{\mu\nu} \qquad \forall \mu, \nu \in \{1, ..., r\}. \tag{1.22}$$

Puisque $\lambda_\mu$ est réelle et non nulle, alors $\lambda_\mu/|\lambda_\mu| = \pm 1$ et

$$\sqrt{\frac{\lambda_\mu}{|\lambda_\mu|}} = \mathbf{1}_{\lambda_\mu \geq 0} + i\mathbf{1}_{\lambda_\mu < 0} = U_{\mu\mu}$$

où nous avons introduit la matrice $U$ dont les éléments sont

$$U_{\mu\nu} = (\mathbf{1}_{\lambda_\mu \geq 0} + i\mathbf{1}_{\lambda_\mu < 0})\delta_{\mu\nu}.$$

Cette matrice est diagonale, unitaire et non singulière. Les éléments de la matrice $\Delta$ s'expriment ainsi comme $\Delta_{\mu\nu} = \sum_{\kappa,\tau} U_{\mu\kappa}\sigma_\kappa\delta_{\kappa\tau}U_{\tau\nu}$ et sous forme matricielle, en définissant $\Sigma_r = \mathrm{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$, nous obtenons

$$\Delta = U\Sigma_r U, \tag{1.23}$$

ce qui est une relation d'équivalence et de congruence unitaire diagonale. La substitution de cette transformation dans la factorisation $O\Delta O^\top$ de $A$ donne

$$A = OU\Sigma_r UO^\top = V_r\Sigma_r V_r^\top,$$

où $V_r := OU$. Notons d'abord que $O$ est aussi une matrice de vecteurs propres de $\bar{A}$ :

$$AO = O\Delta \quad \Rightarrow \quad \bar{A}\bar{O} = \bar{O}\bar{\Delta} \quad \Rightarrow \quad \bar{A}O = O\Delta. \tag{1.24}$$

Ce dernier constat permet de montrer que la matrice $V_r$ est une matrice de vecteurs propres de la matrice hermitienne $A^\dagger A$ (et $AA^\dagger$) dont la matrice de valeurs propres est $\Delta^2$. En effet,

$$A^\dagger AV_r = \bar{A}AOU = \bar{A}O\Delta U = O\Delta^2 U = OU\Delta^2 = V_r\Delta^2. \tag{1.25}$$

Introduisons désormais la matrice de vecteurs propres réels du noyau de $A$ (de valeurs propres nulles), soit $X := (\boldsymbol{v}_{r+1}, ..., \boldsymbol{v}_n)$. Cette matrice est une matrice de vecteurs propres de $A^\dagger A$ : $A^\dagger AX = \bar{A}X0 = X0 = 0$. Nous pouvons alors construire la matrice $n \times n$ de vecteurs propres de $A^\dagger A$, soit la matrice par blocs $V = (V_r\ X)$, de même que la matrice $n \times n$ des valeurs singulières

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.26}$$

pour obtenir la factorisation

$$A = V\Sigma V^\top.$$

Pour que cette dernière factorisation soit la décomposition de Autonne-Takagi, il ne reste qu'à montrer que $V$ est unitaire. C'est effectivement le cas, puisque $U$ est unitaire, $X^\top X = I_{(n-r)\times(n-r)}$, $O^\top O = I_{r\times r}$, $O^\top X = 0_{r\times(n-r)}$ et $X^\top O = 0_{(n-r)\times r}$ :

$$V^\dagger V = \begin{pmatrix} V_r^\dagger \\ X^\top \end{pmatrix}\begin{pmatrix} V_r & X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_r^\dagger V_r & V_r^\dagger X \\ X^\top V_r & X^\top X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger O^\top OU & U^\dagger O^\top X \\ X^\top OU & X^\top X \end{pmatrix} = I$$

$$VV^\dagger = \begin{pmatrix} V_r & X \end{pmatrix}\begin{pmatrix} V_r^\dagger \\ X^\top \end{pmatrix} = V_rV_r^\dagger + XX^\top = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^\top + \sum_{i=r+1}^{n} \boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^\top = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^\top = PP^\top = I.$$

□

Concluons cette sous-section avec un exemple simple qui illustre les différentes factorisations de rang introduites.

**Exemple 1.21.** La matrice symétrique de rang 2

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

possède les valeurs singulières $1, 1, 0$, les valeurs propres $1, -1, 0$ et n'est donc pas semi-définie positive. Nous remarquons d'abord que le lemme 1.18 est bel et bien respecté : $\sigma_i = |\lambda_i|$ pour $i \in \{1, 2, 3\}$. Pour cette matrice symétrique, nous obtenons donc la factorisation

1. en valeurs singulières compacte $U_r \Sigma_r V_r^\top$ [corollaires 1.7 et 1.9] :

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

2. en deux matrices réelles $LM$ où $M \neq L^\top$ [corollaire 1.1] :

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

3. en deux matrices complexes $CC^\top$ [corollaire 1.2] :

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \\ 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ i & 0 & -i \end{pmatrix};$$

4. en valeurs propres compacte $O\Delta O^T$ [corollaire 1.3] :

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

5. de Autonne-Takagi compacte $W_r \Sigma_r W_r^\top$ [lemme 1.19] :

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \\ 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ i & 0 & -i \end{pmatrix}.$$

Remarquons qu'en suivant le lemme 1.20, il suffit d'effectuer la transformation $\Delta = U \Sigma_r U$ avec $U = \mathrm{diag}(1, -i)$ pour obtenir la factorisation de Takagi. ■

## 1.4 Théorème de Weyl et factorisation de bas rang optimale

La SVD partage plusieurs théorèmes analogues à ceux de la décomposition en valeurs propres, tels que les théorèmes de Rayleigh [279, Theorem 4.2.2], de Courant-Fischer [279, Theorem 7.3.8], d'entrelacement de Cauchy [577, Lemma A.1] et, en particulier, de Weyl. Ce dernier occupera une place importante au chapitre 4. L'extension du théorème de Weyl pour les valeurs singulières a été obtenue en 1951 par Ky Fan [179, Theorem 2].

**Théorème 1.22.** *Soient deux matrices $A$ et $B$ de dimension $m \times n$ et $q = \min(m, n)$. Alors,*

$$\sigma_{i+j-1}(A+B) \leq \sigma_i(A) + \sigma_j(B) \qquad \forall\, 1 \leq i,\, j,\, i+j-1 \leq q, \tag{1.27}$$

*où $\sigma_k(X)$ est la $k$-ième valeur singulière de $X$ et les valeurs singulières sont ordonnées dans l'ordre décroissant usuel.*

*Démonstration.* En utilisant une astuce qui viendrait de H. Wielandt [180,411], il est toujours possible de définir les matrices hermitiennes $(m+n) \times (m+n)$

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^\dagger & 0 \end{pmatrix},$$

Du théorème 7.3.3 de la Réf. [279], les $m+n$ valeurs propres de $\mathcal{X}$, égale à $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, ou $\mathcal{A}+\mathcal{B}$, sont

$$-\sigma_1(X) \leq \ldots \leq -\sigma_q(X) \leq \underbrace{0 = \ldots = 0}_{|n-m| \text{ fois}} \leq \sigma_q(X) \leq \ldots \leq \sigma_1(X) \tag{1.28}$$

où $X$ est $A$, $B$ ou $A+B$, respectivement. Sans perte de généralité, considérons seulement les valeurs propres de $\mathcal{X}$ associées aux valeurs singulières $\sigma_1(X), \ldots, \sigma_q(X)$. Les inégalités à l'équation (1.28) permettent d'indicer les valeurs propres positives en ordre décroissant tel que $\sigma_1(X) =: \lambda_{m+n}(\mathcal{X})$, $\sigma_2(X) =: \lambda_{m+n-1}(\mathcal{X})$, ..., $\sigma_q(X) =: \lambda_{m+n-q+1}(\mathcal{X})$, ou de façon concise,

$$\sigma_i(X) = \lambda_{m+n-i+1}(\mathcal{X}) \quad \text{avec} \quad i \in \{1, \ldots, q\}. \tag{1.29}$$

De plus, le théorème de Weyl [625, Satz I, p.445] [279, Theorem 4.3.1] donne un ensemble d'inégalités pour les valeurs propres positives des matrices hermitiennes $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{A}+\mathcal{B}$, soit,

$$\lambda_k(\mathcal{A}+\mathcal{B}) \leq \lambda_{k+\ell}(\mathcal{A}) + \lambda_{m+n-\ell}(\mathcal{B}) \tag{1.30}$$

où $k \in \{m+n-q+1, \ldots, m+n\}$ et $\ell \in \{0, \ldots, m+n-k\}$. En vue d'appliquer la relation (1.29) dans les inégalités de Weyl (1.30), il est utile d'effectuer d'abord les changements d'indices

$$\begin{aligned} m+n-\ell = m+n-j+1 \quad &\Longleftrightarrow \quad j = \ell+1 \\ k+\ell = m+n-i+1 \quad &\Longleftrightarrow \quad k = m+n-(i+j-1)+1. \end{aligned}$$

D'une part, la valeur maximale de $k$ est $m+n$, ce qui implique que la valeur minimale de $i+j$ est 2 :

$$m+n-(i+j-1)+1 = m+n \quad \Longleftrightarrow \quad i+j = 2.$$

D'autre part, la valeur minimale de $k$ est $m+n-q+1$. Il s'ensuit que la valeur maximale de $i+j$ est $q+1$ :

$$m+n-(i+j-1)+1 = m+n-q+1 \quad \Longleftrightarrow \quad i+j = q+1.$$

Ainsi, $2 \leq i+j \leq q+1$ tel qu'attendu. De plus, la valeur maximale de $\ell = m+n-k$ est maximale pour la plus petite valeur de $k$, soit $m+n-q+1$. Il s'ensuit que la valeur de $\ell$ pour $k = m+n-q+1$ est $q-1$ et donc, $j \leq q$. Puisque $\ell \geq 0$, alors $j \geq 1$. Par conséquent, $i+j \geq 2$ et $j \geq 1$, ce qui laisse $i \geq 1$. Similairement, $i+j \leq q+1$ et $j \geq 1$ impliquent que $i \leq q$. Le tout mène enfin à $1 \leq i, j \leq q$.

L'application du changement de variables conduit aux inégalités

$$\lambda_{m+n-(i+j-1)+1}(\mathcal{A}+\mathcal{B}) \leq \lambda_{m+n-i+1}(\mathcal{A}) + \lambda_{m+n-j+1}(\mathcal{B}), \quad 1 \leq i, j, i+j-1 \leq q \tag{1.31}$$

et la substitution de l'équation (1.29) donne directement les inégalités de Weyl pour les valeurs singulières. Une démonstration alternative avec l'équivalent du théorème de Courant-Fischer pour les valeurs singulières est présente à la Réf. [278, Theorem 3.3.16]. □

**Remarque 1.23.** Si $i = j = 1$, alors le dernier théorème n'implique que les valeurs singulières dominantes et prend la forme $\sigma_1(A+B) \leq \sigma_1(A)+\sigma_1(B)$. Celle-ci était connue avant le dernier théorème et est parfois attribuée [386] à Wittmeyer [640, Eq. (VIII)], qui attribue lui-même l'inégalité à Wintner (« Spektraltheorie der unendlichen Matrizen », Leipzig 1929, p. 130). De nos jours, cette inégalité est moins surprenante : c'est l'inégalité du triangle pour la 2-norme matricielle [définition 1.13]. ■

Un premier corollaire utile [574, Exercise 1.3.22 (iv)] permet d'analyser les graphes aléatoires sous la perspective de la théorie perturbative des matrices aléatoires, tel qu'abordée au chapitre 4. En effet, le résultat suivant établit que la force (norme) d'une perturbation borne la différence entre chaque valeur singulière d'une matrice et sa version perturbée.

**Corollaire 1.24.** *Soient deux matrices $A$ et $B$ de dimension $m \times n$ et $q = \min(m, n)$.*

$$|\sigma_i(A+B) - \sigma_i(A)| \leq \|B\|_2 \qquad \forall\, 1 \leq i \leq q, \tag{1.32}$$

*où $\sigma_i(X)$ est la $i$-ème valeur singulière de $X$.*

*Démonstration.* Soit $D, E \in \mathbb{C}^{m\times n}$. Les inégalités de Weyl (1.27) du théorème 1.22 avec $A = D$ et $B = E$ impliquent

$$\sigma_{i+j-1}(D+E) \leq \sigma_i(D) + \sigma_j(E) \qquad \forall\, 1 \leq i,\, j,\, i+j-1 \leq q.$$

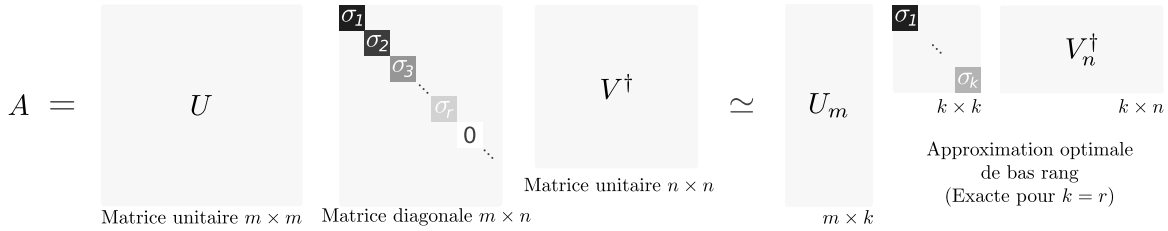



FIGURE 1.3 – La SVD tronquée à $k < r$ termes est l'approximation de bas rang optimale pour n'importe quelle matrice $A$.

De même, en posant $A + B = D$ dans les inégalités de Weyl donne $A = D + E$, $B = -E$, et

$$\sigma_{i+j-1}(D) \leq \sigma_i(D+E) + \sigma_j(E) \qquad \forall\, 1 \leq i,\, j,\, i+j-1 \leq q\,,$$

puisque $\sigma_j(-E) = \sigma_j(E)$. Avec $j = 1$ dans les deux derniers ensembles d'inégalités, les inégalités suivantes sont valides pour tout $i$ :

$$\sigma_i(D+E) - \sigma_i(D) \leq \sigma_1(E) \tag{1.33}$$

$$\sigma_i(D) - \sigma_i(D+E) \leq \sigma_1(E). \tag{1.34}$$

Si $\sigma_i(D+E) > \sigma_i(D)$ pour un certain $i$, le côté gauche de l'inégalité (1.33) est positif et est évidemment plus grand que le côté gauche (négatif) de l'inégalité (1.34). À l'inverse, si $\sigma_i(D+E) < \sigma_i(D)$ pour un $i$ quelconque, le côté gauche de l'inégalité (1.34) est positif et plus grand que le côté gauche de l'inégalité (1.33). Poser $D = A$, $E = B$ et $\|B\|_2 = \sigma_1(B)$ donne le résultat escompté. □

L'importance du théorème de Weyl réside aussi dans ses implications pour la réduction dimensionnelle. En particulier, celui-ci permet de prouver le théorème de Schmidt-Eckart-Young-Mirsky [23, 55, 160, 411, 530, 560] (souvent appelé le théorème de Eckart-Young [234, Theorem 2.4.8] ou Eckart-Young-Mirsky [385]). Ce dernier énonce que la SVD tronquée est l'approximation optimale d'une matrice (Fig. 1.3) selon toutes normes $\|\cdot\|$ unitairement invariantes, c'est-à-dire, telle que $\|U_1 A U_2\| = \|A\|$ pour des matrices unitaires $U_1, U_2$ [1]. Le prochain théorème 1.25 est formulé pour la norme de Frobenius et la norme spectrale.

**Théorème 1.25.** *Soit $A$ une matrice de rang plus grand ou égal à $k$ et le problème d'optimisation*

$$\begin{aligned} &\underset{B}{\text{minimiser}} && \|A-B\|^2 \\ &\text{sous la contrainte} && \operatorname{rank} B \leq k\,, \end{aligned} \tag{P0}$$

1. Il se trouve qu'une norme matricielle est unitairement invariante si et seulement si la norme de la matrice s'exprime comme une fonction des valeurs singulières de la matrice où la fonction est une fonction de jauge symétrique. Sur le sujet des normes unitairement invariantes et les fonctions de jauge symétriques, voir Réf. [411] et Réf. [279]. Plus simplement, remarquons que pour une norme unitairement invariante $\|A\| = \|U\Sigma V^\dagger\| = \|\Sigma\|$.

*où* $\|\,\|$ *est la norme spectrale* $\|\,\|_2$ *ou de Frobenius* $\|\,\|_F$*. Alors, l'erreur minimum au problème* (P0) *est*

$$\min_{B,\operatorname{rank} B\leq k} \|A-B\|_2^2 = \sigma_{k+1}^2 \quad ou \quad \min_{B,\operatorname{rank} B\leq k} \|A-B\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i^2, \tag{1.35}$$

*où* $q=\min\{m,n\}$ *et* $\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_q$ *sont les valeurs singulières de* $A$*. De plus, dans les deux cas, la solution au problème* (P0) *est donnée par la SVD tronquée à* $k$ *termes de* $A$*, c'est-à-dire*

$$B^* = \underset{B,\operatorname{rank} B\leq k}{\arg\min} \|A-B\|_2^2 = \underset{B,\operatorname{rank} B\leq k}{\arg\min} \|A-B\|_F^2 = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger, \tag{1.36}$$

*où* $\boldsymbol{u}_i$*,* $\boldsymbol{v}_i$ *sont les* $i$*-ème vecteurs singuliers gauches et droits de* $A$*, respectivement. Si* $\sigma_k = \sigma_{k+1}$*, alors le problème* (P0) *admet plus d'une solution optimale.*

*Démonstration.* D'une part, de la SVD de $A$, la norme de Frobenius de $A-A_k^*$ est

$$\|A-A_k^*\|_F^2 = \left\| \sum_{i=1}^{q} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger - \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger \right\|_F^2 = \left\| \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger \right\|_F^2 = \operatorname{tr}\left[ \sum_{i,j=k+1}^{q} \sigma_i \sigma_j \boldsymbol{v}_j \boldsymbol{u}_j^\dagger \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger \right].$$

Puisque $\boldsymbol{u}_j^\dagger \boldsymbol{u}_i = \delta_{ij}$, alors

$$\|A-A_k^*\|_F^2 = \operatorname{tr}\left[ \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i^2 \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger \right] = \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i^2 \operatorname{tr}(\boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger) = \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i^2 \operatorname{tr}(\boldsymbol{v}_i^\dagger \boldsymbol{v}_i) = \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i^2 \,,$$

où la linéarité et la cyclicité de la trace ont été utilisées, de même que $\boldsymbol{v}_i^\dagger \boldsymbol{v}_i = 1$ pour tout $i$. D'autre part, la norme spectrale de $A-A_k^*$ est

$$\|A-A_k^*\|_2 = \left\| \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\dagger \right\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

Soit $A_k = LM$, où $LM$ est une certaine factorisation de rang $k$. Il est alors suffisant de montrer que pour n'importe quelle factorisation de rang $k$ de $A_k$,

$$\|A-A_k^*\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{q} \sigma_i^2 \leq \|A-A_k\|_F^2 \quad \text{et} \quad \|A-A_k^*\|_2 = \sigma_{k+1} \leq \|A-A_k\|_2 \,.$$

En notant la $i$-ème valeur singulière de $A-A_k$ comme $\sigma_i(A-A_k)$ (puis en effectuant l'abus $\sigma_i(A) := \sigma_i$), la norme de Frobenius et la norme spectrale de $A-A_k$ sont

$$\|A-A_k\|_F^2 = \sum_{i=1}^{q} \sigma_i(A-A_k)^2 \quad \text{et} \quad \|A-A_k\|_2 = \sigma_1(A-A_k).$$

Poser $A+B \to A$, $A \to A-A_k$ et $B \to A_k$ à l'équation (1.27) du théorème 1.22 donne ensuite

$$\sigma_{i+j-1}(A) \leq \sigma_i(A-A_k) + \sigma_j(A_k)$$

avec $1 \leq i,\ j,\ i+j-1 \leq q$. Pour tout $j \geq k+1$, $\sigma_j(A_k) = 0$ et donc,

$$\sigma_i(A - A_k) \geq \sigma_{i+k}(A) \tag{1.37}$$

avec $1 \leq i \leq q-k$. Pour la norme de Frobenius, il s'ensuit que

$$\|A-A_k\|_F^2 = \sum_{i=1}^{q} \sigma_i(A-A_k)^2 \geq \sum_{i=1}^{q-k} \sigma_i(A-A_k)^2 \geq \sum_{i=1}^{q-k} \sigma_{i+k}(A)^2 = \sum_{\ell=k+1}^{q} \sigma_\ell(A)^2 = \|A-A_k^*\|_F^2 .$$

Pour la norme spectrale, fixer $i = 1$ dans l'équation (1.37) implique

$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_1(A - A_k) \geq \sigma_{k+1}(A) = \|A - A_k^*\|_2.$$

Pour chacune des normes, la valeur minimale de $\|A-A_k\|^2$ est donc atteinte lorsque $A_k = A_k^*$.

En ce qui concerne l'unicité, supposons le contraire, c'est-à-dire que la solution est unique lorsque $\sigma_{k+1} = \sigma_k$. Il est connu que $A_k^* = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(A)\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\dagger$ est une solution au problème, mais $C_k^* = \sum_{i=1}^{k-1} \sigma_i(A)\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\dagger + \sigma_{k+1}(A)\boldsymbol{u}_{k+1}\boldsymbol{v}_{k+1}^\dagger$ est une matrice différente (puisque $U$ et $V$ sont unitaires, chacune de leurs lignes/colonnes sont linéairement indépendantes et $\boldsymbol{u}_k \neq \boldsymbol{u}_{k+1}$, $\boldsymbol{v}_k \neq \boldsymbol{v}_{k+1}$) et constitue une solution distincte au problème, ce qui contredit l'hypothèse initiale. □

**Remarque 1.26.** L'obtention de bornes spectrales a été un sujet actif dans les années 1950, où l'on y trouve entre autres les contributions de Wielandt, Hoffman et Mirsky [269, 411]. À l'annexe A.4, certains de leurs théorèmes sont énoncés. ■

Le théorème 1.25 de Eckart-Young entraîne à son tour un autre résultat qui sera utile pour le théorème 4.53 du chapitre 4 : les projecteurs formés par les matrices de vecteurs singuliers gauches et droits sont des projecteurs orthogonaux optimaux. Ce fait paraît bien connu [259, Fact 2]. Toutefois, celui-ci ne semble pas avoir été présenté de façon complète et avec une preuve détaillée, ce qui est l'objet du prochain théorème.

**Théorème 1.27.** *Soit une matrice réelle $A$ de dimension $m \times n$, de rang $r$, de SVD $U\Sigma V^\top$ et de SVD tronquée à $k$ termes $U_k\Sigma_k V_k^\top$. Soit le problème d'optimisation*

$$\text{minimiser } \|(I - M^+M)A\|^2, \tag{P1}$$

*où la variable à optimiser $M$ est une matrice $k \times m$ telle que $k \leq m$ et la norme $\|\ \|$ représente soit la norme spectrale $\|\ \|_2$ ou celle de Frobenius $\|\ \|_F$.*

1. *Si $k = n \leq m$, alors $M = A^+$ solutionne le problème (P1) avec une erreur nulle.*

2. *Si $k = m$, alors n'importe quelle matrice $M$ de rang $m$ solutionne le problème (P1) avec une erreur nulle.*

*3. Si $k \leq r < \min(m,n)$, alors $M = U_k^\top$ minimise l'erreur au problème (P1) avec*

$$\min_{M,\operatorname{rank} M \leq k} \|(I - M^+M)A\|_2^2 = \sigma_{k+1}^2 \quad \text{et} \quad \min_{M,\operatorname{rank} M \leq k} \|(I - M^+M)A\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2 \,, \tag{1.38}$$

*lesquelles sont nulles si $k = r$.*

*Similairement, soit une matrice réelle $B$ de dimension $\ell \times m$, de rang $r$, avec une SVD $LSR^\top$ et une SVD tronquée à $k$ termes $L_k S_k R_k^\top$. Soit le problème d'optimisation*

$$\text{minimiser } \|B(I - M^+M)\|^2 \tag{P2}$$

*où, encore une fois, la variable à optimiser $M$ est une matrice $k \times m$ avec $k \leq m$.*

*4. Si $k = \ell \leq m$, alors $M = B$ solutionne le problème (P2) avec une erreur nulle.*

*5. Si $k = m$, alors n'importe quelle matrice $M$ de rang $m$ solutionne le problème (P2) avec erreur nulle.*

*6. Si $k \leq r < \min(\ell, m)$, alors $M = R_k^\top$ minimise l'erreur au problème (P2) avec*

$$\min_{M,\operatorname{rank} M \leq k} \|B(I - M^+M)\|_2^2 = \sigma_{k+1}^2 \quad \text{et} \quad \min_{M,\operatorname{rank} M \leq k} \|B(I - M^+M)\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{\min(\ell,m)} \sigma_i^2, \tag{1.39}$$

*lesquelles sont nulles si $k = r$.*

*Démonstration.* Considérons le problème (P1) et la preuve des énoncés 1–3.

1. Si $k = n \leq m$, alors les dimensions des matrices $M$ et $A^+$ coïncident et l'égalité $M = A^+$ peut être fixée. Par conséquent,

$$\|(I - M^+M)A\|^2 = \|A - AA^+A\|^2 = \|A - A\|^2 = 0,$$

puisque $(A^+)^+ = A$ et $AA^+A = A$ par les propriétés de la pseudo-inversion de Moore-Penrose [469].

2. Si $k = m$, alors $M$ est carrée. Une matrice $M$ quelconque de rang $m$ et de dimension $m \times m$ est inversible, de sorte que $M^+ = M^{-1}$ et $I - M^{-1}M = 0$, ce qui implique directement que $\|(I - M^+M)A\|^2 = 0$.

3. Prouvons d'abord que

$$\min_{M,\operatorname{rank} M \leq k} \|(I - M^+M)A\|^2 = \min_{\substack{C \\ C = M^+MA, \operatorname{rank} M \leq k}} \|A - C\|^2 \,.$$

En effet, par l'inégalité de Sylvester [279, Section 0.4.5 (c)] et l'inégalité $\operatorname{rank} M \leq k$, il s'ensuit que

$$\operatorname{rank}(M^+M) \leq \min\{\operatorname{rank} M, \operatorname{rank} M^+\} \leq k\,,$$

laquelle implique à son tour que

$$\operatorname{rank}(M^+MA) \leq \min\{\operatorname{rank}(M^+M), r\} = \operatorname{rank}(M^+M) \leq k\,,$$

où l'égalité suit du fait que $k \leq r$. Ainsi,

$$\min_{M, \operatorname{rank} M \leq k} \|(I - M^+M)A\|^2 = \min_{\substack{C \\ C = M^+MA,\, \operatorname{rank} C \leq k}} \|A - C\|^2. \tag{1.40}$$

Examinons désormais le cas particulier de la norme de Frobenius. La nouvelle forme du problème à l'équation (1.40) est compatible avec le théorème 1.25, mais avec la contrainte additionnelle que $C = M^+MA$, ce qui implique directement l'inégalité

$$\min_{\substack{C \\ C = M^+MA,\, \operatorname{rank} C \leq k}} \|A - C\|^2 \geq \min_{\substack{C \\ \operatorname{rank} C \leq k}} \|A - C\|^2 = \sum_{i=k+1}^{\min\{m,n\}} \sigma_i^2$$

ou de manière équivalente, de l'équation (1.40),

$$\min_{M, \operatorname{rank} M \leq k} \|(I - M^+M)A\|_F^2 \geq \sum_{i=k+1}^{\min\{m,n\}} \sigma_i^2. \tag{1.41}$$

Il en découle que si nous trouvons une matrice $M$ qui permet d'atteindre la borne inférieure de l'inégalité (1.41), alors le problème de minimisation est résolu. Ci-bas, nous prouvons que $M = U_k^\top$ est une telle solution.

La matrice $I - M^+M$ est un projecteur orthogonal (ce qui se démontre directement des propriétés de la pseudo-inversion de Moore-Penrose) et donc,

$$(I - M^+M)^\top (I - M^+M) = (I - M^+M)^2 = I - M^+M.$$

La propriété cyclique de la trace et la décomposition en valeurs propres de $AA^\top$ depuis la SVD impliquent

$$\|(I - M^+M)A\|_F^2 = \operatorname{tr}\left[AA^\top (I - M^+M)\right] = \operatorname{tr}\left[U\Sigma^2 U^\top (I - M^+M)\right].$$

Soit $M = U_k^\top$. Alors, $M^+M = U_k U_k^\top$ et

$$\|(I - M^+M)A\|_F^2 = \operatorname{tr}\left[\sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^\top - \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sum_{j=1}^{k} \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^\top \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{u}_j^\top\right].$$

Puisque $\boldsymbol{u}_i^\top \boldsymbol{u}_j = \delta_{ij}$, il en résulte que

$$\sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sum_{j=1}^{k} \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^\top \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{u}_j^\top = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sum_{j=1}^{k} \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i \delta_{ij} \boldsymbol{u}_j^\top = \sum_{j=1}^{k} \sigma_j^2 \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{u}_j^\top$$

et puis,

$$\|(I - M^+M)A\|_F^2 = \operatorname{tr}\left[\sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^\top\right] = \sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2 \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^\top\right] = \sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2.$$

Par conséquent, $B^* = U_k U_k^+ A$ est une solution au problème (P0). Si $k = r$, alors $\|(I - M^+M)A\|_F^2 = \sum_{i=r+1}^{\min(m,n)} \sigma_i^2 = 0$, car $\sigma_i = 0$ pour tout $i > r$.
Pour la norme spectrale, avec $M = U_k^\top$, il en découle que $(I - M^+M)A = (I - U_kU_k^\top)U\Sigma V^\top$, ce qui est équivalent à

$$\sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\top - \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \sum_{j=1}^{k} \boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^\top \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\top - \sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i \sum_{j=1}^{k} \boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^\top \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\top = \sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\top,$$

où $\boldsymbol{u}_j^\top \boldsymbol{u}_i = \delta_{ij}$ a été utilisé pour les deux derniers termes, de même que le fait que $i$ n'est jamais égal à $j$ dans le dernier terme. Nous concluons que $\|(I - M^+M)A\|_2 = \|\sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^\top\| = \sigma_{k+1}$, ce qui démontre que $M = U_k^\top$ minimise l'erreur au problème (P1).

Les preuves des énoncés 4–6 reliées au problème (P2) sont pratiquement identiques aux preuves des énoncés 1–3. □

Les résultats précédents illustrent bien comment la SVD est adaptée à l'approximation de matrices. Il reste toutefois difficile de déterminer combien de termes « significatifs » doivent être conservés pour obtenir une approximation « acceptable ». Ce choix dépend évidemment de ce que le modélisateur souhaite préserver dans la matrice et de la qualité de l'approximation désirée. C'est précisément le rôle des rangs effectifs d'établir un tel critère d'approximation, ce qui est l'objet de la prochaine section.

## 1.5 Rangs effectifs

Le rang est une mesure plutôt stricte, en ce sens qu'elle exige à certaines valeurs singulières d'être exactement 0. Les matrices qui ne sont pas de plein rang sont rares (mesure 0) parmi les matrices réelles. En effet, il suffit de perturber une matrice par une autre de très faible norme pour la rendre de plein rang. Une matrice peut toutefois avoir de très petites valeurs singulières et seulement quelques valeurs singulières dominantes. Il est donc utile d'avoir une notion moins restrictive du rang, soit le rang effectif. Il existe en fait plusieurs manières de définir un rang effectif pour une matrice, mais celles-ci sont basées sur les mêmes objets de base : tout comme le rang, un rang effectif dépend des valeurs singulières. Une telle dépendance est choisie de manière à ce que le rang effectif s'interprète comme une mesure du nombre de valeurs singulières significatives d'une matrice. Dit autrement, un rang effectif donne une dimension approximative d'une matrice.

La diversité des rangs effectifs vient entre autres des différentes façons de définir une valeur singulière significative ou non. Dans cette sous-section, nous présentons différents rangs effectifs, réunis grâce à une revue de littérature approfondie. Nous retrouverons ces rangs effectifs au Tableau 4.2 du chapitre 4.

### Rang stable

Le *rang stable* [602, Definition 7.6.7], aussi appelé le rang numérique (« numerical rank ») [508], est défini tel que

$$\operatorname{srank}(A) = \frac{\|A\|_F^2}{\|A\|_2^2} = \frac{\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2}{\sigma_1^2} \,. \tag{1.42}$$

Celui-ci mesure l'importance relative des valeurs singulières au carré par rapport au carré de la plus grande valeur singulière. Plus familièrement, $\operatorname{srank}(A)$ compare l'énergie totale de $A$ avec l'énergie de la première composante (premiers vecteurs singuliers) de $A$. Il se trouve que

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_F \leq \sqrt{r}\|A\|_2 \,, \tag{1.43}$$

où $r = \operatorname{rank}(A)$ et la deuxième inégalité implique la borne supérieure

$$\operatorname{srank}(A) \leq r \,,$$

telle que désiré. Le rang stable est dit « stable » au sens où celui-ci demeure essentiellement inchangé sous une faible perturbation de la matrice $A$, contrairement au rang [508]. Celui-ci est utilisé pour élaborer des algorithmes aléatoires rapides pour les approximations de bas rang [128, 259]. Puisque le rang stable indique aussi dans quelle mesure les éléments d'une matrice sont regroupés autour de la diagonale, il caractérise aussi la complexité des connexions entre les modules d'un graphe [158].

### Rang nucléaire

Le *rang nucléaire* [338, p.2183] est tel que

$$\operatorname{nrank}(A) = \frac{\|A\|_*}{\|A\|_2} = \frac{\sum_{i=1}^{r} \sigma_i}{\sigma_1} \,, \tag{1.44}$$

où $\|\ \|_*$ est la norme nucléaire, qui est aussi appelée la norme de Ky Fan ou la norme trace. Similairement au rang stable, il mesure l'importance relative de la somme des valeurs singulières par rapport à la plus grande valeur singulière. La norme nucléaire est bornée supérieurement telle que

$$\|A\|_* \leq \sqrt{r}\|A\|_F \leq r\|A\|_2 \,, \tag{1.45}$$

où la première inégalité de l'équation (1.43) a été utilisée. Il en découle que

$$\operatorname{nrank}(A) \leq \sqrt{r}\ \operatorname{srank}^{1/2}(A) \leq r \,. \tag{1.46}$$

### Ratio d'énergie

Le ratio d'énergie, aussi appelé la variance expliquée cumulative, la proportion reconstruite, ou le coefficient $R_v$ [2], est

$$E(\ell) = \frac{\|A_\ell\|_F^2}{\|A\|_F^2} = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} \sigma_i^2}{\sum_{j=1}^{r} \sigma_j^2}\,, \tag{1.47}$$

où $A_\ell$ est la SVD tronquée à la $\ell$-ième composante de $A$. Le rang effectif du *ratio d'énergie* est

$$\text{energy}(A) = \min\Big(\underset{\ell\in\{1,\ldots,N\}}{\arg\max}\,\big(E(\ell) > \tau\big)\Big)\,, \tag{1.48}$$

où $\tau \in (0,1)$ est un seuil à déterminer. Soulignons que l'énergie d'un graphe est différente (bien que reliée) à celles définies en combinatoire, qui ont des applications en chimie théorique et en théorie spectrale des graphes [254, 438, 445].

### Rang du coude

Soit les coordonnées $(x_i, y_i)$ de la $i$-ème valeurs singulières ayant la forme

$$x_i = \frac{i-1}{N-1} \quad \text{et} \quad y_i = \frac{\sigma_i - \sigma_N}{\sigma_1 - \sigma_N} \tag{1.49}$$

pour tout $i \in \{1,\ldots,N\}$, telle que la valeur singulière dominante est située à la coordonnée $(0,1)$ et la plus petite valeur singulière est située à $(1,0)$. La distance entre la ligne $L = \{(x,y)\,|\,x+y=1\}$, reliant la plus grande et la plus petite valeur singulière, et la position $(x_i, y_i)$ de la $i$-ème valeur singulière est

$$d_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x_i + y_i - 1|\,. \tag{1.50}$$

La *position du coude* est la plus grande distance au sein de $\{d_1,\ldots,d_N\}$, c'est-à-dire,

$$i_{\text{elbow}} = \underset{i\in\{1,\ldots,N\}}{\arg\max}\; d_i. \tag{1.51}$$

Le *rang du coude* est ainsi défini comme le nombre de valeurs singulières au-dessous de la position du coude, lequel s'écrit

$$\text{elbow}(A) = i_{\text{elbow}} - 1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\underset{i\in\{1,\ldots,N\}}{\arg\max}\left|\frac{i-1}{N-1} + \frac{\sigma_i - \sigma_N}{\sigma_1 - \sigma_N} - 1\right| - 1. \tag{1.52}$$

Ce rang effectif est souvent utilisé comme une règle empirique pour tronquer la distribution de valeurs singulières [215, 537]. Cette approche correspond au test du coude [2], où la position du coude est parfois définie autrement que ci-dessus [185].

### Rang basé sur l'entropie

Le rang effectif de Roy et Vetterli [506] ou la dimension d'information de Cangelosi et Goriely [97] est ici appelé *erank*. Celui-ci s'exprime comme

$$\operatorname{erank}(A) = \exp\left[H(p_1, ..., p_r)\right] \tag{1.53}$$

où $H(p_1, ..., p_r) = -\sum_{i=1}^{r} p_i \log p_i$ est l'entropie de Shannon, mesurée en nats et dépendante de la fonction de masse des valeurs singulières

$$p_i = \frac{\sigma_i}{\|A\|_*} = \frac{\sigma_i}{\sum_{j=1}^{r} \sigma_j}, \quad \forall i \in \{1, ..., r\}. \tag{1.54}$$

Notons que le carré des valeurs singulières pourrait être utilisé pour définir la fonction de masse des valeurs singulières, comme à la Réf. [16]. Parmi d'autres propriétés intéressantes, le erank satisfait $1 \leq \operatorname{erank}(A) \leq r$ et il est relié au « minimum coefficient rate » [96] (voir Réf. [506, Sec. 3] pour plus de détails). De plus, l'entropie de Shannon maximum est atteinte pour une distribution identique de valeurs singulières ($\operatorname{erank}(A) = r \leq N$). Intuitivement, cela signifie que le erank mesure l'uniformité de la distribution des valeurs singulières. Par exemple, le erank des valeurs singulières $(1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0)$ est 5, le erank de $(5, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$ est approximativement 7.9, le erank de $(30, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$ est approximativement 2.8 et celui de $(10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 1)$ est 8.6.

À la sous-section 2.4 du prochain chapitre, nous introduirons aussi deux autres rangs effectifs basés sur les matrices aléatoires et la notion de débruitage.

### Approximations, exemples et inégalités

Pour calculer les rangs effectifs exactement, toutes les valeurs singulières doivent être connues, ce qui peut entraîner de coûteux calculs numériques pour les grandes matrices. Un moyen d'approximer les valeurs singulières dans de tels cas consiste à utiliser la SVD aléatoire [381]. Cela peut être fait à l'aide de la fonction sklearn.utils.extmath.randomized_svd en *Python*.

**Exemple 1.28.** À la figure 1.4, la SVD tronquée à différents nombres de termes des matrices R, G et B décrivant les images du drapeau de Québec et de l'université d'Oxford est effectuée. Les drapeaux sont ensuite reconstitués à partir des approximations de bas rang des matrices R, G et B. Les détails de la matrice n'apparaissent qu'avec un nombre plus élevé de termes dans les décompositions. Il est donc logique que, pour reconstituer le drapeau d'Oxford qui contient des éléments plus fins, plus de termes soient nécessaires. ■

Parmi les rangs effectifs listés précédemment, srank, nrank et erank se distinguent par leur forme simple. Ceux-ci suivent naturellement un ordre comme démontré dans le lemme original ci-bas.

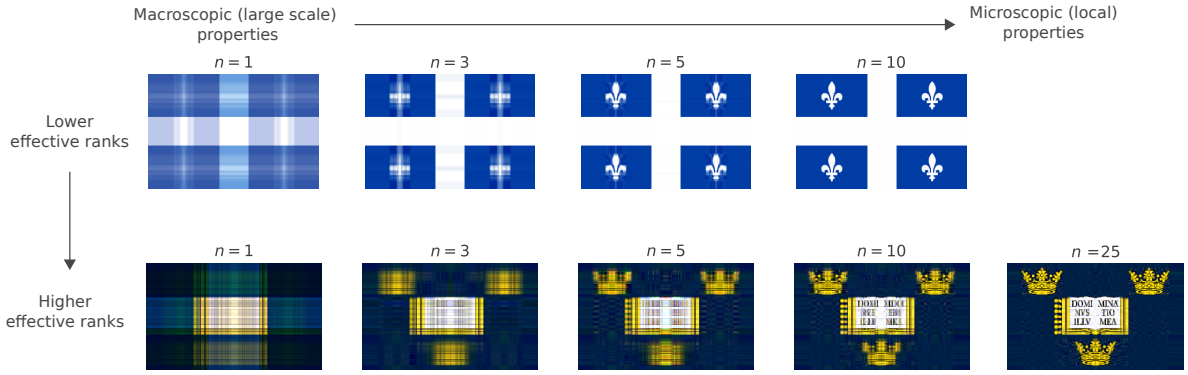



FIGURE 1.4 – Compression de deux drapeaux ayant différents niveaux de détails.

**Lemme 1.29** (Ordre de rangs effectifs)**.** *Pour n'importe quelle matrice $A$,*

$$\operatorname{srank}(A) \leq \operatorname{nrank}(A) \leq \operatorname{erank}(A) \leq \operatorname{rank}(A)\,. \tag{1.55}$$

*Démonstration.* Soit $r = \operatorname{rank}(A)$. Alors, $A$ possède exactement $r$ valeurs singulières positives : $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$.

Pour prouver la première inégalité, rappelons que $\operatorname{srank}(A) = \sum_{i=1}^{r} (\sigma_i/\sigma_1)^2$ tandis que $\operatorname{nrank}(A) = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i/\sigma_1$. Puisque $\sigma_i/\sigma_1 \leq 1$ pour tout $i$, alors $(\sigma_i/\sigma_1)^2 \leq \sigma_i/\sigma_1$ pour tout $i$. Par conséquent, $\operatorname{srank}(A) \leq \operatorname{nrank}(A)$.

La deuxième inégalité et la troisième inégalité sont impliquées dans $\operatorname{erank}(A)$, lequel s'écrit $e^H$ où l'entropie $H$ est

$$H = \sum_{i=1}^{r} p_i \ln \frac{1}{p_i} \qquad \text{avec} \qquad p_i = \frac{\sigma_i}{\sum_{j=1}^{r} \sigma_j}.$$

La définition du nrank implique ensuite

$$p_i = \frac{\sigma_i}{\sigma_1 \sum_{j=1}^{r} \frac{\sigma_j}{\sigma_1}} = \frac{\sigma_i}{\sigma_1 \operatorname{nrank}(A)}.$$

Par conséquent, l'entropie devient

$$H = \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i}{\sigma_1 \operatorname{nrank}(A)} \ln \left( \frac{\sigma_1 \operatorname{nrank}(A)}{\sigma_i} \right) = \ln \big( \operatorname{nrank}(A) \big) + \frac{1}{\operatorname{nrank}(A)} \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i}$$

et il s'ensuit que

$$\operatorname{erank}(A) = e^H = \operatorname{nrank}(A) \cdot \exp \left( \frac{1}{\operatorname{nrank}(A)} \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \right) \geq \operatorname{nrank}(A), \tag{1.56}$$

où l'égalité tient seulement lorsque $r = 1$. Finalement, l'utilisation de la concavité du logarithme et l'inégalité de Jensen, nous déduisons que

$$H = \sum_{i=1}^{r} p_i \ln \frac{1}{p_i} \leq \ln \left( \sum_{i=1}^{r} p_i \frac{1}{p_i} \right) = \ln(r),$$

ce qui implique directement la dernière inégalité du lemme. □

Un critère simple pour déterminer si une matrice est de bas rang se formule en termes du nombre minimal d'éléments nécessaires pour complètement décrire la matrice par une décomposition de rang. Plus précisément, une matrice de dimension $N \times N$ de rang $r$ peut être dite de bas rang si $2rN < N^2$ ou écrit autrement, $r < N/2$ (ou $r \ll N/2$). Dans le même ordre d'idée, une matrice $N \times N$ de rang effectif $\tilde{r}$ serait dite de bas rang effectif si $\tilde{r} < N/2$.

Dans cette thèse, un tel critère ne sera pas imposé pour dire qu'une matrice est de bas rang (effectif). Au chapitre 4, nous adopterons plutôt une perspective asymptotique basée sur les rangs effectifs présentés précédemment. À la section 2.4, des exemples simples d'applications aux graphes seront présentés, mais avant d'y arriver, nous présentons des outils de base de la théorie spectrale des graphes.

# Chapitre 2

# Théorie spectrale des graphes

> "As long as a branch of science offers an abundance of problems, so long is it alive", said David Hilbert in his address to the Congress in Paris in 1900. Judged by this criterion, graph theory could hardly be more alive.
> - B. Bollobás [70]

> [*Eigenvalues*] *give a matrix a personality.* We humans like images ; our brains are specially adapted to interpret them. Eigenvalues enable us to take the abstraction of a matrix or linear operator, for whose analysis we possess no hardwired talent, and portray it as a picture.
> - L. N. Trefethen & M. Embree [590]

La théorie des graphes a fait beaucoup de chemin(s) depuis le problème des sept ponts de Königsberg (Euler, 1735-36). Passant des mains de Kirchhoff, Cayley et Sylvester au 19e siècle à celles de Tutte, Erdős, Lovász et Bollobás au 20e siècle, elle s'établit désormais comme une théorie mature qui est au cœur de l'arsenal mathématique utilisé en science des réseaux.

Certes, la théorie des graphes est encore bien vivante aujourd'hui et peut-être plus que jamais si nous ajoutons à la liste des problèmes qui la concerne les défis liés à l'intelligence artificielle et aux réseaux complexes. Les graphes servent de représentation abstraite de la structure d'un système complexe, sur laquelle ou au sein de laquelle les constituants du système se déplacent ou interagissent. Mieux comprendre cette structure et en particulier, ses propriétés spectrales, permet d'entrevoir les mécanismes qui sous-tendent l'émergence de propriétés dynamiques collectives.

Si les valeurs propres donnent aux matrices une personnalité [590], alors les graphes en reçoivent une à leur tour. Dans cette section, nous introduisons les graphes en vue d'étudier leurs propriétés spectrales. Plusieurs ouvrages traitent des graphes [70, 71, 74, 438] et des réseaux [43, 345, 433], nous survolerons donc seulement les notions de base, en passant par leurs représentations matricielles et leurs versions aléatoires. Cela sera suffisant pour aborder la

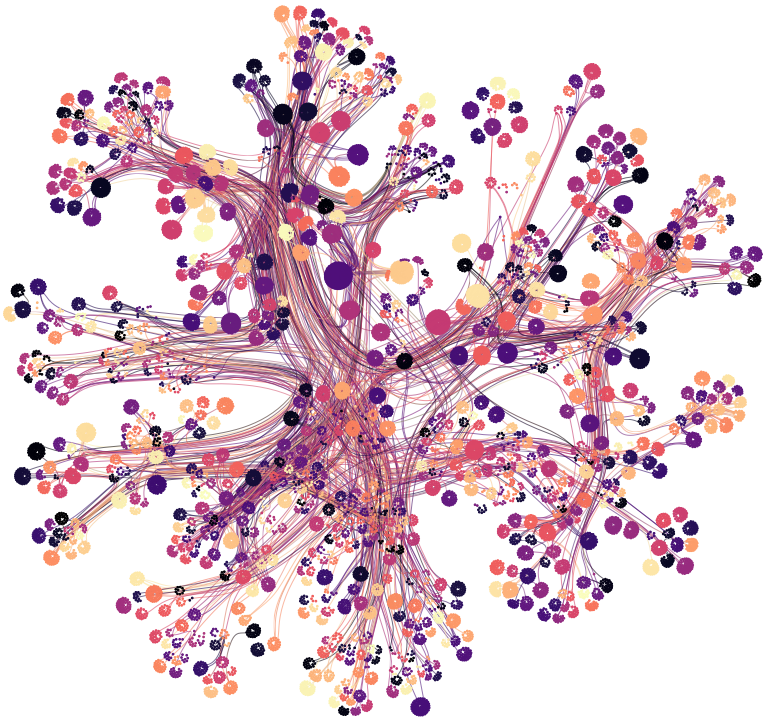


FIGURE 2.1 – Réseau représentant une partie du connectome (l'« hemibrain ») de la mouche à fruit *D. Melanogaster* [527]. Celui-ci possède près de 22 000 neurones (sommets) et autour de 3 millions de synapses (arêtes) dont seulement 1% d'entre elles sont illustrées pour alléger la représentation du réseau.

théorie spectrale des graphes et des graphes aléatoires. Quelques théorèmes clés en théorie spectrale des matrices aléatoires, liées aux graphes aléatoires, seront présentés. Nous terminons le chapitre sur la SVD des graphes, laquelle joue un rôle central au chapitre 4.

## 2.1 Graphes

Un graphe ou un réseau [1] se représente par des points (nœuds, sommets) connectés par des liens (arêtes). Tracer un graphe est parfois un jeu d'enfant et d'autres fois, un défi de grande taille. En effet, la figure 2.1 illustre abstraitement les connexions neuronales du cerveau de la mouche à fruit (connectome partiel) où une maigre fraction des arêtes est affichée, sans quoi l'entremêlement des arêtes rend la représentation encore plus intangible. Pour en avoir une vision plus claire, nous abordons désormais plus formellement les graphes et leurs propriétés.

La définition suivante est adaptée du livre de Bollobás [70] et diffère légèrement de celle de Bondy et Murty [74].

1. Dans cette thèse, la terminologie *réseau* sera parfois utilisée comme synonyme de graphe, mais son usage sera plus fréquent pour parler des réseaux empiriques, construits à partir de données sur les interactions mesurées au sein d'un système.

**Définition 2.1.** Un *graphe* fini est une paire ordonnée $\bar{\mathcal{G}} = (\mathcal{V}, \bar{\mathcal{E}})$ où $\mathcal{V} = \{1, ..., N\}$ est un ensemble de $N < \infty$ sommets $i$ et $\bar{\mathcal{E}} \subset \{\{i, j\} \,|\, i, j \in \mathcal{V}\,, i \neq j\}$ est un ensemble d'arêtes $\{i, j\}$.

**Remarque 2.2.** Un symbole comme $v$ est typiquement introduit pour décrire un sommet et l'ensemble $\mathcal{V}$ est alors un ensemble de symboles identifiant les sommets. Nous utiliserons parfois cette notation. Cependant, nous empruntons plus souvent le raccourci d'identifier directement un sommet par un chiffre, ce qui ordonne les sommets et réduit la charge de symboles à utiliser. Nos graphes sont donc définis comme *indicés* en général. De plus, le nombre $N = \#\mathcal{V}$ de sommets du graphe est aussi appelé l'*ordre* du graphe. Bien que le nombre d'arêtes $\#\bar{\mathcal{E}}$ soit appelé la taille du graphe, nous parlerons souvent de la taille d'un système qui correspondra plutôt au nombre de sommets. ■

La définition de graphe précédente n'admet pas qu'il y ait une direction dans l'interaction entre les sommets $i$ et $j$, puisque $\{i, j\} = \{j, i\}$. Toutefois, plusieurs réseaux empiriques, comme les connectomes ou les réseaux de prédateurs-proies, ont des interactions orientées, ce qui limite le pouvoir de modélisation d'un graphe dans sa forme plus rudimentaire. La définition n'admet pas non plus la possibilité d'une « auto-interaction », soit une interaction d'un sommet $i$ vers lui-même.

Pour ajouter une direction aux arêtes et des arêtes partant d'un sommet vers lui-même, il suffit donc de remplacer les ensembles $\{i, j\}$ décrivant les arêtes par une paire ordonnée $(i, j)$ [70, p.8].

**Définition 2.3.** Un *graphe orienté* ou *dirigé*[2] est une paire ordonnée $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ où $\mathcal{E} \subset \mathcal{V} \times \mathcal{V}$ contient les arêtes orientées de $j \in \mathcal{V}$ vers $i \in \mathcal{V}$, notées $(i, j)$ et parfois appelées des arcs.

La convention selon laquelle les arêtes sont orientées de $j$ vers $i$ est arbitraire, mais à retenir pour éviter les erreurs d'interprétation. Tout au long de la thèse, ce sera la convention utilisée. Nous permettons à $\mathcal{G}$ d'être qualifié de *non orienté* lorsque pour tout $(i, j) \in \mathcal{E}$, $(j, i)$ appartient aussi à $\mathcal{E}$. De cette manière, un graphe orienté généralise la définition 2.1.

### Sous-graphes

Dans l'analyse d'un graphe, il est utile de se concentrer sur certaines de ses parties, soit des sous-graphes [70], qui permettent de

> conduire par ordre [nos] pensées, en commençant par les objets les plus simples et les plus aisés à connaître, pour monter peu à peu [...] jusqu'à la connaissance des plus composés [141].

2. Notons que nous ne distinguons pas un graphe dirigé et un graphe orienté contrairement à la Réf. [70, p.8] où un graphe orienté est un graphe dirigé obtenu en orientant les arêtes d'un graphe, soit en remplaçant $\{i, j\}$ par $(i, j)$ *ou* $(j, i)$. De cette manière, $(i, j)$ et $(j, i)$ ne sont pas contenus simultanément dans $\mathcal{E}$.

Ceux-ci comprennent les notions de motifs et de communautés, qui sont des blocs de base des réseaux complexes. Puisqu'il y a différents types de sous-graphes, des précisions sont nécessaires pour en indiquer le type. La prochaine définition comprend un type de sous-graphe que nous utiliserons à profusion au chapitre 6, soit les sous-graphes induits.

**Définition 2.4.** La paire ordonnée $\mathcal{G}' = (\mathcal{V}', \mathcal{E}')$ est un *sous-graphe* de $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ si $\mathcal{V}' \subset \mathcal{V}$ et $\mathcal{E}' \subset \mathcal{E}$. Si $\mathcal{G}'$ contient toutes les arêtes de $\mathcal{G}$ connectant les sommets au sein de $\mathcal{V}'$, alors $\mathcal{G}'$ est appelé un *sous-graphe induit* par $\mathcal{V}'$.

Certains sous-graphes peuvent être isolés au sens où il n'existe pas de connexions entre ses sommets et ceux du reste du graphe, ce qui renvoie à la notion de connexité et de chemin.

**Définition 2.5.** Un *chemin* de longueur $\ell$ est un graphe dont les sommets $v_0, v_1, ..., v_\ell$ sont connectés par les arêtes $\{v_0, v_1\}$, $\{v_1, v_2\}$, ... , $\{v_{\ell-1}, v_\ell\}$. Dans un *chemin orienté*, les arêtes sont orientées dans la même direction, de sorte que $\mathcal{E} = \{(v_1, v_0), (v_2, v_1), ... , (v_\ell, v_{\ell-1})\}$.

**Définition 2.6.**

- Un graphe non orienté est *connexe* s'il existe un chemin entre toutes ses paires de sommets.
- Un graphe orienté est *faiblement connexe* si le remplacement de ses arêtes orientées par des arêtes non orientées donne un graphe non orienté connexe.
- Un graphe orienté est *fortement connexe* si pour toute paire de sommets $u$ et $v$, il existe un chemin orienté de $u$ vers $v$ et un chemin orienté de $v$ vers $u$.

Un graphe peut avoir plusieurs parties connexes, appelées ses composantes connexes. Un nom particulier est aussi donné aux sous-graphes dont tous les sommets sont connectés entre eux (graphe complet).

**Définition 2.7.** Une *clique* est un sous-graphe induit formant un graphe complet. Une *clique maximale* est une clique qui ne fait pas partie d'une clique avec plus de sommets.

Cette terminologie est utilisée dans le langage familier et surtout dans le contexte des réseaux sociaux, où le terme aurait été introduit [372]. De la notion de clique, il est naturel de s'intéresser à la possibilité d'observer certains agencements de connexions qui apparaissent fréquemment dans un graphe ou plus concrètement, dans les réseaux empiriques. De façon informelle, les sous-graphes induits apparaissant dans les réseaux complexes en un nombre significativement plus grand que dans un réseau aléatoire (voir la fin de la section) sont appelés des *motifs* de réseau et peuvent avoir des rôles fonctionnels significatifs dans un système complexe [409]. Au chapitre 6, nous adopterons une définition plus flexible de la notion de motif, qui sera essentiellement un synonyme de sous-graphe induit avec une structure spécifique. La particularité sera que ces motifs sont liés aux quantités conservées et aux symétries d'un modèle d'oscillateurs couplés.

### Matrice de poids

L'étude des propriétés spectrales des graphes est possible parce qu'il existe des représentations matricielles pour ceux-ci. L'une des plus employées est la matrice de poids.

**Définition 2.8.** La *matrice de poids* est une matrice carrée réelle $W = (W_{ij})_{i,j=1}^{N}$ possédant des éléments tels que

$$W_{ij} = \begin{cases} w(i,j) \in \mathbb{R} \setminus \{0\} & \text{si } (i,j) \in \mathcal{E}, \\ w(i,j) = 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{2.1}$$

où la fonction $w : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathbb{R}$ est une fonction qui attribue un poids (scalaire) à chaque arête et qui détermine du même coup si deux sommets sont connectés ou non [118]. Un graphe $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, w)$ de fonction de poids $w$ est

- *binaire* si la fonction de poids a seulement des valeurs 0 ou 1 et la matrice de poids est alors appelée la *matrice d'adjacence*, notée $A = (A_{ij})_{i,j=1}^{N}$ ;
- *simple* si le graphe est binaire et qu'il n'y a pas de boucles, c.-à-d. qu'il n'existe pas d'arête $(i,i)$ pour tout $i$ et la diagonale de la matrice d'adjacence est nulle ;
- *pondéré* lorsqu'un graphe est muni d'une fonction de poids $w$ à valeurs non binaires ;
- *signé* si la fonction de poids possède au moins une valeur négative ;
- *orienté*[3] si la matrice de poids est non symétrique, c.-à-d. $W^T \neq W$ .

**Remarque 2.9.** En toute généralité, les poids peuvent être choisis complexes. Dans ce cas, les graphes sont dits *complexes* [76], ce qui s'avérera utile aux chapitres 6 et 7. En pratique, nous considérerons toutefois des poids réels dans les autres chapitres. ■

Avec une telle représentation matricielle, l'analyse des réseaux complexes bénéficie d'un grand ensemble d'outils provenant de l'algèbre linéaire, dont ceux du chapitre 1.

Qu'un graphe soit élémentaire ou qu'il comporte un grand nombre de sommets et d'arêtes, il est généralement difficile d'entrevoir des propriétés structurelles tangibles en regardant uniquement la matrice. Il est donc pratique d'établir différentes mesures, c'est-à-dire des fonctions des graphes ou de la matrice de poids, pour révéler des propriétés structurelles spécifiques. Les trois prochaines parties de la section contiennent ainsi différentes fonctions des graphes qui apparaîtront dans la thèse.

### Degrés et matrice laplacienne

Au niveau local, c'est-à-dire à l'échelle des sommets, une propriété importante des graphes est le nombre de sommets auxquels chaque sommet est connecté ou autrement dit, le nombre d'arêtes de chacun des sommets.

3. Ce qui est plus strict que la définition (2.3), au sens où il y a au moins une arête $(i,j)$ pour laquelle $(j,i) \notin \mathcal{E}$.

**Définition 2.10.** Soit un graphe $\bar{\mathcal{G}} = (\mathcal{V}, \bar{\mathcal{E}})$ binaire, simple et non orienté de matrice d'adjacence $A$. Le *voisinage* d'un sommet $i \in \mathcal{V}$ est $\partial i = \{\, j \in \mathcal{V} \,|\, \{i,j\} \in \bar{\mathcal{E}} \,\}$. Le *degré* ou la *valence* d'un sommet $i \in \mathcal{V}$ est son nombre de voisins ou, de façon équivalente, le nombre d'arêtes reliant ce sommet aux sommets de son voisinage, soit

$$k_i = \#\partial i = \sum_{j=1}^{N} A_{ij} \,. \tag{2.2}$$

La *séquence de degrés* de $\bar{\mathcal{G}}$ est le $N$-uplet formé des degrés dans $\{k_1, ..., k_N\}$ en ordre décroissant.

Lorsque le graphe est orienté et pondéré, on parle également des *forces* entrantes et sortantes d'un sommet $i$, définies respectivement par

$$s_i^{\text{in}} = \sum_{j=1}^{N} W_{ij} \quad \text{et} \quad s_i^{\text{out}} = \sum_{j=1}^{N} W_{ji} \,. \tag{2.3}$$

La notation $k_i^{\text{in}}$ et $k_i^{\text{out}}$ est utilisée lorsque le graphe est orienté et non pondéré.

Le degré est l'une des mesures les plus élémentaires d'un graphe, mais a joué un rôle important dans le développement de la science des réseaux. Effectivement, bien que ce soit un sujet controversé [84, 273, 608], il a été rapporté que les réseaux complexes empiriques ont souvent des distributions de degrés suivant une loi de puissance $k^{-\gamma}$, ce qui s'expliquerait entre autres par la tendance des sommets à s'attacher préférentiellement aux sommets de degrés élevés [44, 139]. L'hétérogénéité des degrés observée dans les réseaux empiriques cause plusieurs difficultés méthodologiques pour leur analyse, entre autres pour la réduction dimensionnelle de dynamiques sur ces réseaux [208, 346, 583, 599].

Un autre défi méthodologique qui peut survenir dans l'analyse spectrale des réseaux empiriques est lorsque la distribution de degrés est dominée par de petites valeurs (graphe creux). Plus explicitement, pour un graphe non orienté simple $\bar{\mathcal{G}} = (\mathcal{V}, \bar{\mathcal{E}})$, la densité s'écrit comme $d = 2\#\bar{\mathcal{E}}/(N(N-1))$, soit le nombre d'arêtes du graphe sur le nombre maximal d'arêtes. Dépendant du contexte, un graphe est dit *creux* si $d \to 0$ lorsque $N \to \infty$. Les critères plus restrictifs $\#\bar{\mathcal{E}} = O(N \log N)$ ou $\#\bar{\mathcal{E}} = O(N)$ sont aussi utilisés pour les graphes creux. À l'inverse, un graphe est *dense* si le nombre d'arêtes est de l'ordre de $N^2$ ou plus spécifiquement, si $d \to c \in (0, 1]$ lorsque $N \to \infty$.

À partir de la notion de degré émerge une autre représentation matricielle des graphes, soit la matrice laplacienne. Il existe plusieurs versions de la matrice laplacienne, dépendantes notamment du type de graphe. Dans sa version la plus simple, elle est définie comme suit.

**Définition 2.11.** Soit un graphe binaire, simple et non orienté de matrice d'adjacence $A$. La *matrice laplacienne* est

$$L = D - A \,, \tag{2.4}$$

où $D = \text{diag}(k_1, ..., k_N)$ est la matrice diagonale des degrés.

La matrice laplacienne est l'opérateur de diffusion sur un graphe : elle est l'analogue du laplacien continu $\nabla^2$. De plus, elle est utilisée pour la détection de communauté et le partitionnement de données (« clustering ») [150, 341, 466, 525], de même que pour la renormalisation des réseaux [603].

Les degrés, tout comme la matrice de poids et la matrice laplacienne, s'écrivent comme des fonctions d'un graphe. En effet, la notation $k_i(\mathcal{G})$ ou $k_i(A)$ est aussi d'usage. Le degré d'un sommet indicé $i$ n'est toutefois pas invariant en général, ce qui est expliqué dans ce qui suit.

### Invariants d'un graphe et autres propriétés structurelles

Un invariant d'un graphe est une propriété de celui-ci qui est préservée sous un isomorphisme. Dans ce contexte, deux graphes $\mathcal{G} = (\mathcal{V}_\mathcal{G}, \mathcal{E}_\mathcal{G})$ et $\mathcal{H} = (\mathcal{V}_\mathcal{H}, \mathcal{E}_\mathcal{H})$ sont isomorphes ($\mathcal{G} \simeq \mathcal{H}$) s'il existe une bijection $\varphi : \mathcal{V}_\mathcal{G} \to \mathcal{V}_\mathcal{H}$ telle que $(u, v) \in \mathcal{E}_\mathcal{G}$ si et seulement si $(\varphi(u), \varphi(v)) \in \mathcal{E}_\mathcal{H}$ pour tout $u, v \in \mathcal{V}_\mathcal{G}$. Intuitivement, un invariant est une quantité qui ne dépend que de la structure intrinsèque du graphe et non pas de comment les sommets sont indicés ou positionnés dans un dessin.

Le nombre de sommets, le nombre d'arêtes, le degré maximum et la séquence de degrés en sont des exemples simples. Un contre-exemple est le degré $k_i$ d'un sommet $i$ qui n'est pas le même pour deux graphes non réguliers isomorphes [4] dont les sommets sont indicés différemment (ex. $k_1(\mathcal{G}) = 1$ et $k_1(\mathcal{H}) = 2$ est possible même si $\mathcal{G} \simeq \mathcal{H}$). Le nombre de croisements entre les arêtes dans le plongement d'un graphe dans le plan est un autre contre-exemple. Effectivement, deux graphes dont les positions des sommets sont différentes peuvent être isomorphes et ne pas avoir le même nombre de croisements. En revanche, le nombre minimal de croisements est un invariant. La définition suivante contient d'autres exemples typiques d'invariants.

**Définition 2.12.** Soit un graphe connexe non orienté [définition 2.1] et appelons « excentricité d'un sommet $v$ », la plus grande distance parmi les distances entre ce sommet $v$ et les autres sommets du graphe. Les fonctions suivantes du graphe sont des invariants :

- Le *rayon* est l'excentricité minimum parmi tous les sommets.
- Le *diamètre* est le plus long chemin entre deux de ses sommets, soit l'excentricité maximum parmi tous les sommets.
- La *maille* (« girth ») est la longueur du plus court de ses cycles.
- Le « *clique number* » est le nombre de sommets de sa plus grande clique maximale.
- La *stabilité* (« independence number ») est le nombre de sommets du plus grand ensemble de sommets non adjacents.
- Le *nombre chromatique* est le nombre minimal de couleurs nécessaires pour colorier les sommets de sorte que les sommets adjacents aient des couleurs différentes.

4. ...pour lesquels les degrés ne sont pas tous identiques...

**Remarque 2.13.** Le nombre chromatique est historiquement relié au problème de coloriage d'une carte où les régions adjacentes (par exemple, des pays) doivent avoir des couleurs distinctes. Le théorème des quatre couleurs énonce que le nombre chromatique est plus petit ou égal à 4 pour un graphe planaire, soit un graphe qui se plonge dans le plan sans que ses arêtes s'intersectent, excepté à leurs extrémités. Autrement dit, au plus quatre couleurs sont nécessaires pour solutionner le problème de coloriage d'une carte, ce qui a été démontré avec une preuve assistée par ordinateur [24, 25]. ■

**Exemple 2.14.** Pour $N \geq 4$, le graphe roue $W_N$ est obtenu en ajoutant à un cycle à $N-1$ sommets un sommet central adjacent à tous les sommets du cycle. Quelques invariants de ce graphe sont les suivants :

- Le nombre de sommets est $N$ ;
- Le nombre d'arêtes est $2(N-1)$ ;
- Le degré minimum est $3$ ;
- Le degré moyen est $4\left(\frac{N-1}{N}\right)$ ;
- Le degré maximal est $N-1$ ;
- Le rayon est $1$ ;
- Le diamètre est $1$ si $N=4$ et $2$ si $N>4$.
- La maille est $3$ ;
- Le « clique number » est $4$ si $N=4$ et $3$ si $N>4$
- Le nombre chromatique est $4$ si $N$ est pair et $3$ si $N$ est impair.
- La stabilité est $\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor$.

■

Ces derniers invariants apparaissent fréquemment en théorie des graphes. En science des réseaux, plusieurs autres propriétés sont aussi utilisées pour caractériser la structure des réseaux complexes, comme la centralité, la modularité, la réciprocité, la similarité, la non-normalité parmi bien d'autres. Nous référons le lecteur aux références [35, 43, 345, 433] pour plus de détails à leur sujet et nous introduisons deux dernières propriétés avant de poursuivre.

D'abord, il s'avère que supprimer successivement les sommets d'un graphe basé sur ses degrés donne une suite de sous-graphes informatifs.

**Définition 2.15.** Le *$k$-cœur* est le sous-graphe induit maximal tel que les sommets de celui-ci ont un degré au moins égal à $k$. Autrement dit, c'est le sous-graphe induit par le retrait récursif de tous les sommets de degré plus petit que $k$.

Le $k$-cœur maximal est par conséquent le $k$-cœur non vide avec la plus grande valeur de $k$, noté $k_{\mathrm{m}}$. À la section 2.3, nous ferons une brève référence à cet invariant $k_{\mathrm{m}}$, qui est associé

aux propriétés spectrales des graphes. Dans le concret, la structure en $k$-cœur des réseaux complexes est associée à leur robustesse face aux perturbations structurelles aléatoires [154].

Une autre propriété fondamentale des réseaux complexes est leur tendance à former des agglomérations de sommets plus connectés entre eux qu'avec le reste du réseau. Nous reviendrons sur cette propriété à la fin de la section où nous introduirons les graphes modulaires, mais ajoutons ici qu'un type d'agglomération spécifique relié à la *transitivité* est aussi d'intérêt. Par exemple, considérons le réseau social d'une certaine population d'individus où une personne $u$ est amie avec une personne $v$ et cette dernière personne $v$ est amie avec une personne $w$. Bien que $u$ ne soit pas nécessairement amie avec $w$, l'amitié entre $u$ et $w$ est plus probable que l'amitié entre $u$ (ou $w$) et une autre personne quelconque de la population. Le nombre de chemins fermés de longueur 2 (soit un chemin $\{u, v\}$, $\{v, w\}$ tel que $\{u, w\}$ existe) sur le nombre de chemins de longueur 2 mesure cette tendance du réseau ou des voisins d'un de ses sommets à former des cliques. C'est ce que les coefficients d'agglomération permettent de mesurer [433] et ceux-ci s'expriment d'une belle manière en fonction de la matrice d'adjacence et des degrés.

**Définition 2.16.** Soit un graphe binaire, simple et non orienté de matrice d'adjacence $A$ de taille $N \times N$. Le $i$-ème *coefficient d'agglomération local* est

$$C_i = \frac{\sum_{j,k=1}^{N} A_{ij}A_{jk}A_{ki}}{k_i(k_i-1)} \mathbb{1}_{k_i \notin \{0,1\}}\,, \quad i \in \{1, ..., N\}\,, \tag{2.5}$$

et le *coefficient d'agglomération global* est

$$C = \frac{\sum_{i,j,k=1}^{N} A_{ij}A_{jk}A_{ki}}{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} k_i(k_i-1)}\,. \tag{2.6}$$

En définissant un triplet comme trois sommets connectés par deux (triplet ouvert) ou trois (triplet fermé) arêtes non orientées, le coefficient d'agglomération global est égal au nombre de triplets fermés (trois fois le nombre de triangles) divisé par le nombre de triplets fermés ou ouverts. Celui-ci est d'ailleurs un autre invariant d'un graphe.

Dans les réseaux empiriques, en moyenne, les sommets avec un plus haut degré ont souvent un plus faible coefficient d'agglomération local, ce qui traduirait la propriété des réseaux à avoir une organisation hiérarchique en communautés [433, 496, 615]. Cette idée d'agglomération a continué d'évoluer en science des réseaux depuis le début des années 2000 et un sujet d'actualité consiste à reconnaître que certains réseaux forment des groupes de sommets ayant des interactions d'ordre supérieur.

### Hypergraphes

En toute généralité, les interactions entre les sommets n'ont pas besoin d'être par paires. Par exemple, la modélisation des réactions de type $A + B \to C + D$ ou des complexes à plus

de deux protéines se prête plus naturellement à une représentation en hypergraphe [312]. La prochaine définition générale d'un hypergraphe permet la modélisation des interactions d'ordre supérieur, soit des interactions à plus de deux sommets.

**Définition 2.17.** Un *hypergraphe* est un triplet $\mathcal{H} = (\mathcal{V}, \Xi, h)$, où :

- $\mathcal{V} = \{1, \ldots, N\}$ est l'ensemble des sommets ;
- $\Xi$ est un ensemble d'*hyperarcs* (ou *hyperarêtes orientées*) définis comme des paires ordonnées $E = (H, T)$, où $H$ est la *tête* de l'hyperarc (un $n_H$-uplet d'éléments de $\mathcal{V}$) et $T$ est la *queue* de l'hyperarc (un $n_T$-uplet d'éléments de $\mathcal{V}$), avec $2 \leq n_H + n_T \leq N$ et $n_H, n_T \geq 1$. Pour $n_H = 1$ et $n_T = 1$, l'hyperarc correspond à une arête orientée. Si $n_H = 1$ et $n_T > 1$, on parle d'un *hyperarc arrière*, tandis que si $n_H > 1$ et $n_T = 1$, il s'agit d'un *hyperarc avant* ;
- $h$ est une fonction qui associe une valeur réelle aux hyperarcs.

Cette définition généralise celle de Berge [58] ainsi que celle des hypergraphes orientés de la Réf. [205], où les têtes et les queues des hyperarcs sont considérées comme des ensembles plutôt que comme des uplets. Elle comprend aussi la notion plus particulière des complexes simpliciaux, pour lesquels une interaction à un certain ordre exige l'existence des interactions aux ordres inférieurs [507]. De plus, l'hypergraphe est aussi défini comme pondéré et il offre donc une représentation flexible des interactions dans un système complexe. Par exemple, pour la réaction $A + B \to C + D$, il est possible de définir l'hyperarc $((D, C), (B, A))$ où $A, B, C, D$ représentent les sommets [312].

Les hypergraphes apparaîtront seulement, de façon non anticipée, au chapitre 4. Nous n'en ferons donc pas une présentation élaborée et nous invitons le lecteur intéressé à consulter le livre de Berge [58] et aux ouvrages plus récents [49, 50, 61]. Comme les graphes qui se représentent par des matrices, les hypergraphes se représentent par des tenseurs. Nous reléguons la discussion sur les tenseurs à la section 4.12.1 et nous nous concentrons désormais sur une autre approche matricielle pour les graphes.

### Graphes aléatoires et matrices aléatoires

Les matrices aléatoires décrivent des matrices dont chaque élément est une variable aléatoire. L'intérêt de celles-ci pour les graphes est direct : elles forment des ensembles de matrices de poids. Lorsqu'un réseau complexe n'est pas entièrement connu, considérer un ensemble de graphes susceptibles de le décrire permet de prendre en compte cette part d'ignorance dans la modélisation. Plus précisément, un *ensemble de graphes* est un espace de probabilité dont l'univers est constitué de graphes. Ainsi, un *graphe aléatoire* est défini comme une variable aléatoire dont les valeurs sont des graphes de l'ensemble de graphes. Ce dernier est naturellement associé à une matrice aléatoire, qui s'écrit comme la somme de son espérance et d'une

matrice aléatoire d'espérance nulle :

$$W = \mathbb{E}[W] + R\,. \tag{2.7}$$

Un exemple de base pour les graphes aléatoires est le suivant.

**Définition 2.18.** Le *modèle* $\mathcal{G}(N,p)$ [168, 221, 543] est un ensemble de graphes simples à $N$ sommets dans lequel chaque paire de sommets distincts est connectée par une arête de manière indépendante avec une probabilité $p \in [0,1]$.

En théorie des matrices aléatoires, ce modèle est associé aux matrices de Bernoulli symétriques. La matrice d'adjacence $A$ possède une diagonale nulle ($A_{ii} = 0$) et ses éléments du triangle supérieur ($i < j$) sont des variables aléatoires de Bernoulli indépendantes, où $A_{ij} = 1$ avec probabilité $p$ et $A_{ij} = 0$ avec probabilité $1-p$. La symétrie impose $A_{ji} = A_{ij}$. La matrice aléatoire s'écrit comme $A = p(\mathbf{1}\mathbf{1}^\top - I) + R$ où $R$ est une matrice aléatoire symétrique d'espérance nulle (centrée) et de diagonale nulle, dont les éléments hors diagonale valent $1-p$ avec probabilité $p$ et $-p$ avec probabilité $1-p$. Si les boucles sont autorisées, comme c'est le cas dans l'analogue non simple du modèle considéré au chapitre 4, la correction diagonale « $-I$ » de la matrice espérée peut être retirée et la matrice centrée $R$ est adaptée en conséquence.

Dans le langage de la physique statistique, ce dernier graphe aléatoire est un ensemble statistique canonique. La probabilité d'avoir un graphe en particulier s'obtient analytiquement en maximisant l'entropie de Shannon à l'aide d'une fonction de Lagrange qui contraint l'espérance du nombre d'arêtes (contrainte souple). Cet exercice est formateur et a été effectué au niveau de la maîtrise [580, 1.1.3]. Nous présenterons les théorèmes précis sur les multiplicateurs de Lagrange et la fonction de masse exponentielle à la section 4.11.2. Dans cette thèse, nous utiliserons principalement des modèles canoniques de graphes aléatoires.

Pour introduire de l'hétérogénéité au niveau des degrés des sommets, un modèle influent a été introduit au début des années 2000 par Chung et Lu.

**Définition 2.19.** Le *modèle de Chung-Lu* [119, 120] $\mathcal{G}(\boldsymbol{\kappa})$ est un ensemble de graphes à $N$ sommets pouvant contenir des boucles, défini à partir de la séquence de degrés attendus $\boldsymbol{\kappa} = \mathbb{E}[\boldsymbol{k}] = (\kappa_1, \ldots, \kappa_N)$ où $\boldsymbol{k}$ d'une séquence de degrés aléatoire et $\max_i \kappa_i^2 < \sum_{i=1}^N \kappa_i$. Chaque paire de sommets distincts $\{i,j\}$ est connectée indépendamment avec la probabilité $p_{ij} = \kappa_i\kappa_j / \sum_{\ell=1}^N \kappa_\ell$, tandis qu'une boucle est assignée au sommet $i$ avec la probabilité $p_{ii} = \kappa_i^2 / (2\sum_{\ell=1}^N \kappa_\ell)$.

Une autre propriété importante de plusieurs systèmes complexes est l'organisation de leurs éléments en communautés. Un *graphe modulaire* est un graphe $\mathcal{G}$ dont l'ensemble des sommets $\mathcal{V}$ se partitionne en $q$ parties (modules, communautés, groupes ou blocs) $B_\mu$ où $\mu \in \{1, ..., q\}$. Nous notons la partition des sommets $\mathscr{B} = (B_1, ..., B_q)$. Cela nous permet d'introduire une généralisation du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ dans laquelle les graphes de l'ensemble sont modulaires.

**Définition 2.20.** Le *modèle stochastique par blocs* SBM($\mathscr{B}$, $\mathscr{P}$) [272] est un ensemble de graphes modulaires dont les sommets sont partitionnés selon $\mathscr{B}$ et où la collection ordonnée $\mathscr{P}$ des probabilités de connexions au sein des communautés et entre les communautés est

$$\mathscr{P} = \left( p_{\mu\nu} \in [0,1] \,\middle|\, 1 \leq \mu \leq \nu \leq q \right).$$

Il y a en réalité plusieurs types de modèles stochastiques par blocs. Ceux-ci forment une classe très générale et flexible de graphes aléatoires [651] et peuvent donc servir de modèles pour plusieurs réseaux complexes modulaires, dont les connectomes [374].

À la section 4.11.1 du chapitre 4, plusieurs autres graphes aléatoires seront introduits, dont un mélange entre le modèle de Chung-Lu et le SBM appelé le « degree-corrected SBM ». L'inspection de ces graphes aléatoires dans la perspective des matrices aléatoires appuiera un argument central de la thèse : les graphes aléatoires ont souvent une formulation de bas rang.

Pour mieux en saisir la portée, il convient d'abord de présenter le cadre théorique dans lequel cet argument s'inscrit : la théorie spectrale des graphes.

## 2.2 Propriétés spectrales des graphes

> Roughly speaking, half of the main problems of the spectral theory lie in deriving bounds on the distribution of eigenvalues. The other half concern the impact and consequences of the eigenvalue bounds as well as their applications.
> - Fan Chung [118, Sec. 1.3]

Un des défis majeurs de la théorie spectrale est de trouver une interprétation claire au spectre des matrices dans un contexte donné. Dans la théorie des graphes, cela signifie relier les propriétés spectrales à des mesures connues des graphes, notamment leurs invariants. La théorie spectrale des graphes est un domaine désormais bien établi des mathématiques [118, 438, 554], dont l'histoire est liée à celle de l'algèbre linéaire [118] et des matrices aléatoires. Au fil des années, avec la disponibilité croissante de données issues de réseaux empiriques de plus en plus complexes (par exemple, en connectomique [1]), un échange fécond s'est établi entre les propriétés de ces réseaux et la théorie spectrale des graphes [596]. C'est dans cette perspective que la théorie est présentée dans la présente section et celles à suivre.

### Notions de base

Le spectre d'un graphe est le spectre de sa matrice de poids [définition 2.8], extrait de l'équation aux valeurs propres $W\boldsymbol{v}_i = \lambda_i \boldsymbol{v}_i$, où $\lambda_i$ est la valeur propre associée au vecteur propre $\boldsymbol{v}_i$, un vecteur dont l'orientation est inchangée par l'application de $W$, mais dont la norme change

d'un facteur $\lambda$. Les $N$ valeurs propres sont des zéros du polynôme caractéristique

$$p_W(\lambda) = \det(\lambda I - W) = \sum_{\ell=0}^{N} a_\ell \lambda^\ell, \tag{2.8}$$

où $I$ est une matrice identité de taille $N \times N$ et $a_0$, ..., $a_N$ sont les coefficients du polynôme. Ces coefficients sont réels lorsque la matrice $W$ est réelle, ce qui a pour conséquence le prochain lemme.

**Lemme 2.21.** *Le conjugué complexe $\bar{\lambda}$ d'une valeur propre complexe $\lambda$ d'une matrice réelle $W$ est aussi une valeur propre de $W$.*

*Démonstration.* Pour $W \in \mathbb{R}^{N\times N}$, les coefficients de $p_W$ sont réels [279, Sec. 1.2]. Il s'ensuit que $p_W(\bar{\lambda}) = \sum_{\ell=0}^{N} a_\ell \bar{\lambda}^\ell = \overline{\left(\sum_{\ell=0}^{N} a_\ell \lambda^\ell\right)} = \overline{p_W(\lambda)} = 0$, puisque $p_W(\lambda) = 0$. □

Par convention, les valeurs propres sont ordonnées selon leur module, c'est-à-dire telles que $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq ... \geq |\lambda_N|$. Le spectre de la matrice de poids est alors noté $\text{spec}(W) = (\lambda_1, ..., \lambda_N)$ où les valeurs propres ne sont pas nécessairement distinctes. Une valeur propre peut ainsi apparaître plus d'une fois dans le spectre, ce qui conduit naturellement à distinguer les différentes notions de multiplicité qui lui sont associées.

**Définition 2.22.**

- La *multiplicité algébrique* d'une valeur propre $\lambda$ est sa multiplicité en tant que racine du polynôme caractéristique.
- La *multiplicité géométrique* est égale à $N - \text{rank}(W - \lambda I)$ et représente le nombre maximum de vecteurs propres linéairement indépendants associés à $\lambda$.

**Exemple 2.23.** Soit les matrices

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad W_\star = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

respectivement associées à un chemin orienté du sommet 1 vers le sommet 3 et à une étoile non orientée. Pour $W$, le polynôme caractéristique est $p_W(\lambda) = \lambda^3$. La multiplicité algébrique de la valeur propre $\lambda = 0$ est donc 3, alors que sa multiplicité géométrique est $3 - \text{rank}(W) = 1$. En ce qui concerne $W_\star$, le polynôme est $p_{W_\star}(\lambda) = \lambda^{N-2}[\lambda^2 - (N-1)]$ avec $N = 4$. Le spectre est alors $\text{spec}(W_\star) = (\sqrt{N-1}, 0, ..., 0, -\sqrt{N-1})$, la valeur propre nulle a une multiplicité algébrique de $N - 2 = 2$ et une multiplicité géométrique de $4 - \text{rank}(W_\star) = 2$. ■

Même si une valeur propre nulle ne contribue pas à la décomposition d'une matrice, l'exemple précédent montre qu'elle peut tout de même donner de l'information sur un graphe. En effet,

lorsque le voisinage de plusieurs sommets est identique (lignes et/ou colonnes identiques dans la matrice de poids), le rang de la matrice est bas et la multiplicité géométrique de la valeur propre nulle est élevée.

### Automorphismes et propriétés spectrales

En général, la multiplicité d'une valeur propre peut également indiquer la présence d'automorphismes dans un graphe, parfois appelé des *symétries*.

**Definition 2.1.** Un *automorphisme* d'un graphe $\bar{\mathcal{G}} = (\mathcal{V}, \bar{\mathcal{E}})$ est un isomorphisme de $\bar{\mathcal{G}}$ vers $\bar{\mathcal{G}}$ qui permute l'ensemble des sommets via la bijection $\sigma : \mathcal{V} \to \mathcal{V}$ telle que $\{u, v\} \in \bar{\mathcal{E}}$ si et seulement si $\{\sigma(u), \sigma(v)\} \in \bar{\mathcal{E}}$.

**Lemme 2.24.** *L'ensemble des automorphismes* $\mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}})$ *forme un groupe sous la composition de fonctions.*

**Exemple 2.25.** Les ensembles d'arêtes pour les huit graphes à trois sommets possibles $\bar{\mathcal{G}}_1, ..., \bar{\mathcal{G}}_8$ sont

$$\bar{\mathcal{E}}_1 = \{\}, \quad \bar{\mathcal{E}}_2 = \{\{1,3\}\}, \quad \bar{\mathcal{E}}_3 = \{\{1,2\}\}, \quad \bar{\mathcal{E}}_4 = \{\{2,3\}\},$$
$$\bar{\mathcal{E}}_5 = \{\{1,2\},\{1,3\}\}, \quad \bar{\mathcal{E}}_6 = \{\{1,3\},\{2,3\}\}, \quad \bar{\mathcal{E}}_7 = \{\{1,2\},\{2,3\}\}, \quad \bar{\mathcal{E}}_8 = \{\{1,2\},\{1,3\},\{2,3\}\}.$$

Le groupe symétrique $(S_3, \circ)$ contient les permutations

$$e = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (1\ 2), \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = (1\ 3),$$
$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = (2\ 3), \quad \rho_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = (1\ 2\ 3), \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = (1\ 3\ 2).$$

En appliquant ces permutations à chaque arête des graphes à trois sommets, nous obtenons les groupes d'automorphisme

$$\mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_1) = S_3, \quad \mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_2) = \{e, \sigma_2\}, \quad \mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_3) = \{e, \sigma_1\}, \quad \mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_4) = \{e, \sigma_3\},$$
$$\mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_5) = \{e, \sigma_3\}, \quad \mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_6) = \{e, \sigma_1\}, \quad \mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_7) = \{e, \sigma_2\}, \quad \mathrm{Aut}(\bar{\mathcal{G}}_8) = S_3.$$

■

Le nombre maximal d'automorphismes d'un graphe est $N!$, soit l'ordre du groupe symétrique $S_N$. Le graphe complet est un exemple de graphe connexe maximalement symétrique.

Un automorphisme est associé à une matrice de permutation qui commute avec la matrice d'adjacence [5]).

5. Ce résultat s'applique aussi à la matrice Laplacienne [341]. En effet, soit le vecteur de degrés $\boldsymbol{k} = A\mathbf{1}$. Si $[A, P] = 0$, puisque $P\mathbf{1} = \mathbf{1}$, alors $P\boldsymbol{k} = PA\mathbf{1} = AP\mathbf{1} = \boldsymbol{k}$, $[\mathrm{diag}(\boldsymbol{k}), P] = 0$ et $[L, P] = [\mathrm{diag}(\boldsymbol{k}) - A, P] = 0$.

**Lemme 2.26.** *Soit $A$, la matrice d'adjacence associée au graphe $\bar{\mathcal{G}} = (\mathcal{V}, \bar{\mathcal{E}})$. La permutation $\sigma$ est un automorphisme si et seulement s'il existe une matrice de permutation $P$ telle que $A = PAP^\top$ ou autrement dit,*

$$[A, P] = 0,$$

*où $[X, Y] = XY - YX$ est le commutateur matriciel. De plus, la matrice de permutation $P$ est orthogonale.*

Le spectre est invariant sous la transformation $A \mapsto PAP^\top$. De plus, si $Av = \lambda v$ et la matrice de permutation $P$ est associée à un automorphisme, alors $APv = PAv = \lambda Pv$, de sorte que $Pv$ est aussi un vecteur propre de $A$ de valeur propre $\lambda$.

Cette dernière remarque contribue à éclairer une interprétation possible de la multiplicité d'une valeur propre. Pour ce qui est de la multiplicité géométrique de $\lambda$, la présence d'un automorphisme non trivial $P$ signifie que l'espace propre de la matrice d'adjacence associé à $\lambda$ contient $v$ et $Pv$ [6]. Ainsi, la présence de plusieurs automorphismes non triviaux peut contribuer à augmenter la multiplicité géométrique de la valeur propre $\lambda$. De plus, puisque la multiplicité algébrique est bornée inférieurement par la multiplicité géométrique [279, Théorème 1.2.8], un nombre d'automorphismes élevé peut aussi engendrer une multiplicité algébrique élevée.

### Propriétés spectrales dominantes

En théorie spectrale, les valeurs propres de grand module jouent un rôle central. La valeur propre de plus grand module $\lambda_1$ est appelée la *valeur propre dominante*. Son module définit le *rayon spectral* $\rho(W)$ d'une matrice carrée $W$, soit $\rho(W) = \max\{|\lambda| \,|\, \lambda \in \mathrm{spec}(W)\}$. Nous appellerons les valeurs propres immédiatement inférieures à la valeur propre dominante, les *valeurs propres sous-dominantes*. Similairement, nous parlerons de vecteurs propres dominants et sous-dominants. Les applications utilisant les propriétés spectrales dominantes sont abondantes. Celles-ci apparaissent notamment dans l'étude de la structure des systèmes complexes :

- mesurer la centralité des sommets dans un graphe [48, 72, 73, 305, 433] ;
- partitionner un graphe [45, 46, 187, 484] (ex. détecter des communautés [195, 348]) ;

et dans l'étude de leur dynamique pour

- calculer la stabilité des points d'équilibre [398, 402, 429] ;
- contrôler les trajectoires et leurs propriétés à long terme [193, 299, 357] ;
- identifier les seuils critiques de transitions (ex. percolation [304, 461, 499], synchronisation [103, 498], épidémiologie [103, 597]) ;
- mesurer le niveau de localisation [93, 217, 232, 461, 551] ;
- réduire la dimension du système [219, 220, 346, 581, 583].

6. Notons toutefois qu'il est possible que $Pv = v$ lorsque la matrice de permutation permute des éléments identiques de $v$.

L'importance des valeurs propres dominantes est une conséquence directe du théorème spectral [279, Théorème 2.5.5]. En effet, une matrice de poids normale ($W^\dagger W = WW^\dagger$) se décompose selon ses $N$ valeurs propres $\lambda_i$ et de $N$ vecteurs propres orthonormaux $\boldsymbol{u}_i$ telle que $W = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^\dagger$. Les valeurs propres pondèrent à elles seules l'importance de chaque terme dans la somme, car les vecteurs propres sont normalisés. Les termes associés aux valeurs propres dominantes caractérisent ainsi plus fortement la matrice de poids.

L'un des théorèmes les plus fondamentaux concernant les propriétés spectrales dominantes d'un graphe est le théorème de Perron–Frobenius [196, 197, 473]. Le résultat intermédiaire suivant est utile pour le démontrer.

**Théorème 2.27** (Théorème 8.3.1, Réf. [279])**.** *Pour une matrice carrée non négative $W$, le rayon spectral $\rho(W)$ est une valeur propre de $W$ et il existe un vecteur non négatif et non nul $x$ tel que $Wx = \rho(W)x$.*

Le théorème de Perron-Frobenius demande aussi que la matrice soit irréductible, ce qui est équivalent à dire que le graphe associé est fortement connexe [définition 2.6].

**Théorème 2.28** (Perron-Frobenius, Théorème 8.4.4, Réf. [279])**.** *Soit une matrice $W$ non négative, irréductible et de dimension $N \times N$ avec $N \geq 2$. Alors,*

1. *$\rho(W) > 0$ ;*
2. *$\rho(W)$ est une valeur propre de $W$ de multiplicité algébrique 1 ;*
3. *il existe un vecteur unique $x = (x_i)_{i=1}^N$ tel que $Wx = \rho(W)x$, $\sum_{i=1}^N x_i = 1$ et $x$ est positif ;*
4. *il existe un vecteur unique $y = (y_i)_{i=1}^N$ tel que $y^\top W = \rho(W)y^\top$, $\sum_{i=1}^N y_i = 1$ et $y$ est positif.*

Les éléments non négatifs d'un tel vecteur propre dominant sont utiles pour donner une mesure interprétable de centralité à chacun des sommets d'un graphe [72, 73, 433] et pour réduire la dimension d'une dynamique sur un graphe [346, 583, 599].

Un autre théorème important est celui de Gershgorin, présenté à l'annexe A.2. Ce dernier établit la région d'existence des valeurs propres d'un graphe à l'aide de disques dont le rayon est relié à la force « absolue » entrante et sortante des arêtes, soit l'équation (2.3) avec les poids en valeur absolue. Le théorème de Gershgorin donne donc des bornes sur les valeurs propres, ce qui est une pratique courante en théorie spectrale des graphes comme le souligne la citation d'ouverture de la section : « [...] half of the main problems of the spectral theory lie in deriving bounds on the distribution of eigenvalues ». Dans cette optique, nous consacrons le reste de cette section à introduire quelques bornes sur les valeurs propres, dont certaines relient le spectre d'une matrice d'adjacence et de la matrice laplacienne associée.

**Lien entre le spectre des matrices d'adjacence et des matrices laplaciennes**

> [...] there is a kind of silent duality between adjacency and Laplacian eigenvalues.
> - B. Nica [438]

Les matrices $A$ et $L$ sont directement reliées l'une à l'autre et cela transparaît dans leur spectre, mais pas toujours de manière évidente. Le cas le plus simple pour établir un lien est lorsque tous les degrés du graphe sont identiques à $k$. Dans un tel cas, le graphe est dit $k$-régulier.

**Lemme 2.29.** *Pour un graphe non orienté $k$-régulier, le spectre de la matrice laplacienne et celui de la matrice d'adjacence sont directement associés tels que*

$$\lambda_i(A) + \lambda_i(L) = k\,, \quad i \in \{1, ..., N\} \tag{2.9}$$

*où les valeurs propres sont ordonnées telles que*

$$\lambda_N(A) \leq ... \leq \lambda_1(A) \qquad et \qquad \lambda_1(L) \leq ... \leq \lambda_N(L)\,. \tag{2.10}$$

*Démonstration.* Puisque la matrice d'adjacence est symétrique, elle est diagonalisable par une matrice orthogonale $O$ et la matrice diagonale $D_A$ contient les valeurs propres ordonnées $\lambda_1(A) \geq ... \geq \lambda_N(A)$. De plus, $\lambda_1(A) = k$ avec le vecteur propre $\mathbf{1}$ dans un graphe $k$-régulier. Ainsi, $L = kI - A = kOO^\top - OD_AO^\top = O(kI - D_A)O^\top = OD_LO^\top$, où $D_L := kI - D_A$, ce qui est équivalent à $\lambda_i(L) = k - \lambda_i(A)$ pour tout $i \in \{1, ..., N\}$. L'ordre $\lambda_1(L) \leq ... \leq \lambda_N(L)$ se vérifie aisément. En effet, $\lambda_1(A) = k$ étant la plus grande valeur propre de $A$, il s'avère que $\lambda_1(L) = k - \lambda_1(A) = 0$ est la plus petite valeur propre de $L$ comme attendu. Un raisonnement similaire justifie l'ordre des autres valeurs propres de $L$. □

Pour un graphe non régulier, nous pouvons aussi relier les valeurs propres de la matrice d'adjacence et de la matrice laplacienne [438, Proposition 10.9] à l'aide du théorème de Weyl [279, Théorème 4.3.1] (présenté précédemment pour les valeurs singulières au théorème 1.22).

**Lemme 2.30** (Nikiforov, 2006 [444])**.** *Les valeurs propres de la matrice d'adjacence $A$ et de la matrice laplacienne $L$ d'un graphe (définition 2.1) satisfont*

$$k_{\min} \leq \lambda_i(A) + \lambda_i(L) \leq k_{\max} \quad i \in \{1, ..., N\} \tag{2.11}$$

*où les valeurs propres sont ordonnées telles qu'à l'équation (2.10).*

*Démonstration.* Les matrices $A$ et $L$ sont symétriques et nous pouvons ordonner les valeurs propres telles qu'à l'équation (2.10). Le théorème de Weyl donne des inégalités entre les valeurs propres des matrices hermitiennes $X$, $Y$ et $X + Y$. Une inégalité de Weyl particulière [438, corollaire 10.8] pour les matrices réelles symétriques $X$, $Y$ et $X + Y$ s'écrit $\lambda_i(X) + \lambda_{\min}(Y) \leq \lambda_i(X + Y) \leq \lambda_i(X) + \lambda_{\max}(Y)$, où $i \in \{1, ..., N\}$. En choisissant $X = -A$ et $Y = D$ (matrice diagonale des degrés), nous avons $X + Y = L$ et le résultat désiré. □

Le dernier lemme borne chaque valeur propre des matrices d'adjacence et laplacienne de façon plus précise que le théorème de Gershgorin, à partir duquel nous obtenons plutôt $\lambda_i(A) \in [-k_{\max}, k_{\max}]$ et $\lambda_i(L) \in [0, 2k_{\max}]$ pour tout $i$. Les bornes d'une valeur propre $\lambda_i(A)$ (resp. $\lambda_i(L)$) dépendent toutefois de la valeur propre $\lambda_i(L)$ (resp. $\lambda_i(A)$), ce qui n'est pas toujours pratique. À l'aide du théorème de Courant-Fisher, des bornes indépendantes pour $\lambda_2(A)$ et $\lambda_2(L)$ peuvent être obtenues.

**Lemme 2.31.** *Soit la deuxième plus petite valeur propre $\lambda_2(L)$ de la matrice laplacienne $L = D - A$ d'un graphe connexe, le degré maximum $k_{\max}$ et la deuxième plus grande valeur propre $\lambda_2$ de la matrice d'adjacence $A$. Si le graphe n'est pas complet, alors*

$$\lambda_2(L) \leq k_{\max} \qquad et \qquad \lambda_2(A) \geq 0. \tag{2.12}$$

*Démonstration.* Soit l'espace $U$ engendré par les vecteurs propres orthogonaux $u_1, ..., u_N$ de $L$, l'espace $V_k$ engendré par les vecteurs $u_1, ..., u_k$ et l'espace $W_{N-k+1}$ engendré par $u_k, ..., u_N$. L'application du théorème de Courant-Fischer (local) [279, Théorème 4.2.6] à la deuxième valeur propre de la matrice laplacienne ($k = 2$) permet d'écrire $\lambda_2(L) = \min_{x \in W_{N-1}, x \neq 0} \frac{x^\dagger L x}{x^\dagger x}$, où $W_{N-1}$ est l'espace engendré par $u_2, ..., u_N$. Cet espace est particulier, c'est le complément orthogonal de $V_1$, l'espace engendré par le premier vecteur propre de la matrice laplacienne qui est uniforme et associé à la valeur propre $\lambda_1(L) = 0$ [438, Théorème 7.1]. En effet,

$$W_{N-1} = V_1^\perp = \left\{ x \in U \;\middle|\; \forall a\mathbf{1} \in V_1 \text{ avec } a \in \mathbb{C} \setminus \{0\},\ (a\mathbf{1})^\dagger x = 0 \right\} = \left\{ x \in U \;\middle|\; \textstyle\sum_{i=1}^N x_i = 0 \right\}.$$

Ainsi, nous avons

$$\lambda_2(L) = \min_{\substack{x \in V_1^\perp \\ x \neq 0}} \frac{x^\dagger L x}{x^\dagger x} = \min \left\{ \frac{x^\dagger L x}{x^\dagger x} \;\middle|\; \sum_{i=1}^N x_i = 0,\ x \neq 0 \right\}$$

ou sous une autre forme, $\lambda_2(L) \leq (x^\dagger L x)/(x^\dagger x)$ avec $\sum_{i=1}^N x_i = 0$, $x \neq 0$. Puisque le graphe n'est pas complet, alors nous pouvons trouver deux sommets $i$ et $j$ non adjacents (tels que $A_{ij} = 0$). Nous définissons alors un vecteur $x \in V_1^\perp$ tel que $x_i = 1$, $x_j = -1$ et $x_k = 0$ pour tout $k$ différent de $i$ et $j$. Par conséquent, $x^\dagger x = 2$, $x^\dagger A x = 0$ et $x^\dagger L x$ est égal à

$$\sum_{p,q=1}^N x_p k_p \delta_{pq} x_q - \sum_{p,q=1}^N x_p A_{pq} x_q = \sum_{p=1}^N x_p (k_p \delta_{pi} - k_p \delta_{pj}) = k_i \delta_{ii} - k_i \delta_{ij} - (k_j \delta_{ji} - k_j \delta_{jj}) = k_i + k_j.$$

Il s'ensuit que $\lambda_2(L) \leq \frac{1}{2}(k_i + k_j) \leq k_{\max}$, puisque $k_{\max} \geq k_\ell$ pour tout $\ell \in \{1, ..., N\}$.

De façon similaire à la matrice laplacienne, le théorème de Courant-Fischer (local) pour la deuxième valeur propre de la matrice d'adjacence implique que

$$\lambda_2(A) = \max_{\substack{x \in W_{N-1} \\ x \neq 0}} \frac{x^\dagger A x}{x^\dagger x} \tag{2.13}$$

où les espaces $U$, $V_k$ et $W_{N-k+1}$ sont redéfinis comme ceux étant reliés à la matrice d'adjacence. Il est crucial de noter que nous avons ici un maximum $\max_{x\in W_{N-1}}$ plutôt qu'un minimum, ce qui est une conséquence de l'ordre décroissant des valeurs propres de la matrice d'adjacence, contrairement à celles de la matrice laplacienne. De plus, l'espace $W_{N-1}$ est le complément orthogonal de l'espace $V_1$, cette fois-ci engendré par le vecteur positif de Perron $v := u_1$ [438, Théorème 9.2] de sorte que $\lambda_2(A) \geq (x^\dagger Ax)/(x^\dagger x)$ avec $\sum_{\ell=1}^N x_\ell v_\ell = 0$, $x \neq 0$. Puisque le graphe n'est pas complet, nous trouvons deux sommets non adjacents $i$ et $j$ pour définir un vecteur $x$ dont les seuls éléments non nuls sont $x_i = v_j > 0$ et $x_j = -v_i < 0$. Ce vecteur est orthogonal à $v$, car $\sum_{\ell=1}^N x_\ell v_\ell = v_j v_i - v_i v_j = 0$. Le vecteur $x$ appartient donc à $V_1^\perp$ et est non nul. Il en découle aussi que $x^\dagger x = v_i^2 + v_j^2 \neq 0$ et $x^\dagger Ax = \sum_{p,q=1}^N x_p A_{pq} x_q = v_j A_{ii} v_j - 2v_i A_{ij} v_j + v_i A_{jj} v_i = 0$, puisque $A_{\ell\ell} = 0$ pour tout $\ell$ et $A_{ij} = 0$. Nous obtenons alors le résultat escompté. □

Pour compléter la section, nous présentons une dernière borne spectrale élégante introduite par Hoffman.

### Borne spectrale sur le nombre chromatique

Inspiré du résultat de Wilf qui borne supérieurement le nombre chromatique $\mathrm{chr}(A)$ tel que $\mathrm{chr}(A) \leq 1 + \lambda_{\max}(A)$, Hoffman borne inférieurement $\mathrm{chr}(A)$ à l'aide de la valeur propre maximale et la valeur propre minimale de $A$. Des résultats préliminaires sont présentés à l'annexe A.3 et servent à effectuer la preuve.

**Théorème 2.32** (Hoffman, 1970 [268])**.** *Le nombre chromatique d'un graphe avec au moins une arête et de matrice d'adjacence $A$ est borné inférieurement tel que*

$$\mathrm{chr}(A) \geq 1 + \frac{\lambda_{\max}(A)}{|\lambda_{\min}(A)|}. \tag{2.14}$$

*Démonstration.* Du lemme A.11, il existe une partition chromatique des arêtes. La particularité de cette partition est que les sommets d'une même couleur ne sont pas adjacents, de sorte que les blocs diagonaux de la matrice d'adjacence sont nuls

$$A = \begin{pmatrix} 0_1 & & \star \\ & \ddots & \\ \star & & 0_c \end{pmatrix}$$

où $c = \mathrm{chr}(A)$ et $0_\ell$ est la $\ell$-ième matrice nulle de taille $m_\ell$ par $m_\ell$ avec $\sum_{\ell=1}^c m_\ell = m =$ le nombre de sommets. Les valeurs propres des matrices nulles sont évidemment 0 et le corollaire A.10 implique alors que

$$(c-1)\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A) \;\leq\; \sum_{\ell=1}^k \mu_{m_\ell}(0_\ell) = 0.$$

Le lemme A.12 nous dit que la valeur propre minimale de la matrice d'adjacence d'un graphe avec au moins une arête est négative et plus petite que -1. Ainsi, $\lambda_{\min}(A) = -|\lambda_{\min}(A)|$ et

$$(c-1)\lambda_{\min}(A) = (c-1)(-|\lambda_{\min}(A)|) \;\leq\; -\lambda_{\max}(A) \quad \Longleftrightarrow \quad c \leq 1 + \frac{\lambda_{\max}(A)}{|\lambda_{\min}(A)|}.$$

□

L'évaluation du nombre chromatique numériquement est un problème NP-difficile. Les théorèmes de Wilf et de Hoffman ont donc l'avantage de limiter les valeurs possibles du nombre chromatique.

Cette section ne donne qu'un avant-goût de la théorie spectrale des graphes et nous renvoyons le lecteur aux références [70,118,438,554] pour un traitement plus complet. Nous nous tournons maintenant vers un cadre connexe tout aussi riche : la théorie spectrale des graphes aléatoires.

## 2.3 Théorie spectrale des graphes aléatoires

Comme mentionné à la section 2.1, un graphe aléatoire admet une représentation en matrice aléatoire. La théorie des matrices aléatoires remonte aux années 1930 selon Mehta [404] et depuis lors, elle trouve des applications de la physique nucléaire jusqu'aux réseaux complexes, en passant par l'écologie [396] et les neurosciences [492]. L'étude des propriétés spectrales de ces matrices est essentielle à la théorie et plusieurs théorèmes généraux remarquables ont été formulés au fil des décennies. Les résultats qui suivent en comptent parmi les plus marquants et présentent une universalité qui rappelle celle du théorème central limite.

### Résultats sur la valeur propre dominante

En raffinant les résultats de Juhász [295], Fűredi et Komlós ont démontré que la distribution asymptotique de la valeur propre dominante d'une matrice aléatoire symétrique avec des éléments indépendants est une distribution gaussienne centrée à une valeur d'ordre $N$ dépendante de l'espérance et de la variance des éléments de la matrice aléatoire.

**Théorème 2.33** (Adapté de Fűredi et Komlós, 1981 [203] et Réf. [573])**.** *Soit une matrice symétrique $A = (A_{ij})_{i,j=1}^{N}$ dont tous les éléments $(A_{ij})_{i\geq j}$ sont des variables aléatoires indépendantes (pas nécessairement identiquement distribuées), de module borné par $K$ et telles que*

$$\mathbb{E}[A_{ij}] = \mu > 0 \quad \forall i > j\,, \qquad \mathbb{E}[A_{ij}^2] - \mathbb{E}[A_{ij}]^2 = \sigma^2 \quad \forall i > j\,, \qquad \mathbb{E}[A_{ii}] = \nu \quad \forall i,$$

*où $\mu, \sigma^2$, $\nu$, et $K$ sont indépendants de $N$. Alors, la distribution de la valeur propre dominante converge à l'ordre $\sqrt{N}$ vers une densité de probabilité gaussienne, c'est-à-dire*

$$\lambda_1(A) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(\mu', 2\sigma^2)\,, \quad \text{où} \quad \mu' = (N-1)\mu + \nu + \sigma^2/\mu\,. \tag{2.15}$$

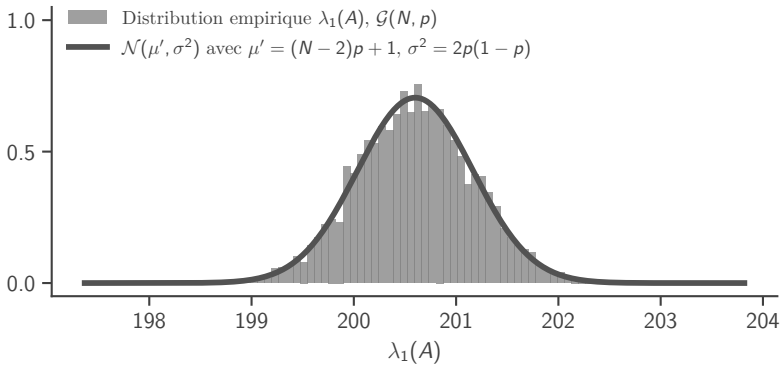



FIGURE 2.2 – Convergence de la distribution de la valeur propre dominante du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ vers une densité gaussienne (exemple 2.34) où $N = 1000$, $p = 0.2$, $\mu' = 200.6$, $\sigma^2 = 0.32$ et 5000 instances du modèle ont été utilisées.

*De plus, avec probabilité tendant vers 1,*

$$\max_{i\geq 2} |\lambda_i(A)| < 2\sigma\sqrt{N} + O(N^{1/3}\log N)\,.$$

Le comportement selon lequel la plus grande valeur propre est de l'ordre de $N$ tandis que les autres sont de l'ordre de $\sqrt{N}$ avait été mis en évidence par Juhász [295] et se retrouve ici en fonction des moments des éléments de la matrice.

Le théorème 2.33 s'applique directement au modèle $\mathcal{G}(N,p)$.

**Exemple 2.34.** Pour le modèle $\mathcal{G}(N,p)$ dont la matrice aléatoire associée est notée $A$, les espérances des éléments hors-diagonaux et diagonaux sont respectivement $\mu = p$ et $\nu = 0$, alors que la variance est $\sigma^2 = p(1-p)$. Le théorème 2.33 implique directement que la valeur propre dominante converge à l'ordre $\sqrt{N}$ à une gaussienne (figure 2.2), soit

$$\lambda_1(A) \xrightarrow{d} \mathcal{N}\left[\,(N-2)p+1\,,\,2p(1-p)\,\right], \tag{2.16}$$

alors que les valeurs propres sous-dominantes satisfont

$$\max_{i\geq 2} |\lambda_i(A)| < 2\sqrt{Np(1-p)} + O(N^{1/3}\log N)\,, \tag{2.17}$$

avec probabilité tendant vers 1. ∎

En 2022, Tang et ses collaborateurs ont généralisé ce résultat aux « generalized random dot product graphs » (GRDPG) [section 4.11.1], en démontrant que les valeurs propres dominantes suivent conjointement une loi gaussienne multivariée [36]. Les GRDPGs incluent plusieurs familles de SBMs [36] et les valeurs propres dominantes de ces SBMs suivent donc une telle forme gaussienne, illustrée à la figure 2.3 pour un SBM à deux blocs.

Pour le graphe aléatoire de Chung-Lu [définition 2.19], la figure 2.4 montre la distribution de la valeur propre dominante, qui n'est pas de l'ordre de $N$. Dans ce cas, la dépendance avec les propriétés du graphe est plus subtile, comme démontré par Chung, Lu et Vu.

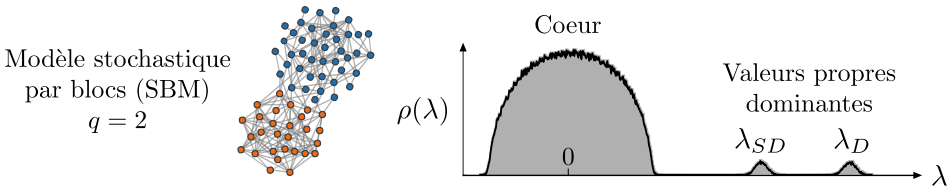



FIGURE 2.3 – Densité spectrale d'un SBM à deux communautés.

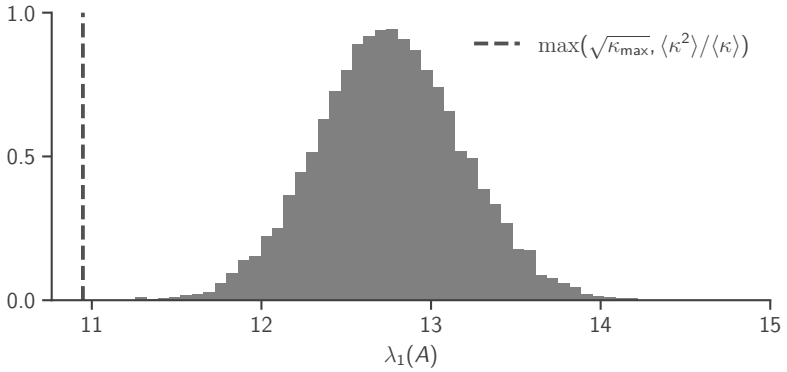



FIGURE 2.4 – Distribution de la valeur propre dominante du modèle Chung-Lu avec $N = 10^2$ et $10^4$ échantillons. La distribution des degrés attendus est choisie comme étant une loi de puissance $P(\kappa) = (1-\alpha)\,\kappa^{-\alpha}/(\kappa_{\max}^{1-\alpha} - \kappa_{\min}^{1-\alpha})$ sur l'intervalle $[\kappa_{\min}, \kappa_{\max}]$ où $\alpha = 2.5$, $\kappa_{\min} = 1$ et $\kappa_{\max} = 30$. La ligne verticale pointillée est la borne inférieure du théorème 2.35, alors que la borne supérieure n'est pas illustrée, étant environ égale à 201.

**Théorème 2.35** (Adapté de Chung, Lu, Vu, 2003 [121,122,371])**.** *La plus grande valeur propre de la matrice aléatoire $A$ associée au modèle de Chung-Lu $\mathcal{G}(\boldsymbol{\kappa})$ [définition 2.19] est bornée presque sûrement telle que*

$$(1 - o(1)) \max\left(\sqrt{\kappa_{\max}}, \langle\boldsymbol{\kappa}^2\rangle/\langle\boldsymbol{\kappa}\rangle\right) < \lambda_1(A) < 7\sqrt{\log N} \max\left(\sqrt{\kappa_{\max}}, \langle\boldsymbol{\kappa}^2\rangle/\langle\boldsymbol{\kappa}\rangle\right), \qquad (2.18)$$

*où $\kappa_{\max} = \max \boldsymbol{\kappa}$ est le degré espéré maximum et $\langle x\rangle = \sum_{i=1}^{N} x_i/N$.*

Il s'ensuit que la valeur propre dominante s'exprime essentiellement en termes du degré espéré maximum et des deux premiers moments de la distribution de degrés attendus. En 2017, poursuivant le travail de Chung, Lu et Vu, Castellano et Pastor-Satorras ont fait la conjecture que la valeur de $\lambda_1$ d'un graphe peut être vue comme résultant de la compétition entre deux sous-graphes : l'étoile associée au sommet de plus haut degré et le $k$-cœur maximal. Informellement, il en résulte que $\lambda_1(A) \approx \max(\sqrt{k_{\max}}\,, \langle k\rangle_{k_{\mathrm{m}}})$ où $\langle k\rangle_{k_{\mathrm{m}}}$ est le degré moyen du $k_{\mathrm{m}}$-cœur. Cette conjecture donne des résultats assez épatants pour approximer la valeur propre dominante de plusieurs réseaux empiriques [103]. Les mêmes auteurs ont poursuivi leurs travaux pour étudier la valeur propre dominante de la matrice de Hashimoto [260,461] et il y a aussi de récents développements pour les bornes des valeurs propres dominantes des graphes signés [555,556].

### Cœur du spectre

Jusqu'à maintenant, nous n'avons pas abordé les résultats connus pour les valeurs propres au voisinage de 0. La densité de ces valeurs propres est communément appelée le *cœur* (ou *bulk* en anglais) de la densité spectrale [192, Chapitre 7]. À ce sujet, la théorie des matrices aléatoires [40,192,358] offre plusieurs résultats applicables en théorie des graphes. Par exemple, le cœur du SBM dans le cas de la figure 2.3 respecte la loi semi-circulaire [650, Équation 4.2.29]. Cette loi provient de Wigner [629–631] et a été précisée et généralisée après lui, entre autres par L. Arnold [30]. Ci-dessous, nous présentons la version de Tao et Vu, en définissant d'abord la notion de distribution spectrale empirique.

**Définition 2.36.** La *distribution spectrale empirique* (ESD) des valeurs propres complexes $(\lambda_i)_{i=1}^N$ d'une matrice complexe $A$ de dimension $N \times N$ est

$$\mu_A(x,y) = \frac{1}{N}\#\{1 \leq j \leq N \,|\, \mathrm{Re}(\lambda_j) \leq x\,,\, \mathrm{Im}(\lambda_j) \leq y\,\}\,. \tag{2.19}$$

Si $A$ possède seulement des valeurs propres réelles, alors

$$\mu_A(x) = \frac{1}{N}\#\{1 \leq j \leq N \,|\, \lambda_j \leq x\,\}\,. \tag{2.20}$$

**Théorème 2.37** (Tao, Vu [576])**.** *Soit $A_N$ une matrice aléatoire hermitienne de taille $N \times N$ dont les éléments au-dessus de la diagonale sont des variables aléatoires complexes i.i.d. d'espérance 0 et de variance 1. La ESD de $A_N/\sqrt{N}$ converge en probabilité et presque sûrement à la loi du demi-cercle de Wigner :*

$$\mu_{A_N/\sqrt{N}}(x) \xrightarrow{p,\,a.s.} \frac{\sqrt{4-x^2}}{2\pi}\,\mathbb{1}_{|x|\leq 2} \tag{2.21}$$

**Remarque 2.38.** Si la variance $\sigma^2$ n'est pas égale à 1, la loi du demi-cercle de Wigner s'écrit $(\sqrt{4\sigma^2 - x^2}/2\pi\sigma^2)\mathbb{1}_{|\lambda|\leq 2\sigma}$ [295]. ■

Tout comme le théorème de Fűredi et Komlós, le théorème 2.37 s'applique directement au modèle $\mathcal{G}(N,p)$.

**Exemple 2.39.** Pour le modèle $\mathcal{G}(N,p)$, notons la matrice aléatoire $A$, qui s'exprime telle que $A = \mathbb{E}[A] + X$ avec $\mathbb{E}[A] = p(\mathbf{1}\mathbf{1}^\top - I)$. De plus, $X = A - \mathbb{E}[A]$ est une matrice aléatoire symétrique de diagonale nulle et dont les éléments ont une espérance nulle et une variance de $p(1-p)$. La matrice $W$ telle que $W_{ij} = X_{ij}/\sqrt{p(1-p)}$ pour tout $i,j \in \{1,...,N\}$ a des éléments d'espérance 0 et de variance 1 et la ESD de $W/\sqrt{N}$ satisfait donc la loi de Wigner par le théorème 2.37, telle qu'illustrée à la figure 2.5. ■

Il en faut toutefois peu pour que la loi du demi-cercle ne soit pas satisfaite pour le modèle $\mathcal{G}(N,p)$. En effet, il suffit de supposer que $Np$ tend vers une constante pour que la convergence vers cette loi échoue [181] (voir Figure 2.6(a)). C'est le régime creux, en opposition avec le

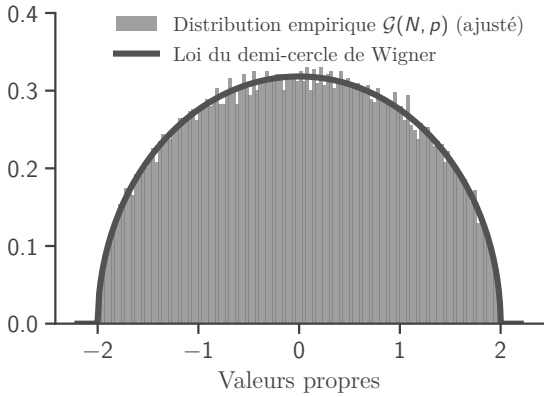



FIGURE 2.5 – Convergence de la distribution spectrale empirique (10 instances) du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ centré à 0 avec une variance ramenée à 1 (voir l'exemple 2.39) où $N = 1000$ et $p = 0.2$ (régime dense).

régime dense du dernier exemple. Une adaptation de la loi de Wigner est possible dans un tel cas [500, Sec. 3.4.2].

Plusieurs articles des années 2000 ont ainsi souligné l'importance d'aller au-delà de la loi semi-circulaire [156, 181, 405]. Dans les modèles avec des degrés plus hétérogènes comme celui de Barabási-Albert [44], la loi de Wigner n'est pas satisfaite non plus en général [181], comme illustrée à la figure 2.6 (c).

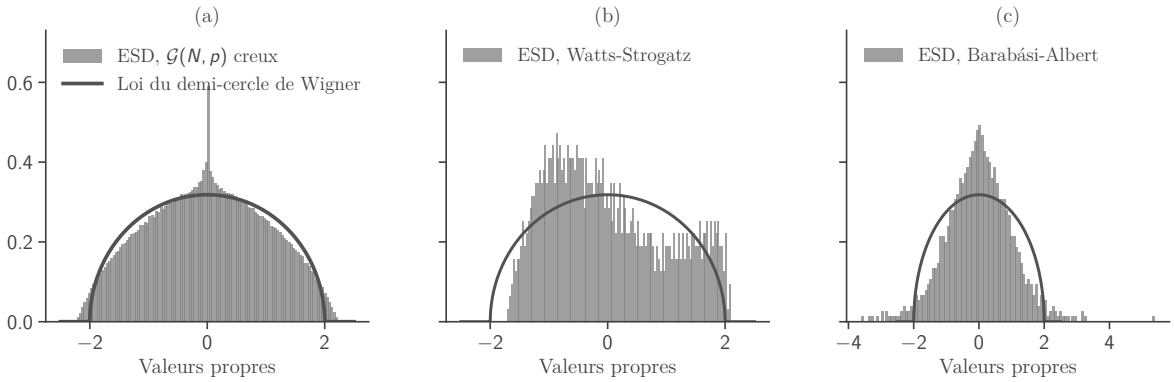



FIGURE 2.6 – (a) ESD du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ centré à 0 avec une variance ramenée à 1 (voir l'exemple 2.39) où $p = 5/N$ (régime creux). Dans les régimes encore plus creux, où le degré moyen est 2 ou 3 par exemple, d'autres pics apparaissent dans la ESD. Les pics sont reliés au spectre de petits arbres prévalents dans le graphe [500]. (b) ESD du modèle de Watts-Strogatz avec le nombre de connexions avec les plus proches voisins égal à 5 et une probabilité de reconnexion de 0.2. (c) ESD du modèle de Barabási-Albert avec 5 arêtes ajoutées par nouveau sommet. Dans tous les cas, $N = 1000$ et 100 instances ont été utilisées.

De plus, les réseaux empiriques sont souvent orientés et pondérés, de sorte qu'il n'y a généralement pas convergence de la ESD vers une loi de Wigner. Dans le domaine des matrices aléatoires, le cas des matrices non hermitiennes a vu plusieurs percées depuis les années 1960. En 1965, J. Ginibre étudie les valeurs propres pour des matrices non hermitiennes (gaussiennes, i.i.d.), qui admettent des valeurs propres complexes dont les applications étaient à ce moment

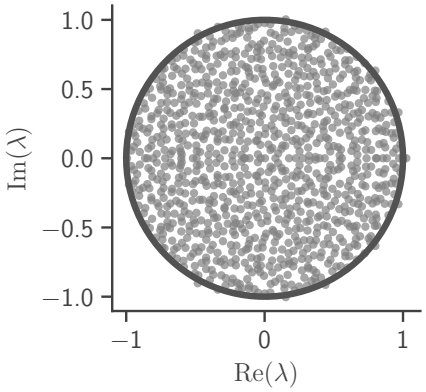



FIGURE 2.7 – Convergence de la distribution spectrale empirique (1 instance) du modèle $\mathcal{G}(N,p)$ pondéré et orienté de l'exemple 2.41 où $N = 1000$, $p = 0.2$ et les éléments de la matrice $U$ sont tirés d'une distribution uniforme entre -1 et 1.

encore à déterminer [222]. En 1967, Mehta a travaillé sur le cas des matrices gaussiennes complexes où les parties réelles et imaginaires sont indépendantes [403] et en 1973, L. A. Pastur a conjecturé qu'il existe une loi circulaire pour des matrices dont les éléments sont des variables aléatoires i.i.d. avec une dispersion finie [462]. En 1983, Girko donne une preuve de la loi circulaire [224], mais avec une faille soulignée par Bai, qui donne ensuite une preuve complète basée sur un lemme important de Girko [41]. Par la suite, 45 ans après les travaux de Ginibre, T. Tao et V. Vu donnent une version de la loi circulaire avec des hypothèses minimales.

**Théorème 2.40** (Tao, Vu [576])**.** *Soit $W_N$ une matrice aléatoire de taille $N \times N$ dont les éléments sont des variables aléatoires complexes i.i.d. d'espérance 0 et de variance 1. Alors, la ESD de $W_N/\sqrt{N}$ converge en probabilité et presque sûrement à la distribution uniforme sur le disque unité.*

**Exemple 2.41.** Par continuité avec les exemples 2.34 et 2.39, adaptons le modèle $\mathcal{G}(N,p)$ pour en faire un modèle de graphe aléatoire pondéré et orienté. La procédure la plus simple, aussi utilisée à la section 4.11.1, consiste à faire le produit de Hadamard de la matrice de Bernoulli $B$ (non symétrique ici) avec une matrice de poids $U$, de sorte que la matrice aléatoire est $W = B \circ U$. La ESD du modèle tend vers la loi circulaire illustrée à la figure 2.7. ■

L'éternelle tension entre l'utilisation de modèles réalistes et de modèles qui se traitent analytiquement a motivé l'élaboration d'autres modèles de matrices aléatoires. Cela a conduit à de nouvelles formes d'ESD intéressantes. Nous en énumérons quelques-unes ci-bas, décrites de façon informelle.

— La loi elliptique [225], selon laquelle la ESD d'une matrice $W$ prend la forme d'une ellipse, s'applique lorsque les paires d'éléments $(W_{ij}, W_{ji})$ pour $i \geq j$ et pour tout $i, j \in \{1, ..., N\}$ sont indépendantes entre elles. Il existe alors une corrélation non nulle entre $W_{ij}$ et $W_{ji}$.

— La loi de Kesten-Mckay donne la forme de la ESD pour les graphes $k$-réguliers aléatoires [400, 500].

— Une densité spectrale proportionnelle à $|\lambda|^{1-2\gamma}$ pour les graphes avec une distribution de degré suivant une loi de puissance $k^{-\gamma}$ est introduite dans l'article de Dorogovtsev et al. [156].

— Une densité spectrale avec une singularité à 0 est obtenue dans la limite dense d'un modèle des configurations (nous utiliserons le modèle au chapitre 4) avec une distribution exponentielle des degrés [405].

— D'autres résultats pertinents ont été obtenus dans le contexte des réseaux neuronaux [8, 10, 492, 624], où il y a de l'intérêt à considérer des poids signés avec certaines propriétés (par exemple, la satisfaction de la loi de Dale [262]).

— Historiquement, la théorie des matrices aléatoires a produit davantage de résultats applicables aux graphes denses. Toutefois, les réseaux complexes sont souvent creux [181, 304, 433], ce qui a stimulé des travaux pour les spectres des graphes aléatoires avec des structures plus creuses, hétérogènes (ex. en termes des degrés) et modulaires. Nadakuditi, Newman, Peixoto et Zhang ont spécifiquement travaillé sur ces cas dans une série d'articles intéressants [425, 426, 434, 436, 466, 657].

Mis ensemble, les derniers résultats laissent déjà présager que les ESDs des réseaux empiriques possèdent des formes très particulières, loin de la loi semi-circulaire ou circulaire [156, 169, 181, 405, 522]. Nous concluons cette section par un exemple sur le spectre des connectomes.

**Exemple 2.42.** L'ensemble des connexions neuronales d'un cerveau s'appelle un *connectome*. Le cerveau humain est constitué d'environ $10^{10}$ neurones et $10^{14}$ synapses, mais son connectome, comme tous les autres mammifères, n'est toujours pas complètement cartographié. En revanche, les connectomes de certains invertébrés sont, hormis les variations interindividuelles, entièrement caractérisés : le nématode *C. elegans* [133, 598, 626, 641], le cione *Ciona intestinalis* [513], l'annélide marine *P. dumerilii* [601] et la mouche à fruits *Drosophila melanogaster* [153, 527, 637]. En 2024, un tour de force a été réalisé pour *D. melanogaster*, alors que son connectome au stade adulte a été construit, contenant 139 255 neurones et $5\times10^7$ synapses. Il y aussi eu du progrès concernant le connectome du poisson-zèbre, un poisson transparent au stade larvaire [291, 330, 376], et le connectome mésoscopique de la souris [449]. L'article *The Mind of a Mouse* de Abbott et al. [1] explique bien le défi colossal que représente l'obtention du connectome d'un mammifère. Même si ces grands connectomes étaient connus, ils seraient difficiles à analyser, comme c'est déjà le cas avec les connectomes déjà établis.

À la figure 2.8, les spectres du cione, du nématode, de la drosophile et de la souris sont illustrés. Nous voyons bien les formes très particulières des cœurs et la symétrie des valeurs propres autour de l'axe réel, qui est une simple conséquence du lemme 2.21. Nous observons également plusieurs valeurs propres qui se détachent du cœur, ce qui est relié à la structure modulaire des connectomes. ■

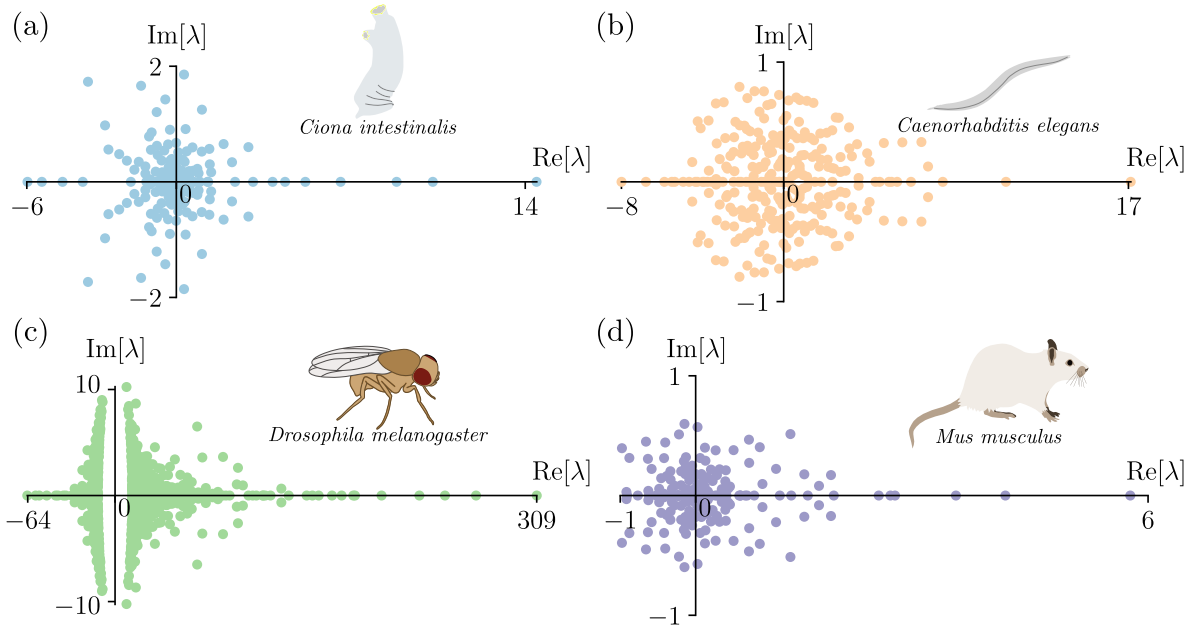



FIGURE 2.8 – (a) Spectre du connectome de *Ciona intestinalis*. Le réseau ($N = 213, M = 1999$) est orienté et pondéré [513]. (b) Spectre du connectome de *Caenorhabitis elegans*. Le réseau ($N = 279, M = 1999$) est orienté et dans sa version non pondérée [647]. (c) Spectre du connectome partiel de la mouche à fruit *Drosophila melanogaster* au stade larvaire [527]. Le réseau ($N = 21733, M = 2\,872\,500$) et dans sa version non pondérée. Seulement les 1000 valeurs propres de plus grands modules sont illustrées, ce qui explique la séparation autour de 0. (d) Spectre du connectome mésoscopique de la souris. Le réseau ($N = 213, M = 1726$) est orienté et pondéré [449].

## 2.4 SVD et graphes

La section précédente met en évidence l'intérêt marqué pour l'étude des valeurs propres et des vecteurs propres des graphes. La SVD dans le contexte des graphes est toutefois nettement moins exploitée. Nous proposons ainsi une courte introduction, qui prépare au chapitre 4 sur le plan intuitif et technique. Cette section fait aussi le pont entre le chapitre 1 et le présent chapitre.

D'abord, la matrice de poids d'un graphe pondéré sera généralement de plein rang.

**Exemple 2.43.** Soit un graphe de deux sommets dont la matrice de poids est

$$W = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

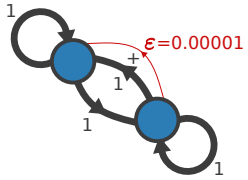



FIGURE 2.9 – Une petite perturbation d'une matrice de poids d'un graphe fait augmenter son rang.

soit une matrice de rang 1 dont les valeurs singulières sont $\sigma_1 = 2$ et $\sigma_2 = 0$. Il ne faut qu'une petite perturbation $\varepsilon$ à un de ses poids pour que le rang de la matrice devienne 2. Clairement, avec une perturbation $\varepsilon = 0.00001$, la matrice de poids

$$W' = \begin{pmatrix} 1 & 1.00001 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

est de rang 2 (plein) [figure 2.9] et les valeurs singulières $\sigma'_1 = 2.000005$ et $\sigma'_2 \approx 0.000005$. Cependant, les rangs effectifs introduits à la section 1.5 sont beaucoup moins sensibles à la perturbation que le rang. En effet, le rang stable est environ 1.000000000006, le rang nucléaire est environ 1.000002, le erank est environ 1.00003 et le ratio d'énergie est 1, alors que le rang du coude donne 0 puisqu'il n'y a pas de valeurs singulières au-delà de la position du coude, soit $i_{\text{elbow}} = 1$. ■

Selon le type de graphe, que ce soit un chemin, une grille ou une étoile, la décroissance des valeurs singulières varie de façon marquée [figure 2.10].

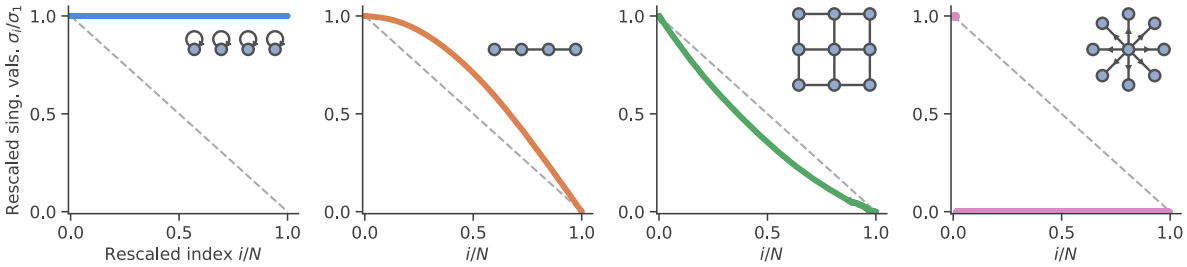



FIGURE 2.10 – La décroissance des valeurs singulières de la matrice d'adjacence de différents graphes.

La décroissance peut être plus lente (ex. chemin) ou plus rapide (ex. grille) qu'une décroissance linéaire. Tout comme un graphe complet, l'étoile orientée est associée à une matrice d'adjacence de rang 1 (rang 2 lorsque non orientée) et il suffit alors d'avoir deux vecteurs pour la décrire.

En connectant des sommets en périphérie de l'étoile, d'autres valeurs singulières sont non nulles [figure 2.11]. En ne conservant qu'un seul terme dans la SVD, la structure en étoile n'est pas encore visible, mais celle-ci apparaît plus clairement en ajoutant le deuxième terme. Lorsque la SVD est tronquée à sa cinquième composante, les deux arêtes qui connectent les sommets en périphérie ont un plus grand poids et sont plus visibles. Enfin, l'utilisation des six premiers termes de la SVD est suffisante pour avoir une représentation exacte de l'étoile perturbée, puisque le rang de sa matrice d'adjacence est 6.

Cette figure joue, pour les graphes, un rôle analogue à la figure 1.4 pour les drapeaux. En effet, elle montre que les premières composantes de la SVD donnent une vision plus globale du graphe et l'ajout de composantes permet de capter les caractéristiques locales du graphe (les arêtes en périphérie). Nous tirerons parti de ce constat au chapitre 4

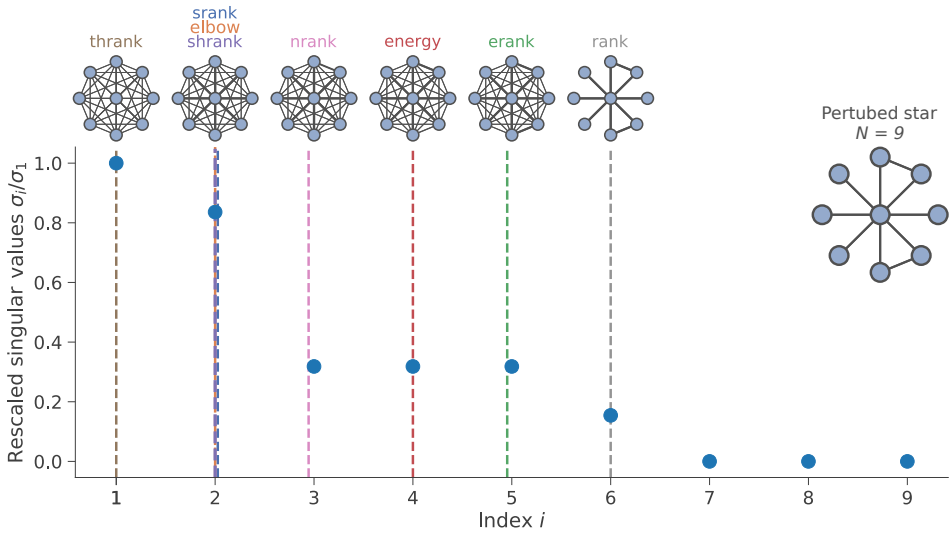



FIGURE 2.11 – Une « étoile perturbée » de 9 sommets où deux paires de sommets en périphérie sont connectées. Les rangs effectifs sont indiqués par les lignes verticales de même que les graphes associés à la matrice de poids approximative où $i$ termes de la décomposition sont conservés. Les rangs effectifs thrank et shrank sont introduits à la fin de la section.

Avant d'aborder des résultats plus techniques concernant la SVD et les graphes, nous introduisons deux applications plus intuitives, l'une concernant la centralité et l'autre concernant la détection de communautés.

### Centralité des sommets d'un graphe orienté

Les valeurs propres et les vecteurs propres de la représentation matricielle d'un graphe orienté sont en général complexes, et il faut adapter l'approche standard pour définir une mesure spectrale de centralité. Une manière naturelle de le faire consiste à utiliser la SVD de la matrice de poids du graphe orienté, laquelle fournit deux mesures de centralité des sommets [313, 433].

**Définition 2.44.** Soit un graphe de matrice de poids $W$ non négative. La *centralité d'autorité* d'un sommet $i$ est donnée par le $i$-ème élément du vecteur singulier gauche dominant $u_1$ de $W$ et la *centralité du hub* d'un sommet $i$ est donnée par le $i$-ème élément du vecteur singulier droit dominant $v_1$ de $W$.

**Remarque 2.45.** La restriction que $W$ soit non négative implique que le graphe est non signé (définition 2.8) et qu'il existe des vecteurs singuliers non négatifs associés à la première valeur singulière par le théorème 2.27. Cela permet d'éviter l'ambiguïté causée par une valeur de centralité qui serait négative. ■

Un sommet possède une grande centralité d'autorité lorsque celui-ci reçoit des connexions des sommets avec une grande centralité du hub. À l'inverse, un sommet a une grande centralité du hub s'il pointe vers des sommets avec une grande centralité d'autorité [433]. Ces centralités

sont illustrées à la figure 2.12. Cette interprétation des vecteurs singuliers dominants nous guidera au chapitre 4 dans le choix d'observables pour la réduction dimensionnelle et elle peut également servir à interpréter les équations issues du théorème 3.45 avec le choix $M = V_n^\top$.

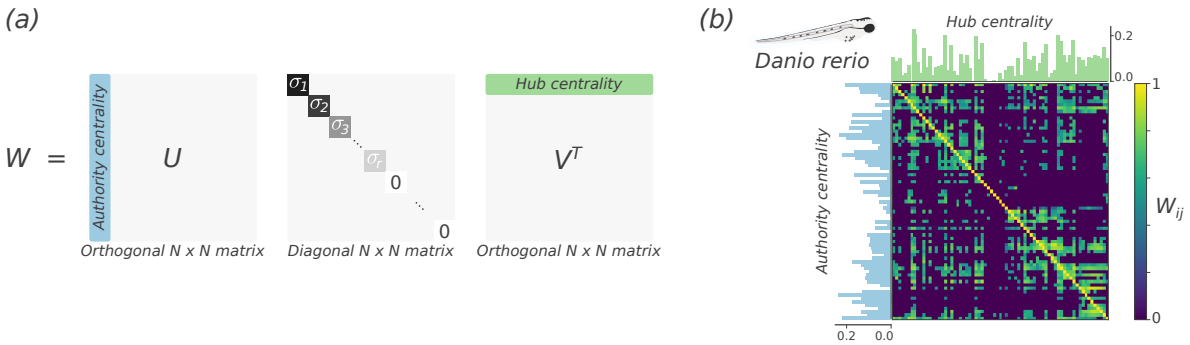



FIGURE 2.12 – (a) Les centralités d'autorité et du hub sont données respectivement par les éléments des vecteurs singuliers gauche et droit dominants. (b) Centralités pour le connectome mésoscopique de la larve de poisson-zèbre comportant $N = 71$ communautés avec ajout de boucles (modifié d'après la Réf. [330]).

### Détection de communauté dans les graphes orientés

La détection de communautés dans les réseaux empiriques est l'un des principaux sujets d'intérêt en science des réseaux [194, 195]. Une méthode populaire consiste à utiliser la *modularité*, une mesure introduite par Newman et Girvan [341, 431, 435] qui quantifie la structure en communauté d'un réseau. La détection s'effectue ensuite en maximisant cette modularité.

Récemment, une mesure de bimodularité a été introduite pour les réseaux orientés [125]. En effectuant une relaxation convexe du problème de maximisation de la bimodularité, il se trouve que la solution optimale est donnée par les vecteurs singuliers dominants. La démarche est plutôt élémentaire, mais assez élégante, et nous renvoyons le lecteur à la référence originale pour les détails [125].

Dans la continuité de la section 2.2, la théorie spectrale des graphes s'enrichit également de résultats formulés en termes de valeurs singulières.

### Valeurs singulières de la matrice d'adjacence et laplacienne

Les résultats du premier chapitre et de la section 2.2 impliquent directement deux lemmes. Le premier relie les valeurs singulières directement aux valeurs propres pour la matrice laplacienne.

**Lemme 2.46.** *Soit un graphe simple non orienté [définition 2.1] et connexe. Les valeurs singulières* $\sigma_1(L) \geq ... \geq \sigma_N(L)$ *de la matrice laplacienne sont égales à ses valeurs propres* $\lambda_1(L) \leq ... \leq \lambda_N(L)$ *:*

$$\sigma_i(L) = \lambda_{N-i+1}(L) \quad avec \quad i \in \{1, ..., N\}. \tag{2.22}$$

*De plus,* $\mathrm{rank}(L) = N - 1$ *et* $L$ *possède un vecteur singulier (droit et gauche) uniforme.*

*Démonstration.* Les valeurs propres de la matrice laplacienne (symétrique) se situent dans l'intervalle $[0, 2k_{\max}]$ [438, théorème 7.5]. Ainsi, toutes les valeurs propres de $L$ sont positives et le lemme 1.18 donne $\sigma_1 = \lambda_N$, $\sigma_2 = \lambda_{N-1}$, ... , $\sigma_i = \lambda_{N-i+1}$, ... , $\sigma_N = \lambda_1$.

De plus, le graphe est connexe et $\lambda_1 = 0$ est une valeur propre simple de la matrice laplacienne [438, théorème 7.1]. Par conséquent, $\sigma_N = \lambda_1 = 0$ est la seule valeur singulière nulle, ce qui implique qu'il y a $N-1$ valeurs singulières non nulles et donc que le rang de $L$ est $N-1$.

Finalement, $LL^\top \mathbf{1}/\sqrt{N} = L^\top L\mathbf{1}/\sqrt{N} = LL\mathbf{1}/\sqrt{N} = 0$ et donc, $\mathbf{1}/\sqrt{N}$ représente un vecteur singulier gauche et droit uniforme de $L$ associé à la valeur singulière nulle. □

De façon similaire au lemme 2.30, il existe aussi une relation entre les valeurs singulières de la matrice d'adjacence et de la matrice laplacienne, dépendante des degrés optimaux.

**Lemme 2.47.** *Soit un graphe simple non orienté [définition 2.1]. Les valeurs singulières de la matrice d'adjacence et de la matrice laplacienne (ordonnées comme à l'Éq. (2.10)) satisfont*

$$\sigma_i(L) - \sigma_i(A) \leq k_{\max} \quad \textit{avec} \quad 1 \leq i \leq N \tag{2.23}$$

$$\sigma_i(L) + \sigma_j(A) \geq k_{\min} \quad \textit{avec} \quad i + j = N + 1. \tag{2.24}$$

*Démonstration.* C'est une conséquence directe du théorème de Weyl pour les valeurs singulières 1.22. D'une part, en choisissant $j = 1$, $X = -A$ et $Y = D$, nous avons $\sigma_i(L) \leq \sigma_i(-A) + \sigma_1(D)$ avec $1 \leq i \leq N$. Puisque $D$ est diagonal et $DD^\dagger = D^\dagger D = D^2$, les valeurs singulières sont données par les degrés et donc, la plus grande valeur singulière est $\sigma_1(D) = k_{\max}$. De plus, si $A = U\Sigma V^\top$, alors $-A = -U\Sigma V^\top = U'\Sigma V^\top$ et $\sigma_i(A) = \sigma_i(-A)$ pour tout $i$. Nous trouvons alors directement la borne supérieure de l'équation (2.23). D'autre part, en choisissant $i + j = N + 1$, $X = L$ et $Y = A$, nous avons $\sigma_i(L) + \sigma_j(A) \geq \sigma_N(D) = k_{\min}$, où nous avons utilisé un raisonnement similaire à précédemment. □

En théorie des matrices aléatoires [section 2.3], un résultat remarquable sur la distribution des valeurs singulières des matrices aléatoires est aussi d'intérêt dans le contexte des graphes aléatoires.

### Densité de probabilité de Marchenko-Pastur

De manière analogue à la loi de Wigner, la *loi de Marchenko-Pastur* [384] décrit la ESD des valeurs singulières, mais elle est valable pour les matrices rectangulaires et non hermitiennes.

**Théorème 2.48** (Adapté de Bai & Silverstein, 2010 [40] et [90, 255, 596])**.** *Soit la matrice aléatoire $X/\sqrt{n}$ de dimension $m \times n$, dont les éléments sont i.i.d., complexes, de moyenne nulle, de variance $\sigma^2 < \infty$ et où $m/n \to \lambda \in (0, \infty)$ lorsque $n \to \infty$. Alors, la ESD de $XX^\dagger/n$*

*converge presque sûrement vers la loi de Marchenko-Pastur :*

$$\mu_{XX^\dagger/n}(x) \xrightarrow{a.s.} \frac{\sqrt{(\lambda_+ - x)(x - \lambda_-)}}{2\pi\sigma^2\lambda x}\,\mathbb{1}_{x\in[\lambda_-,\lambda_+]} + (1 + 1/\lambda)\,\mathbb{1}_{\lambda>1}\,\delta(x) \tag{2.25}$$

*avec* $\lambda_\pm = \sigma^2(1 \pm \sqrt{\lambda})^2$.

**Remarque 2.49.** Une version du dernier théorème où les éléments de la matrice sont seulement indépendants est donnée dans le livre de Bai et Silverstein [40, Theorem 3.10], mais cela nécessite d'ajouter une condition supplémentaire sur les moments des éléments. ■

Si $X/\sqrt{n}$ est carrée ($\lambda = 1$), la loi de Marchenko-Pastur se simplifie à

$$\frac{1}{2\pi\sigma^2}\sqrt{\frac{4\sigma^2 - x}{x}}\,\mathbb{1}_{x\in[0,4\sigma^2]}\,. \tag{2.26}$$

De plus, si la matrice est hermitienne, la distribution (2.26) est égale à la loi du demi-cercle de Wigner évaluée à $\sqrt{x}$ et divisée par $\sqrt{x}$ [596, Section 6.5.2], ce qui conduit à une *loi du quart de cercle* [215].

Les matrices décrivant les interactions au sein d'un système ne sont pas toujours carrées. Par exemple, la matrice d'incidence d'un réseau biparti est rectangulaire [433] et il en est de même pour la matrice qui décrit les interactions entre les couches d'un réseau à multiples couches (« multilayer networks ») [138]. Pour des valeurs de $\lambda$ qui ne sont pas 1, la loi de Marchenko-Pastur prend des formes différentes, telles qu'illustrées à la figure 2.13. Plus le ratio des dimensions $\lambda$ est élevé, plus la densité s'étale.

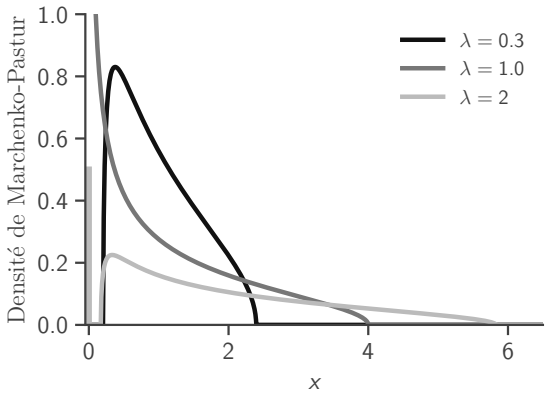



FIGURE 2.13 – Loi de Marchenko-Pastur pour différentes valeurs de ratio des dimensions $\lambda$ de la matrice.

Malgré la restriction que les éléments soient i.i.d., la loi s'applique néanmoins à certains graphes aléatoires orientés.

**Exemple 2.50.** Soit le modèle $\mathcal{G}(N, p)$ orienté, avec des boucles et de matrice d'adjacence $A$. Les éléments de $A$ sont i.i.d. et de support réel, la variance est $\sigma^2 = p(1 - p)$ et en utilisant

la matrice centrée $X = A - p\mathbf{1}\mathbf{1}^\top$, les valeurs singulières convergent vers la loi de Marchenko-Pastur comme suit :

$$\mu_{XX^T/N}(x) \to \frac{1}{2\pi p(1-p)} \sqrt{\frac{4p(1-p)-x}{x}}\ \mathbb{1}_{x\in[0,4p(1-p)]}\,, \tag{2.27}$$

ce qui est illustré à la figure 2.14. ■

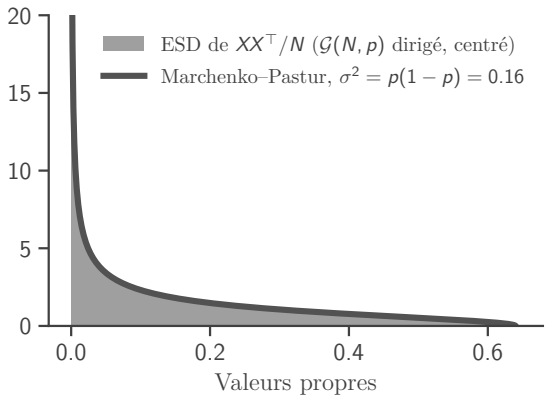



FIGURE 2.14 – La distribution des valeurs singulières au carré de $X/\sqrt{N}$ pour le modèle $\mathcal{G}(N,p)$ orienté suit la loi de Marchenko-Pastur.

Remarquons que dans le dernier exemple, la matrice d'adjacence aléatoire prend la forme $A = p\mathbf{1}\mathbf{1}^\top + X$ et que $p\mathbf{1}\mathbf{1}^\top$ peut être vu comme une perturbation de rang 1 (un signal) de la « matrice de bruit » $R = X$. C'est ce qu'on appelle une matrice aléatoire piquée, qui de façon générale, s'écrit

$$W = \sum_{j=1}^{r} s_j \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{v}_j^\dagger + R\,,$$

où $r$ est le nombre de pics, $s_j > 0$ est la force du signal, les vecteurs $\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_r$ sont orthonormaux entre eux et de même pour $\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_r$. La terminologie « piquée » est appropriée puisque la perturbation par une matrice de rang $r$ introduit des pics dans la distribution des valeurs singulières, mais cela dépend de la force de ses pics, ce qui est expliqué dans ce qui suit.

### Transition de Baik-Ben Arous-Péché

Les valeurs singulières des matrices aléatoires piquées présentent un cœur lié aux valeurs singulières de la matrice de bruit $R$ et la présence de valeurs singulières isolées est caractérisée asymptotiquement par la transition de Baik–Ben Arous–Péché (BBP) [42]. Notamment, l'apparition de $p \leq r$ valeurs singulières isolées dans $W = \langle W \rangle + R$ (où $\langle W \rangle$ est de rang $r$) dépend uniquement d'un seuil $\bar{\sigma}$ sur $\sigma_1(\langle W \rangle), \ldots, \sigma_r(\langle W \rangle)$ [57]. Le cas le plus simple est présenté ci-dessous.

**Exemple 2.51.** Considérons que les éléments de $R$ soient des variables aléatoires gaussiennes i.i.d., de variance $1/N$. Alors, lorsque $N \to \infty$, les valeurs singulières de $R$ tendent à remplir densément l'intervalle $[0, 2]$ (suivant la loi de Marchenko-Pastur), le seuil devient $\bar{\sigma} = 1$, et la $i$-ième valeur singulière de $W$ s'écarte de l'intervalle $[0, 2]$ du cœur pour atteindre $\sigma_i(\langle W \rangle) + 1/\sigma_i(\langle W \rangle)$ dès que $\sigma_i(\langle W \rangle) > \bar{\sigma}$ pour $i \in \{1, \ldots, r\}$. ■

Certains résultats qui rappellent le théorème 2.33 de Fűredi et Komlós existent aussi pour la plus grande valeur singulière. En effet, en considérant $r = 1$, la ESD associée à la plus grande valeur singulière passe asymptotiquement d'une distribution de Tracy-Widom à une distribution gaussienne [292, 293].

Dans la section 4.5, nous utiliserons la transition BBP pour appuyer notre propos sur l'hypothèse de bas rang dans le contexte des graphes aléatoires. Les matrices aléatoires piquées servent également pour introduire deux autres mesures de rangs effectifs, qui s'ajoutent à la liste de la section 1.5. Ces nouveaux rangs effectifs sont basés sur des techniques de débruitage.

### Débruitage de Gavish-Donoho

Soit $W = W_\ell + R$ où $W_\ell$ est une matrice non aléatoire de rang inconnu $\ell$ et $R$ une matrice aléatoire décrivant un certain bruit. Basé sur la Réf. [475, Definition 4.2] et la Réf. [215], le *seuil optimal* $\tau^*(W)$ est défini tel que

$$\tau^*(W) = \arg\min_{\tau} \|W_\ell - \hat{W}(\tau)\|, \tag{2.28}$$

où $\hat{W}(\tau)$ est la SVD tronquée à la $\tau$-ième composante de $W$ et $\|\cdot\|$ est une certaine norme matricielle (par exemple, la norme spectrale, la norme de Frobenius). Intuitivement, le problème pour trouver $\tau^*(W)$ revient au problème de trouver les valeurs singulières de la matrice $W_\ell$ de rang $\ell$ (matrice de signal) en retirant les valeurs singulières reliées au bruit $R$ de $W$. Quand le niveau de bruit est inconnu et sous certaines conditions sur $R$, le rang optimal

$$\tau^*(W) = \frac{4\sigma_{\text{med}}}{\sqrt{3\,\mu_{\text{med}}}} \tag{2.29}$$

minimise la norme de Frobenius $\|W_\ell - \hat{W}(\tau)\|_F$ dans la limite des matrices infinies [215, Corollaire 3 et Théorème 1], où $\sigma_{\text{med}}$ est la médiane de la distribution des valeurs singulières observées de la matrice de poids $W$ et $\mu_{\text{med}}$ est la médiane de la loi de Marchenko-Pastur. La médiane $\mu_{\text{med}}$ est généralement inconnue, mais elle peut être calculée comme expliqué à la Réf. [215, p.5046].

Ces résultats, basés sur la théorie des matrices aléatoires [57], sont rigoureux dans la limite asymptotique sous les conditions précises données par Réf. [215]. Il s'ensuit qu'un rang effectif, que nous appelons $\text{thrank}(W)$, se définit comme le nombre de valeurs singulières au-delà du seuil optimal $\tau^*(W)$ sur les valeurs singulières, c'est-à-dire,

$$\text{thrank}(W) = \#\big\{\sigma_i \,\big|\, i \in \{1, ..., N\} \text{ et } \sigma_i > \tau^*(W)\big\}, \tag{2.30}$$

où # est le cardinal de l'ensemble.

De manière similaire au seuil optimal précédent, la contraction optimale des valeurs singulières (« optimal shrinkage ») [216, 347, 537] définit aussi un rang effectif. Soit $W = W_\ell + R$ où $W_\ell$ est une matrice non aléatoire de rang $\ell$ et $R$ est une matrice aléatoire décrivant le bruit. Étant donné les valeurs singulières de $W$, la fonction scalaire $s : [0, \infty) \to [0, \infty)$, $\sigma_i \mapsto s(\sigma_i)$ est appelée la fonction de débruitage (« shrinker » ou « denoiser ») des valeurs singulières. Des références [151, 216, 347, 537], des fonctions de débruitage optimales $s^*$ s'obtiennent analytiquement pour différentes erreurs basées sur les normes de Frobenius, spectrale et nucléaire.

Nous définissons alors *shrank* comme le rang de la matrice aux valeurs singulières optimalement contractées, soit

$$\text{shrank}(W) = \#\big\{ s^*(\sigma_i) \,\big|\, i \in \{1, ..., N\} \text{ et } s^*(\sigma_i) > 0 \big\}. \tag{2.31}$$

Notons que ce rang effectif dépend aussi de la médiane de la distribution de Marchenko-Pastur lorsque le niveau de bruit est inconnu et elle est estimée comme dans la référence [216].

**Remarque 2.52.** Dans la définition de thrank et shrank, le rang $\ell$ de la matrice de signal est considéré comme étant $O(1)$. D'ailleurs, si le type de bruit est inconnu, les hypothèses des références [215, 216] ne sont pas nécessairement satisfaites et il n'est pas garanti que thrank et shrank soient optimaux. Finalement, l'implémentation numérique de ces rangs effectifs est disponible sur Github (low-rank-hypothesis-complex-systems, module singular_values/optimal_shrinkage.py), qui contient le code accompagnant l'article au chapitre 4. Ce code est une traduction en Python du script Matlab optimal_shrinkage.m [216]. Une coquille dans la référence originale [216] concernant la contraction optimale des valeurs singulières par rapport à la norme nucléaire est corrigée, suivant le théorème 3.1 de W. Leeb [347]. Nous adaptons aussi le répertoire Github optht en Python, lequel est basé sur le script Matlab optimal_SVHT_coef.m [215]. ■

En passant des graphes aux matrices aléatoires avec une attention particulière à leurs propriétés spectrales, nous avons introduit des outils essentiels qui concernent la structure des systèmes complexes. Il manque désormais l'introduction d'un aspect des systèmes complexes dont chacun des prochains chapitres prendra au sérieux, soit leur dynamique.

# Chapitre 3

# Perspectives sur les systèmes dynamiques

> How complex or simple a structure is depends critically upon the way in which we describe it.
> - Herbert Simon, The architecture of complexity, 1962 [541]

Un système dynamique régit l'évolution temporelle d'un ensemble de constituants. Pour un système complexe, la dynamique est typiquement non linéaire, de haute dimension, potentiellement chaotique et souvent très difficile à modéliser et résoudre. Face à une telle complexité, il est sage d'envisager différentes perspectives et de commencer par bien définir les quantités pertinentes. Nous aborderons donc des perspectives non disjointes basées sur le flot et les groupes, les trajectoires, les équations différentielles (dynamiques non linéaires), les opérateurs différentiels et leurs propriétés spectrales, de même que la réduction dimensionnelle.

Pour ce faire, nous introduisons d'abord le cadre classique des systèmes dynamiques [section 3.1] avec suffisamment de précision pour y aborder une perspective reposant sur les opérateurs, soit la théorie de Koopman [section 3.2]. C'est depuis cette théorie qu'une perspective spectrale des systèmes dynamiques prend son sens dans la thèse [section 3.3]. Nous complétons le chapitre par une approche qui intervient dans tous les articles insérés dans la thèse, à savoir la réduction dimensionnelle des systèmes dynamiques [section 3.4].

## 3.1 Systèmes dynamiques

Une structure mathématique centrale permettant de modéliser l'évolution temporelle d'une quantité est appelée un *système dynamique*. Les prochaines définitions serviront à établir progressivement cette notion. D'abord, le paramètre de temps est noté $t$ et appartient à l'ensemble $\mathscr{T}$. Un système dynamique est alors en temps discret si $\mathscr{T} \subseteq \mathbb{Z}$ et il est en temps continu si $\mathscr{T}$

est un sous-ensemble de $\mathbb{R}$. Dans cette thèse, nous travaillerons avec les systèmes dynamiques à temps continu.

L'espace dans lequel évoluent les constituants du système se nomme l'*espace des états (ou des phases)* $\mathscr{X}$, soit une variété différentielle de classe $\mathscr{C}^k$ [Définition C.27]. Dans la suite, les variétés seront réelles ou complexes et les coordonnées $\boldsymbol{x} \in \mathscr{X}$ seront aussi appelées *points, positions ou états*. Pour un espace des états de dimension $N$, les états sont décrits selon les coordonnées $\boldsymbol{x} = (x^1, x^2, ..., x^N)$, que nous écrirons aussi sous forme de vecteurs colonnes tels que $\boldsymbol{x} = (x^1 \ x^2 \ \dots \ x^N)^T$.

Afin de décrire l'évolution du système dans l'espace et le temps, nous introduisons le flot du système [471].

**Définition 3.1.** Le *flot* est une fonction

$$\begin{aligned} \phi : \mathscr{T} \times \mathscr{X} &\to \mathscr{X} \\ (t, \boldsymbol{x}) &\mapsto \phi_t(\boldsymbol{x}) := \phi(t, \boldsymbol{x}), \end{aligned} \tag{3.1}$$

telle que *i.* $\phi_0(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}$ et *ii.* $\phi_t \circ \phi_s(\boldsymbol{x}) = \phi_{t+s}(\boldsymbol{x})$ pour tout $\boldsymbol{x} \in \mathscr{X}$ et $s, t \in \mathscr{T}$. Par hypothèse, $\phi$ est différentiable au moins une fois selon chacun de ses arguments.

Il en découle finalement la structure centrale du chapitre.

**Définition 3.2.** Un *système dynamique* est un couple $(\mathscr{X}, \phi)$.

Il est utile de voir l'ensemble de flots du point de vue de la théorie des groupes, qui joue un rôle de différentes manières dans la thèse, de la théorie de Koopman aux symétries de Lie [chapitre 5].

**Lemme 3.3.** *Soit un groupe commutatif associé à l'ensemble des temps* $(\mathscr{T}, +)$ *avec* $\mathscr{T} = \mathbb{R}$. *Alors,*

1. *le flot* $\phi$ *est l'action du groupe* $(\mathscr{T}, +)$ *sur l'espace des phases* $\mathscr{X}$ *;*
2. *la famille des flots* $\mathscr{G}_\phi := (\phi_t)_{t \in \mathscr{T}}$ *forme un groupe commutatif sous la composition de fonctions.*

*Démonstration.* D'une part, la fonction $\phi$ est l'action du groupe du temps sur l'espace des phases par définition 3.1. D'autre part, la structure en groupe commutatif du temps et les propriétés *i.*-*ii.* impliquent : (1) l'existence d'un élément neutre $\phi_0$ tel que $\phi_0 \circ \phi_t = \phi_t$, (2) l'élément inverse $\phi_{-t}$ pour tout $\phi_t$ telle que $\phi_t \circ \phi_{-t} = \phi_0$, (3) la fermeture, $\phi_t \circ \phi_s = \phi_{t+s} \in \mathscr{G}_\phi$ puisque $t + s \in \mathscr{T}$ et (4) que la composition de fonctions $\circ$, en plus d'être associative, est une opération commutative, puisque $t + s = s + t$. □

**Remarque 3.4.** Pour des temps non négatifs, l'élément inverse n'existe pas et il suffit de remplacer « groupe » par « monoïde » (ensemble avec une loi de composition interne associative et un élément identité) dans le lemme précédent. En général, nous devrions même parler d'un semi-groupe fortement continu, sur lequel nous reviendrons [définition 3.19].

De plus, le groupe associé au flot s'élève même au rang de groupe de Lie à un paramètre réel $t$ [définition C.29] [428]. Ces groupes seront utilisés dans les trois derniers chapitres de la thèse, où la théorie de Lie joue un rôle important. ■

En pratique, nous observons un objet à partir d'une certaine condition initiale $\boldsymbol{x}_0$ jusqu'à un certain état $\boldsymbol{x}(t)$ au temps $t$. Cette évolution est décrite par une trajectoire.

**Définition 3.5.** Une *trajectoire* $\boldsymbol{x}$ depuis $\boldsymbol{x}_0 \in \mathscr{X}$ au temps $t = 0$ est une courbe-$\mathscr{C}^r$ paramétrée régie par le flot $\phi_t$, de telle sorte que

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} : \mathscr{T} &\to \mathscr{X} \\ t &\mapsto \boldsymbol{x}(t) := \phi_t(\boldsymbol{x}_0). \end{aligned} \tag{3.2}$$

**Remarque 3.6.** Pour alléger la notation, $\boldsymbol{x}$ peut être une fonction définie comme dans la dernière définition ou sa valeur, un élément de $\mathscr{X}$ (par exemple, un vecteur dans $\mathbb{R}^N$). ■

Nous considérerons généralement que le flot, régissant les trajectoires, est généré par un champ vectoriel $\boldsymbol{F}$ qui s'exprime directement à partir du groupe des flots. Par convention, le générateur est défini au voisinage de l'élément identité du groupe, soit $\phi_0$ (donc, $\boldsymbol{x} = \phi(0, \boldsymbol{x})$).

**Définition 3.7.** Le *champ vectoriel* $\boldsymbol{F} : \mathscr{X} \subset \mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^N$ est le générateur infinitésimal du flot $\phi$ tel que

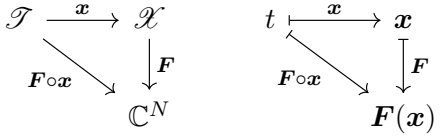
$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\phi(\varepsilon, \boldsymbol{x}) - \boldsymbol{x}}{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{x} \in \mathscr{X}. \tag{3.3}$$

**Remarque 3.8.** À l'exception des chapitres 6 et 7, nous nous intéressons principalement aux systèmes dynamiques autonomes, c'est-à-dire que le champ vectoriel ne dépend pas du temps. ■

Pour $t \in \mathscr{T} \subset \mathbb{R}$, puisque le flot est différentiable, le champ vectoriel s'exprime aussi comme la dérivée du flot par rapport au temps [471] :

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \left. \frac{\mathrm{d}\phi(t, \boldsymbol{x})}{\mathrm{d}t} \right|_{t=0} \tag{3.4}$$

Les définitions 3.5-3.7 se résument par le diagramme de composition suivant :



La relation entre le flot et le champ vectoriel s'exprime sous une autre forme élégante. En effet, informellement, un simple réarrangement de l'équation (3.3) permet de voir le champ vectoriel comme une perturbation au premier ordre de l'élément identité du groupe des flots :

$$\phi_\varepsilon \approx \phi_0 + \varepsilon \boldsymbol{F}. \tag{3.5}$$

Le flot $\phi_\varepsilon$ n'effectue qu'un déplacement infinitésimal de l'état du système dynamique. Pour obtenir la transformation $\phi_t$ à un temps $t$ fini quelconque, nous décomposons $t$ en $N$ parties de taille $t/N$ :

$$t = N \cdot \frac{t}{N} = \sum_{i=1}^{N} \frac{t}{N}.$$

Pour $N \to \infty$, il y a une infinité de perturbations infinitésimales de taille $\varepsilon = t/N$ menant de 0 à $t$ [391] et l'utilisation de l'équation (3.5) sous une forme exacte implique

$$\phi_t = \lim_{N\to\infty} \left[\phi_{t/N}\right]^N = \lim_{N\to\infty} \left[\phi_0 + \frac{t\boldsymbol{F}}{N}\right]^N := e^{t\boldsymbol{F}},$$

où $e^{t\boldsymbol{F}} = \exp \circ\, t\boldsymbol{F}$ où exp est l'application exponentielle [285, 450, 578].

Une autre approche pour décrire l'évolution temporelle d'un système est d'introduire immédiatement des équations différentielles, en se souciant moins des fonctions particulières définissant les trajectoires. Dans son *Mémoire sur les courbes définies par une équation différentielle*, Henri Poincaré présente des arguments clés en faveur de l'utilisation des équations différentielles :

> Une théorie complète des fonctions définies par les équations différentielles serait d'une grande utilité dans un grand nombre de questions de Mathématiques pures ou de Mécanique. Malheureusement, il est évident que dans la grande généralité des cas qui se présentent on ne peut intégrer ces équations à l'aide des fonctions déjà connues, par exemple à l'aide des fonctions définies par les quadratures. Si l'on voulait donc se restreindre aux cas que l'on peut étudier avec des intégrales définies ou indéfinies, le champ de nos recherches serait singulièrement diminué, et l'immense majorité des questions qui se présentent dans les applications demeureraient insolubles. Il est donc nécessaire d'étudier les fonctions définies par des équations différentielles en elles-mêmes et sans chercher à les ramener à des fonctions plus simples, ainsi qu'on a fait pour les fonctions algébriques, qu'on avait cherché à ramener à des radicaux et qu'on étudie maintenant directement, ainsi qu'on a fait pour les intégrales de différentielles algébriques, qu'on s'est efforcé longtemps d'exprimer en termes finis. Rechercher quelles sont les propriétés des équations différentielles est donc une question du plus haut intérêt.

Herbert Simon en fera de même en parlant des systèmes complexes [541] :

> By appropriate "recoding," the redundancy that is present but unobvious in the structure of a complex system can often be made patent. The most common recoding of descriptions of dynamic systems consists in replacing a description of the time path with a description of a differential law that generates that path. The

simplicity, that is, resides in a constant relation between the state of the system at any given time and the state of the system a short time later. [...]

Much of the activity of science is an application of that paradigm : given the description of some natural phenomena, to find the differential equations for processes that will produce the phenomena.

**Définition 3.9.** Un *problème aux conditions initiales* est un système d'équations différentielles

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t)), \tag{3.6}$$

$$\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0\,, \tag{3.7}$$

où $\boldsymbol{F} : \mathscr{X} \subset \mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^N$ et $\boldsymbol{x}(t) \in \mathscr{X}$ pour tout $t \in \mathscr{T} \subset \mathbb{R}$ est appelé une *solution* au problème (3.6-3.7). L'équation (3.6) sera appelée la *dynamique*.

**Remarque 3.10.** En général, nous faisons l'hypothèse que les fonctions $F_1$,...,$F_N$ formant le champ vectoriel $\boldsymbol{F}$ sont au moins des fonctions $\mathscr{C}^1(\mathscr{X})$, ce qui garantit que $\boldsymbol{F}$ est Lipschitz [471, p.71]. Il s'ensuit que les solutions de la dynamique (3.6) existent et sont uniques pour une condition initiale donnée [471, p.74]. ■

La possibilité d'une telle représentation en équations différentielles d'un système dynamique peut être vue comme une conséquence de nos énoncés précédents sur les trajectoires. En effet, par la définition de la dérivée et celle d'une trajectoire [définition 3.5], nous obtenons

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}(t)}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\boldsymbol{x}(t+\varepsilon) - \boldsymbol{x}(t)}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\phi_{t+\varepsilon}(\boldsymbol{x}_0) - \phi_t(\boldsymbol{x}_0)}{\varepsilon}.$$

La propriété *ii.* du flot [définition 3.1] et la définition du champ vectoriel [définition 3.7] impliquent

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}(t)}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\phi_\varepsilon\left(\phi_t(\boldsymbol{x}_0)\right) - \phi_t(\boldsymbol{x}_0)}{\varepsilon} = \boldsymbol{F}(\phi_t(\boldsymbol{x}_0)) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t)).$$

**Remarque 3.11.** À la définition 5.12 du chapitre 5, nous adopterons une perspective géométrique des équations différentielles qui permet de définir des transformations sur celles-ci et plus spécifiquement, des symétries de Lie. ■

Les dynamiques non linéaires se solutionnent rarement de manière analytique et il n'est pas simple en général de caractériser complètement leur comportement, surtout lorsque leur dimension est élevée. Il est alors fréquent d'avoir recours à des méthodes de linéarisation pour poursuivre le travail analytique. Après tout, comme le dit Feynman dans ses lectures (vol. I, chap. 25),

[w]hy linear systems are so important [?] The answer is simple : because we can solve them ! So most of the time we solve linear problems. Second (and most important), it turns out that the fundamental laws of physics are often linear. The Maxwell equations for the laws of electricity are linear, for example. The great laws of quantum mechanics turn out, so far as we know, to be linear equations. That is why we spend so much time on linear equations : because if we understand linear equations, we are ready, in principle, to understand a lot of things.

La méthode de linéarisation la plus répandue pour les systèmes dynamiques est sans doute l'analyse de stabilité locale qui décrit le système non linéaire à l'aide de sa matrice jacobienne dans le voisinage d'un point d'équilibre. Celle-ci encode de l'information cruciale : ses valeurs propres permettent de classifier la nature des points d'équilibre et leur stabilité, même pour des systèmes dynamiques de grandes dimensions [325, 402, 516]. Outre la matrice jacobienne, un autre exemple d'objet permettant une telle analyse est la fonction de stabilité maîtresse qui définit des intervalles spectraux pour lesquels un point d'équilibre est stable [433, Chapitre 17] [69, Chapitre 5]. Celle-ci est fréquemment utilisée pour délimiter les régions où des oscillateurs couplés se synchronisent [464].

Par sa nature locale, l'analyse de stabilité linéaire donne seulement une vision partielle des dynamiques non linéaires en général. Certains phénomènes dynamiques globaux requièrent que ce type d'analyse soit adapté, que les termes non linéaires du champ vectoriel soient considérés ou ultimement, que des techniques plus raffinées soient développées (par exemple, la théorie de Floquet, les sections de Poincaré [251] ou la théorie de l'indice [567]). Il faut dire que les problèmes pour les ensembles limites et les attracteurs qui occupent une grande région de l'espace des états peuvent devenir extrêmement difficiles dès que la dimension du système dynamique est supérieure ou égale à trois. Pour les cycles limites, même en deux dimensions, il nous est encore impossible de déterminer le nombre maximum de cycles limites pour un système dynamique avec un champ vectoriel polynomial [471, p.262-263] : c'est le seizième problème posé par Hilbert en 1900 [264]. Un autre exemple concerne les bassins d'attraction dans les espaces de grande dimension : ceux-ci peuvent prendre des formes de « pieuvres » dans l'espace des états dont les tentacules s'étendent loin de l'attracteur [658]. D'autres perspectives sur les systèmes dynamiques en haute dimension sont donc encore les bienvenues.

En particulier, il existe une méthode de linéarisation particulière qui assure que l'information sur la dynamique non linéaire est conservée sous certaines conditions, mais il y aura un prix à payer sur la dimension du système linéaire. Malgré l'enthousiasme de Feynman pour les systèmes linéaires, les difficultés ne disparaîtront généralement pas, elles se transformeront.

## 3.2 Théorie de Koopman

La théorie de Koopman est inspirée de la formulation mathématique de la mécanique quantique et a été introduite par Bernard Koopman en 1931 [294, 317]. Elle a été approfondie l'année suivante avec John von Neumann [318] [1], conduisant à une reformulation de la mécanique classique en termes d'opérateurs linéaires [612]. Cette approche a trouvé des applications en théorie ergodique [164,318,344,351,408,416], mais la deuxième moitié du 20e siècle s'est avérée calme dans le développement de la théorie. Un regain d'intérêt notable est ensuite survenu au début des années 2000, alors que des méthodes numériques axées sur les données [82, 89, 334,

1. De façon indépendante, Torsten Carleman a également proposé une version spécifique de la théorie fondée sur une base de fonctions monomiales [102, 263, 321].

528, 529] ont permis l'analyse spectrale de flots complexes en mécanique des fluides [505]. Il existe désormais une littérature riche sur le sujet et différents articles de synthèse [88, 91, 407].

Dans cette section, nous montrons comment introduire un opérateur d'évolution linéaire pour les systèmes dynamiques non linéaires à partir de la théorie de Koopman. Mathématiquement, ce changement de perspective a des conséquences majeures sur le type d'outils accessibles pour analyser la dynamique, ce que nous exploiterons dans ce chapitre et aux chapitres 6 et 7. Cependant, présenter la théorie de Koopman de façon formelle demande des notions d'analyse fonctionnelle qui dépassent le cadre de la thèse. Nous nous limiterons ainsi à apporter, dans la mesure du possible, des précisions et des remarques afin de remédier à cette lacune.

### Observables

Afin de montrer comment une linéarisation qui préserve les propriétés du flot d'une dynamique non linéaire est possible, nous nous intéressons à l'évolution des fonctions des états du système, soit des *observables*, plutôt que de se limiter à l'évolution des états.

**Définition 3.12.** Une *observable* $f$ d'un système dynamique $(\mathscr{X}, \phi)$ est une fonction des états $f : \mathscr{S} \subset \mathscr{X} \to \mathbb{C}$ de classe $\mathscr{C}^1(\mathscr{S})$.

Insistons sur le fait que les observables sont définies comme différentiables et de dérivées continues dans un *sous-ensemble* de l'espace des états, ce qui sera important pour que la définition soit cohérente, comme nous discuterons plus loin.

De plus, nous utilisons la terminologie « observable » au sens de la mécanique classique. En mécanique quantique, les observables sont des opérateurs linéaires (généralement auto-adjoints) agissant sur des espaces de fonctions (par exemple, les fonctions d'onde).

**Exemple 3.13.** La position, la vitesse, l'énergie, la pression et la température sont des exemples d'observables en physique. Les fonctions $f_1(x_1, ..., x_N) = x_1$, $f_2(x_1, ..., x_N) = x_1^2 + x_N \cos(x_5 + x_9)$ ou une moyenne empirique $f_3(x_1, ..., x_N) = \sum_{i=1}^{N} x_i/N$ sont aussi des observables. Il s'ensuit qu'une observable peut à la fois représenter un aspect microscopique (ex. $f_1$) d'un système qu'un aspect macroscopique (ex. $f_3$), et toutes les échelles intermédiaires (ex., du type de $f_2$, où un sous-ensemble des états est impliqué). Une discussion détaillée sur la notion d'observable est présente dans la Réf. [539]. ■

Se concentrer sur les fonctions des états demande déjà d'introduire certains prérequis techniques subtils. En effet, il faut généralement porter une attention particulière à la définition de l'ensemble des observables, en tant qu'espace de fonctions, sans quoi les opérations sur les observables sont mal définies.

**Définition 3.14.** L'*espace des observables* $\mathscr{O}$ forme une algèbre de Banach commutative sur $\mathbb{C}$ [annexe A.5].

Dans l'article original de Koopman [317], l'espace des observables forme plutôt un espace de Hilbert, c'est-à-dire que l'espace est aussi muni d'un produit scalaire. Dans cette thèse, ajouter un produit scalaire à l'espace des observables ne sera pas nécessaire.

### Opérateur de Koopman

L'objectif est désormais d'étudier l'évolution temporelle des observables, de $f(\boldsymbol{x}(0))$ à $f(\boldsymbol{x}(t))$. Il suffit essentiellement de remarquer que $f(\boldsymbol{x}(t)) = f(\phi_t(\boldsymbol{x}(0)))$ et il apparaît donc une composition entre $f$ et $\phi_t$. C'est précisément ce qui définit l'action de l'opérateur de Koopman.

**Définition 3.15.** Soit un système dynamique $(\mathscr{X}, \phi)$ et une observable $f : \mathscr{X} \to \mathbb{C}$ appartenant à l'espace des observables $\mathscr{O}$. L'*opérateur de Koopman* est une fonction

$$\begin{aligned} K_\phi : \mathscr{T} \times \mathscr{O} &\to \mathscr{O} \\ (t, f) &\mapsto K_{\phi_t}[f] := K_\phi(t, f), \end{aligned} \tag{3.8}$$

telle que

$$K_{\phi_t}[f](\boldsymbol{x}) = f(\phi_t(\boldsymbol{x})), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathscr{X}. \tag{3.9}$$

En d'autres termes, l'opérateur de Koopman est un opérateur de composition $K_{\phi_t}[f] = f \circ \phi_t$.

**Remarque 3.16.** Comme l'espace des observables n'a pas de produit scalaire, nous n'avons pas la notion d'adjoint à l'opérateur de Koopman, qui n'est pas utilisée dans la thèse. En travaillant sur les espaces de Hilbert, plusieurs ouvrages introduisent aussi l'opérateur adjoint de l'opérateur de Koopman, qui est appelé l'opérateur de Perron-Frobenius [344, p.212]. ■

En toute généralité, avec une structure algébrique arbitraire pour $\mathscr{X}$, il n'est pas garanti que l'opérateur de Koopman $K_{\phi_t}$ contienne toute l'information sur le flot $\phi_t$. D'après la référence [164, théorème 4.13, p.55], il suffit que $\mathscr{X}$ soit compact pour qu'il n'y ait pas de perte d'information en analysant l'opérateur de Koopman au lieu du flot. Grossièrement, cela veut dire que la connaissance de l'évolution des observables détermine implicitement la dynamique des états et vice-versa.

Dans ce contexte, le prochain lemme et son corollaire montrent que l'opérateur de Koopman hérite des mêmes propriétés que le flot.

**Lemme 3.17.** *Si $(\mathscr{T}, +)$ est un groupe commutatif pour les temps $t$, alors l'opérateur de Koopman (3.8) définit l'action de ce groupe sur l'espace des observables $\mathscr{O}$ et possède alors les propriétés suivantes pour tout $f \in \mathscr{O}$ et $s, t \in \mathscr{T}$ : $K_{\phi_0}[f] = f$ et $K_{\phi_t} \circ K_{\phi_s}[f] = K_{\phi_{t+s}}[f]$.*

*Démonstration.* La preuve découle directement des propriétés du flot [définition 3.1] et de l'opérateur de Koopman [définition 3.15]. D'une part, $\forall \boldsymbol{x} \in \mathscr{X}$ et $f \in \mathscr{O}$, $K_{\phi_0}[f](\boldsymbol{x}) = f(\phi_0(\boldsymbol{x})) = f(\boldsymbol{x})$. D'autre part, $K_{\phi_t} \circ K_{\phi_s}[f] = K_{\phi_t}[K_{\phi_s}[f]] = K_{\phi_t}[f \circ \phi_s] = f \circ \phi_s \circ \phi_t = f \circ \phi_{s+t} = K_{\phi_{t+s}}[f]$. □

**Corollaire 3.18.** *Si $(\mathscr{T}, +)$ forme un groupe commutatif pour les temps $t$, alors la famille d'opérateurs de Koopman $(K_{\phi_t})_{t\in\mathscr{T}}$ forme un groupe commutatif avec la composition de fonctions $\circ$.*

*Démonstration.* La preuve découle directement des lemmes 3.3 et 3.17. □

Il est toutefois plus utile pour la suite de travailler avec les semi-groupes fortement continus à un paramètre [165]. En se basant sur les précédents résultats, nous définissons le semi-groupe fortement continu spécifique à l'opérateur de Koopman sur l'espace des observables $\mathscr{O}$.

**Définition 3.19.** La famille $(K_{\phi_t})_{t\geq 0}$ d'opérateurs de Koopman (bornés[2]) sur l'algèbre de Banach $\mathscr{O}$ [annexe A.5] est un *semi-groupe fortement continu* si, pour tout $s, t \geq 0$ et $f \in \mathscr{O}$,

1. $K_{\phi_0}[f] = f$ ;
2. $K_{\phi_t} \circ K_{\phi_s}[f] = K_{\phi_{t+s}}[f]$ ;
3. $\lim_{t\to 0^+} \|K_{\phi_t} f - f\|_{\mathscr{O}} = 0$ .

L'opérateur de Koopman est donc l'équivalent du flot pour l'évolution temporelle des observables du système dynamique et représente en quelque sorte sa généralisation. En effet, considérons que l'opérateur de Koopman s'applique également aux *observables vectorielles* $\boldsymbol{f} : \mathscr{S} \subset \mathscr{X} \to \mathbb{C}^N$ telles que $K_{\phi_t}[\boldsymbol{f}](\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\phi_t(\boldsymbol{x}))$. Pour l'observable vectorielle identité $\mathrm{id} : \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}$, il se trouve que l'opérateur de Koopman est directement le flot : $K_{\phi_t}[\mathrm{id}] = \phi_t$.

Cependant, l'opérateur de Koopman a une propriété cruciale qui le distingue du flot, c'est un opérateur linéaire. En effet, c'est une conséquence de sa définition et de la distributivité à droite de la composition :

$$K_{\phi_t}\left[a\, f + b\, g\right] = \left[a\, f + b\, g\right] \circ \phi_t = a\, f \circ \phi_t + b\, g \circ \phi_t = a\, K_{\phi_t}\left[f\right] + b\, K_{\phi_t}\left[g\right]. \tag{3.10}$$

Ainsi, même si $\phi_t$ est non linéaire, $K_{\phi_t}$ est linéaire et cela ouvre la voie à l'analyse spectrale.

### Générateur de Koopman

Un autre opérateur linéaire relié à l'opérateur de Koopman sera davantage utilisé dans la thèse, soit le générateur infinitésimal du semi-groupe de la définition 3.19. C'est la raison pour laquelle nous avons défini l'espace des observables comme une algèbre de Banach, qui garantit l'existence de limites dans l'espace [annexe A.5]. En effet, pour un espace de Banach, le théorème de Hille-Yosida donne les conditions nécessaires et suffisantes pour avoir un générateur infinitésimal dans les semi-groupes fortement continus. Nous renvoyons le lecteur à la version générale du théorème par Feller, Miyadera et Phillips présentée à la Réf. [165, p.77].

2. L'opérateur est borné s'il existe une constante $C > 0$ telle que $\|K_{\phi_t} f\|_{\mathscr{O}} \leq C\|f\|_{\mathscr{O}}$. Voir l'annexe A.5 pour une définition de la norme $\|\cdot\|_{\mathscr{O}}$.

Tout comme le champ vectoriel $\boldsymbol{F}$ pour le flot, le générateur $\mathcal{K}$ pour l'opérateur de Koopman se définit comme suit.

**Définition 3.20.** Le générateur infinitésimal $\mathcal{K} : \mathscr{D}(\mathcal{K}) \subset \mathscr{O} \to \mathscr{O}$ de l'opérateur de Koopman $K_\phi$ est

$$\mathcal{K}[f] = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{K_\phi(\varepsilon, f) - f}{\varepsilon} \,, \tag{3.11}$$

où $f \in \mathscr{D}(\mathcal{K})$ et $\mathcal{K}$ sera appelé le *générateur de Koopman.*

**Remarque 3.21.** Le domaine de l'opérateur $\mathscr{D}(\mathcal{K})$ est l'ensemble des observables $f \in \mathscr{O}$ pour lesquelles la limite définissant $\mathcal{K}[f]$ existe dans $\mathscr{O}$. Certaines subtilités concernant le domaine sont discutés davantage à la remarque 3.22. ■

Le générateur de Koopman est donc la dérivée de Lie $\mathcal{L}_{\boldsymbol{F}}$ agissant sur des fonctions scalaires, soit une dérivée directionnelle le long du champ vectoriel $\boldsymbol{F}$ générant le flot $\phi$. Par ailleurs, une autre façon d'écrire le générateur sera encore plus utile dans la thèse.

Soit $f \in \mathscr{D}(\mathcal{K}) \subset \mathscr{O}$ et une solution $\boldsymbol{x}(t)$ pour $t \in \mathscr{T} \subset \mathbb{R}$ du problème aux conditions initiales (3.6-3.7). La trajectoire $\boldsymbol{x}$ induit une trajectoire pour l'observable $f$ dont la valeur est $f(\boldsymbol{x}(t))$ pour tout $t \in \mathscr{T}$. Par la définition de la dérivée et celle d'une trajectoire, la dérivée totale de $f(\boldsymbol{x}(t))$ par rapport au temps s'exprime comme

$$\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}(t))}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(\boldsymbol{x}(t+\varepsilon)) - f(\boldsymbol{x}(t))}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(\phi_{t+\varepsilon}(\boldsymbol{x}_0)) - f(\phi_t(\boldsymbol{x}_0))}{\varepsilon}.$$

Les propriétés du flot et de la composition de fonctions impliquent ensuite que

$$\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}(t))}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(\phi_\varepsilon(\phi_t(\boldsymbol{x}_0))) - f(\phi_t(\boldsymbol{x}_0))}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{(f \circ \phi_\varepsilon)(\phi_t(\boldsymbol{x}_0)) - f(\phi_t(\boldsymbol{x}_0))}{\varepsilon}.$$

La définition de l'opérateur de Koopman et le lemme 3.17 permet enfin d'exprimer la dérivée selon le générateur $\mathcal{K}$ :

$$\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}(t))}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{K_{\phi_\varepsilon}[f](\phi_t(\boldsymbol{x}_0)) - f(\phi_t(\boldsymbol{x}_0))}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{K_{\phi_\varepsilon}[f](\boldsymbol{x}(t)) - f(\boldsymbol{x}(t))}{\varepsilon} = \mathcal{K}[f](\boldsymbol{x}(t)) \,. \tag{3.12}$$

L'équation précédente montre que le générateur de l'opérateur de Koopman agit comme une dérivée totale par rapport au temps le long des trajectoires, soit

$$\mathcal{K} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \,. \tag{3.13}$$

De plus, plutôt que d'utiliser la définition de la dérivée, la dérivation en chaîne de $f(\boldsymbol{x}(t))$ donne

$$\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}(t))}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i} \frac{\mathrm{d}x_i(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i} F_i(\boldsymbol{x}(t)). \tag{3.14}$$

Par conséquent, la comparaison des équations (3.12) et (3.14) implique aussi que [3]

$$\mathcal{K} = \sum_{i=1}^{N} F_i(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} \,. \tag{3.15}$$

**Remarque 3.22.** L'identification du générateur de Koopman avec l'opérateur différentiel $\sum_{i=1}^{N} F_i(\boldsymbol{x})\, \partial/\partial x_i$ nécessite des observables suffisamment régulières pour justifier l'application de la règle de dérivation en chaîne. En particulier, si $\mathscr{O} = \mathscr{C}^1(\mathscr{X})$, les fonctions de classe $\mathscr{C}^2(\mathscr{X})$ forment un sous-espace de $\mathscr{O}$ sur lequel l'application de $\sum_{i=1}^{N} F_i(\boldsymbol{x})\, \partial/\partial x_i$ est bien définie. En effet, si $f \in \mathscr{C}^2(\mathscr{X})$ et $F_1, ..., F_N \in \mathscr{C}^1(\mathscr{X})$, alors $\partial f/\partial x_i$ est de classe $\mathscr{C}^1(\mathscr{X})$ pour tout $i$ et $\sum_{i=1}^{N} (\partial f/\partial x_i) F_i$ est bien de classe $\mathscr{C}^1(\mathscr{X})$. Ceci montre donc que l'opérateur différentiel (3.15) envoie bien les fonctions du sous-espace $\mathscr{C}^2(\mathscr{X})$ dans $\mathscr{O}$.

Étant donné un problème aux conditions initiales avec un champ vectoriel $\boldsymbol{F}$ donné, un opérateur différentiel se définit directement via l'équation (3.15) sans avoir à discuter de s'il génère un semi-groupe fortement continu ou non. Dans ce contexte, nous appellerons tout de même l'opérateur de l'équation (3.15), le générateur de Koopman. ■

L'équation (3.12) révèle aussi que la dynamique de l'observable $f$ satisfait l'équation *linéaire*

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \mathcal{K}[f] \,, \tag{3.16}$$

et c'est en ce sens que nous avons parlé de la linéarisation basée sur la théorie de Koopman. La solution s'écrit ainsi formellement

$$f(\boldsymbol{x}(t)) = e^{t\mathcal{K}} f(\boldsymbol{x}(0)) \tag{3.17}$$

et par conséquent, il en découle une autre représentation de l'opérateur de Koopman [4], soit

$$K_{\phi_t} = e^{t\mathcal{K}}. \tag{3.18}$$

La figure 3.1 illustre le changement de perspective en termes d'opérateurs pour l'étude d'un système dynamique.

Puisque $\mathcal{K}$ est un opérateur différentiel linéaire, il existe alors une représentation matricielle de celui-ci. Cependant, c'est probablement ici que le prix à payer pour avoir une représentation linéaire du système dynamique se voit le mieux : il n'existe généralement pas de représentation matricielle finie du générateur de Koopman. Donnons toutefois deux exemples simples où une telle représentation finie est possible.

3. Une autre démarche utilisant le théorème des accroissements finis (« mean value theorem ») et d'autres hypothèses est aussi fournie dans le livre de Lasota [344, p.210].

4. Dans le cas d'un système d'équations différentielles non autonome, nous verrons au chapitre 7 que cette dernière équation ne tient pas, mais qu'une solution formelle existe aussi via le développement de Magnus [380].

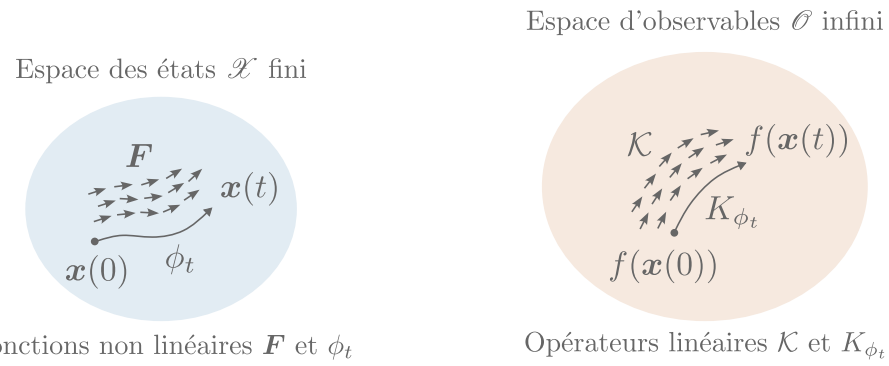



FIGURE 3.1 – Deux perspectives sur les systèmes dynamiques. (a) Perspective classique (« de Poincaré ») des systèmes dynamiques non linéaires de dimension finie. (b) Perspective de Koopman et Von Neumann, basée sur la mécanique quantique, où l'évolution des observables est étudiée avec des opérateurs linéaires, mais dans des espaces de fonctions de dimensions infinies.

**Exemple 3.23.** Soit le système dynamique $\dot{x}_1 = ax_1$, $\dot{x}_2 = b(x_2 - x_1^2)$ et les observables $f_1, f_2, f_3 \in \mathscr{O}$ tels que $y_1 := f_1(x_1, x_2) = x_1, y_2 := f_2(x_1, x_2) = x_2$ et $y_3 := f_3(x_1, x_2) = x_1^2$. L'équation (3.15) implique que le générateur est

$$\mathcal{K} = ax_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + b(x_2 - x_1^2) \frac{\partial}{\partial x_2} \,. \tag{3.19}$$

Il se trouve que ce dernier générateur a une représentation matricielle finie dans la base choisie. En effet, dans ce cas, en augmentant la dimension du système de deux équations à trois équations, le système devient linéaire :

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= \dot{x}_1 = ax_1 = ay_1 \\ \dot{y}_2 &= \dot{x}_2 = b(x_2 - x_1^2) = b(y_2 - y_3) \\ \dot{y}_3 &= 2x_1\dot{x}_1 = 2ax_1^2 = 2ay_3. \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & -b \\ 0 & 0 & 2a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} ,$$

où la matrice s'associe donc directement au générateur de Koopman (la dérivée totale). Cet exemple se généralise aisément pour une dynamique de la forme $\dot{x}_1 = ax_1, \dot{x}_2 = b[x_2 - P(x_1)]$ où $P$ est un polynôme [87, 89]. ■

Malheureusement, il n'est pas toujours aussi simple de choisir des observables qui mènent à un système linéaire fini.

**Exemple 3.24.** Essayons de suivre la démarche du dernier exemple avec la dynamique d'une forme plus simple, soit $\dot{x} = x^2$. Le générateur de Koopman est alors

$$\mathcal{K} = x^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \,. \tag{3.20}$$

Puisque le générateur est polynomial, il paraît logique de considérer les observables monomiaux $y_1 = f_1(x) = x$ et $y_2 = f_2(x) = x^2$. L'évolution temporelle des observables satisfait

$$\dot{y}_1 = \dot{x} = x^2 = y_2 \,, \qquad \dot{y}_2 = 2x\dot{x} = 2x^3 = 2y_1^3 = 2y_1y_2 = 2y_2^{3/2} \,.$$

La première équation dépend linéairement de $y_2$, mais la deuxième équation demeure non linéaire, bien qu'elle soit fermée en termes des observables. Tentons d'ajouter l'observable $y_3 = f_3(x) = x^3$. Nous avons alors

$$\dot{y}_1 = y_2\,, \qquad \dot{y}_2 = 2y_3\,, \qquad \dot{y}_3 = 3x^2\dot{x} = 3x^4\,.$$

À chaque fois qu'une nouvelle observable est ajoutée avec un exposant $m$ de $x$ plus grand, il faut ajouter l'observable $x^{m+1}$ pour fermer le système d'équations en un système linéaire. Considérons donc une infinité d'observables telles que $y_m = x^m$, c'est-à-dire une base de fonctions monomiales $\{x, x^2, x^3, ...\}$. Nous avons alors le système linéaire de dimension infinie

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

et donc, c'est une matrice de dimension infinie qui représente le générateur de Koopman dans la base monomiale.

Est-ce qu'il existe un choix d'observables qui permettrait d'avoir un système de taille fini ? Il se trouve que pour ce système, une seule observable bien choisie, soit $y = f(x) = e^{-1/x}$ [exemple 3.33], est suffisante pour linéariser l'équation. Effectivement, il se trouve que

$$\dot{y} = -(-x^{-2})e^{-1/x}\dot{x} = x^{-2}e^{-1/x}(x^2) = y,$$

de sorte que le générateur est simplement l'identité. ■

Les exemples montrent bien l'importance de choisir adéquatement l'espace des observables. Dans le cas où une représentation matricielle finie est possible, les outils standards de la théorie spectrale en algèbre linéaire s'appliquent. Cependant, lorsque ce n'est pas le cas, il faut employer la théorie spectrale en analyse fonctionnelle, ce qui est un sujet plus subtil. Dans la prochaine section, une brève introduction à la théorie spectrale des opérateurs est présentée, de même que des résultats de base sur les propriétés spectrales du générateur de Koopman.

## 3.3 Propriétés spectrales du générateur de Koopman

Rappelons que pour une matrice $A$ diagonalisable de dimension $N \times N$ agissant sur $\mathbb{C}^N$, les $N$ valeurs propres sont les nombres complexes satisfaisant $\det(A - \lambda I) = 0$. L'ensemble des valeurs $\lambda$ est le spectre de la matrice et si $\kappa$ n'est pas une valeur propre, $A - \kappa I$ est inversible. La situation est plus délicate en analyse fonctionnelle [497], où il y a plusieurs types de spectres.

La prochaine partie présente ces différents types de spectres. Il convient toutefois de préciser que l'exposition qui suit n'est pas pleinement rigoureuse : elle emprunte plusieurs raccourcis afin de mettre en évidence quelques notions essentielles à la théorie spectrale des opérateurs.

### Résolvant et spectres

Le générateur de Koopman $\mathcal{K}$ est un opérateur linéaire agissant sur une algèbre de Banach $\mathscr{O}$. Au lieu d'une matrice $A - \lambda I$, l'opérateur $\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I}$ est considéré où $\mathcal{I}$ est l'opérateur identité sur $\mathscr{O}$. Si $\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I}$ possède un inverse, alors cet inverse,

$$R_\lambda(\mathcal{K}) = (\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I})^{-1}\,, \tag{3.21}$$

est appelé le *résolvant* de $\mathcal{K}$ au point $\lambda$. Ce dernier est au cœur de la définition des valeurs régulières d'un opérateur linéaire de même que son spectre.

**Définition 3.25.** Une *valeur régulière* $\lambda \in \mathbb{C}$ de $\mathcal{K} : \mathscr{D}(\mathcal{K}) \subset \mathscr{O} \to \mathscr{O}$ est telle que

(r1) $R_\lambda(\mathcal{K})$ existe ;

(r2) $R_\lambda(\mathcal{K})$ est borné ;

(r3) $R_\lambda(\mathcal{K})$ est défini sur un ensemble dense dans $\mathscr{O}$.

**Définition 3.26.** L'*ensemble résolvant* $\rho(\mathcal{K})$ est l'ensemble des valeurs régulières de $\mathcal{K}$ et le *spectre de l'opérateur* est $\sigma(\mathcal{K}) = \mathbb{C} \setminus \rho(\mathcal{K})$, soit le complément de l'ensemble résolvant.

Le spectre de l'opérateur est séparé en trois parties disjointes qui satisfont ou non certaines des propriétés des valeurs régulières [88, 323, 497, 649].

**Définition 3.27.** Le spectre de l'opérateur $\mathcal{K}$ s'écrit $\sigma(\mathcal{K}) = \sigma_{\mathrm{p}}(\mathcal{K}) \cup \sigma_{\mathrm{c}}(\mathcal{K}) \cup \sigma_{\mathrm{r}}(\mathcal{K})$ où

- le *spectre ponctuel* $\sigma_{\mathrm{p}}(\mathcal{K})$ est l'ensemble des valeurs de $\lambda$ telles que $R_\lambda(\mathcal{K})$ n'existe pas, c.-à-d. que (r1) n'est pas satisfaite. Les conditions (r2) et (r3) peuvent être satisfaites ou non. Une valeur $\lambda \in \sigma_{\mathrm{p}}(\mathcal{K})$ est alors appelée une valeur propre de $\mathcal{K}$. Autrement dit, pour une valeur propre $\lambda$, l'opérateur $\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I}$ est non injectif ;
- le *spectre continu* $\sigma_{\mathrm{c}}(\mathcal{K})$ est l'ensemble des valeurs de $\lambda$ telles que $R_\lambda(\mathcal{K})$ satisfait (r1) et (r3), mais pas (r2) : le résolvent n'est pas borné ;
- le *spectre résiduel* $\sigma_{\mathrm{r}}(\mathcal{K})$ est l'ensemble des valeurs de $\lambda$ telles que $R_\lambda(\mathcal{K})$ existe (satisfait (r1)), mais ne satisfait pas (r3). Il n'y a pas de restriction sur (r2).

Au sein du spectre ponctuel, il peut y avoir une partie discrète $\sigma_{\mathrm{disc}}(\mathcal{K})$, soit le spectre discret, qui désigne l'ensemble des valeurs propres isolées et de multiplicité finie. Ainsi, $\sigma_{\mathrm{disc}}(\mathcal{K}) \subset \sigma_{\mathrm{p}}(\mathcal{K})$ et le spectre discret est au plus dénombrable. Comme montré à l'exemple 3.28, le spectre ponctuel peut être non dénombrable, alors que $\sigma_{\mathrm{disc}}(\mathcal{K})$ est vide.

**Exemple 3.28.** Soit l'espace de Hilbert $\ell^2(\mathbb{N}_0) = \{\boldsymbol{x} = (x_0, x_1, x_2, \ldots) \,|\, \sum_{n=0}^{\infty} |x_n|^2 < \infty\}$ et l'opérateur de décalage arrière $B : \ell^2(\mathbb{N}_0) \to \ell^2(\mathbb{N}_0)$ agissant tel que

$$B(x_0, x_1, x_2, \ldots) = (x_1, x_2, x_3, \ldots)\,.$$

L'équation aux valeurs propres $B\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{v}$ avec $\boldsymbol{v} = (v_0, v_1, v_2, \ldots)$ implique $v_{n+1} = \lambda v_n$, $v_n = \lambda^n v_0$ pour tout $n \geq 0$ et donc, $\boldsymbol{v} = v_0(1,\, \lambda,\, \lambda^2, \lambda^3, \ldots)$. Ce vecteur appartient à $\ell^2(\mathbb{N}_0)$ si et seulement si $\sum_{n=0}^{\infty} |\lambda|^{2n} |v_0|^2 < \infty$, ce qui est valide pour $|\lambda| < 1$. Par conséquent, le spectre ponctuel est le disque ouvert unité :

$$\sigma_p(B) = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\lambda| < 1\}$$

Le spectre ponctuel de $B$ est donc indénombrable, mais aucune de ces valeurs propres n'est isolée dans le spectre et $\sigma_{\text{disc}}(B) = \varnothing$. ■

**Remarque 3.29.** Le livre de Yosida [649, p.209] contient d'autres exemples pour se familiariser aux trois types de spectres, le livre de Zeidler [654, p.371-372] présente une application en théorie de la diffusion en mécanique quantique et l'article [407, Sec. 11] de Mezić donne des exemples pertinents par rapport au spectre continu dans la théorie de Koopman. ■

La définition du spectre ponctuel conduit à l'équation aux valeurs propres associée au générateur de Koopman. En effet, si l'opérateur $\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I} : \mathscr{D}(\mathcal{K}) \subset \mathscr{O} \to \mathscr{O}$ n'est pas injectif, alors il existe deux observables distincts $\psi_1, \psi_2 \in \mathscr{D}(\mathcal{K})$ tels que $(\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I})[\psi_1] = (\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I})[\psi_2]$ avec $\psi_1 \neq \psi_2$. Ainsi, $(\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I})[\psi_1 - \psi_2] = 0$. Comme $\psi_1 - \psi_2 \neq 0$ et $\psi_1 - \psi_2 \in \mathscr{D}(\mathcal{K})$, le noyau de $\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I}$ est non trivial. Il existe donc une observable non nulle $\psi \in \mathscr{D}(\mathcal{K})$ telle que $(\mathcal{K} - \lambda\mathcal{I})[\psi] = 0$. Il en découle l'équation aux valeurs propres

$$\mathcal{K}[\psi] = \lambda\psi \tag{3.22}$$

où $\psi$ est une *fonction propre* de $\mathcal{K}$. Une fonction propre est donc une observable bien particulière : elle est telle que l'application du générateur ne la transforme que par un facteur d'échelle $\lambda$.

**Remarque 3.30.** La thèse n'étudie pas rigoureusement les propriétés spectrales des opérateurs au sens usuel de la théorie spectrale en analyse. En effet, l'espace fonctionnel exact ainsi que les propriétés analytiques des solutions de l'équation propre n'y sont généralement pas caractérisés en détail. Plusieurs « fonctions propres » introduites dans la thèse sont plutôt obtenues au niveau formel et leur régularité globale n'est pas étudiée. Celles-ci peuvent donc correspondre à des fonctions propres généralisées/formelles plutôt qu'à de véritables éléments de l'espace des observables considéré. Pour la suite, nous qualifierons tout de même de « fonction propre » une fonction $\psi$ satisfaisant l'équation (3.22). ■

Puisque le générateur de Koopman est une dérivée totale par rapport au temps, l'équation aux valeurs propres (3.22) s'écrit comme une équation différentielle ordinaire

$$\frac{\mathrm{d}\psi(\boldsymbol{x}(t))}{\mathrm{d}t} = \lambda\psi(\boldsymbol{x}(t))\,. \tag{3.23}$$

En supposant qu'il existe un ensemble de valeurs propres distinctes $\{\lambda_1, ..., \lambda_n\}$ et de fonctions propres linéairement indépendantes $\{\psi_1, ..., \psi_n\}$ avec $n < \infty$, l'évolution temporelle de chaque fonction propre satisfait

$$\psi_\mu(\boldsymbol{x}(t)) = e^{t\lambda_\mu}\psi_\mu(\boldsymbol{x}_0)\,, \quad \mu \in \{1, ..., n\}\,. \tag{3.24}$$

Puisque $\psi_\mu(\boldsymbol{x}(t)) = \psi_\mu(\phi_t(\boldsymbol{x}_0)) = K_{\phi_t}[\psi_\mu](\boldsymbol{x}_0)$, la dernière équation implique que les valeurs propres de l'opérateur de Koopman sont $e^{t\lambda_\mu}$, alors que les fonctions propres sont $\psi_1, ..., \psi_n$ tout comme pour le générateur.

Par ailleurs, c'est la partie réelle des valeurs propres qui détermine le comportement asymptotique des fonctions propres, ou au moins, de leur module.

**Lemme 3.31** (Adapté de Claveau, 2026 [126])**.** *Soit un problème aux conditions initiales [définition 3.9] et une fonction propre $\psi$ du générateur de Koopman associé de valeur propre $\lambda$. Pour toute condition initiale $\boldsymbol{x}_0 \in \mathscr{X}$ telle que $\psi(\boldsymbol{x}_0)$ est finie et non nulle :*

1. $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$ *implique que* $\lim_{t\to\infty} \psi(\boldsymbol{x}(t)) = 0$ *;*
2. $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$ *implique que* $\lim_{t\to\infty} |\psi(\boldsymbol{x}(t))| = \infty$ *;*
3. $\mathrm{Re}(\lambda) = 0$ *implique que* $|\psi(\boldsymbol{x}(t))| = |\psi(\boldsymbol{x}_0)|$ *pour tout* $t \in \mathbb{R}$*.*

*Démonstration.* C'est une conséquence directe de l'équation (3.24) et

$$\lim_{t\to\infty} \psi(\boldsymbol{x}(t)) = \lim_{t\to\infty} e^{\lambda t}\psi(\boldsymbol{x}_0) = \psi(\boldsymbol{x}_0) \lim_{t\to\infty} e^{\mathrm{Re}(\lambda)t} e^{i\mathrm{Im}(\lambda)t}\,. \tag{3.25}$$

□

Il s'avère que les fonctions propres $(\psi_\mu)_{\mu=1}^n$ forment une base d'observables générant un sous-espace invariant $\mathscr{I}$ de $\mathscr{O}$, soit un ensemble tel que si $f \in \mathscr{I}$, alors $\mathcal{K}[f] \in \mathscr{I}$. Autrement dit, une observable $f \in \mathscr{I}$ s'exprime comme une combinaison linéaire des fonctions propres et forme l'espace invariant

$$\mathscr{I} = \left\{ f \in \mathscr{O} \,\middle|\, f = \sum_{\mu=1}^{n} c_\mu \psi_\mu \;\text{ où }\; c_1, ..., c_n \in \mathbb{C} \right\}. \tag{3.26}$$

L'évolution temporelle des observables $f \in \mathscr{I}$ est alors entièrement déterminée par l'évolution indépendante de chacune des fonctions propres. En effet, par l'équation (3.24),

$$f(\boldsymbol{x}(t)) = \sum_{\mu=1}^{n} c_\mu e^{t\lambda_\mu}\psi_\mu(\boldsymbol{x}_0). \tag{3.27}$$

La possibilité d'avoir une telle expression de l'évolution de $f$ dans le temps étant donné les valeurs propres et les fonctions propres est l'une des beautés de travailler dans le cadre de la théorie de Koopman. Les fonctions propres du générateur de Koopman ont aussi la propriété de décrire le comportement du système autour de ses attracteurs via les concepts d'isochrones et d'isostables, pour lesquels nous suggérons les références [126, 395, 476].

Bien qu'elles soient informatives, ces propriétés spectrales ne sont pas données d'emblée. Heureusement, il y a plusieurs méthodes pour les découvrir.

### Calcul des fonctions propres

Les difficultés concernant l'étude des systèmes non linéaires sont principalement transférées, dans la perspective koopmanienne, à l'établissement des propriétés spectrales des opérateurs. En particulier, si elles existent pour un système dynamique donné, trouver les valeurs propres et les fonctions propres est un défi de taille en général. Il y a plusieurs méthodes numériques et analytiques pour y parvenir [91, 407, 468, 517] [chapitre 6]. Dans la suite, nous nous intéressons seulement aux méthodes analytiques. Par exemple, il est possible de

- trouver un ensemble d'observables tel que la représentation matricielle du générateur $\mathcal{K}$ est triangulaire supérieure. Les valeurs propres se trouvent alors sur la diagonale ;
- décomposer les fonctions propres en série de puissance ;
- utiliser des méthodes perturbatives pour le générateur ;
- poser un Ansatz sur la forme des fonctions propres ;
- identifier une algèbre de Lie associée au générateur et trouver des invariants conjoints ;
- trouver des symétries de Lie et générer de nouvelles fonctions propres avec celles connues.

Les trois dernières méthodes seront utilisées au chapitre 6. Revenons maintenant au premier exemple de la dernière section pour illustrer la première de ces méthodes.

**Exemple 3.32** (Suite de l'exemple 3.23)**.** En utilisant la base d'observables $\{x_1, x_2, x_1^2\}$, nous avons déjà montré que la représentation matricielle du générateur est finie et triangulaire supérieure. Il s'ensuit que le spectre est composé des valeurs propres $\lambda_1 = a$, $\lambda_2 = b$ et $\lambda_3 = 2a$. Pour obtenir les fonctions propres, nous les décomposons selon les éléments de la base telle que $\psi_\mu(\boldsymbol{x}) = c_1^\mu x_1 + c_2^\mu x_2 + c_3^\mu x_1^2$. Ainsi, ce sont les coefficients $(c_i^\mu)_{i,\mu}$ qui distinguent chaque fonction propre. Les équations aux valeurs propres sont

$$\mathcal{K}[c_1^\mu x_1 + c_2^\mu x_2 + c_3^\mu x_1^2] = \lambda_\mu [c_1^\mu x_1 + c_2^\mu x_2 + c_3^\mu x_1^2]$$

pour $\mu \in \{1, 2, 3\}$. En appliquant l'opérateur (3.19), nous obtenons le système d'équations

$$c_1^\mu (a - \lambda_\mu) = 0\,, \qquad 2c_3^\mu a - c_2^\mu b - \lambda_\mu c_3^\mu = 0\,, \qquad c_2^\mu (b - \lambda_\mu) = 0.$$

En considérant que $a \neq b$ et $2a \neq b$, les fonctions propres sont ainsi

$$\psi_1(\boldsymbol{x}) = x_1\,, \qquad \psi_2(\boldsymbol{x}) = x_2 + \frac{bx_1^2}{2a-b}\,, \qquad \psi_3(\boldsymbol{x}) = x_1^2.$$

Pour une condition initiale connue $\boldsymbol{x}_0$, l'évolution des fonctions propres du générateur est alors directement donnée par l'équation (3.24) :

$$\psi_1(\boldsymbol{x}(t)) = e^{at}\psi_1(\boldsymbol{x}_0), \quad \psi_2(\boldsymbol{x}(t)) = e^{bt}\psi_2(\boldsymbol{x}_0), \quad \psi_3(\boldsymbol{x}(t)) = e^{2at}\psi_3(\boldsymbol{x}_0)\,, \tag{3.28}$$

qui se combinent linéairement pour donner l'évolution de tout un ensemble invariant d'observables, selon les équations (3.26) et (3.27). ■

Dans ce dernier exemple, il est simple de calculer les propriétés spectrales pour obtenir la solution, puisqu'une base était déjà donnée et la matrice associée au générateur est triangulaire, finie et de basse dimension. Trouver une telle base est toutefois difficile, voire impossible, en général. Dans le prochain exemple, il est nécessaire de faire plus de travail pour trouver une base, même si le système et cette base sont de dimension 1. Pour ce faire, la méthode du développement en série de puissance de la fonction propre est utilisée.

**Exemple 3.33.** [Suite de l'exemple 3.24] Comment savoir que l'observable $e^{-1/x}$ est la bonne pour la dynamique $\dot{x} = x^2$ ? Le problème aux valeurs propres s'écrit

$$\mathcal{K}[\psi](x) = x^2\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \lambda\psi(x)\,. \tag{3.29}$$

La substitution de la série de Laurent de la fonction propre $\psi(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} c_i\, x^i$ dans l'équation aux valeurs propres implique

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} i c_i\, x^{i+1} = \lambda \sum_{i=-\infty}^{\infty} c_i\, x^i.$$

Le changement d'indice $i = j + 1$ et la réassignation de $j$ à $i$ pour le côté droit de l'équation donne

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} i\, c_i\, x^{i+1} = \lambda \sum_{i=-\infty}^{\infty} c_{i+1}\, x^{i+1},$$

ce qui conduit à l'équation de récurrence $\lambda\, c_{i+1} = i\, c_i$. Pour $i = 0$, nous obtenons $c_1 = 0$, puis $c_2 = c_1 = 0$ pour $i = 1$ et ainsi de suite. Par conséquent, pour tout $i > 0$, $c_i = 0$ et

$$\psi(x) = \sum_{i=-\infty}^{0} c_i\, x^i = \sum_{i=0}^{\infty} c_{-i} \left(\frac{1}{x}\right)^i. \tag{3.30}$$

Il suffit alors de résoudre l'équation de récurrence pour les valeurs négatives de $i$ par induction. Pour $i = -1$, l'équation de récurrence donne $c_0 = -\lambda^{-1}c_{-1}$ de sorte que $c_{-1} = -\lambda c_0$. Pour $i = -2$, $c_{-2} = \lambda^2 c_0/2$. Faisons l'hypothèse inductive que

$$c_{-k} = \frac{c_0(-\lambda)^k}{k!}$$

pour $k > 0$ est vrai. Pour $i = -(k+1)$ dans $\lambda\, c_{i+1} = i\, c_i$, l'équation de récurrence est

$$\lambda\, c_{-k} = -(k+1)c_{-(k+1)} \quad \Rightarrow \quad c_{-(k+1)} = \frac{-\lambda c_{-k}}{k+1}\,.$$

Par l'hypothèse inductive, il s'ensuit que

$$c_{-(k+1)} = \frac{-\lambda}{k+1}\frac{c_0(-\lambda)^k}{k!} = \frac{c_0(-\lambda)^{k+1}}{(k+1)!}$$

et alors, l'hypothèse tient pour $k+1$, ce qui termine la preuve par induction. La substitution des coefficients dans l'expression de la fonction propre donne finalement

$$\psi_{c_0,\lambda}(x) := \psi(x) = c_0 \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}\left(\frac{-\lambda}{x}\right)^i = c_0\, e^{-\lambda/x}\,. \tag{3.31}$$

■

Le dernier exemple illustre comment l'observable attendue $\psi_1(x) = e^{-1/x}$, une fonction propre de valeur propre 1, apparaît à un facteur d'échelle et à un exposant près dans la démarche générale. Cette observation s'interprète comme une conséquence directe du prochain lemme, qui montre comment le produit et la combinaison linéaire de fonctions propres peuvent donner d'autres formes de fonctions propres. En fait, dès qu'il existe une fonction propre, il en existe une famille infinie associée [394], ce qui explique notre notation $\psi_{c_0,\lambda}$ dans le dernier exemple.

**Lemme 3.34.** *Soient les fonctions propres linéairement indépendantes $\psi_1, \psi_2$ de valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2$ de $\mathcal{K}$ et $a, b, c, d \in \mathbb{C}$.*

1. *Le produit $\psi_1^a\, \psi_2^b$ est une fonction propre formelle de $\mathcal{K}$ de valeur propre $a\lambda_1 + b\lambda_2$.*
2. *Si $\lambda_1 = \lambda_2 =: \Lambda$, alors $c\psi_1 + d\psi_2$ est une fonction propre de $\mathcal{K}$ de valeur propre $\Lambda$.*
3. *Si $\lambda_j \in \mathbb{R}$ et $\mathcal{K}$ est réel*[5]*, $\mathrm{Re}[\psi_j]$ et $\mathrm{Im}[\psi_j]$ sont des fonctions propres de $\mathcal{K}$ pour $j \in \{1, 2\}$.*

**Remarque 3.35.** Ce dernier lemme est correct formellement, mais sa validité dépend encore une fois du choix précis de l'espace d'observables auquel appartiennent $\psi_1$ et $\psi_2$. Le fait que les observables forment une algèbre de Banach garantit la stabilité par addition et multiplication, mais pas nécessairement par puissances complexes ou réelles non entières. Par exemple, si l'espace d'observables est $\mathscr{C}^1(\mathbb{R})$ et $\psi(x) = x$, alors $\psi \in \mathscr{C}^1(\mathbb{R})$, mais $\psi^{1/2}(x) = \sqrt{x}$ n'est pas définie sur $\mathbb{R}$, tandis que $|x|^{1/2}$ n'est pas de classe $\mathscr{C}^1$. Ainsi, même si $\psi_1$ et $\psi_2$ sont des fonctions propres, le produit $\psi_1^a\psi_2^b$ peut ne plus appartenir à l'espace d'observables et donc ne plus définir une fonction propre de $\mathcal{K}$ au sens strict. ■

Donnons désormais un dernier exemple pour une dynamique sur un graphe où nous ne disposons pas d'une forme fermée pour les fonctions propres en général, mais tout de même de la forme exacte des valeurs propres.

5. C'est-à-dire que le générateur envoie une fonction réelle vers une fonction réelle. C'est le cas si le champ vectoriel de la dynamique associée est réelle.

**Exemple 3.36.** En écologie, le modèle de Lotka-Volterra [370, 610] décrit la dynamique de populations à l'aide des équations différentielles ordinaires

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = r_i x_i + \sum_{j=1}^{N} x_i\, A_{ij}\, x_j, \quad i \in \{1, ..., N\},$$

où $x_i$ décrit la taille de la population $i$, $r_i$ est son taux de croissance intrinsèque et $A = (A_{ij})_{i,j=1}^{N}$ est une matrice réelle décrivant la force des interactions de la population $j$ à la population $i$. Le générateur de Koopman pour ce modèle est

$$\mathcal{K} = \sum_{i=1}^{N} r_i x_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{i,j=1}^{N} x_i A_{ij} x_j \frac{\partial}{\partial x_i}. \tag{3.32}$$

Sur la base monomiale standard $x^{\boldsymbol{\mu}} := x_1^{\mu_1} \cdots x_N^{\mu_N}$ où $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{N}^N$, l'application de $\mathcal{K}$ s'écrit

$$\mathcal{K}[x^{\boldsymbol{\mu}}] = \sum_{\boldsymbol{\nu} \in \mathbb{N}^N} \mathcal{K}_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}}\, x^{\boldsymbol{\nu}} \quad \text{avec} \quad \mathcal{K}_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}} = \delta_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}} \sum_{i=1}^{N} \mu_i r_i + \sum_{i,j=1}^{N} \mu_i A_{ij} \delta_{\boldsymbol{\nu},\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{e}_j}\,. \tag{3.33}$$

En ordonnant les compositions en ordre croissant selon le degré total d'abord puis selon l'ordre lexicographique, une représentation matricielle de $\mathcal{K}$ est obtenue, soit la matrice infinie $(\mathcal{K}_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}})_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}}$. En inspectant l'équation (3.33), cette matrice infinie est triangulaire supérieure et les éléments diagonaux sont donnés, pour différents $\boldsymbol{\mu}$, par $\sum_{i=1}^{N} \mu_i r_i$ (dépendant uniquement des taux de croissance intrinsèques), alors que les éléments hors-diagonaux ne dépendent que de la matrice d'interaction $A$. Les valeurs propres sont donc

$$\lambda_{\boldsymbol{\mu}} = \boldsymbol{r}^\top \boldsymbol{\mu}, \qquad \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{N}^N\,. \tag{3.34}$$

Bien que les valeurs propres soient indépendantes des interactions entre les populations, cela ne signifie pas que la linéarisation a découplé le système : les fonctions propres de l'opérateur dépendront des interactions.

Pour l'illustrer simplement, considérons le cas de $N = 2$ avec $A_{11} = A_{22} = 0$. La base monomiale contient toutes les fonctions de la forme $x_1^{\mu_1} x_2^{\mu_2}$ où les $\mu_1$ et $\mu_2$ sont des entiers naturels. La base contient donc les éléments du vecteur $(1,\, x_1,\, x_2,\, x_1^2,\, x_1x_2,\, x_2^2,\, x_1^3,\, x_1^2x_2,\, x_1x_2^2,\, x_2^3,\, ...)^\top$. Dans ce cas, l'application du générateur aux observables implique

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(x_1^{\mu_1} x_2^{\mu_2}) = \mathcal{K}[x_1^{\mu_1} x_2^{\mu_2}] = (\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2) x_1^{\mu_1} x_2^{\mu_2} + \mu_1 A_{12} x_1^{\mu_1+1} x_2^{\mu_2} + \mu_2 A_{21} x_1^{\mu_1} x_2^{\mu_2+1},$$

ce qui donne un système linéaire de la forme

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & r_1 & 0 & 0 & A_{12} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & r_2 & A_{21} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 2r_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_1+r_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2r_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{3.35}$$

La matrice est triangulaire supérieure, ce qui donne directement les éléments du spectre du générateur $0, r_1, r_2, 2r_1, r_1 + r_2, 2r_2, ...$, conformément au cas général.

Pour trouver les fonctions propres, l'utilisation d'une décomposition sur la base monomiale

$$\psi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\gamma=0}^{\infty}\sum_{\delta=0}^{\infty} c_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} x_1^{\gamma} x_2^{\delta}$$

mène aux fonctions propres

$$\psi_{10}(\boldsymbol{x}) = x_1 - \frac{A_{12}}{r_2} x_1 x_2 + ..., \quad \psi_{01}(\boldsymbol{x}) = x_2 - \frac{A_{21}}{r_1} x_1 x_2 + ...$$

En $N$ dimensions, des calculs similaires donnent la fonction propre

$$\psi_{\boldsymbol{e}_i}(\boldsymbol{x}) = x_i - x_i \sum_{j=1}^{N} A_{ij} r_j^{-1} x_j + ...$$

Les fonctions propres dépendent donc explicitement de la matrice d'adjacence $A$ et des taux de croissance $r_1, ..., r_N$. ■

Nous pouvons toutefois aller plus loin que ce dernier exemple. La rédaction d'un article mené par Benjamin Claveau en collaboration avec l'auteur de cette thèse et les superviseurs est en cours. Cet article éclairera plusieurs autres aspects (p. ex., géométrique) des fonctions propres du générateur de Koopman. Entre autres, différentes fonctions propres sont associées à différentes classes de dynamiques sur des graphes, incluant la dynamique de Lotka-Volterra et les réseaux de neurones récurrents. Les premiers résultats sont exposés dans le mémoire de Benjamin Claveau [126]. Pour en donner un aperçu, revenons à l'exemple sur la dynamique de Lotka-Volterra.

**Exemple 3.37.** (Suite de l'exemple 3.36) Si la matrice d'interaction $A$ est de rang $\rho$, il s'avère que les monômes $\psi_\ell(\boldsymbol{x}) = x^{\boldsymbol{\mu}_\ell}$ pour tout $\ell \in \{\rho + 1, ..., N\}$ sont des fonctions propres de $\mathcal{K}$ avec une valeur propre $\boldsymbol{r}^\top \boldsymbol{\mu}_\ell$ où $\boldsymbol{\mu}_\ell = \boldsymbol{u}_\ell \in \mathbb{R}^N$, le $\ell$-ième vecteur singulier gauche de $A$. Ce résultat est inspiré du chapitre 4 de la thèse. ■

Les expressions des fonctions propres sont donc associées aux paramètres de la dynamique. Mais qu'en est-il de l'effet des propriétés connues des dynamiques, comme les points d'équilibre et les attracteurs, sur les fonctions propres ? La prochaine partie de la section montre comment les attracteurs contraignent fortement leur forme.

### Attracteurs et fonctions propres

Il existe un lien étroit entre les attracteurs des systèmes dynamiques et les domaines sur lesquels les fonctions propres du générateur de Koopman sont définies. En effet, les points d'équilibre sont des zéros ou des singularités des fonctions propres, ce qui contraint fortement leur forme

et les domaines sur lesquels elles sont différentiables. Un exemple pour une dynamique en une dimension illustre bien cette idée.

**Exemple 3.38.** Soit une dynamique à une dimension $\dot{x} = F(x)$ avec $x : \mathscr{T} \to \mathscr{X} \subset \mathbb{R}$. L'équation aux valeurs propres du générateur de Koopman est alors

$$\mathcal{K}[\psi](x) = F(x)\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \lambda\psi(x)\,.$$

La séparation de variables implique que

$$\psi_\lambda(x) = \exp\left(\lambda \int_a^x \frac{\mathrm{d}z}{F(z)}\right)$$

pour $a, x \in \mathscr{X}$. Il devient clair que si $F$ possède $d$ zéros, l'évaluation de l'intégrale se complique un peu, puisque l'intégrande possède $d$ singularités. Plus concrètement, considérons un champ vectoriel polynomial tel que

$$F(x) = \prod_{k=1}^{d}(x - x_k)\,,$$

où $x_1 < x_2 < ... < x_d$ sont des points d'équilibre distincts dans $\mathscr{X}$. Pour éviter d'avoir des pôles dans l'intégrande, il suffit de restreindre $x$ à l'intervalle ouvert $(x_i, x_{i+1})$ pour n'importe quelle paire $(i, i+1)$ avec $i \in \{1, ..., d-1\}$ [6]. Il s'ensuit que

$$\psi_\lambda(x) = \exp\left(\lambda \int_a^x \frac{\mathrm{d}z}{\prod_{k=1}^{d}(z - x_k)}\right)\,,$$

où $a, x \in (x_i, x_{i+1})$ et l'intégrale se solutionne en utilisant les fractions partielles. En effet,

$$\int_a^x \frac{\mathrm{d}z}{\prod_{k=1}^{d}(z - x_k)} = \sum_{k=1}^{d} c_k(x_1, ..., x_d)\ln(x - x_k) + C'\,,$$

où $C'$ est une constante d'intégration et les fonctions $c_1, ..., c_d$ sont rationnelles et évaluées aux points d'équilibres. Par conséquent, les fonctions propres du générateur de Koopman d'une dynamique unidimensionnelle au champ vectoriel polynomial s'écrivent comme

$$\psi_\lambda(x) = \exp\left(\lambda \sum_{k=1}^{d} c_k(x_1, ..., x_d)\ln(x - x_k) + C''\right) = C\left(\prod_{k=1}^{d}(x - x_k)^{c_k(x_1,...,x_d)}\right)^\lambda \tag{3.36}$$

où $C'' = \lambda C'$ et $C = e^{C''}$. Puisque $\lambda c_i(x_1, ..., x_d)$ n'est généralement pas un entier, la fonction propre n'est pas nécessairement un polynôme ou une fonction rationnelle et peut donc avoir une forme très spéciale généralement.

L'équation (3.36) montre aussi clairement que les points d'équilibre $x_1, ..., x_d$ sont des zéros ou des singularités des fonctions propres. À cet effet, un exemple avec des illustrations est donné à la Réf. [126, Exemple 35] pour la forme normale d'une bifurcation nœud-selle. ■

6. Une démarche similaire peut être faite pour les intervalles $(-\infty, x_1)$ et $(x_d, \infty)$.

Le dernier exemple montre pourquoi il est crucial de bien choisir le domaine considéré $\mathscr{S}$ pour les fonctions propres [définition 3.12] : cela permet de définir l'espace $\mathscr{O}$ avec des observables suffisamment régulières pour que l'application des opérateurs sur $\mathscr{O}$ (dont le générateur de Koopman) soit bien définie.

Ce n'est pas seulement pour les points d'équilibre stables que les fonctions propres sont nulles. En effet, pour un attracteur en général (par exemple, les cycles limites), le prochain résultat montre que la fonction propre doit être nulle en tout point de l'attracteur.

**Lemma 3.1** (Adapté de Claveau, 2026 [126]). *Soit un système dynamique comportant un attracteur $\mathscr{A} \subset \mathscr{X}$ avec un bassin d'attraction $\mathcal{B}_{\mathscr{A}}$*[7]*. Pour toute fonction propre $\psi$ du générateur de Koopman bien définie sur $\mathcal{B}_{\mathscr{A}} \cup \mathscr{A}$ et associée à une valeur propre $\lambda$ telle que $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$, $\psi(\boldsymbol{x}) = 0$ pour tout $\boldsymbol{x} \in \mathscr{A}$.*

Nous concluons maintenant la section par le sujet qui motivait en partie cette section, soit la linéarisation et les généralisations possibles à l'analyse de stabilité locale.

### Linéarisation et stabilité globale

Dans un système à plusieurs points d'équilibre isolés dans $\mathscr{X}$, le lien entre les points d'équilibre et les fonctions propres de $\mathcal{K}$ suggère qu'il est impossible d'avoir une représentation matricielle finie du générateur dans une base d'observables incluant les observables d'état $f_1(\boldsymbol{x}) = x_1 \in \mathscr{X}$, ... , $f_N(\boldsymbol{x}) = x_N \in \mathscr{X}$ (par exemple). Après tout, le théorème de Hartman-Grobman indique qu'il y a une représentation linéaire locale du système autour d'un seul point d'équilibre. Cependant, il s'avère que cette intuition pour les systèmes multistables n'est pas toujours correcte et il existe des contre-exemples [26]. La linéarisation est un sujet actif et délicat en théorie de Koopman.

À la connaissance de l'auteur, le premier résultat sur la linéarisation *globale* dans la perspective koopmanienne, où le théorème de Hartman-Grobman pour un point d'équilibre hyperbolique est étendu à tout le bassin d'attraction du point, a été obtenu par Lan et Mezić en 2013 [342]. Plus récemment, les résultats de Kvalheim et Sontag étendent aussi le théorème de Hartman-Grobman pour des points d'équilibre non hyperboliques, mais asymptotiquement stables [337]. Kvalheim et ses collaborateurs ont plusieurs articles d'intérêt à ce sujet [26, 335–337].

Plutôt que d'évaluer seulement la stabilité locale des points d'équilibre, la théorie de Koopman permet également de caractériser la stabilité globale de ceux-ci, comme le montre le prochain théorème.

**Théorème 3.39** (Adapté de Mauroy, Mezić, 2016 [394]). *Soit $\mathscr{X} \subset \mathbb{R}^N$ un ensemble connexe, positivement invariant*[8] *et compact. Considérons que le système $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$, où $\boldsymbol{x}(t) \in \mathscr{X}$ et*

7. L'ensemble des conditions initiales qui mènent à l'attracteur.
8. Un ensemble $\mathscr{X}$ est positivement invariant si $\phi_t(\mathscr{X}) \subset \mathscr{X}$ pour tout $t \geq 0$.

*$\boldsymbol{F} \in \mathscr{C}^2(\mathscr{X})$, admette un générateur de Koopman $\mathcal{K} : \mathscr{D}(\mathcal{K}) \subset \mathscr{O} \to \mathscr{O}$ pour $\mathscr{O} \subset \mathscr{C}^1(\mathscr{X})$ et un point d'équilibre $\boldsymbol{x}^* \in \mathscr{X}$. Supposons aussi que la matrice jacobienne $D\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*)$ possède $N$ valeurs propres distinctes dont les parties réelles sont strictement négatives. Alors,*

1. *le point d'équilibre $\boldsymbol{x}^*$ est globalement stable dans $\mathscr{X}$ si et seulement si $\mathcal{K}$ possède $N$ fonctions propres $\psi_{\lambda_1}, ..., \psi_{\lambda_N} \in \mathscr{C}^1(\mathscr{X})$ de valeurs propres distinctes respectives $\lambda_1, ..., \lambda_N$ telles que $\mathrm{Re}(\lambda_i) < 0$ et $\nabla\psi_{\lambda_i}(\boldsymbol{x}^*) \neq 0$ pour tout $i \in \{1, ..., N\}$ ;*
2. *les valeurs propres $\lambda_1, ..., \lambda_N$ correspondent exactement aux valeurs propres de $D\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*)$.*

Ainsi, le résultat fournit un analogue global du critère classique de stabilité locale d'un point d'équilibre. À l'échelle locale, la stabilité est déterminée par les $N$ valeurs propres de la matrice jacobienne. À l'échelle globale, elle est décrite par $N$ fonctions propres de Koopman associées à ces mêmes valeurs propres et dont le support correspond au bassin d'attraction du point d'équilibre [394].

Une façon d'interpréter la perspective koopmanienne est que la dimension du système est agrandie de manière à obtenir des opérateurs linéaires. Certains parlent en effet de « lifting method ». Plutôt que d'agrandir la dimension du système dynamique initial, il est également pertinent de réduire sa dimension pour le simplifier. Cette approche est au cœur de la thèse (chapitre 4) et demeure compatible avec la théorie de Koopman comme expliqué aux chapitres 6 et 7 de même qu'à la prochaine section.

## 3.4 Généralités sur la réduction dimensionnelle

> The supreme goal of all theory is to make the irreducible basic elements as simple and as few as possible without having to surrender the adequate representation of a single datum of experience.
> - Albert Einstein [163]

La réduction dimensionnelle des dynamiques de haute dimension fournit des intuitions analytiques et numériques précieuses sur les systèmes complexes. Par exemple, elle permet de prédire l'apparition de phénomènes explosifs [326] ou d'identifier des observables pertinentes pour évaluer la contrôlabilité du système [414]. Le champ d'application des techniques de réduction dimensionnelle est donc très vaste, couvrant la physique statistique, la chimie, la finance et les neurosciences. Pour cette raison, les méthodes varient considérablement, tout comme la terminologie. Dans la littérature, nous lisons, par exemple, « dimension reduction » [132, 618], « coarse graining » [104, 115, 172], « reduced-order model » [89], « model reduction » [542], « lumping » [588, 623] [311, Section 2.4], « compression » [379], « pruning » [267], « dominance analysis » [191], « variable or state aggregation » [178], etc. De nombreuses techniques de réduction dimensionnelle potentiellement utiles restent peu exploitées dans l'étude des systèmes complexes, potentiellement en raison de cette grande diversité de terminologies. Dans

cette section, nous présenterons la réduction dimensionnelle pour les équations différentielles ordinaires, en partant des aspects plus généraux vers les techniques spécifiques à la thèse.

### Notation et définitions générales

Dans la thèse, nous considérons que le réseau du système est déjà connu (ou déterminé expérimentalement) et que la dynamique est décrite par un modèle théorique donné, alors que les séries temporelles (trajectoires) sont inconnues. Il s'agit d'un cadre favorable pour déterminer comment la structure de la matrice de poids $W$ (plus particulièrement, le rang effectif au chapitre 4) influence l'évolution de l'état du système dans son ensemble, à partir de conditions initiales arbitraires. En effet, aucune limite de notre analyse ne provient du nombre fini de séries temporelles observées ni de leur longueur finie.

De plus, la notation suivante sera utilisée pour décrire le modèle théorique, soit un système dynamique « complet » (non réduit) :

- $x \in \mathbb{R}^N$ est l'état du système ;
- $t \in [0, \infty)$ est le temps ;
- $\phi : [0, \infty) \times \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{R}^N$ est le flot ;
- $x : [0, \infty) \to \mathbb{R}^N$ est une trajectoire (notons l'abus de notation avec l'état) ;
- $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ est le champ vectoriel, considéré comme étant lisse ;
- $x_0 = x(0)$ est la condition initiale ;
- $\dot{x} = f(x)$ est la dynamique complète, écrite plus explicitement comme

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \vdots \\ \dot{x}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, ..., x_N) \\ \vdots \\ f_N(x_1, ..., x_N). \end{pmatrix}$$

En ce qui concerne la dynamique réduite, nous utilisons la notation suivante :

- $R : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{R}^n$ avec $n < N$ est appelée la fonction de réduction ou une observable vectorielle ;
- $R = (R_1, \ldots, R_n)$ où $R_\mu : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{R}$ est la $\mu$-ième observable ;
- $X = R(x) \in \mathbb{R}^n$ est un état du système réduit ;
- $\Phi : [0, \infty) \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ est le flot réduit ;
- $X = R \circ x : [0, \infty) \to \mathbb{R}^n$ est la trajectoire réduite (notons l'abus de notation avec l'état du système réduit) ;
- $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est le champ vectoriel réduit ;
- $X_0 = R(x_0) = (R \circ x)(0)$ est la condition initiale ;
- $\dot{X} = F(X)$ décrit la dynamique réduite.

La logique derrière cette notation est que les quantités dans l'espace de haute dimension sont écrites en lettres minuscules, tandis que les objets dans l'espace de plus basse dimension (par exemple, les observables) sont notés en lettres majuscules, à l'exception de $N$ et $n$ qui désignent respectivement la dimension du système complet et réduit. Les indices latins sont utilisés pour ce qui est associé à la dynamique complète (par exemple, $i, j, k \in \{1, ..., N\}$), tandis que les indices grecs sont utilisés pour la dynamique réduite (par exemple, $\mu, \nu, \tau \in \{1, ..., n\}$). Il est sous-entendu que les quantités sont définies dans des ouverts $\mathscr{X} \subset \mathbb{R}^N$ et $\mathscr{X}' \subset \mathbb{R}^n$.

Avec cette notation, nous définissons maintenant ce que nous entendons par réduction dimensionnelle exacte, basée sur la Réf. [588], mais en gardant la généralité sur les caractéristiques des champs vectoriels $f, F$ et de la fonction de réduction $R$.

**Définition 3.40.** La fonction $R : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{R}^n$ induit une *réduction dimensionnelle exacte* de la dynamique $\dot{x} = f(x)$ s'il existe un champ vectoriel $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ tel que, pour toute solution $x(t)$ de la dynamique, la trajectoire réduite $X = R \circ x : [0, \infty) \to \mathbb{R}^n$ obéit à $\dot{X} = F(X)$.

Le couple de fonctions $(R, F)$ caractérise ainsi la réduction dimensionnelle, dont l'objectif est de *fermer* l'équation différentielle pour $X$ en fonction de $X$ uniquement. La réduction dimensionnelle peut également être interprétée comme une relation de commutation particulière entre les champs vectoriels et les flots.

**Théorème 3.41.** *Les énoncés suivants sont équivalents :*

1. *la réduction dimensionnelle est exacte ;*
2. *l'équation de compatibilité*
$$\mathcal{K}[R] = J_R f = F \circ R \tag{3.37}$$
*est satisfaite*[9]*, où $\mathcal{K}$ est le générateur de Koopman et $J_R$, la matrice jacobienne de $R$ ;*
3. *le flot complet $\phi_t$ et le flot réduit $\Phi_t$ commutent avec $R$, de sorte que*
$$K_{\phi_t}[R] = R \circ \phi_t = \Phi_t \circ R\,, \tag{3.38}$$
*où $K_{\phi_t}$ est l'opérateur de Koopman.*

*Démonstration.*
(1. $\Leftarrow$ 2.) Par définition, $X = R \circ x$ et, par hypothèse, $J_R f = F \circ R$. Alors, la dérivée temporelle de $X$ (le générateur de l'opérateur de Koopman) est

$$\dot{X} = \frac{\mathrm{d}(R \circ x)}{\mathrm{d}t} = \mathcal{K}[R] \circ x = J_R f \circ x = F \circ R \circ x = F \circ X\,,$$

9. Par rapport à la notation, $\mathcal{K}[R]$ dénote l'application (la composition) du générateur sur l'observable, alors que $J_R f$ est le produit matriciel entre la matrice jacobienne et le champ vectoriel de la dynamique complète.

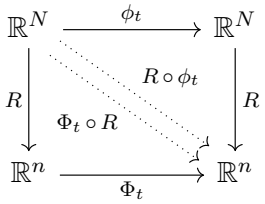
ce qui correspond à la définition 3.40 d'une réduction dimensionnelle exacte.
(1. $\Rightarrow$ 2.) De même, en utilisant à nouveau la dérivée temporelle de $X = R \circ x$, on obtient

$$\dot{X} = \mathcal{K}[R] \circ x = J_R f \circ x.$$

Mais puisque la réduction dimensionnelle est exacte, on a $\dot{X} = F \circ X = F \circ R \circ x$. Par comparaison, il suffit donc que $\mathcal{K}[R] = J_R f = F \circ R$.
(1. $\Leftrightarrow$ 3.) D'une part, la solution de $\dot{x} = f(x)$ est $x(t) = \phi_t(x(0))$, et l'évolution exacte de $X(t)$ est alors donnée par $X(t) = R \circ \phi_t \circ x(0)$. D'autre part, la solution de $\dot{X} = F(X)$ avec $X(0) = R(x(0))$ est $X(t) = \Phi_t(X(0)) = \Phi_t \circ R \circ x(0)$. La comparaison complète la preuve. □

**Remarque 3.42.** La possibilité d'avoir une réduction dimensionnelle exacte dépend alors fortement de la possibilité de trouver des observables telles que les équations du dernier théorème sont satisfaites. Comme pour la théorie de Koopman, la recherche d'observables est donc essentielle à la réduction dimensionnelle. Bien que la dimension du système dans une description koopmanienne explose, les observables d'intérêt dans une telle description (par exemple, les fonctions propres) peuvent être grandement utiles pour réduire la dimension. Comme mentionné précédemment, nous le montrerons aux chapitres 6 et 7. ■

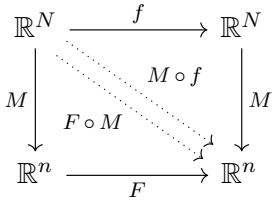
Puisque nous disposons de relations de commutation, il est naturel de les représenter à l'aide de diagrammes commutatifs. En particulier, l'énoncé 3 du théorème 3.41 indique que la réduction dimensionnelle est exacte s'il existe un diagramme commutatif tel que




(3.39)

Aux chapitres 6 et 7, la fonction $R$ sera non linéaire et nous aborderons alors la notion d'intégrabilité partielle. Cependant, dans la suite de ce chapitre et au chapitre 4, nous nous concentrons sur le cas où $R$ est linéaire, ce qui simplifie grandement l'analyse et donne accès aux outils de l'algèbre linéaire présentés aux chapitres 1 et 2.

Supposons donc que $X = R(x) = Mx$, où $M$ est une matrice $n \times N$, appelée matrice de réduction [583] (ou matrice d'agrégation [331, 623]). Alors, $J_R = M$ et la condition (3.37) de fermeture énonce que, pour une réduction dimensionnelle exacte, les champs vectoriels complet et réduit doivent commuter avec $M$ :




(3.40)

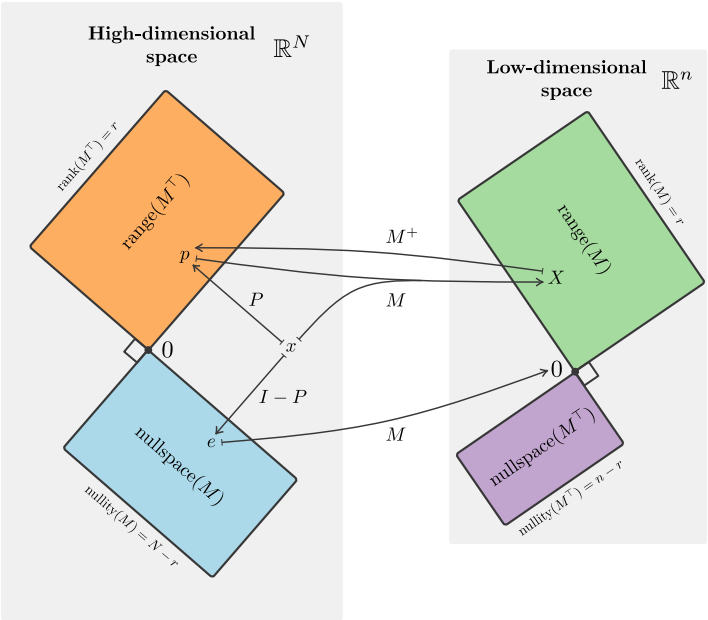



FIGURE 3.2 – Illustration de la réduction dimensionnelle avec une matrice de réduction $M$, son projecteur correspondant $P$ et ses sous-espaces vectoriels induits.

où un abus de notation est commis en utilisant le même symbole pour la matrice et pour la fonction linéaire $M : x \mapsto Mx$, qui sera réutilisé dans la thèse. Notons que ce schéma est lié aux notions de champs vectoriels $C^k$-équivalents et $C^k$-conjugués définies dans la Réf. [471, p.190 et p.191]. À la définition 3.44, la notion d'erreur d'alignement sera introduite et est directement définie à partir de l'équation de compatibilité $M \circ f = F \circ M$.

Étant donnée une matrice de réduction $M$, il existe toujours un projecteur

$$P = M^+ M \,, \tag{3.41}$$

où $M^+$ désigne la pseudo-inverse de Moore–Penrose de $M$. La réduction dimensionnelle peut être vue comme la projection des éléments $x$ de l'espace de grande dimension sur un espace de plus basse dimension dont les éléments sont notés $X$. Cette vision, ainsi que les quatre sous-espaces vectoriels induits par $M$, sont illustrés à la Fig. 3.2.

En général, il est loin d'être simple de résoudre les équations de compatibilité $M \circ f = F \circ M$ pour $F$ et $M$, même lorsque les fonctions $f$ et $F$ sont linéaires. En effet, considérons que celles-ci sont respectivement représentées par la matrice $W$ (par exemple, une matrice de poids [définition 2.8]) de dimension $N \times N$ et la matrice $\mathcal{W}$ de dimension $n \times n$. Alors, la condition $M \circ f = F \circ M$ prend la forme de l'équation de compatibilité [583]

$$MW = \mathcal{W}M \,, \tag{3.42}$$

qui constitue en réalité un système d'équations quadratiques couplées dans les éléments de $\mathcal{W}$ et de $M$, et qui ne peut pas toujours être résolu analytiquement. Cependant, pour un $M$ fixé, on peut trouver une matrice réduite $\mathcal{W}$ optimale et unique.

**Lemme 3.43** (Thibeault, Desrosiers, 2020 [583])**.** *Soient $M$ et $W$ de dimensions respectives $n \times N$ et $N \times N$, avec $n < N$. Alors, l'équation de compatibilité $\mathcal{W}M = MW$ admet une solution pour $\mathcal{W}$ si et seulement si*

$$MWM^+M = MW\,, \tag{3.43}$$

*où $M^+$ est la pseudo-inverse de Moore–Penrose de $M$. La solution générale est*

$$\mathcal{W} = MWM^+ + Y - YMM^+, \tag{3.44}$$

*où $Y$ est une matrice arbitraire de dimension $n \times n$. Si $\operatorname{rank} M = n$, alors l'équation de compatibilité admet au plus une seule solution, à savoir*

$$\mathcal{W} = MWM^+. \tag{3.45}$$

*Pour tout $M$, cette solution minimise $\|\mathcal{W}M - MW\|_F$ avec une erreur $\|MW(I - M^+M)\|_F$.*

*Démonstration.* D'après Penrose (1955) [469, Theorem 2], une condition nécessaire et suffisante pour que l'équation $AXB = C$ admette une solution est que $AA^+CB^+B = C$. La solution générale est alors $X = A^+CB^+ + Y - A^+AYBB^+$, où $Y$ est arbitraire. Poser $A = I$, $X = \mathcal{W}$, $B = M$ et $C = MW$ donne directement l'équation (3.44).

Si $\operatorname{rank} M = n$, alors les $n$ lignes de $M$ sont linéairement indépendantes, ce qui implique $MM^+ = I$ et donc,

$$\mathcal{W} = MWM^+ + Y - Y = MWM^+\,,$$

qui ne dépend plus de la matrice arbitraire $Y$. Il s'agit donc de la seule solution possible.

Enfin, il est connu, au moins depuis le théorème des moindres carrés de Penrose [470], que

$$\arg\min_{U \in \mathbb{R}^{k\times\ell}} \|UA - V\|_F = VA^+ \quad \text{et} \quad \min U \in \mathbb{R}^{k\times\ell} \|UA - V\|_F = \|V(I - A^+A)\|_F,$$

pour des matrices $V \in \mathbb{R}^{k\times m}$ et $A \in \mathbb{R}^{\ell\times m}$. En posant $A = M$, $U = \mathcal{W}$ et $V = MW$, on obtient que $\mathcal{W} = MWM^+$ minimise $\|\mathcal{W}M - MW\|_F$ avec une erreur $\|MW(I - M^+M)\|_F$. □

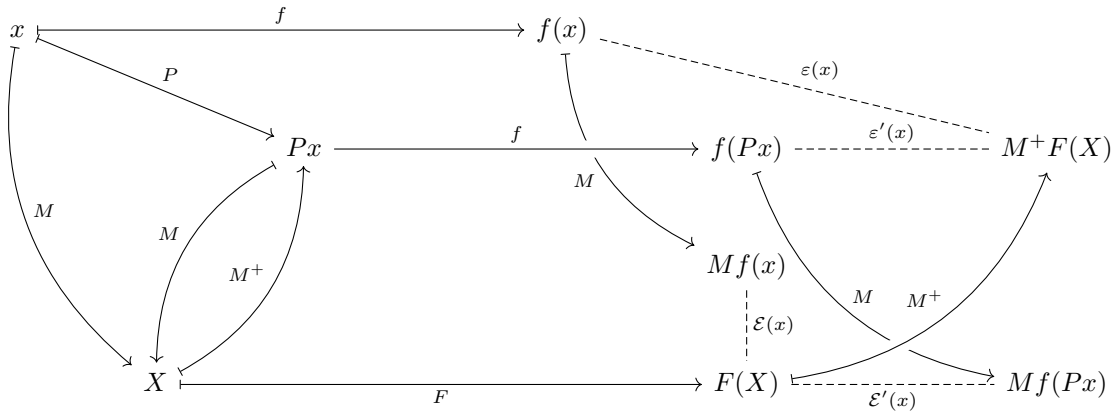
Les premiers résultats sur les équations de compatibilité remontent aux travaux de Wei et Kuo en 1969 [623] et ceux de Li et Rabitz dans les années 1980 et 1990 [352–354], en chimie. Pour une matrice $\mathcal{W}$ fixe et lorsque seul $M$ est inconnue, il faut remonter à beaucoup plus tôt, soit à Sylvester (1884) [570]. En effet, dans ce cas, les équations de compatibilité sont appelées des équations de Sylvester homogènes.

Dans la section suivante, nous présentons une méthode permettant de trouver un champ vectoriel réduit optimal $F$ à partir d'une matrice de réduction $M$, généralisant ainsi le résultat du lemme 3.43 et formalisant davantage les travaux antérieurs en chimie.

### Champ vectoriel optimal au sens des moindres carrés

Des systèmes dynamiques de plus basse dimension sont souvent obtenus à partir d'un problème d'optimisation. Dans un tel cas, une certaine erreur est minimisée sous un ensemble de contraintes [81], de manière à préserver certaines propriétés souhaitées du système original de haute dimension. Pour les systèmes dynamiques, une variable d'optimisation naturelle est le champ vectoriel réduit $F$ lui-même, choisi pour représenter approximativement le champ vectoriel complet $f$. Cependant, il n'est pas évident de comprendre comment les différentes erreurs sur les champs vectoriels sont reliées entre elles, et lesquelles se minimisent analytiquement.

Au cours du doctorat, nous avons conçu un schéma utile qui permet de clarifier cette question. En reprenant les définitions de la partie précédente, nous introduisons le diagramme suivant pour la réduction dimensionnelle des systèmes dynamiques :




(3.46)

où $P = M^+M$ et les lignes pointillées représentent les erreurs quadratiques moyennes (RMSE) entre les champs vectoriels adjacents, c'est-à-dire différentes erreurs d'alignement comme définies ci-dessous [voir également la Fig. 4.4 pour une illustration de $\mathcal{E}(x)$].

**Définition 3.44.** Soit le champ vectoriel complet $f$ dans $\mathbb{R}^N$, le champ vectoriel réduit $F$ dans $\mathbb{R}^n$ et $M$ la matrice de réduction de dimension $n \times N$. En un point $x \in \mathbb{R}^N$, l'*erreur d'alignement* ...

— ... dans $\mathbb{R}^N$ est la RMSE entre les champs vectoriels $f$ et $M^+ \circ F \circ M$, c'est-à-dire

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \| f(x) - M^+ F(Mx) \| \,; \tag{3.47}$$

— ... dans $\mathbb{R}^n$ est la RMSE entre le champ vectoriel $M \circ f$ et $F \circ M$, c'est-à-dire

$$\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \| Mf(x) - F(Mx) \| \,, \tag{3.48}$$

où $\| \, \|$ désigne la norme euclidienne.

En appliquant la définition des erreurs d'alignement au champ vectoriel complet projeté $f \circ P$ plutôt qu'à $f$ seulement, nous avons aussi défini

$$\varepsilon'(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \|f(Px) - M^+ F(Mx)\| \tag{3.49}$$

$$\mathcal{E}'(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \|Mf(Px) - F(Mx)\| \tag{3.50}$$

dans le diagramme 3.46. En principe, l'erreur d'alignement $\mathcal{E}(x)$ dans $\mathbb{R}^n$ doit être minimisée afin de se rapprocher le plus possible d'une réduction dimensionnelle exacte [définition 3.40, théorème 3.41 et diagramme 3.40], mais cette tâche est loin d'être simple. En revanche, l'erreur d'alignement $\varepsilon'(x)$ peut être directement minimisée par la méthode des moindres carrés, ce qui a pour conséquence que l'erreur d'alignement $\mathcal{E}'(x)$ dans $\mathbb{R}^n$ est exactement nulle, comme le montre le théorème suivant.

**Théorème 3.45.** *Soit le champ vectoriel complet $f$ dans $\mathbb{R}^N$, le champ vectoriel réduit $F$ dans $\mathbb{R}^n$, et la matrice de réduction $M$ de dimension $n \times N$. Le champ vectoriel de la dynamique réduite*

$$\dot{X} = Mf(M^+ X) \tag{3.51}$$

*est optimal au sens où il minimise l'erreur d'alignement $\varepsilon'(x)$ dans $\mathbb{R}^N$, c'est-à-dire,*

$$F^*(X) = \underset{\substack{F(X)\in\mathbb{R}^n \\ X=Mx}}{\arg\min} \|f(Px) - M^+ F(X)\| = Mf(M^+ X). \tag{3.52}$$

*Par conséquent, l'erreur d'alignement $\mathcal{E}'(x)$ dans $\mathbb{R}^n$ est nulle.*

*Démonstration.* Soit $v \in \mathbb{R}^k$ et $A \in \mathbb{R}^{k\times\ell}$. Alors, l'application de la méthode des moindres carrés (cas particulier de Penrose [470]) implique que

$$\underset{u\in\mathbb{R}^\ell}{\arg\min} \|v - Au\| = A^+ v. \tag{3.53}$$

En posant $A = M^+$, $u = F(X)$ et $v = f(Px) = f(M^+ Mx) = f(M^+ X)$, on obtient immédiatement le résultat. Puisque $F^*(X) = Mf(M^+ X)$ et que $Px = M^+ X$, on a évidemment $\|Mf(Px) - F^*(X)\| = 0$. □

**Remarque 3.46.**

— Lorsque l'on pose $n = N$, on peut s'attendre à ce que le champ vectoriel « réduit » $F$ soit, d'une certaine manière, équivalent au champ vectoriel complet. En effet, si $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ est un champ vectoriel $\mathscr{C}^1(\mathbb{R}^N)$, alors les champs vectoriels $f$ et $F = M \circ f \circ M^+ = M \circ f \circ M^{-1}$ sont $\mathscr{C}^1$-conjugués sur $\mathbb{R}^N$ [471, p. 191]. Cela découle directement de la forme même de $F$, où $M$ est un $\mathscr{C}^1$-difféomorphisme.

— En principe, il existe tout un éventail de fonctions de coût pouvant être utilisées pour le problème d'optimisation. D'autres contraintes et termes de régularisation pourraient être ajoutés afin de satisfaire les exigences du modélisateur. Il s'agit d'une approche à explorer encore davantage dans l'avenir pour obtenir des systèmes dynamiques réduits optimaux.

■

Malgré la simplicité du résultat, celui-ci ne semble pas avoir été énoncé et démontré avec la précédente généralité pour les systèmes dynamiques. Le champ vectoriel de l'équation (3.52) est connu au moins depuis 1989 par Li et Rabitz [353]. En effet, il y a de nombreux articles sur cette méthode dans cette dernière discipline de même qu'en mécanique des fluides [101, 353, 354, 504]. Plus particulièrement, nous y trouvons aussi une technique similaire qui s'applique aux séries temporelles, souvent appelée « projection de Galerkin » ou « méthode de Petrov–Galerkin » [23, 89, 504, 514]. Cette terminologie est toutefois variable et possède une histoire difficile à retracer [161, 206].

Le théorème 3.45 rappelle aussi le lemme 3.43, pour lequel nous avions la solution optimale $MWM^+$ de l'équation de compatibilité $MW = \mathcal{W}M$. En fait, nous disposons maintenant d'une solution optimale, impliquant un champ vectoriel non linéaire, $M \circ f \circ M^+$ pour l'équation de compatibilité $M \circ f = F \circ M$. En ce sens, le théorème 3.45 généralise le lemme 3.43.

Minimiser $\varepsilon'(x)$ n'en dit pas beaucoup sur l'erreur d'alignement $\mathcal{E}(x)$ qui nous intéresse. Cependant, à la sous-section 4.12.2, nous verrons que l'utilisation du champ vectoriel obtenu par la minimisation de $\varepsilon'(x)$ permet d'obtenir une borne supérieure sur $\mathcal{E}(x)$.

Pour terminer le chapitre, illustrons le dernier théorème en l'appliquant à l'un des modèles les plus influents en neurosciences, soit le modèle de Wilson–Cowan [117, 144, 455, 634] [171, Chap. 11].

**Exemple 3.47.** Soit un système de $N = N_E + N_I$ neurones (ou populations neuronales) comprenant $N_E$ neurones excitateurs et $N_I$ neurones inhibiteurs. Notons $E_e$ (resp. $I_i$) le taux de décharge moyenné dans le temps du $e$-ième neurone excitateur pour $e \in \mathcal{E} = \{1, \dots, N_E\}$ (resp. du $i$-ième neurone inhibiteur pour $i \in \mathcal{I} = \{N_E+1, \dots, N\}$). Le modèle de Wilson–Cowan [634] décrit l'évolution temporelle des taux de décharge par :

$$\dot{E}_e = -d_e E_e + (1 - aE_e)\ \mathcal{S}[b(\textstyle\sum_{e'=1}^{N_E} W_{ee'} E_{e'} + \sum_{i'=N_E+1}^{N} W_{ei'} I_{i'} - c_e)] \tag{3.54}$$

$$\dot{I}_i = -d_i I_i + (1 - aI_i)\ \mathcal{S}[b(\textstyle\sum_{e'=1}^{N_E} W_{ie'} E_{e'} + \sum_{i'=N_E+1}^{N} W_{ii'} I_{i'} - c_i)], \tag{3.55}$$

où $d_y$ est la constante de temps inverse et $a$ est relié à la période réfractaire. De plus, pour tout $i, i' \in \mathcal{I}$ et $e, e' \in \mathcal{E}$, nous avons $W_{ee'} \geq 0$, $W_{ie'} \geq 0$, $W_{ei'} \leq 0$, $W_{ii'} \leq 0$, et

$$\mathcal{S}[b(z - c)] = \frac{1}{1 + e^{-b(z-c)}} \tag{3.56}$$

est la fonction logistique, où $b$ règle la pente et $c$ sa valeur médiane. L'introduction de

$$(x_1, \ldots, x_N) := (E_1, \ldots, E_{N_E}, I_{N_E+1}, \ldots, I_N)^\top , \tag{3.57}$$

mène à une formulation plus condensée du modèle [455, Eq. (11)]

$$\dot{x}_j = -d_j x_j + (1 - a x_j)\, \mathcal{S}[b(\gamma\, y_j - c)], \quad \forall\, j \in \{1, \ldots, N\} , \tag{3.58}$$

où $y_j = \sum_{k=1}^{N} W_{jk} x_k$, et nous avons remplacé $W$ par $\gamma W$ afin d'introduire une constante de couplage globale $\gamma$. Notons que les variables excitatrices et inhibitrices n'ont pas à être étiquetées et ordonnées comme ci-dessus : la matrice de poids $W$ décrit simplement un réseau signé quelconque.

D'après le théorème 3.45, la dynamique réduite optimale est

$$\dot{X}_\mu = \sum_{\nu=1}^{n} \mathcal{D}_{\mu\nu} X_\nu + \sum_{j=1}^{N} M_{\mu j} (1 - a \textstyle\sum_{\nu=1}^{n} M^+_{j\nu} X_\nu)\, \mathcal{S}\left[b(\gamma \textstyle\sum_{\nu=1}^{n} \mathscr{W}_{j\nu} X_\nu - c)\right] , \tag{3.59}$$

où $\mathcal{D}_{\mu\nu} = -\sum_{j=1}^{N} M_{\mu j} d_j M^+_{j\nu}$, $\mathscr{W}_{j\nu} = \sum_{k=1}^{N} W_{jk} M^+_{k\nu}$ et la matrice de réduction $M$ demeure un choix libre, déterminé par l'objectif du modélisateur. ■

Au prochain chapitre, nous irons plus loin dans l'application de la réduction dimensionnelle, en utilisant des dynamiques sur des réseaux empiriques et en effectuant des comparaisons numériques.

# Chapitre 4

# L'hypothèse de bas rang des systèmes complexes

Article original :

**The low-rank hypothesis of complex systems**

Vincent Thibeault[1,2], Antoine Allard[1,2] et Patrick Desrosiers[1,2,3]

[1] Département de physique, de génie physique et d'optique, Université Laval, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

[2] Centre interdisciplinaire en modélisation mathématique, Université Laval, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

[3] Centre de recherche CERVO, Québec (Québec), Canada G1J 2G3

Référence : Nat. Phys. **20**, 294 (2024) [581]

*Reproduced with permission from Springer Nature*

## 4.1 Avant-propos

Ce chapitre représente l'aboutissement des trois premiers chapitres et leur application à l'étude des systèmes complexes. En effet, l'usage de la SVD (chapitre 1), de la théorie spectrale des graphes (notamment, la section 2.4) et de la réduction dimensionnelle (section 3.4) sont au cœur de l'article.

À l'aide de ses notions, une nouvelle propriété fondamentale des réseaux complexes réels est mise en évidence : leur faible dimension effective. Cette découverte apporte une nouvelle manière de comprendre ces réseaux, mais également leurs représentations mathématiques par des graphes aléatoires, omniprésents en science des réseaux, en neuroscience computationnelle, en physique statistique et en écologie. Contrairement aux approches traditionnelles centrées sur les propriétés locales ou communautaires, une analyse des propriétés globales linéaires de ces réseaux est effectuée et se révèle utile pour décrire les phénomènes collectifs à grande échelle. Ces résultats reposent sur des théorèmes originaux à l'intersection de la théorie spectrale des graphes, des matrices aléatoires et des systèmes dynamiques.

L'idée de l'« hypothèse de bas rang » s'est concrétisée au début de l'année 2021. Nous étudiions « Exact rank reduction of network models » de E. Valdano et A. Arenas [594], les dynamiques neuronales avec plasticité synaptique, les travaux de O. Barak et al. sur les RNNs et la théorie spectrale des graphes dans le cadre d'un cours. Les résultats de l'article sur la réduction dimensionnelle sont apparus plus tard, inspirés par nos travaux antérieurs [346, 583], alors que l'émergence des interactions d'ordre supérieur (définition 2.17) a été constatée à Matane seulement quelques semaines avant la première soumission de l'article en août 2022.

Accompagné par une photographe québécoise professionnelle (ma sœur Myriam Thibeault), j'ai produit une représentation artistique des idées du chapitre qui se retrouve sur la page couverture de Nature Physics en février 2024. Celle-ci est reproduite avec la permission de Springer Nature dans la figure 4.1.

Des modifications mineures à la version publiée de l'article ont été effectuées pour la thèse. De plus, des parties du matériel supplémentaire original ont été déplacées dans les trois premiers chapitres pour améliorer l'expérience de lecture, dont les introductions à la SVD, les rangs effectifs, la transition BBP, les hypergraphes et la réduction dimensionnelle.

Bien que l'article renferme l'essence de la contribution, il repose sur des méthodes et un matériel supplémentaire qui développent considérablement le contenu scientifique. En particulier, les formulations rigoureuses complètes de nos résultats mathématiques et leur preuve se retrouvent toutes en matériel supplémentaire. Rappelons que pour orienter le lecteur vers les sections plus centrales, des étoiles ont été insérées dans les titres de quelques sections pour indiquer qu'elles ne sont pas prioritaires, bien que nécessaire à la reproductibilité des résultats.

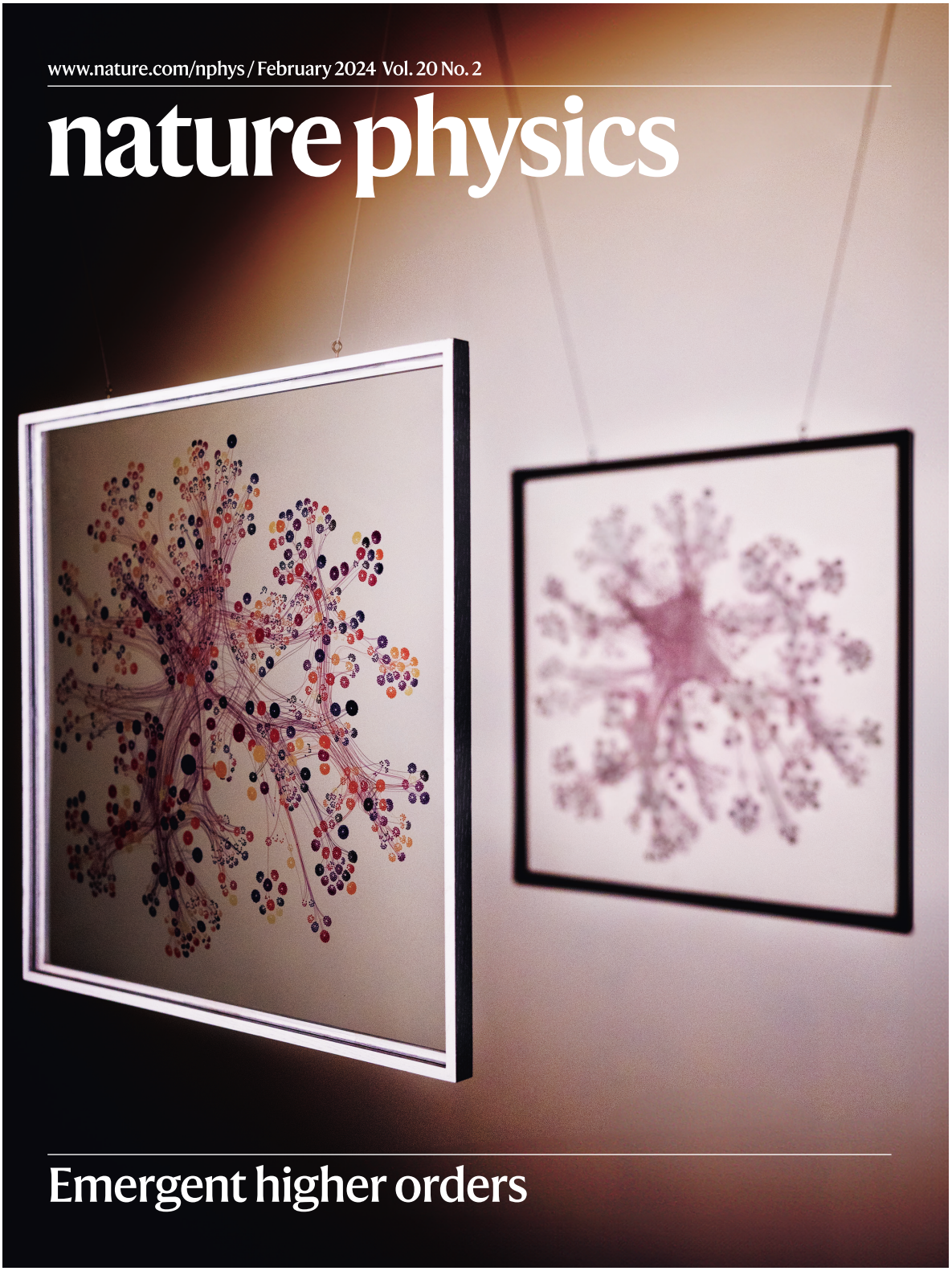



FIGURE 4.1 – De nombreux réseaux complexes, comme celui du connectome partielle de la drosophile illustré ci-dessus (et à la figure 2.1), se caractérisent par de basses dimensions effectives. Cette propriété permet de projeter les dynamiques non linéaires qu'ils supportent dans un espace de plus basse dimension, où des interactions d'ordre supérieur entre leurs constituants peuvent émerger.

## 4.2 Résumé

Les systèmes complexes sont des systèmes dynamiques non linéaires de haute dimension, caractérisés par des interactions hétérogènes entre leurs constituants. Pour effectuer des prédictions interprétables sur leur comportement à grande échelle, il est fréquent de supposer que leur dynamique se réduit à quelques équations impliquant une matrice de bas rang décrivant le réseau d'interactions. Notre article met en lumière cette hypothèse de bas rang et requestionne sa validité. En s'appuyant sur des théorèmes fondamentaux sur la SVD, nous mettons cette hypothèse à l'épreuve pour différents graphes aléatoires, soit en exposant leur formulation de bas rang, soit en démontrant la décroissance exponentielle de leurs valeurs singulières. Nous vérifions l'hypothèse pour des réseaux réels en révélant la décroissance rapide de leurs valeurs singulières, ce qui a des conséquences directes sur leurs rangs effectifs. Nous évaluons ensuite l'impact de cette hypothèse dans le cadre général des systèmes dynamiques sur réseaux, via une réduction dimensionnelle optimale. Cela nous permet de démontrer que les réseaux neuronaux récurrents peuvent être réduits exactement et de relier la décroissance rapide des valeurs singulières des réseaux réels à l'erreur commise par la réduction dimensionnelle de diverses dynamiques sur ces réseaux. Enfin, nous montrons que des interactions d'ordre supérieur émergent naturellement de cette réduction, clarifiant ainsi l'origine de telles interactions dans les systèmes complexes.

## 4.3 Abstract

Complex systems are high-dimensional nonlinear dynamical systems with heterogeneous interactions among their constituents. To make interpretable predictions about their large-scale behavior, it is typically assumed that these dynamics can be reduced to a few equations involving a low-rank matrix describing the network of interactions. Our paper sheds light on this low-rank hypothesis and questions its validity. Using fundamental theorems on singular value decomposition, we probe the hypothesis for various random graphs, either by making explicit their low-rank formulation or by demonstrating the exponential decrease of their singular values. We verify the hypothesis for real networks by revealing the rapid decrease of their singular values, which has major consequences on their effective ranks. We then evaluate the impact of the low-rank hypothesis for general dynamical systems on networks through an optimal dimension reduction. This allows us to prove that recurrent neural networks can be exactly reduced, and to connect the rapidly decreasing singular values of real networks to the dimension reduction error of the nonlinear dynamics they support. Finally, we prove that higher-order interactions naturally emerge from the dimension reduction, thus providing insights into the origin of higher-order interactions in complex systems.

## 4.4 Introduction

Unraveling the emergent phenomena that drive the functions of complex systems requires to rally the microscopic mechanisms with the macroscopic ones. Rather than decomposing complex systems in as many components as possible, dimension reduction seeks a reduced system of macrostates or observables with a small enough dimension to get an insightful description, but large enough to preserve the phenomena of interest. Yet, complex systems are characterized by extremely high dimensions—perhaps some sort of curse of dimensionality [1, 54, 207]—and finding such reduced system remains a challenge in several scientific disciplines.

In the paradigm "More is different" [20, 568], it could appear contradictory to look for simple representations of complex systems. But "simple model" does not mean "simple behavior": the logistic equation [397], cellular automata [613, 643], or spin glasses [458, 557] exhibit complex behaviors such as chaos, and recurrent neural networks can approximate any finite trajectory of $N$-dimensional dynamical systems [202].

In network science, the topology of the interactions among the constituents of complex systems is typically simplified to a graph, defined by a set of vertices and a set of edges (Figs. 4.2a-b). Such representation allows the extraction of dominant properties of complex networks, such as their organization into modules [195]. An ongoing change of paradigm is to use hypergraphs or simplicial complexes rather than graphs to take into account the significant higher-order interactions observed in some real-world systems [49, 61]. In addition to finding an appropriate dimension to describe a complex system, one has to uncover the orders of its interactions. As shown later, both problems are intertwined.

A graph can always be described as a matrix. This simple, yet essential, possibility unlocks several tools from linear algebra to characterize networks. Among them, spectral theory allows identifying the fundamental components of matrices through matrix decomposition. Eigenvalue decomposition has long been used to extract key properties of graphs, such as their invariants [633], their modular structure [150], the centrality of their vertices [72], or the bifurcations of dynamical systems taking place on these networks [498].

One pressing challenge in network science is to efficiently adapt the tools of spectral theory to directed, weighted, and signed (e.g., excitatory-inhibitory) networks and hence, to general real matrices. Indeed, eigenvalue decomposition yields complex eigenvalues and complex-valued eigenvectors in general, potentially causing methodological problems (sec. 2.4 and SI 4.11.5). Worse still, it is not even guaranteed that the matrix representation of the network is diagonalizable. For instance, the trivial directed graph with two vertices connected by one directed edge or any network whose (real) matrix representation, $W$, is rectangular are not diagonalizable (e.g., incidence matrix, interlayer matrix in multilayer networks).

Yet, the matrices $WW^\top$ and $W^\top W$ are always square, symmetric, and thus diagonalizable,

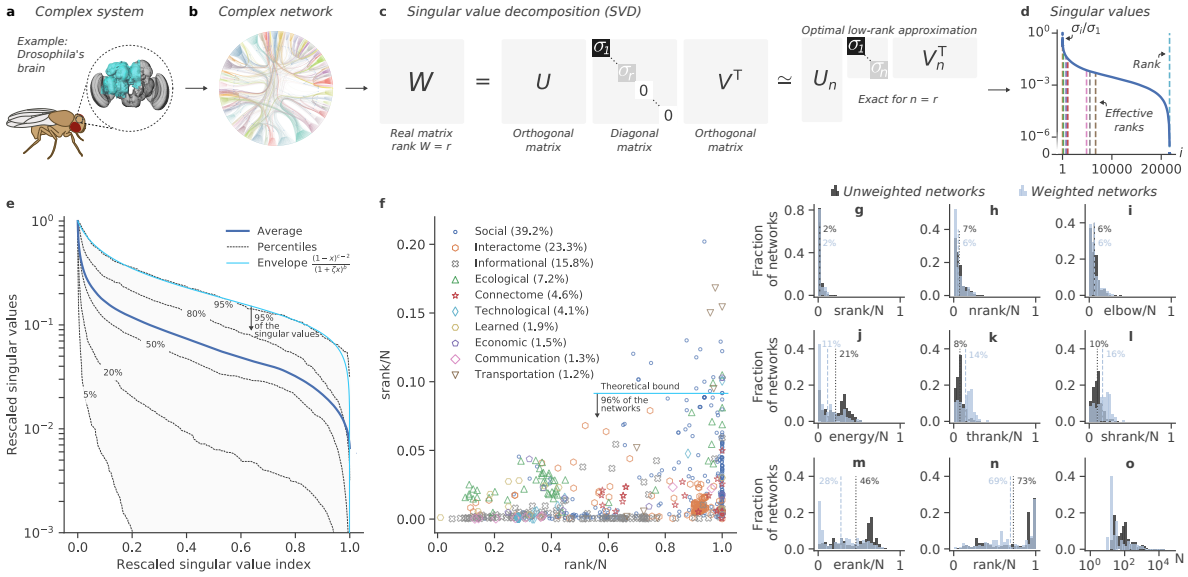



Figure 4.2 – **Experimental verification of the low-rank hypothesis for real networks**. **a**, *Drosophila melanogaster*'s hemibrain as an example of complex system. The open-source image of the hemibrain is from Ref. [527]. **b**, A complex network illustration of *Drosophila melanogaster*'s connectome [527] where only 5% of the 21733 vertices were randomly selected for the sake of visualization. **c**, The singular value decomposition of a real matrix of rank $r$. The truncated SVD is the optimal low-rank approximation of a matrix, as guaranteed by the Schmidt-Eckart-Young-Mirsky theorem (Theorem 1.25). **d**, Rapid decrease of the singular values of the matrix describing the *Drosophila melanogaster*'s connectome with the ordinates in logarithmic scale. The vertical dashed lines indicate the rank of the matrix as well as seven measures of effective rank (Methods, Table 4.2). **e**, The average and the percentiles of the singular value distribution of 679 real networks of different origins rescaled by their respective largest singular value (Methods). The shaded background is the region between the 5th and the 95th percentiles. The parameters of the singular-value (hypergeometric) envelope above 95% of all the singular values are $b \approx 0.54$, $c \approx 2.3$, and $\zeta \approx 25$. **f**, The stable rank to dimension ratio vs. the rank to dimension ratio for real networks. The theoretical bound, above 96% of the networks' stable ranks, is obtained from the singular-value envelope in **e** and Theorem 4.3. The approximate proportion of networks is in the parentheses beside the name of each category. Fraction of 679 real networks (502 unweighted networks and 177 weighted networks) vs. **g-m**, different effective ranks divided by $N$, **n**, the rank divided by $N$, and **o**, the number of vertices $N$ with the abscissa shown in log scale. The vertical dashed lines with their corresponding percentage are the averages of the distributions.

which lays the foundations of singular value decomposition (SVD, see Fig. 4.2c and Theorem 1.5). Interestingly, the decomposition exists for any matrix, the singular vectors are real-valued, and the singular values $\sigma_1, ..., \sigma_N$ are nonnegative real numbers. Notably, the number of nonzero singular values equals the rank of $W$. Moreover, SVD inherits various theorems from eigenvalue decomposition [279], such as Weyl's theorem [179, 625], but it also produces new fundamental results. In particular, SVD is a central tool for dimension reduction in general: the Schmidt-Eckart-Young-Mirsky theorem guarantees that the truncated SVD yields the best low-rank approximation of a matrix (Fig. 4.2c and Theorem 1.25).

The salient properties of SVD and its close relationship with the (effective) rank of a ma-

trix have not yet been completely recognized in network science and spectral graph theory, if we compare to its ubiquity in data science (e.g., matrix completion [95], dynamic mode decomposition [334], and optimal singular value shrinkage [216]), control theory (e.g., Kalman criterion [299, 300, 647]), random matrix theory (e.g., Marčenko-Pastur's law [384]), and linear algebra (e.g., matrix norms [279]). SVD is not even mentioned in many of the main introductory textbooks of network science or spectral graph theory (SI 4.11.1).

Throughout the paper, we leverage the key attributes of SVD to define and evaluate the impact of the low-rank hypothesis of complex systems. Before tackling the case of complex systems as high-dimensional nonlinear dynamical systems, we first expose theoretical evidence of the hypothesis for random graphs followed by an empirical verification of the hypothesis for real networks.

## 4.5 Evidence of the hypothesis for network models

It is first instructive to consider random graphs, i.e., sets of graphs equipped with a probability measure that depends on some properties, such as the degrees, the modules, or the distance between vertices in some metric space (SI 4.11.1 and SI 4.11.2). Mathematically, they can always be written as random matrices $W = \langle W \rangle + R$, where $\langle W \rangle$ is the expected weight matrix and $R$ is a random matrix with mean 0.

By examining many widely used random graphs, we observed that their expected matrices involve low-rank matrices. Indeed, we highlight the—usually implicit—assumption that $\langle W \rangle$ is equal to a function $\Phi$ of a low-rank matrix $L$ (Fig. 4.3a, Table 4.1 in Methods, SI 4.11.1). In many cases, $\Phi(L) = L$ and it is straightforward to see the low rank of $\langle W \rangle$ since it can be written into its rank-factorized form. A particular Weyl inequality already establishes an expected, but important, outcome of the hypothesis: a small random part $R$ ensures that each singular value of $W$ are close to those of $\langle W \rangle$, i.e.,

$$\Delta_i = |\sigma_i(W) - \sigma_i(\langle W \rangle)| \leq \|R\|_2 \tag{4.1}$$

for all $i \in \{1, ..., N\}$, where $\sigma_i(A)$ denotes the $i$-th singular value of $A$ and $\| \cdot \|_2$ denotes the spectral matrix norm (1.22 and Corollary 1.24). Viewing $W = \langle W \rangle + R$ with $\langle W \rangle = L$ and $\text{rank}(L) = r$ as a spiked random matrix [56, 57, 98, 183, 480] offers an even more precise perspective. For such matrices, the singular values have a "bulk" related to the singular values of $R$ and the creation or annihilation of outlying singular values is asymptotically characterized by the Baik-Ben Arous-Péché (BBP) phase transition [42]. Notably, the presence of $p \leq r$ singular values outliers in $W$ only depends upon a threshold on the dominant singular values of $\langle W \rangle$, namely $\sigma_1(\langle W \rangle), ..., \sigma_r(\langle W \rangle)$ [57] (SI 4.11.1). Therefore, a low rank $r$ for $\langle W \rangle$ together with mild threshold conditions imply that the largest singular values of $W$ are located in the vicinity of $\sigma_1(\langle W \rangle), ..., \sigma_r(\langle W \rangle)$, which is a first indicator of the low-rank hypothesis.

However, the low rank of $\langle W \rangle$ is not always obvious, such as in the cases of the directed soft configuration model and its weighted version. Indeed, their expected weight matrices are nonlinear functions of rank-one matrices (Methods). Leveraging Weyl's inequalities, we demonstrated for both models that the singular values of $\langle W \rangle$ are bounded above by an exponentially decreasing term (Theorem 4.1 in Methods, Figs. 4.3e and 4.3i). Figs. 4.3b–4.3i illustrate how the singular values of $W$ in four different weighted random graphs and two noise regimes inherit the decreasing trend of the dominant singular values of $\langle W \rangle$, while the subdominant ones are related to $R$. The rapid decrease of the dominant singular values of $W$ hints at the approximate low rank of a network and thus constitutes a second crucial indicator of the low-rank hypothesis.

The attributes "rapid decrease" and "approximate low rank" remain to be quantified, however. To do so, we invoke the notion of *effective ranks*. For instance, the stable rank measures the relative importance of the squared singular values with respect to $\sigma_1^2$ (Methods, Table 4.2). In Figs. 4.3j–4.3m, we depict its persistence with the increase of the noise level in four random graphs. How "low" is an effective rank of a random graph is better understood through its asymptotic behavior as $N \to \infty$ (Methods). Different singular value decreases lead to different asymptotic behaviors for the effective ranks, from constant $O(1)$ and sub-linear growth $O(N^{1-\epsilon})$ with $\epsilon \in (0, 1]$ to linear growth $O(N)$ (SI 4.11.3). Notably, sub-linear growth implies that the effective ranks to dimension ratio fall to zero asymptotically as $O(N^{-\epsilon})$ : we will thus say that an effective rank is low if it grows at most sub-linearly. For example, we demonstrate that any growing network model with exponentially decreasing singular values (e.g., soft configuration models) imply the lowest asymptotic behavior $O(1)$ for the stable rank and two other effective ranks (Methods, Corollary 4.2). However, when dealing with a single instance of a random graph or with a real network, $N$ should be kept fixed and the above asymptotic perspective is not applicable. Yet, we can give a more subtle, graded, response to the question "how low ?" with effective rank to dimension ratios: values much smaller than 1 indicate that few singular values contribute significantly in the SVD, meaning that $W$ can be well approximated by a low-rank matrix. Having small effective rank to dimension ratios is thus a third indicator, this time quantitative, of the low-rank hypothesis.

Recapitulating, the low-rank hypothesis has been described with three indicators for random graphs. The second one, the rapid decrease of the singular values, is the central indicator of the hypothesis: the first indicator being a theoretical cause for the decrease and the third indicator being a consequence. The second and third indicators are not tied to any theoretical model and can be applied to any type of networked data. We hence adopt the following general, yet workable, definition of the low-rank hypothesis: it is the assumption that the singular values of the network's weight matrix decrease rapidly, implying low effective ranks. We now put this hypothesis to the test.

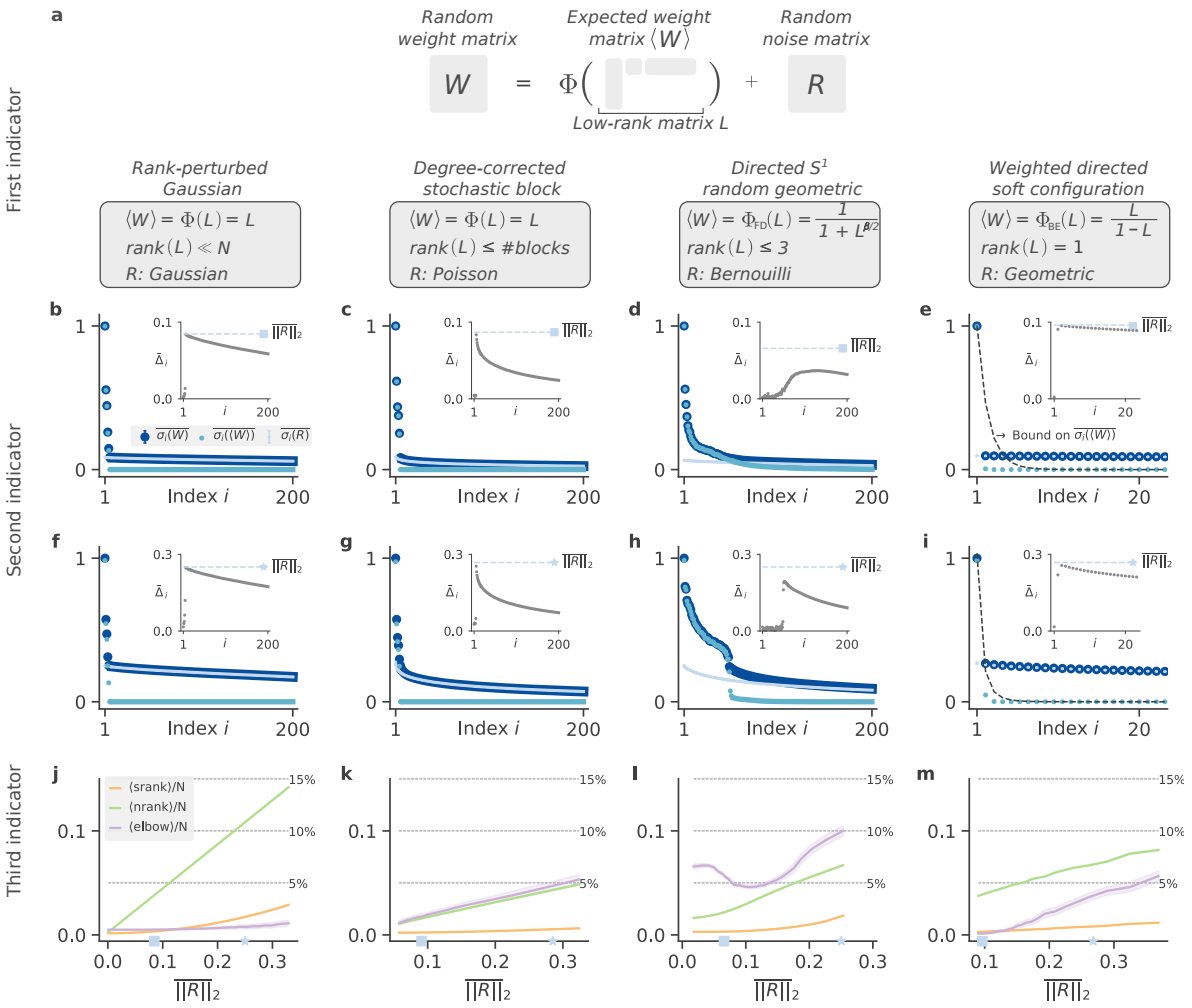



Figure 4.3 – **Three indicators of the low-rank hypothesis for random graphs**. **a**, Many random graphs have a random matrix representation where the expected weight matrix $\langle W \rangle$ is a matrix-valued function $\Phi$ of a low-rank matrix $L$ plus a centered random part $R$. Four examples of random matrices with different weight distributions and functions $\Phi$ are illustrated and aligned with their subfigures below. The functions $\Phi_{\text{FD}}$ and $\Phi_{\text{BE}}$ respectively stand for a Fermi-Dirac distribution with inverse temperature $\beta$ and a Bose-Einstein distribution where the division is element-wise, e.g., the element $(i, j)$ of $L/(1 - L)$ is $L_{ij}/(1 - L_{ij})$. **b-i**, The rescaled and averaged singular values of the random weight matrix, its expected part, and its random part for each random graphs are shown in two noise regimes (square markers for $\overline{\|R\|}_2$ near 0.1 **[b-e]** and star markers for $\overline{\|R\|}_2$ near 0.3 **[f-i]**). The singular values are respectively denoted $\overline{\sigma_i(W)}$, $\overline{\sigma_i(\langle W \rangle)}$, and $\overline{\sigma_i(R)}$ (from darker to lighter blue markers) where $\overline{x} = \langle x \rangle / \langle \|W\|_2 \rangle$ and $\langle\,\rangle$ denotes the average over the ensemble of graphs. Error bars indicate the standard deviation of the singular values, but are too small to be seen. The random graphs have $N = 10^3$ vertices and only the first 200 (or 20 in **e** and **i**) singular values are shown for the sake of visualization. The dashed black lines in **e** and **i** are the rescaled upper bounds on the singular values of $\langle W \rangle$ in Theorem 4.1 (Methods) with root-mean-square errors over all $i \in \{1, ..., N\}$ of 0.02 in **e** and 0.006 in **i**. The insets show the rescaled and averaged $\Delta_i$ and its upper bound defined in Eq. (4.1). **j-m**, The evolution of three effective ranks (averaged over the ensemble of graphs and rescaled by $N$) according to the strength of the noise $\|R\|_2$ is shown. The shaded areas are the standard deviations of the effective ranks. The parameters used for each random graphs can be found in Methods.

## 4.6 Verification of the hypothesis for real networks

Despite its frequent use—often implicit, but sometimes very explicit [53, 594]—the low-rank hypothesis has yet to be verified experimentally for real networks in all their diversity.

Our experiments revealed that the rapid decay of the singular values in real networks is the norm. As an example, we illustrate the singular value profile of the connectome of *Drosophila melanogaster* in Fig. 4.2d. Figure 4.2e presents a coalesced view of the singular value profiles for 679 real networks from 10 different origins. As a guide to appreciate the decreases, we trace a general singular-value envelope below which 95% of the singular values of all the networks belong.

Having an explicit form for the singular-value envelope allows interpreting the stable rank as the area under a curve (SI 4.11.3) and then to find a theoretical bound below which most of the networks' stable ranks lie (Methods, Theorem 4.3). In Fig. 4.2f, we illustrate the stable rank of the real networks along with the theoretical bound above 96% of the networks, which indicates that the stable rank is generally expected to be less than 10% of the number of vertices $N$.

To ensure that this observation is not limited to the stable rank, we report in Figs. 4.2g–4.2m similar observations for other effective ranks (Methods). Having larger values than srank is not surprising for nrank and erank. In fact, it is easily shown that srank $\leq$ nrank $\leq$ erank $\leq$ rank (Methods). Contrarily to the effective ranks, the rank of real networks is often comparable to their dimension (Fig. 4.2n). This observation is expected, especially for weighted networks with real weights, since non-invertible matrices form a set of measure 0.

The datasets considered consist in real networks with fixed $N$, but the asymptotic behaviors of their effective ranks can still be evaluated as if there was a related growing graph whose singular values remain within experimental singular-value envelopes as $N$ grows. Using this approach, we prove that singular-value envelopes such as the one in Fig. 4.2e admits constant and sublinear growth for srank, nrank, and erank (Methods).

All in all, we show that many real networks have rapidly decreasing singular values, leading to low effective ranks. Interestingly, such observation seems to be widespread for big data matrices [51, 210, 593], but it remains a puzzling phenomenon. In particular, the consequences of these observations for high-dimensional nonlinear dynamics on networks are still to be untangled, which is the subject of the next section.

## 4.7 Induced low-dimension hypothesis

Intuitively, we expect that having low (effective) rank networks gives grounds to dimension reduction of dynamics on these networks. Consider the complete dynamics $\dot{x} = f(x\,; W)$,

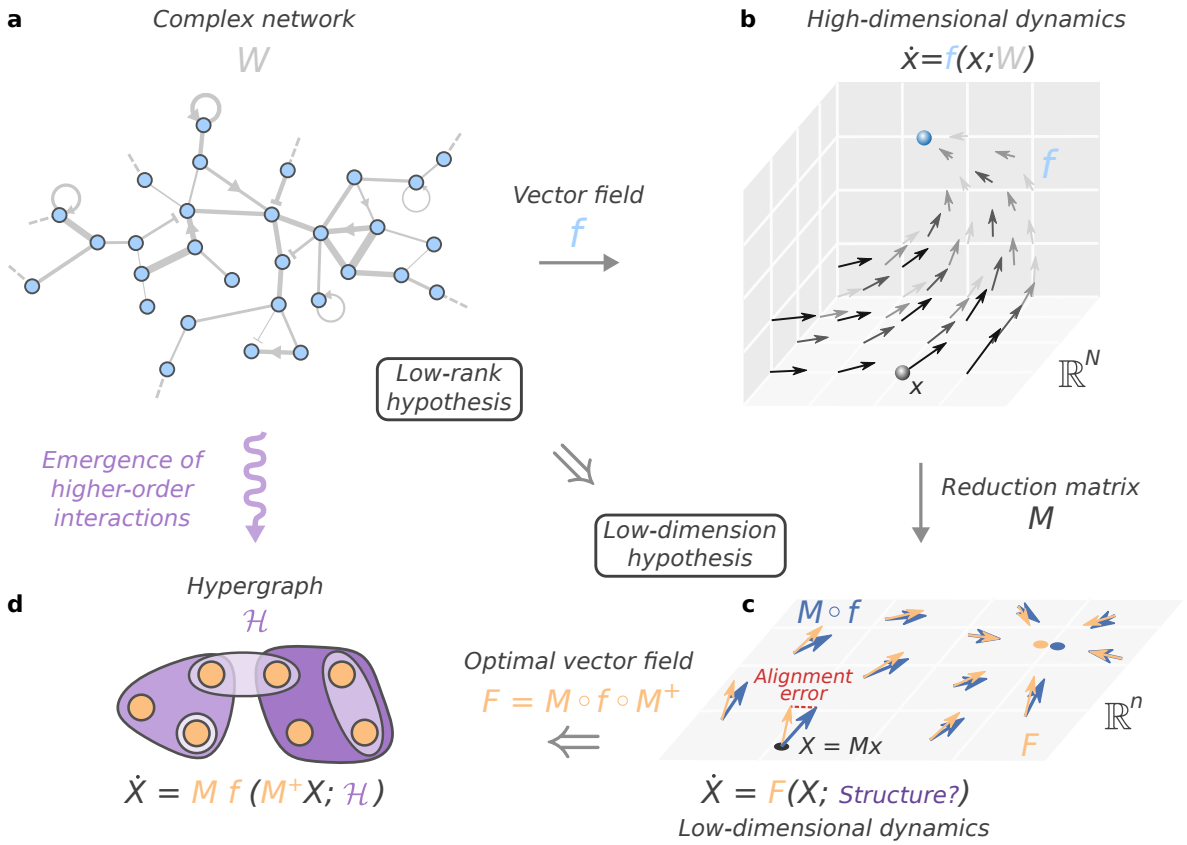



Figure 4.4 – **The low-rank hypothesis of complex systems and the emergence of higher-order interactions.** **a**, A complex network represented as a weighted (edges' width), signed, and directed (edges with arrows or a perpendicular line for inhibition) graph with weight matrix $W$. **b**, A vector field $f$ of a $N$-dimensional dynamical system on a network converging to an equilibrium point. **c**, Dimension reduction of a dynamical system through the reduction matrix—a linear transformation $M : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^n$; $x \mapsto X = Mx$. The blue arrows illustrate the exact vector field $M \circ f$ in $\mathbb{R}^n$ (where $\circ$ is the function composition) while the orange arrows represent an approximate vector field $F$. Dimension reduction is about aligning the vector fields, i.e., minimizing alignment errors. **d**, The least-square optimal vector field $M \circ f \circ M^+$ yields higher-order interactions between the observables $X_1, ..., X_n$ represented by some general hypergraph $\mathcal{H}$ with $n$ vertices. The hyperedges are represented by the shaded regions, their weight and their orientation (SI 4.12.1) are not illustrated to avoid cluttering the figure. Note that we make a slight abuse of notation by considering $x$ (resp. $X$) as a function of time and also as a point in $\mathbb{R}^N$ (resp. $\mathbb{R}^n$).

where $x(t) \in \mathbb{R}^N$ is the system's state at time $t$, $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ is a continuously differentiable vector field, and $W$ is a $N \times N$ weight matrix describing the network (Figs. 4.4a- 4.4b). More specifically, given $g : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ and $W$ ($x(t)$ is unknown), we examine the subclass of dynamics $\dot{x} = g(x, y)$ where $y = Wx$.

Considering this subclass of dynamics already highlight an important implication of the low-rank hypothesis. The linear function $x \mapsto y = Wx$ in $g$ has a very special role: even if $x$ is part of a $N$-dimensional manifold, when $W$ has a low rank, the vector in the image of $W$ will be part of a low-dimension submanifold. Even if $W$ has full rank, our experimental observations in Fig. 4.2 show that it is likely to have a low effective rank. We can hence say that $Wx$ will

be part of an effectively low-dimension submanifold.

Just as some random graph models are crafted from a nonlinear function $\Phi$ of a low-rank matrix $L$ (see Fig. 4.3a), the vector field $g$ depends nonlinearly on $Wx$, making it challenging to assess the low dimensionality of $g(x, y)$. Despite recent developments [208,290,327,346,583,591,599], it remains unclear how to choose a dimension for the reduced dynamics and how to quantify the reduction error for nonlinear dynamics on complex networks.

Dimension reduction of dynamical systems can be imagined as the problem of aligning a low-dimensional vector field with its high-dimensional counterpart (Fig. 4.4c and Sec. 3.4). This involves selecting a $n \times N$ reduction matrix $M$ that maps the elements of the complete system to the reduced system, as well as a vector field $F$ describing the evolution of a set of observables $(X_\mu)_{\mu=1}^n$ in $\mathbb{R}^n$. The alignment error in $\mathbb{R}^n$ at $x \in \mathbb{R}^N$, denoted $\mathcal{E}(x)$, can then be defined as the error between the vector fields $M \circ f$ and $F \circ M$ (Methods).

Minimizing the alignment error to find the optimal pair $(M, F)$ is challenging in general (Sec. 3.4) and the best choice hinges on the modeler's objective. For instance, selecting $M$ to ensure that the temporal evolution of $X$ remains interpretable throughout time (e.g., synchronization observables [583]), might further complicate the optimization problem.

Let us concentrate on identifying $F$ without taking into account $M$ for now. Using least squares, we proved that $M \circ f \circ M^+$ minimizes an alignment error in $\mathbb{R}^N$, where $^+$ denotes pseudoinversion (Methods). Doing so allowed us to show, for $\dot{x} = g(x, y)$, that the alignment error $\mathcal{E}(x)$ caused by the least-square vector field satisfies

$$\sqrt{n}\,\mathcal{E}(x) \leq \|MJ'_x(I - M^+M)x\| + \|W(I - M^+M)\|_2\|MJ'_y\|_2\|x\|\,, \tag{4.2}$$

where $J'_x$ and $J'_y$ are Jacobian matrices (Methods).

Interestingly, the previous inequality suggests a non-arbitrary way of selecting the reduction matrix. Indeed,

$$M = V_n^\top \tag{4.3}$$

minimizes the factor $\|W(I - M^+M)\|_2$ related to the interactions in the system, generally making each observable $X_\mu$ global, i.e., containing information on most vertices (Methods).

The choice made in Eq. (4.3) prompted us to derive another inequality revealing the contribution of the network singular values to the alignment error (Methods, Theorem 4.4):

$$\sqrt{n}\,\mathcal{E}(x) \leq \|V_n^\top J'_x(I - P)x\| + \sigma_{n+1}\|V_n^\top J'_y\|_2\|x\|, \tag{4.4}$$

where $P = V_nV_n^\top$. Notably, the inequality provides a criterion for exact dimension reduction: if $J'_x = dI$ for $d \in \mathbb{R}$ and $n = \mathrm{rank}(W)$, the upper bound vanishes to zero and the dimension reduction is exact (Methods). Consequently, a general class of dynamics, including recurrent neural networks and the Wilson-Cowan neuronal dynamics, can be exactly reduced (Methods).

The upper bound (4.4) is meant to be intuitive (not necessarily tight): it connects the swift decay of singular values of a network with the dimension reduction error. As a basic example, the relative alignment error $\mathcal{E}(x)/\|x\|$ for the linear system $\dot{x} = Wx$ is simply upper-bounded by $\sigma_{n+1}/\sqrt{n}$, meaning that a rapid decrease of the singular values of $W$, be it related to an arbitrarily weighted network, directly induces a rapid decrease of the alignment error.

Figure 4.5a-d illustrates the decrease of the alignment error with $n$ —the latter being in accordance with the rapid decay of the upper bound and of the singular values—in four dynamics on real networks. We show how $n$ can be tuned to predict an epidemic in an epidemiological dynamics (Fig. 4.5e), a hysteresis in a neuronal dynamics (Fig. 4.5f), stable branches in a microbial dynamics (Fig. 4.5g), or a limit cycle in a recurrent neural network (Fig. 4.5h). While effective ranks can help select a suitable dimension $n$ to describe a collective phenomenon, we use them only as an indication: $n$ should be chosen according to the modeler's tolerance to qualitative (e.g., is the hysteresis preserved?) or quantitative (e.g., is the predicted transition accurate?) errors. It thus becomes clear that having low (effective) rank matrices describing complex networks gives ground to dimension reduction of nonlinear dynamics on these networks.

The reduced system is akin to a low-dimensional dynamics taking place on a smaller structure, whose nature remains to be specified (Fig. 4.4c). We show in the next section that dimension reduction ultimately leads to the emergence of higher-order interactions, as illustrated in Fig. 4.4d.

## 4.8 Emergence of higher-order interactions

Theoretical and experimental evidence for the existence of higher-order interactions in various complex systems has been reported and its consequences—e.g., on explosive transitions [326] or mesoscopic localization [552]—have been extensively studied [50]. However, their origin remains under active investigation, notably for oscillatory systems [390, 442] (SI 4.12.1).

Using our framework, a simple example readily provides insights over the emergence of higher-order interactions. Consider the epidemiological dynamics $\dot{x}_i = -d_i x_i + \gamma\,(1 - x_i)\,y_i$ with $i \in \{1, ..., N\}$, where $x_i$ is the probability for the vertex $i$ to be infected, $y = Wx$ while $d_i$ and $\gamma$ denote the recovery rate of vertex $i$ and the infection rate respectively. The reduced dynamics is then given by

$$\dot{X}_\mu = \sum_{\nu=1}^{n} \left(\mathcal{D}_{\mu\nu} + \mathcal{W}_{\mu\nu}\right) X_\nu - \gamma \sum_{i=1}^{N} M_{\mu i} \left(\sum_{\nu=1}^{n} M^{+}_{i\nu} X_\nu\right) \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\kappa=1}^{n} W_{ij} M^{+}_{j\kappa} X_\kappa\right) \tag{4.5}$$

for all $\mu \in \{1, ..., n\}$, where $\mathcal{D} = -MDM^{+}$ is a reduced $n \times n$ recovery rate matrix with $D = \mathrm{diag}(d_1, ..., d_N)$, and $\mathcal{W} = \gamma MWM^{+}$ is a reduced $n \times n$ weight matrix.

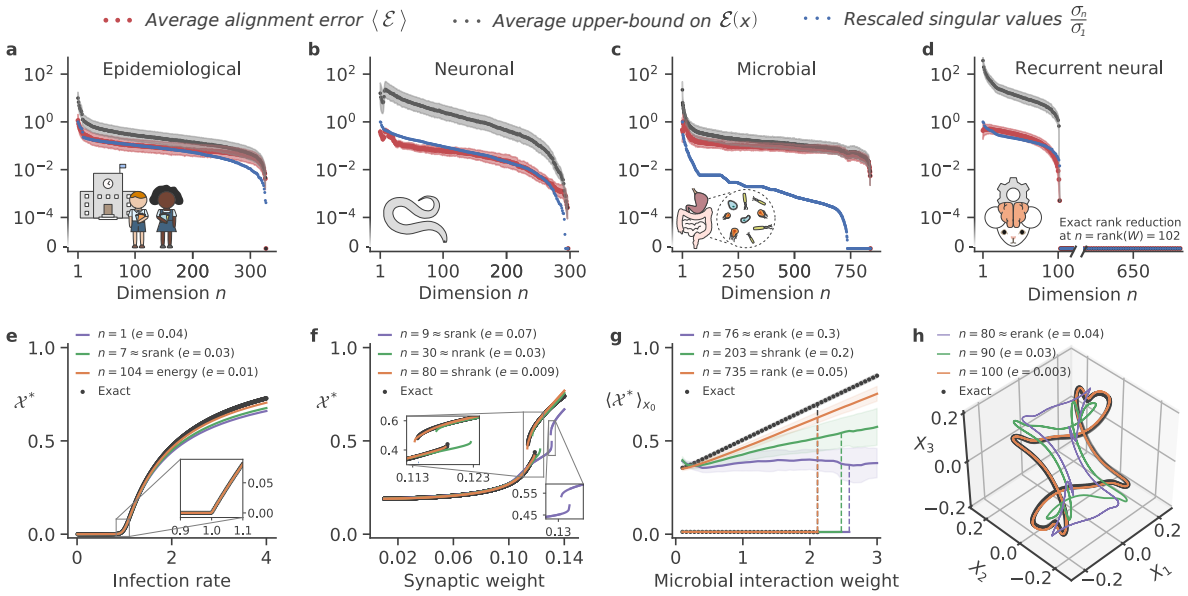



Figure 4.5 – **Dimension reduction errors for nonlinear dynamics on real complex networks in relation with their singular values and effective ranks. a-d**, The decrease of the alignment error $\mathcal{E}(x)$ (red markers) is in accordance with the rapid decrease of singular values (blue markers) as expected by the analytical upper bound in Eq. (4.4) (solid black line). The shaded regions in gray and light red represent the standard deviation of the upper bound and the error respectively. We have $10^3$ different samples for $x$ and the parameters for each $n$ and the upper bounds are computed exactly in **a** and **c**, while they are approximated in **b** and **d** (details in SI 4.12.3). **e-h**, Comparison of the bifurcation diagrams (resp. trajectories in **h**) for the global observable, denoted $\mathcal{X}^* = w \cdot X^*$ at equilibrium where $w$ is a $n \times 1$ real vector specific to the dynamics, of the complete dynamics (black markers) vs. the reduced dynamics (solid colored lines) at different dimensions $n$ with root-mean-square errors $e$ shown in parentheses (Methods). **a** and **e**, Epidemiological dynamics (quenched mean-field SIS) on a high-school contact network ($N = 327$, undirected, binary) rescaled by the largest singular value. **b** and **f**, Neuronal (Wilson-Cowan) dynamics on the *C. elegans* connectome ($N = 297$, signed, weighted, directed). **c** and **g**, Microbial population dynamics on a human gut microbiome network ($N = 838$, signed, weighted, directed). Note that there are multiple stable upper branches depending on the initial condition $x_0$ (Methods). Here we show an average on $x_0$ of the upper branches (black markers and solid colored lines) with the standard deviation (shaded regions) and we show one lower branch. The loss of stability of the lower branch is indicated by a dashed vertical line that connects it, for visualization purpose, to the average of the upper branches. **d** and **h**, Recurrent neural network (RNN) dynamics on a learned network ($N = 669$, signed, weighted, directed) for which we have shrunk its singular values using optimal shrinkage with the Frobenius norm [216] to emphasize the fact that dimension reduction for the RNN dynamics is exact when $n$ is the rank of the network (Methods).

Let us inspect the last term in Eq. (4.5) more carefully. For simplicity, consider that $M^+ = M^\top$, i.e., $M$ has orthogonal rows. Then, $M_{\mu i}$ quantifies the influence of vertex $i$ on the $\mu$-th observable, $M^\top_{i\nu} X_\nu$ is the influence of the $\nu$-th observable weighted by its dependence over vertex $i$, and $W_{ij} M^\top_{j\kappa} X_\kappa$ is the influence of the $\kappa$-th observable weighted by its dependence over vertex $j$ that connects to vertex $i$. Altogether, these factors form a third-order interaction between the observables $X_\mu$, $X_\nu$, and $X_\kappa$, an observation that becomes more explicit by

rearranging Eq. (4.5) as

$$\dot{X}_\mu = \sum_{\nu=1}^{n} \left(\mathcal{D}_{\mu\nu} + \mathcal{W}_{\mu\nu}\right) X_\nu + \sum_{\nu,\kappa=1}^{n} \mathcal{T}_{\mu\nu\kappa} X_\nu X_\kappa \,, \tag{4.6}$$

where the third-order interactions are encoded in a third-order tensor $\mathcal{T}$ with elements

$$\mathcal{T}_{\mu\nu\kappa} = -\gamma \sum_{i,j=1}^{N} M_{\mu i} M^{+}_{i\nu} W_{ij} M^{+}_{j\kappa} \tag{4.7}$$

for all $\mu, \nu, \kappa \in \{1, ..., n\}$. Hence, the resulting structure of the reduced system is a hypergraph $\mathcal{H}$ with $n$ vertices (Fig. 4.4c-d; see SI 4.12.1), which is generally directed [205], weighted, signed, and formed from $\mathcal{D}$, $\mathcal{W}$, and $\mathcal{T}$.

Beyond the influence of dynamical parameters like the weight matrix $W$, Eq. (4.7) highlights the crucial role of the reduction matrix $M$ in shaping higher-order interactions. Indeed, $M$ partially determines the directed, weighted, and signed nature of the hypergraph. Moreover, if the observables respectively depend on disjoint groups of vertices, i.e., $M_{\mu i} \propto \delta_{\mu\, s(i)}$, where $\delta$ is the Kronecker delta and $s$ maps each vertex $i$ to its group, then the tensor with elements in Eq. (4.7) can be exactly mapped to a matrix. In other words, in the epidemiological dynamics, the higher-order interactions emerge from observables depending on overlapping groups of vertices (e.g., $M = V_n^\top$ in general). Interestingly, such overlapping is a very common characteristic of complex networks such as social networks [456].

These observations encouraged us to seek generic conditions for such emergence. For $\dot{x}_i = h_i(x_i, y_i)$, where $h_i : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ is an analytical scalar field for all $i \in \{1, ..., N\}$, we proved that the least-square optimal vector field depends upon higher-order interactions between the observables $X_1, ..., X_n$ (Methods, Proposition 4.5). We then deduced two insightful consequences. First, if the scalar field is a polynomial of total degree $\delta$ in $x_i$ and $y_i$ for all $i$, the hypergraph of the reduced system has interactions of maximal order $\delta + 1$ (Methods, Corollary 4.46). Second, having observables depending on disjoint groups of vertices is not sufficient to avoid higher-order interactions in general: the nonlinearity in $y_i$ also plays its part (Methods, Corollary 4.47). Other worked-out examples for a microbial and an oscillator dynamics are given in Table 4.3 to complement the previous observations on the epidemiological dynamics.

All in all, our results suggest that many instances of higher-order interactions could be a byproduct of the low-dimensional (macroscopic) representation chosen to model a wide variety of complex systems. They clarify the essential role of the description dimension and of the nonlinearity of the original system in shaping the interactions of the ensuing reduced system.

## 4.9 Conclusions and outlook

In this paper, we established the ubiquity of the low-rank hypothesis in complex systems and its consequences, from the dimension reduction of high-dimensional nonlinear dynamics on networks to the emergence of higher-order interactions.

Our experimental results suggest that the low-rank hypothesis is perhaps not only a hypothesis, but something intrinsic to many real complex systems. Our findings hint at the possibility that some emergent collective phenomena are consequences of much fewer variables than what would be expected a priori, thanks to the low-rank nature of their complex network. However, the low-rank hypothesis should be used very carefully: the effective ranks of real networks are often at a non-negligible fraction of $N$ and adopting the low-rank hypothesis unknowingly can lead to an oversimplified model of a given complex system. It thus seems relevant to design new random graphs based on the observed singular values of real networks. Networks' singular values are not a mere abstraction from spectral theory: like the degree, the clustering or the reciprocity, they have an intuitive interpretation as indicators of the effective dimension of complex networks/systems.

Our theoretical framework also suggests that inferring the connections in complex systems from time series observed at a relatively coarse-grained resolution (e.g., local field potentials in the brain [653] or abundances in plant communities [399]) is likely to reveal significant higher-order interactions. We conjecture that monitoring complex systems at different scales experimentally will clarify the role of the dimension at which the measurements are done on the emergence of higher-order interactions. Dimension reduction of dynamics on higher-order networks [61, 184] is also to be pursued, perhaps through Tucker decomposition [489].

Nevertheless, determining the precise form of the dominant observables that drive the behavior of complex systems remains an open problem. While we focused on linear observables, there might exist a small set of nonlinear observables well suited for a given high-dimensional dynamics [620]. However, finding appropriate, intuitive, nonlinear observables is much harder [88]. Our observations on the effective ranks of real networks also motivate further research on the inference of interpretable low-rank models from time series [595].

Finally, one defining property of complex systems that we have not addressed is their capacity for adaptation [271]. Our preliminary results suggest that the low effective rank of complex networks plays a central role for controlling [414, 521] and assessing the resilience of complex adaptive systems [143]. This, alongside indications that maturation or learning could reduce network's effective ranks (SI 4.11.4, Ref. [387]), will be the topic of an upcoming publication.

**Data availability**. All the details about the real networks data used in the paper, mostly from the network repository Netzschleuder, are given in SI 4.13. The data to generate Fig. 1, 2 and 4 are available on Zenodo (`https://doi.org/10.5281/zenodo.8342130`).

**Code availability**. The *Python* code used to generate the results of the paper is available on Zenodo (https://doi.org/10.5281/zenodo.8342130). The code for the optimal shrinkage of singular values is a *Python* implementation of the *Matlab* codes optimal_singval_threshold [215] and optimal_singval_shrink [216], which is based on the repository optht by B. Erichson.

## 4.10 Methods

### 4.10.1 Random graphs

A random graph can be described by a random matrix

$$W = \langle W \rangle + R \,, \tag{4.8}$$

where $\langle W \rangle$ is the expected weight matrix and $R$ is a zero-mean random matrix. Even if one instance in a typical model is generally of full rank $N$, the expected weight matrix $\langle W \rangle$ is often defined as an element-wise function of a low-rank matrix $L$, i.e.,

$$\langle W \rangle = \big(\phi(L_{ij})\big)_{i,j=1}^{N} \,, \tag{4.9}$$

where $\phi$ is a real-valued function of a real variable. This is an alternative, but equivalent, way to write $\langle W \rangle = \Phi(L)$ as in the main text. In Table 4.1, we list some classical examples of random graphs and the corresponding low-rank matrices.

In SI 4.11.1, we also report random network models involving two low-rank matrices, such as the general weighted soft configuration model, the general weighted directed soft configuration model, and the $S^1$ weighted random geometric model, along with other examples (and counter-examples) from network science (e.g., Watts-Strogatz model), random matrix theory, spin glasses, machine learning, and neuroscience. Based on these observations and those of Ref. [594], one can create many new random graphs with matrices of different ranks.

It is straightforward to assess the low rank of $L$, but it is harder to assess the low rank of $\langle W \rangle$ when $\phi$ is nonlinear. For example, in the directed soft configuration model (DSCM), $\phi = \phi_{\rm FD}$, a Fermi-Dirac distribution and in its weighted version (WDSCM), $\phi = \phi_{\rm BE}$, a Bose-Einstein distribution. For both models, the following theorem demonstrates that the singular values of their expected weight matrix are bounded above by an exponentially decreasing term.

**Theorem 4.1** (Simplified version of Theorems 4.22 and 4.23)**.**
*Let $\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_N$ be the singular values of $\langle W \rangle$. If $\langle W_{ij} \rangle = \phi_{\rm FD}(L_{ij}) < 1/2$ or $\langle W_{ij} \rangle = \phi_{\rm BE}(L_{ij})$ for all $i, j \in \{1, ..., N\}$, where $L$ is a rank-one matrix, then*

$$\sigma_i \leq \sum_{k=i}^{\infty} \ell_k \leq \frac{N\gamma^i}{1-\gamma} \qquad \forall\, i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.10}$$

*where $\ell_k = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} L_{ij}^{2k}}$ and $\gamma = \max_{i,j} L_{ij}$.*

Table 4.1 – Low-rank matrix $L$ characterizing the expected adjacency matrix for different random graphs of $N$ vertices. SBM: Stochastic Block Model, CL: Chung-Lu, MD: Metadegree, DSCM: Directed Soft Configuration Model, RDPG: Random Dot Product Graph, RGM: Random Geometric Model, RPG: Rank-Perturbed Gaussian, DCSBM: Degree-Corrected Stochastic Block Model, "W" in front of an acronym stands for "weighted". For the $S^D$ RGM, the rank of $L$ is, more precisely, $D$, $D+1$, or $D+2$ which is a consequence of Ref. [248, Theorem 7] and the inequality $\operatorname{rank}(A \circ B) \leq \operatorname{rank}(A)\operatorname{rank}(B)$. The parameters $q$, $r$, $d$ and $D$ are usually assumed to be small compared to $N$. More details about these random graphs and others are given in SI 4.11.1.

| | **Model** | **Low-rank matrix $L$** | **rank$(L)$** | $\phi(L_{ij})$ |
|---|---|---|---|---|
| **Unweighted** | $\mathcal{G}(N,p)$ | $Np\,\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{1}}^\top$ | 1 | $L_{ij}$ |
| | CL | $\dfrac{\|\kappa\|^2}{2M}\hat{\boldsymbol{\kappa}}\hat{\boldsymbol{\kappa}}^\top$ | 1 | $L_{ij}$ |
| | DSCM | $\|\boldsymbol{\alpha}\|\|\boldsymbol{\beta}\|\,\hat{\boldsymbol{\alpha}}\,\hat{\boldsymbol{\beta}}^\top$ | 1 | $\dfrac{L_{ij}}{1+L_{ij}}$ |
| | MD | $\displaystyle\sum_{\mu,\nu=1}^{r}\Delta_{\mu\nu}\,\boldsymbol{v}_\mu\boldsymbol{v}_\nu^\top$ | $r$ | $L_{ij}$ |
| | SBM | $\displaystyle\sum_{\mu,\nu=1}^{q}\sqrt{n_\mu n_\nu}\,p_{\mu\nu}\,\boldsymbol{b}_\mu\boldsymbol{b}_\nu^\top$ | $\leq q$ | $L_{ij}$ |
| | $S^D$ RGM | $\dfrac{R^2}{\mu^2}\left(\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\,\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^\top\right)\circ\bar{\theta}$ | $\leq D+2$ | $\dfrac{1}{1+L_{ij}^{\beta/2}}$ |
| **Weighted** | $\mathcal{G}(N,p,w)$ | $Npw\,\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{1}}^\top$ | 1 | $L_{ij}$ |
| | WCL | $\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top$ | 1 | $L_{ij}$ |
| | WDSCM | $\boldsymbol{y}\bar{\boldsymbol{y}}^\top$ | 1 | $\dfrac{L_{ij}}{1-L_{ij}}$ |
| | RPG | $\displaystyle\sum_{\mu=1}^{r}\boldsymbol{m}_\mu\boldsymbol{n}_\mu^\top$ | $r$ | $L_{ij}$ |
| | WSBM | $\displaystyle\sum_{\kappa,\nu=1}^{q}\sqrt{n_\kappa n_\nu}\,\mu_{\kappa\nu}\,\boldsymbol{b}_\kappa\boldsymbol{b}_\nu^\top$ | $\leq q$ | $L_{ij}$ |
| | DCSBM | $\Lambda\circ(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^\top)$ | $\leq q$ | $L_{ij}$ |
| | RDPG | $\displaystyle\sum_{\mu=1}^{d}\boldsymbol{X}_\mu\boldsymbol{X}_\mu^\top$ | $\leq d$ | $L_{ij}$ |

The proof is based on Weyl's inequalities (Theorem 1.22 in SI 1.4) and the truncated geometric series. The bound for $\langle W_{ij}\rangle = \phi_{\text{FD}}(L_{ij}) > 1/2$ is also given in Theorem 4.22. The upper bounds in Theorem 4.1 expose the low-rank formulation of soft configuration models and paves the way for new bounds on the singular values of other random graphs, such as random geometric models.

In Fig. 4.3, the singular values of $W$, $\langle W\rangle$, and $R$ are shown for the RPG, DCSBM, $S^1$ RGM,

and WDSCM. The upper bounds shown in Fig. 4.3e and i are given by Eq. (4.10) which is computed by summing the constants $n_i > n_{i+1} > ...$ until $n_k$ is smaller than $10^{-12}$. For RPG, the vectors $\boldsymbol{m}_\mu$ and $\boldsymbol{n}_\mu$ are instances of different Gaussian distributions and $r = 5$. Instances of truncated Pareto distributions were used to generate the expected degrees (DCSBM and $S^1$ RGM) and $\boldsymbol{y}$, $\bar{\boldsymbol{y}}$ (WDSCM). The number of blocks $q$ is set to 5 for the DCSBM and the expected number of edges block matrix $\Lambda$ is defined such that there are more edges expected within the blocks than between them. To obtain the norm of the random part $R$ of the random weight matrices (except RPG, where $R$ is already set to be a Gaussian of mean 0), we have generated 100 instances of $W$, we have computed $R = W - \langle W \rangle$, and then its norm for each instance. The spectral norm of $R$ is increased by changing the variance of each Gaussian element in $R$ for RPG, the expected number of edges in DCSBM, the temperature $1/\beta$ in $S^1$ RGM, and the minimum value of $\boldsymbol{y}$ and $\bar{\boldsymbol{y}}$ in WDSCM. The detailed parameters are given in SI 4.11.1.

Table 4.2 – Different effective ranks of a matrix of dimension $N \times N$ and of rank $r$ expressed in terms of its singular values $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_N$. For *energy*, the constant $\tau$ is a threshold to be set between 0 and 1. For *thrank*, $\sigma_{\text{med}}$ is the median singular value and $\mu_{\text{med}}$ is the median of a Marčenko-Pastur probability density function [215]. For *shrank*, $s^*$ denotes an optimal singular value shrinkage function [151, 216]. The complete names and the details about each of the effective ranks are given in SI 1.5.

| **Abbreviation** | **Expression** |
|---|---|
| srank | $\displaystyle\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2/\sigma_1^2$ |
| nrank | $\displaystyle\sum_{i=1}^{r} \sigma_i/\sigma_1$ |
| energy | $\displaystyle\sum_{i=1}^{r} \min\left[\underset{\ell\in\{1,\ldots,N\}}{\arg\max}\left(\frac{\sum_{i=1}^{\ell}\sigma_i^2}{\sum_{j=1}^{r}\sigma_j^2} > \tau\right)\right]$ |
| elbow | $\displaystyle\frac{1}{\sqrt{2}}\underset{i\in\{1,\ldots,N\}}{\arg\max}\left\lvert\frac{i-1}{N-1}+\frac{\sigma_i-\sigma_N}{\sigma_1-\sigma_N}-1\right\rvert-1$ |
| erank | $\displaystyle\exp\left[-\sum_{i=1}^{r}\frac{\sigma_i}{\sum_{j=1}^{r}\sigma_j}\log\frac{\sigma_i}{\sum_{j=1}^{r}\sigma_j}\right]$ |
| thrank | $\displaystyle\#\left\{\sigma_i \,\middle\vert\, i\in\{1,\ldots,N\} \text{ and } \sigma_i > \frac{4\sigma_{\text{med}}}{\sqrt{3\,\mu_{\text{med}}}}\right\}$ |
| shrank | $\displaystyle\#\left\{s^*(\sigma_i) \,\middle\vert\, i\in\{1,\ldots,N\} \text{ and } s^*(\sigma_i) > 0\right\}$ |

### 4.10.2 Effective ranks

The idea of extracting the number of significant components in a matrix decomposition is an old theme (e.g., in factor analysis [383, 519] or PCA [2, How Many Components ?]), but is

still subject to new interesting developments in random matrix theory, data science [215,216], and in network science where hyperbolic geometry [14] and information theory [375] are used. Because of the close relationship of SVD with the rank, many effective ranks are defined using the singular values. Intuitively, these effective ranks are numbers that indicate how many singular values are significant when decomposing a matrix. Table 4.2 presents the list of different effective ranks that we have inventoried. The effective ranks thrank and shrank are defined from matrix denoising techniques such as the ones introduced by Refs. [215,216,475], which rely on the spectral theory of infinite random matrices [57] to determine optimal ways of shrinking the singular values (see Sec. 1.5). In Fig. 4.2l, the Frobenius norm is used to obtain shrank and a threshold of 0.9 is used for the energy ratio in Fig. 4.2j.

As shown in Lemma 1.29, the following ordering of the effective ranks holds: srank $\leq$ nrank $\leq$ erank $\leq$ rank. Because of their simple forms, srank, nrank, and erank are amenable to analytic calculations. In particular, we prove that these effective ranks are of order $O(1)$ for singular values with exponentially decreasing envelopes (only stated for srank below).

**Corollary 4.2** (Simplified version of Corollary 4.30)**.** *Let* $(W_N)_{N\in\mathbb{Z}_+}$ *be an infinite sequence of matrices in which* $W_N$ *has size* $N \times N$*. Suppose that there are parameters* $\alpha$ *and* $\omega$ *such that* $0 < \alpha \leq \omega < 1$ *and for each* $N$*, the singular values* $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_N \geq 0$ *of* $W_N$ *satisfy*

$$\alpha^{i-1} \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \leq \omega^{i-1}, \qquad i \in \{1, \ldots, N\}. \tag{4.11}$$

*Then, as* $N \to \infty$*,*

$$\frac{1}{1-\alpha^2} + O(\alpha^{2N}) \leq \operatorname{srank}(W_N) \leq \frac{1}{1-\omega^2} + O(\omega^{2N}), \tag{4.12}$$

Combined with Theorem 4.1, the latter theorem implies that the expected weight matrices for the directed soft configuration model and its weighted version have $O(1)$ effective ranks.

Moreover, we show in Lemma 4.27 that srank, nrank, and erank all have an interpretation in terms of area under the normalized singular value scree plots. This point of view allows considering a more general family of singular-value envelopes, such as the one in Fig. 4.2e, to bound the effective ranks. Interestingly, the bounds are related to Gaussian hypergeometric functions, as shown in the next theorem (only stated for srank below, for simplicity).

**Theorem 4.3** (Simplified version of Theorem 4.28)**.** *Suppose that the singular values of matrix* $W$*,* $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_N \geq 0$*, satisfy the inequality*

$$\frac{(1-x_i)^{c^*-2}}{(1+\zeta^* x_i)^{b^*}} \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \leq \frac{(1-x_i)^{c_*-2}}{(1+\zeta_* x_i)^{b_*}}, \tag{4.13}$$

*where* $x_i = (i-1)/(N-1)$ *and for some* $0 \leq b_* \leq b^*$*,* $2 \leq c_* \leq c^*$*,* $0 < \zeta_* \leq \zeta^*$*, and for all* $i \in \{1, \ldots, N\}$*. Then,*

$$\frac{N-1}{2c^*-3} H(b^*, c^*, \zeta^*) \leq \operatorname{srank}(W) \leq 1 + \frac{N-1}{2c_*-3} H(b_*, c_*, \zeta_*), \tag{4.14}$$

*where* $H(b, c, \zeta) := {}_2F_1(1, 2b; 2(c-1); -\zeta)$ *and* ${}_2F_1$ *being the Gaussian hypergeometric function.*

In Fig. 4.2e, each singular value distribution of the real networks is interpolated linearly with 1000 points and the indices are then divided by 1000. The singular-value envelope is then obtained by fitting the upper bound in Eq. (4.13) to the 95th percentile of the singular values. The fit is done by minimizing the L2 norm for the parameters $b := b_* \in [0.01, 10]$, $c := c_* \in [2, 10]$, and $\zeta := \zeta_* \in [0.01, 1000]$ and the minimization gives $b \approx 0.54$, $c \approx 2.3$, and $\zeta \approx 25$. We then use those parameters to evaluate the upper bound in Eq. (4.14) divided by $N$ (where we neglect the terms $1/N$), which is shown in Fig. 4.2f.

Corollary 4.32 shows that if there is a growing graph whose singular values remain bounded within hypergeometric envelopes, then srank, nrank, and erank are of order $O(N^{1-\epsilon})$ with $\epsilon \in (0, 1]$ in different asymptotic regimes for the parameters $b$ and $\zeta$, meaning that the effective rank to dimension ratios become negligible asymptotically. Section 4.11.3 clarifies how various singular-value envelopes can lead to very distinct asymptotic behaviors (see Fig. 4.8).

When the asymptotic perspective is no longer applicable (e.g., for real networks), we cannot classify an effective rank as either "low" or "high". Yet, as explained in the main text, we can use effective ranks to dimension ratios, which are well defined for all $N$ and their values range from 0 ($W$ has rank 0) to 1 ($W$ has full rank).

### 4.10.3 Dimension reduction of dynamical systems

Dimension reduction of high-dimensional nonlinear dynamics is a fundamental approach to get analytical and numerical insights on complex systems. Low-dimensional dynamics can be obtained from an optimization problem, where some error is minimized under a set of constraints to preserve the salient properties of the original system. For dynamical systems, a natural optimization variable is the reduced vector field $F$ itself, which is chosen to represent approximately the complete vector field $f$. Yet, it is rather puzzling to find how the different vector field errors are related to each other and which one can be minimized analytically. In Sec. 3.4, we provided a useful diagram (see Diagram 3.46) that sheds light on the links between the different ways to define alignment errors between vector fields. We also showed that the vector field of the reduced dynamics $\dot{X} = Mf(M^+X)$ is optimal, i.e., it minimizes the alignment error $\varepsilon'(x)$ in $\mathbb{R}^N$ and it makes the alignment error $\mathcal{E}'(x)$ equal to 0.

In Table 4.3, we apply this optimal dimension reduction on five dynamics from different fields of application. For the RNN and the neuronal dynamics, we have $\mathcal{D}^{(2)} = -MDM^+$ where $D = \mathrm{diag}(d_1, ..., d_N)$ and $\mathscr{W}_{j\nu} = \sum_{k=1}^{N} W_{jk} M^+_{k\nu}$ and we discuss the other dynamics in the next part of the Methods. With the optimal vector field in Eq. (3.52) and for dynamics of the general form $\dot{x} = g(x, y)$ (see Assumptions 4.51), we find an upper bound on the alignment error $\mathcal{E}(x)$ related to the singular values of $W$.

Table 4.3 – **Vector fields of typical nonlinear dynamics on a network and their least-square optimal reduced dynamics.** The epidemiological dynamics is the quenched mean-field susceptible-infected-susceptible (QMF SIS). Its parameters in Fig. 4e are $d_i = 1$ for all $i$, $\gamma$ is the global infection rate and the global observable $\mathcal{X}^* = w \cdot X^*$ is defined with $w = (w_1\ 0\ ...\ 0)^\top$ with $w_1 = 1/\sum_{j=1}^N (v_1)_j$, where $v_1$ is the leading right singular vector of the contact network. The microbial dynamics is a population dynamics and when $a = b = c = 0$, it is the well-known generalized Lotka-Volterra dynamics. Its parameters in Fig. 4g are $a = 5$, $b = 13$, $c = 1$, $d_i = 30$ for all $i$, $\gamma$ is the global microbial interaction weight, and the global observable is defined with $w = (w_1\ ...\ w_{n_{\min}}\ 0\ ...\ 0)^\top$ with $\bar{w} = (w_1\ ...\ w_{n_{\min}}) = V_{n_{\min}}^\top \mathbb{1}/(10N)$ and $n_{\min} = 76$, which is chosen to approach the uniform global observable $\sum_{i=1}^N x_i/(10N)$. The oscillator dynamics is the Kuramoto-Sakaguchi dynamics for which $x_i = e^{\mathrm{i}\theta_i}$, where $\theta_i$ is the phase of the oscillator, i is the imaginary unit (to be distinguished with the index $i$), $^-$ denotes complex conjugation, and $X_1, ..., X_n$ are thus complex. The acronym RNN stands for recurrent neural network and its parameters in Fig. 4h are $d_i = 1$ for all $i$ and $\gamma = 2$. The neuronal dynamics is the Wilson-Cowan dynamics, where $\mathcal{S}$ denotes the sigmoid function $x \mapsto 1/(1 + e^{-x})$. Its parameters in Fig. 4f are $a = 0.05$, $b = 1$, $c_i = 1$, $d_i = 1$ for all $i$, $\gamma$ is the global synaptic weight and the global observable is defined with $w = (w_1\ 0\ ...\ 0)^\top$ with $w_1 = 1/(0.15\sum_{j=1}^N (v_1)_j)$ where $v_1$ is the leading right singular vector of the connectome. More details about the dynamics and their parameters are given in SI IIIB and SI IIIC.

| **Name** | **Complete vector field** $h_i(x_i, y_i)$ | **Reduced vector field** $H_\mu(X_1, ..., X_n)$ |
|---|---|---|
| Epidemiological | $-d_i x_i + \gamma(1 - x_i)\, y_i$ | $\sum_{\nu=1}^n (\mathcal{D}_{\mu\nu} + \mathcal{W}_{\mu\nu})\, X_\nu + \sum_{\nu,\kappa=1}^n \mathcal{T}_{\mu\nu\kappa} X_\nu X_\kappa$ |
| Microbial | $a - d_i x_i + b x_i^2 - c x_i^3 + \gamma\, x_i\, y_i$ | $\mathcal{C}_\mu + \sum_{\nu=1}^n \mathcal{D}_{\mu\nu} X_\nu + \sum_{\nu,\kappa=1}^n \left(\mathcal{D}_{\mu(\nu,\kappa)} + \mathcal{T}_{\mu\nu\kappa}\right) X_\nu X_\kappa + \sum_{\nu,\kappa,\tau=1}^n \mathcal{D}_{\mu(\nu,\tau,\kappa)} X_\nu X_\kappa X_\tau$ |
| Oscillator | $\mathrm{i}\omega_i x_i + \gamma\, e^{-\mathrm{i}\alpha}\, y_i - \gamma\, e^{\mathrm{i}\alpha}\, x_i^2\, \bar{y}_i$ | $\sum_{\nu=1}^n (\mathcal{D}_{\mu\nu} + \mathcal{W}_{\mu\nu})\, X_\nu + \sum_{\nu,\kappa,\tau=1}^n \mathcal{T}_{\mu(\nu,\kappa)\tau} X_\nu X_\kappa \bar{X}_\tau$ |
| RNN | $-d_i x_i + \tanh(\gamma y_i + c_i)$ | $\sum_{\nu=1}^n \mathcal{D}_{\mu\nu} X_\nu + \sum_{i=1}^N M_{\mu i} \tanh\left(\gamma \sum_{\nu=1}^n \mathscr{W}_{j\nu} X_\nu + c_i\right)$ |
| Neuronal | $-d_i x_i + (1 - a x_i)\, \mathcal{S}[b(\gamma\, y_i - c_i)]$ | $\sum_{\nu=1}^n \mathcal{D}_{\mu\nu} X_\nu + \sum_{j=1}^N M_{\mu j} \left(1 - a \sum_{\nu=1}^n M_{j\nu}^+ X_\nu\right) \mathcal{S}\left[b\left(\gamma \sum_{\kappa=1}^n \mathscr{W}_{j\kappa} X_\kappa - c_i\right)\right]$ |

**Theorem 4.4** (Simplified version of Theorem 4.53)**.** *The alignment error* $\mathcal{E}(x)$ *in* $\mathbb{R}^n$ *at* $x \in \mathbb{R}^N$ *is upper-bounded as*

$$\sqrt{n}\,\mathcal{E}(x) \leq \|V_n^\top J'_x (I - V_n V_n^\top)x\| + \sigma_{n+1}\|V_n^\top J'_y\|_2 \|x\|, \tag{4.15}$$

*where* $y' = Wx'$ *with* $x'$ *being some point between* $x$ *and* $V_n V_n^\top x$*,* $\sigma_i$ *is the* $i$*-th singular value of* $W$*, and* $J'_x = J_x(x', y')$*,* $J'_y = J_y(x', y')$ *are the Jacobian matrices of* $f$ *with derivatives according to the vectors* $x$ *and* $y$ *respectively. Moreover, for any* $x$ *not at the origin of* $\mathbb{R}^N$*, the following upper bound holds:*

$$\frac{\mathcal{E}(x)}{\|x\|} \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\Big[\alpha(x', y') + \sigma_{n+1}\beta(x', y')\Big], \tag{4.16}$$

*where* $\alpha(x', y') = \sigma_1(J_x(x', y'))$ *and* $\beta(x', y') = \sigma_1(J_y(x', y'))$*.*

As a bonus, the proof of the theorem suggests choosing $M$ as the truncated right singular vectors $V_n^\top$, since it allows minimizing a part of the bound. This is a consequence of the Schmidt-Eckart-Young-Mirsky theorem and more specifically, Theorem 1.27. This choice for $M$ also has a notable consequence: each observable $X_\mu$ generally becomes a global observable in that it contains information on most vertices. This characteristic, alongside that it is a finite-size dimension reduction, make our approach stands out from many mean-field modeling approaches used in network science in which vertices are coarse-grained according to their degree (local property) or to some other mesoscopic property of the network.

Theorem 4.4 also provides a criterion for exact dimension reduction: if $J_x(x', y') = dI$ for some real constant $d$ and $n$ is the rank of $W$, then $\mathcal{E}(x) = 0$ (see Corollary 4.55 in SI 4.12.2). For example, we find that the class of dynamics of matrix form

$$\dot{x} = d\,x + s(Wx)\,, \tag{4.17}$$

where $s$ is a vector of $N$ functions $s_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ and $W$ has rank $r$ and compact SVD $U_r \Sigma_r V_r^\top$, can be exactly reduced to the $r$-dimensional reduced dynamics

$$\dot{X} = d\,X + V_r^\top s(U_r \Sigma_r X), \tag{4.18}$$

where $X = V_r^\top x$. For any $n$ and $X = V_n^\top x$, the vector field in Eq. (4.18) is the least-square optimal one in the sense described in Theorem 3.45 of Sec. 3.4. This result implies that any RNN or any neuronal dynamics (with $a = 0$) having the forms given in Table 4.3 can be exactly reduced (see Examples 4.57-4.58 in SI 4.12.2).

A simple corollary of the latter theorem (Corollary 4.60) shows that if the dynamics is a linear system, the relative alignment error in $\mathbb{R}^n$ at $x \in \mathbb{R}^N$ is

$$\frac{\mathcal{E}(x)}{\|x\|} \leq \frac{\sigma_{n+1}}{\sqrt{n}}, \tag{4.19}$$

implying that a rapid decrease of the singular values of $W$ directly induces a rapid decrease of the alignment error.

### 4.10.4 Emergence of higher-order interactions

All the $N$-dimensional (complete) dynamics on a network in Table 4.3 (and many more, see SI 4.12.1) have the general form $\dot{x}_i = h_i(x_i, y_i)$ for all $i \in \{1, ..., N\}$, where $x_i : [0, \infty) \to \mathbb{R}$, $y_i = \sum_{j=1}^{N} W_{ij} x_j$, and $h_i : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ is an analytic function.

**Proposition 4.5** (Simplified version of Proposition 4.43)**.** *The least-square reduced dynamics can be expressed in terms of higher-order interactions between the observables as*

$$\dot{X}_\mu = \mathcal{C}_\mu + \sum_{d_x=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{D}_{\mu\boldsymbol{\alpha}}^{(d_x+1)} X_{\boldsymbol{\alpha}} + \sum_{d_y=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{\beta}} \mathcal{W}_{\mu\boldsymbol{\beta}}^{(d_y+1)} X_{\boldsymbol{\beta}} + \sum_{d_x,d_y=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} \mathcal{T}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}^{(d_x+d_y+1)} X_{\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}},$$

*where we have introduced the multi-indices $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, ..., \alpha_{d_x})$ and $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, ..., \beta_{d_y})$ with $\alpha_p, \beta_q \in \{1, ..., n\}$, the compact notation for products $X_{\boldsymbol{\gamma}} = X_{\gamma_1} ... X_{\gamma_d}$, while $\mathcal{C}_\mu$ denotes a real constant and $\mu \in \{1, \dots, n\}$. The higher-order interactions are described by three tensors of respective order $d_x + 1$, $d_y + 1$, $d_x + d_y + 1$, and whose elements are*

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{\mu\boldsymbol{\alpha}}^{(d_x+1)} &= \sum_{i=1}^{N} c_{id_x0} M_{\mu i} M_{i\boldsymbol{\alpha}}^{+}, \\
\mathcal{W}_{\mu\boldsymbol{\beta}}^{(d_y+1)} &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\boldsymbol{j}} c_{i0d_y} M_{\mu i} W_{i\boldsymbol{j}} M_{\boldsymbol{j}\boldsymbol{\beta}}^{+}, \\
\mathcal{T}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}^{(d_x+d_y+1)} &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\boldsymbol{j}} c_{id_xd_y} M_{\mu i} M_{i\boldsymbol{\alpha}}^{+} W_{i\boldsymbol{j}} M_{\boldsymbol{j}\boldsymbol{\beta}}^{+},
\end{aligned}$$

*for some real coefficients $c_{id_xd_y}$ with $i \in \{1, ..., N\}$, $d_x, d_y \in \mathbb{Z}_+$ and the multi-index $\boldsymbol{j}$ in the sums is in $\{1, ..., N\}^{d_y}$.*

This proposition led us to two corollaries. First, if $h_i(x_i, y_i)$ is a polynomial of total degree $\delta$ in $x_i$ and $y_i$, then the reduced dynamics has a polynomial vector field of total degree $\delta$ with interactions of maximal order $\delta + 1$ (Corollary 4.46). Second, if $M$ is block diagonal and $h_i$ linearly depends on $y_i$, then there are solely pairwise interactions in the reduced system, which doesn't hold in general for nonlinear dependencies of $h_i$ over $y_i$ (Corollary 4.47).

In Table 4.3, we apply Proposition 4.5 and Corollary 4.46 to the QMF SIS dynamics, the microbial dynamics, and the Kuramoto-Sakaguchi dynamics, which illustrates concretely the emergence of higher-order interactions through dimension reduction. More details are given in SI 4.12.1.

### 4.10.5 *Integration and properties of the dynamics

The trajectories of the dynamics on the real networks presented in Fig. 4.5 were obtained with `solve_ivp` from `scipy.integrate`. We used the backward differentiation formula (BDF), an implicit method with variable step length and order, which is known to be well suited for stiff problems, such as the microbial dynamics on the gut microbiome. We observed that a relative tolerance rtol $= 10^{-8}$ and an absolute tolerance of atol $= 10^{-12}$ for the complete microbial dynamics (rtol $= 10^{-6}$ and atol $= 10^{-10}$ for the reduced dynamics) gave reliable results with decent integration time while being in line with the recent benchmarks of Ref. [553].

Moreover, we have provided the Jacobian matrices of the complete and reduced dynamics to the integrator as recommended in the documentation of solve_ivp for the BDF method. We also integrated the other dynamics with the BDF method with a relative tolerance of $10^{-8}$ and an absolute tolerance of $10^{-12}$.

For the epidemiological dynamics, the phenomenon of critical slowing down appears, but it is easily dealt with by increasing the number of time steps near the transcritical bifurcation (at the infection rate of 1, that is, the largest singular value of the rescaled network) as we have done in the inset of Fig. 4.5e. Note that increasing the dimension improves the prediction for higher infection rates. In Fig. 4.5f, we observe a hysteresis for the global observable of the neuronal dynamics vs. the synaptic weight. In Fig. 4.5e-f, the root-mean-square errors (RMSE) are simply computed between the global equilibrium points of the complete and the reduced dynamics at different $n$.

As illustrated in Fig. 4.5g, multiple branches of stable equilibrium points for the global observables of the microbial dynamics arise. We proceeded as follows to get a simplified picture involving only some equilibrium point branches. We focused on one forward branch obtained with initial conditions $x_0$ sampled from a uniform distribution between 0 and 1 and showed its loss of stability when incrementally increasing the microbial interaction weight in Fig. 4.5g. To obtain one backward branch, we sampled the initial condition $x_0$ from a uniform distribution between 0 and $z$ where $z$ is a random integer between 1 and 15, we integrated the dynamics to get the equilibrium point, we decreased the microbial interaction weight and used the last equilibrium point as the initial condition for the integration, and repeated these last two steps until the minimum coupling value (0.1 in Fig. 4.5g) is reached. We repeated all these steps 100 times (300 for $n = 76$) to generate different initial conditions and stable branches. At each iteration, we ensured that the vector fields evaluated at the equilibrium points gave a vector with elements below the tolerance $10^{-7}$ and that the equilibrium points were positive (see SI 4.12.6). In this case, the RMSE is computed between the average upper and lower branches of the complete and reduced dynamics.

For the (finite-size) recurrent neural network, similar to the observations in the conclusion of Ref. [544], there is a stable equilibrium point at zero for lower coupling and increasing the coupling eventually gives rise to limit cycles of increasing complexity such as the one in Fig. 4.5h. We illustrate a 3-dimensional projection of this high-dimensional limit cycle in the complete dynamics and the ones in the reduced dynamics as the dimension $n$ approaches the rank of the learned network. The RMSE is computed between the points of the limit cycle for the complete recurrent neural dynamics and the closest points on the limit cycles of the reduced dynamics.

The choices of global observables used in Fig. 4.5 are justified in SI 4.12.4 and the parameters of the dynamics are in Table 4.3.

## 4.11 Appendix: SVD in the study of complex systems

In this section, we present applications of SVD in the study of complex systems. First, we highlight the ubiquity of the low-rank hypothesis in random graph theory. Second, we present original theorems for the rapid decrease of the singular values in the directed soft configuration model and its weighted version. Third, inequalities and scaling behaviors for the effective ranks are deduced from different decreasing behaviors of the singular values. Fourth, we discuss preliminary results concerning the evolution of the effective rank in adaptive systems. Finally, we give a short overview of the use of SVD in dynamical systems.

### 4.11.1 SVD of random graphs

Random graphs and their eigenvalue spectrum have a long and rich history [37,73,103,118,122, 123,156,203,425,436,438,466,544,596], but less attention has been given to their singular value decomposition. Indeed, SVD is not mentioned in many of the main introductory textbooks of network science [43,175,345,433] or spectral graph theory [118,136,438]. This phenomenon is somewhat expected, since both fields needed to develop their own set of tools, but we believe that SVD deserve much more attention. In the following, we present the low-rank formulation in a wide variety of models ranging from network science and random matrix theory to machine learning and neuroscience.

The adjacency or the weight matrix of a random network model can always be written as

$$W = \langle W \rangle + R \,, \tag{4.20}$$

where $R$ is a zero mean random matrix and $\langle W \rangle$ is the (deterministic) expected weight matrix. Typically, $\langle W \rangle$ depends upon a low-rank matrix $L$:

$$\langle W \rangle = \Phi(L) \,, \tag{4.21}$$

where $\Phi$ a matrix-valued function of a matrix variable. In all the cases studied below, the $(i,j)$ element $\Phi(L)$ is equal to $\phi(L_{ij})$, with $\phi$ being a real scalar function of a real variable. To expose the low-rank formulation of $\langle W \rangle$, recall that there always exists a rank factorization

$$\langle W \rangle = LR^\top \,, \tag{4.22}$$

where $L, R$ are $N \times r$ matrices and $r$ is the rank of $\langle W \rangle$. Another convenient form is the sum of rank one matrices

$$\langle W \rangle = \sum_{\mu,\nu=1}^{s} \alpha_{\mu\nu} \boldsymbol{a}_\mu \boldsymbol{c}_\nu^\top = \sum_{\mu=1}^{s} \boldsymbol{a}_\mu \boldsymbol{b}_\mu^\top \,, \tag{4.23}$$

where $\boldsymbol{a}_\mu$, $\boldsymbol{c}_\mu$ are $N \times 1$ vectors, $\alpha_{\mu\nu}$ is a real constant for all $\mu, \nu$, and $\boldsymbol{b}_\mu = \sum_{\nu=1}^{s} \alpha_{\mu\nu} \boldsymbol{c}_\nu$. Indeed, defining the $N \times s$ matrices $A = (\boldsymbol{a}_1, ..., \boldsymbol{a}_s)^\top$ and $B = (\boldsymbol{b}_1, ..., \boldsymbol{b}_s)^\top$ yields $\langle W \rangle = AB^\top$ and ensures that the rank of $W$ is at most $s$. In the next examples, we provide the details about the random graphs of Table 4.1 in the Methods.

**Example 4.6** (Network science—unweighted graphs)**.** A large class of binary random graphs are described by Bernouilli random matrices, $R_{ij}$ being equal to either $-\langle W_{ij}\rangle$ or $1-\langle W_{ij}\rangle$. The expected adjacency matrix for...

— ...the $\mathcal{G}(N,p)$ *model* [168, 221, 543] with self-loops is

$$\langle W\rangle = L = Np\,\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{1}}^\top\,, \tag{4.24}$$

where $Np\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{1}}^\top$ is the (exact) SVD of the mean adjacency matrix, which is a rank one matrix with singular value $Np$ and $N\times 1$ singular vectors $\hat{\mathbf{1}} = (1\,...\,1)^\top/\sqrt{N}$. The model is also called Poisson random graph, Erdős-Rényi model [430], Bernouilli random matrix [252], or spiked Wigner matrix [474].

— ...the *stochastic block model* (SBM) [272, 651] with $q$ communities (generalization of $\mathcal{G}(N,p)$) is

$$\langle W\rangle = L = \sum_{\mu,\nu=1}^{q} \sqrt{n_\mu n_\nu}\,p_{\mu\nu}\,\boldsymbol{b}_\mu\boldsymbol{b}_\nu^\top\,, \tag{4.25}$$

where $p_{\mu\nu}$ is the probability for a vertex in the $\mu$-th block of size $n_\mu$ to be connected to a vertex in the $\nu$-th block of size $n_\nu$ and $b_\mu$ is a block vector with $1/\sqrt{n_\mu}$ at the indices of the $\mu$-th block and zeros elsewhere.

— ... the *Chung-Lu model* [119, 120] is

$$\langle W\rangle = L = \frac{\|\boldsymbol{\kappa}\|^2}{2M}\hat{\boldsymbol{\kappa}}\hat{\boldsymbol{\kappa}}^\top\,, \tag{4.26}$$

where $\boldsymbol{\kappa}$ is a vector of expected degrees. Note that the annealed approximation, omnipresent in epidemiology [617] (or for spin models [155]), is thus a very strong low-rank hypothesis.

— ... the *metadegree model* [594] is

$$\langle W\rangle = L = \sum_{\mu,\nu=1}^{r} \Delta_{\mu\nu}\,\boldsymbol{v}_\mu\boldsymbol{v}_\nu^\top, \tag{4.27}$$

where $(v_\mu)_{\mu=1}^r$ are the $N$-dimensional vectors of metadegree and $\Delta$ is a $r\times r$ nonsingular matrix that contains the "coefficients of mixing" among metadegrees. In Ref. [594, p.2, 2nd column, 2nd paragraph], a low-rank hypothesis is explicitly made as they assume that the rank of $V\Delta V^\top$ is much smaller than the size of the system. One must say, however, that the model is flexible and generalizes, in particular, the Chung-Lu model. The framework developed by the authors of Ref. [594] offers a solid discussion and a strong theoretical ground to better understand, classify, and design random graphs in the future. Their work has inspired our preliminary thoughts on the low-rank hypothesis.

— ... the directed $S^1$ model of *random geometric networks* [11, 324] has elements

$$\langle W_{ij}\rangle = \phi(L_{ij}) = \frac{1}{1+L_{ij}^{\beta/2}}\,, \tag{4.28}$$

where $\beta > 0$ (inverse temperature of the Fermi-Dirac distribution). The elements of the matrix $L$ are defined as

$$L_{ij} = \frac{R^2\theta_{ij}^2}{\mu^2(\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}})_i^2(\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}})_j^2}\,, \tag{4.29}$$

where $\mu$ and $R$ are positive constants, the latter representing the radius of the circle on which the vertices are distributed, $\theta_{ij}$ is the angular distance between the vertices $i$ and $j$ on the circle, and $(\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}})_i, (\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}})_i$ denote the $i$-th latent in- and out-degrees respectively (positive constants). To estimate the rank of the matrix $L$, it is more convenient to rewrite it using the Hadamard product:

$$L = \frac{R^2}{\mu^2}\left(\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^{\top}\right) \circ \bar{\theta}\,, \tag{4.30}$$

where

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}} = (\,1/(\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}})_i^2\,)_{i=1}^N, \qquad \bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}} = (\,1/(\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}})_i^2\,)_{i=1}^N, \qquad \bar{\theta} = (\,\theta_{ij}^2\,)_{i,j=1}^N\,. \tag{4.31}$$

Clearly, $\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\bar{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^{\top}$ is a rank-one matrix. Now, according to Ref. [248, Theorem 7], the rank of a distance matrix (with squared elements) is $D$, $D+1$, or $D+2$, where $D$ is the dimension of the manifold where the points are embedded. Here $D = 1$, which means that the rank of $\bar{\theta}$ is at most 3. Recalling the well-known inequality $\operatorname{rank}(A \circ B) \leq \operatorname{rank}(A)\operatorname{rank}(B)$, we conclude that the matrix $L$ defining the expected adjacency matrix of the $S^1$ model has a rank of at most 3. For the $S^D$ model [158], one can proceed similarly to conclude that its expected adjacency matrix has a rank of at most $D+2$.

— ... the *soft directed configuration model* also has elements following a Fermi-Dirac distribution such that

$$\langle W_{ij}\rangle = \phi(L_{ij}) = \frac{L_{ij}}{1+L_{ij}}\,, \qquad L_{ij} = \alpha_i\beta_j \tag{4.32}$$

for some positive parameters $\alpha_i, \beta_j$. Thus, $L = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}^T$ is a rank-one matrix and $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ are positive vectors defined in subsection 4.11.2.

— ... of the *Barabási-Albert model* (BA) [44], a model of preferential attachment and a particular case of Price's model [139], does not possess an explicit formula of the form $\langle W\rangle = \Phi(L)$. However, in Fig. 4.6b, we show the singular values of the model for increasing values of $m$, the number of edges to which a new vertex is attached, and we observe rapid decreases.

■

**Example 4.7** (Network science—weighted graphs)**.** All the above-mentioned unweighted graph models can be generalized to include weights.

— The simplest procedure consists in posing

$$W = A \circ \mathcal{W}\,, \tag{4.33}$$

where $A$ and $\mathcal{W}$ are two independent $N \times N$ random matrices. The first matrix, $A$, corresponds to the Bernoulli matrices introduced in Example 4.6 that control the existence of edges, while $\mathcal{W}$ is a (possibly continuous) random matrix that only encodes the values of the weights. Due to the independence of $A$ and $\mathcal{W}$, the expected weight matrix factorizes as

$$\langle W \rangle = \langle A \rangle \circ \langle \mathcal{W} \rangle . \tag{4.34}$$

For instance, supposing that the elements of $A$ are i.i.d. such that $\text{Prob}(A_{ij} = 1) = p$, we get the *weighted* $\mathcal{G}(N, p)$ *model* satisfying

$$\text{Prob}(W_{ij} = 0) = 1 - p, \qquad \text{Prob}(W_{ij} \neq 0) = p, \qquad \langle W \rangle = p \langle \mathcal{W} \rangle, \tag{4.35}$$

meaning that the average matrix of weights completely determine the rank of $\langle W \rangle$. If we additionally impose that all $W_{ij}$'s are i.i.d. with mean $w$, then we conclude that

$$\langle W \rangle = Npw \, \hat{\mathbf{1}} \hat{\mathbf{1}}^\top , \tag{4.36}$$

thus corresponding to a rank-one model that we denote $\mathcal{G}(N, p, w)$ in Table 4.1.

— When $p = 1$ in Eq. (4.35), all edges exist and one recovers the models of complete weighted graphs, such as the simplest form of the *weighted stochastic block model* (WSBM) with $q$ communities (groups) [9, Eq. (2.3)] (where $q = K$), for which the probability density function of the weights is

$$f_W(w) = \prod_{i,j=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Sigma_{ij}^2}} e^{-\frac{(w_{ij} - M_{ij})^2}{2\Sigma_{i,j}^2}} , \tag{4.37}$$

where $M = (M_{ij})_{i,j=1}^N$ and $\Sigma = (\Sigma_{ij})_{i,j=1}^N$ are block matrices whose elements can only take a few different values encoded in the $q \times q$ matrices $\mu$ and $\sigma$ as

$$M_{ij} = \mu_{g_i g_j} \qquad \text{and} \qquad \Sigma_{ij} = \sigma_{g_i g_j} . \tag{4.38}$$

In the last equations, $g_i \in \{1, \ldots, q\}$ is the group label of vertex $i$. The expected weight matrix of this WSBM is simply

$$\langle W \rangle = L = M = \sum_{\kappa,\nu=1}^{q} \sqrt{n_\kappa n_\nu} \, \mu_{\kappa\nu} \, \boldsymbol{b}_\kappa \boldsymbol{b}_\nu^\top , \tag{4.39}$$

where $n_\kappa$ and $\boldsymbol{b}_\kappa$ are defined as in Example 4.6 for the SBM. Since the vertices belonging to the same group produce the same rows in matrix $M$, we conclude that the rank of $L$ is at most $q$.

— Random models as in Eq. (4.33) were also used to define weighted versions of the SBM [437] and planted-partition model [83]. Moreover, they served to study synchronization in random weighted directed networks [482] as well as the spectral properties of neuronal

networks with inhibition [493] and the transitions to chaos of dilute random neuronal networks [297]. Separating edges and their weights as in Eq. (4.33) is also common practice in random matrix theory when studying the spectral properties of random weighted directed graphs [131, 134, 246, 575, 644].

— Although variables $A$ and $\mathcal{W}$ are independent in Eq. (4.33), variables $A$ and $W = A \circ \mathcal{W}$ depend on each other. Indeed, they have a non-factorizable joint probability density function (pdf) of the form

$$F_{A,W}(a,w) = \prod_{1 \le i < j \le N} \Big( p_{ij}\delta(a_{ij}-1) f_{\mathcal{W}_{ij}}(w_{ij}) + (1-p_{ij})\delta(a_{ij})\delta(w_{ij}) \Big), \tag{4.40}$$

where $\delta$ denotes Dirac's delta distribution, $p_{ij}$ is the marginal probability for $A_{ij} = 1$, and $f_{\mathcal{W}_{ij}}$ is the pdf of the independent variable $\mathcal{W}_{ij}$. Note that we have assumed that the graph is undirected for simplicity. We see from the previous equation that $\mathcal{W}_{ij}$ can be interpreted as the random variable $W_{ij}$ given the existence of an edge from $j$ to $i$, i.e., $W_{ij} \,|\, A_{ij} = 1$. Setting $\mu_{ij} = \langle \mathcal{W}_{ij} \rangle = \int w f_{\mathcal{W}_{ij}}(w) dw$ and returning to Eq. (4.34), we conclude that any model defined using Eq. (4.40) also satisfies

$$\langle\, W_{ij} \,\rangle = p_{ij}\mu_{ij}. \tag{4.41}$$

A good example of such a model is the $S^1$ version of the *weighted random geometric model* (WRGM) [12] with fixed hidden variables

$$\boldsymbol{\theta} \in [0, 2\pi)^N, \qquad \boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}_+^N, \qquad \boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{R}_+^N, \tag{4.42}$$

and parameters

$$\alpha \in [0,1), \qquad \beta > 1, \qquad \mu > 0, \qquad \nu > 0, \qquad R > 0\,. \tag{4.43}$$

One can prove that the pdf of this model is given by Eq. (4.40) with

$$p_{ij} = \frac{1}{1+L_{ij}^{\beta}}, \qquad L_{ij} = \frac{R\theta_{ij}}{\mu\kappa_i\kappa_j}, \qquad f_{\mathcal{W}_{ij}}(w) = \frac{\nu\sigma_i\sigma_j}{(\kappa_i\kappa_j)^{1-\alpha}(R\theta_{ij})^{\alpha}} f(\epsilon)\,, \tag{4.44}$$

where $R$ stands for the radius of the circle on which the vertices are distributed, $\theta_{ij}$ is the angular distance between the vertices $i$ and $j$, respectively placed at angle $\theta_i$ and $\theta_j$ on the circle, and $\epsilon$ is an auxiliary random variable whose pdf is $f$ and whose mean is equal to 1. The expected weighted matrix is thus

$$\langle\, W_{ij} \,\rangle = \phi(L_{ij}, M_{ij}) = \frac{1}{L_{ij}^{\alpha}(1+L_{ij}^{\beta})} M_{ij}, \qquad M_{ij} = \frac{\nu\sigma_i\sigma_j}{\mu^{\alpha}\kappa_i\kappa_j}\,. \tag{4.45}$$

The rank of the corresponding matrices $L$ and $M$ are at most 3 and equal to 1, respectively.

— All multigraphs can be interpreted as weighted graphs in which the weights can only take nonnegative integer values. One of the best known and most widely used examples of a random multigraph, and thus a weighted random graph, is the *degree-corrected stochastic block model* (DCSBM) [303, 467] with $q$ communities whose probability mass function is defined as

$$\text{Prob}(W = w) = \prod_{1\leq i,j\leq N} \frac{e^{-\alpha_{ij}}\alpha_{ij}^{w_{ij}}}{w_{ij}!}\,, \tag{4.46}$$

that is, the random variable $W_{ij}$ follows a Poisson distribution with values $w_{ij} \in \mathbb{N}$ for all $i, j$ and parameter

$$\alpha_{ij} = \lambda_{g_i g_j}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}})_i(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}})_j\,. \tag{4.47}$$

In the last equation, $g_i \in \{1, \ldots, q\}$ denotes the group (community) label to which vertex $i$ belongs and $\lambda_{g_i g_j}$ is the expected number of edges from group $g_j$ to $g_i$. Moreover, $(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}})_i$ and $(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}})_i$ are group-normalized expected in- and out-degrees, i.e.,

$$\sum_{i=1}^{N}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}})_i\delta_{g_i,\mu} = 1\,, \qquad \sum_{i=1}^{N}(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}})_i\delta_{g_i,\mu} = 1 \tag{4.48}$$

for all $\mu \in \{1, \ldots, q\}$. The expected weight matrix is thus

$$\langle W\rangle = L = \Lambda \circ (\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^{\top}), \tag{4.49}$$

where $\Lambda = (\lambda_{g_i g_j})_{i,j=1}^{N}$ is a block matrix of rank at most $q$ while $\hat{\boldsymbol{\kappa}}$ is the vector of expected degrees. Now, according to the rank inequality for the Hadamard product,

$$\text{rank}(L) = \text{rank}\left(\Lambda \circ (\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^{\top})\right) \leq \underbrace{\text{rank}\,(\Lambda)}_{\leq q}\underbrace{\text{rank}\left(\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{in}}\hat{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{out}}^{\top}\right)}_{1} = q. \tag{4.50}$$

Thus, including a "rank-one correction" for better describing vertex degrees in SBM does not affect its low-rank property.

— ...the *random dot product graph* [38] is

$$\langle W\rangle = L = XX^{\top}\,, \tag{4.51}$$

where $X$ is a $N \times d$ matrix where the rows are the latent positions of each vertex of the graph. The rank of $\langle W\rangle$ is obviously less or equal to $d$ and from Ref. [38, p.14]: "[...]in the RDPG case, where $\boldsymbol{P}$ [(i.e., $\langle W\rangle$)] is of low rank [...]". The model generalizes the SBM, the degree-corrected SBM and the mixed-membership SBM as shown in Theorem 15 of Ref. [38], which is why we classify it in the weighted networks.

— The authors [213, 214] introduced yet another simple method for providing weights to many classical random network models. Using entropy maximization, they defined exponential families of random weighted graphs, such as those whose weights $w_{ij}$ are nonnegative integers and whose probability mass function is

$$\text{Prob}(W = w) = \prod_{1\leq i<j\leq N}(1 - y_i y_j)(y_i y_j)^{w_{ij}} \tag{4.52}$$

where $y_i$ and $y_j$ satisfy $0 < y_i y_j < 1$ for all $i, j$ and are related in a nonlinear way to the expected strengths while controlling the probability of having an edge from $j$ to $i$. Indeed,

$$\text{Prob}(W_{i,j} = 0) = 1 - y_i y_j \qquad \text{and} \qquad \text{Prob}(W_{i,j} \neq 0) = y_i y_j \,. \tag{4.53}$$

We see that the random variable $W_{i,j} + 1$ follows a geometric distribution of parameter $1 - y_i y_j$. One easily shows that the elements of the expected weight matrix follow the Bose-Einstein distribution

$$\langle W_{ij} \rangle = \phi(L_{ij}) = \frac{L_{ij}}{1 - L_{ij}} \,, \qquad L_{ij} = y_i y_j, \tag{4.54}$$

meaning that the expected weight matrix $\langle W \rangle$ is a function of the rank-one matrix

$$L = \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top \,. \tag{4.55}$$

The above random graph is somewhat analogous to the model presented in Eq. (4.32). For this reason, we call the weighted graph satisfying Eq. (4.52) the *weighted soft configuration model* (WSCM).

— The weighted random graph defined in Eq. (4.52) can be related to the Chung-Lu model. Indeed, supposing $y_i y_j \ll 1$, we get

$$\langle W_{ij} \rangle = y_i y_j + O\big((y_i y_j)^2\big) \,. \tag{4.56}$$

Comparing with Eq. (4.26), we conclude that the limit case $\langle W \rangle = \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top$, where the rank of the expected weight matrix is exactly equal to one, corresponds to a *weighed Chung-Lu model*, sometimes called weighted configuration model (cf. [536, Eq. 5]).

— To define the *weighted directed soft configuration model* (WDSCM), we need to modify Eq. (4.52). First, we introduce new positive parameters, say $\bar{y}_1, \ldots, \bar{y}_N$. Then we set

$$\text{Prob}(W = w) = \prod_{1 \leq i,j \leq N} (1 - y_i \bar{y}_j)(y_i \bar{y}_j)^{w_{ij}}, \qquad w_{ij} \in \mathbb{N}, \tag{4.57}$$

which means that $W_{ij}+1$ a random variable having a geometric distribution of parameter $1 - y_i \bar{y}_j$. Therefore,

$$\langle W_{ij} \rangle = \phi(L_{ij}) = \frac{L_{ij}}{1 - L_{ij}} \,, \qquad L_{ij} = y_i \bar{y}_j, \,, \tag{4.58}$$

meaning that the edge directionality has no impact on the rank of the expected weight matrix.

— The model defined by Eq. (4.52) is a special case of the following random graph, also introduced in [214]:

$$\text{Prob}(W = w) = \prod_{1 \leq i < j \leq N} \frac{(x_i x_j)^{\Theta(w_{ij})}(1 - y_i y_j)(y_i y_j)^{w_{ij}}}{1 - y_i y_j + x_i x_j y_i y_j}, \qquad w_{ij} \in \mathbb{N}, \tag{4.59}$$

where $\Theta$ denotes the Heaviside function and the $x_i$'s are positive parameters. We call the corresponding random graph the *general weighted soft configuration model* (GWSCM). For this general model, the expected weight matrix depends upon two rank-one matrices, $L$ and $M$, and its elements follow a Bose-Fermi distribution [214]. Explicitly,

$$\langle W_{ij} \rangle = \phi(L_{ij}, M_{ij}) \,, \tag{4.60}$$

where

$$\phi(L_{ij}, M_{ij}) = \frac{L_{ij} M_{ij}}{(1 - L_{ij} + L_{ij} M_{ij})(1 - L_{ij})} \,, \qquad L_{ij} = y_i y_j, \qquad M_{ij} = x_i x_j \,. \tag{4.61}$$

— Eqs. (4.59) can be easily generalized to include directed edges as follows:

$$\text{Prob}(W = w) = \prod_{1 \le i,j \le N} \frac{(x_i \bar{x}_j)^{\Theta(w_{ij})} (1 - y_i \bar{y}_j)(y_i \bar{y}_j)^{w_{ij}}}{1 - y_i \bar{y}_j + x_i \bar{x}_j y_i \bar{y}_j}, \qquad w_{ij} \in \mathbb{N}, \tag{4.62}$$

where all parameters are positive. We call the random graph whose weight matrix satisfies (4.62) the *general weighted directed soft configuration model* (GWDSCM). Its expected weight matrix is

$$\langle W_{ij} \rangle = \phi(L_{ij}, M_{ij}) \,, \tag{4.63}$$

where

$$\phi(L_{ij}, M_{ij}) = \frac{L_{ij} M_{ij}}{(1 - L_{ij} + L_{ij} M_{ij})(1 - L_{ij})} \,, \qquad L_{ij} = y_i \bar{y}_j, \qquad M_{ij} = x_i \bar{x}_j \,. \tag{4.64}$$

■

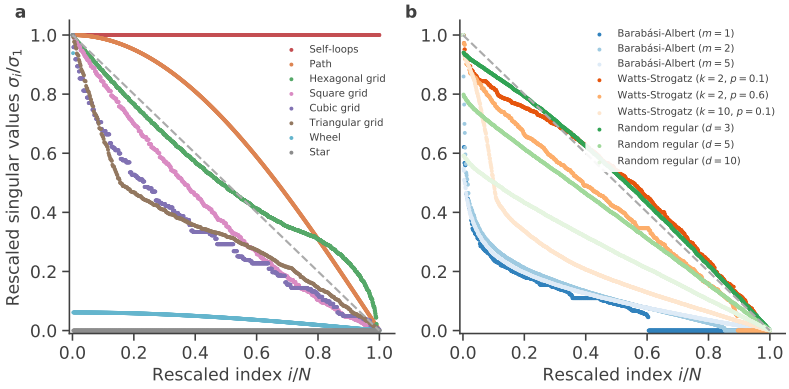



Figure 4.6 – Rescaled singular values for **a** typical (non-random) graphs and **b** instances of three random graphs with different parameters. For the Barabási-Albert model, $m$ is the number of edges to which a new vertex is attached. For the (connected) Watts-Strogatz model, $k$ is the number of neighbors of each vertex in a ring structure and $p$ is the probability of rewiring an edge. For the random regular model, $d$ is the degree of each vertex. The graphs and random graphs are all available on networkx (see plots/plot_fig_SI_singular_values_scree_graphs.py on the GitHub repository), except the disconnected self-loop graph whose adjacency matrix is simply the identity matrix. The dashed gray lines are shown for the sake of visualization.

There are also counter-examples of network model with high effective ranks. The most obvious examples are perhaps the Watts-Strogatz model, which had a considerable impact in the network science, and some non-random graphs.

**Example 4.8.** The *Watts-Strogatz model* [621] is described by the random matrix

$$W = D_k + R \tag{4.65}$$

where $D_k$ is a band matrix of bandwidth $k$ whose $k$ up- and sub- diagonal entries are equal to 1 while $R$ is a matrix with -1's and 1's for each site that has been rewired with probability $p$. This is a perfect counter-example of the affirmation "popular random network models are low-rank": the model is a sum of a high-rank matrix and a noise matrix (first indicator). Figure 4.6b also shows that the singular values in the model can decrease linearly and even supralinearly for some parameters (as in the *random regular graph*). These observations confirm that even though the Watt-Strogatz satisfy two interesting properties, namely small distances (small-world property) and a high-clustering coefficient, it doesn't generally enjoy the low-effective-rank property that we observe in real networks. ■

**Example 4.9** (Graph theory)**.** Although we often discuss about the rapid decrease of singular values in graphs, they can in fact have very different singular value distributions in general. As an intuitive example, we gather simple graphs, common in physics (e.g., path, grids), and illustrate how their singular values decrease differently, from supralinear to sublinear, in Fig. 4.6a. ■

One can also find clear examples of the low-rank models in physics, machine learning, and neuroscience that are worth mentioning.

**Example 4.10** (Random matrix theory, oscillators and spin glasses)**.** The typical random matrix ensembles used in physics (e.g., *Gaussian Orthogonal Ensemble* [192]) are matrix models involving normally (Gaussian) distributed random variables and such that $\langle W \rangle = 0$, so they have a rank equal to zero. A counter-example is the *Circular Unitary Ensemble* that is of full rank with all the singular values being 1. The random matrix $J$ encoding the interactions in the classical *Sherrington-Kirkpatrick spin-glass model* [540] is formed by i.i.d. Gaussian variables of mean $J_0$, which implies that $\langle J \rangle = J_0 \mathbf{1}\mathbf{1}^\top$, meaning that the effective rank of the model is one. Other well-known random matrix models, such as the *Gaussian ensembles with finite-rank external source* [142] or *spiked random matrices* [66], satisfy Eq. (4.20) with $\langle W \rangle$ of rank $r = O(1)$, i.e., they have a low-rank formulation in the limit $N \to \infty$. Finally, in a Kuramoto model with frustrated oscillators [454], the coupling matrix with elements $J_{jk} = (J/N) \sum_{m=1}^{K} (-1)^m u_m^{(j)} u_m^{(k)}$ where the rank $K$ is assumed to be in a low-rank regime $2 \leq K \ll \log_2 N$. ■

**Example 4.11** (Machine learning and neuroscience)**.**

— In the *Hopfield network* [276], one of the most influential models of artificial recurrent neural network, the weight matrix describing the connections between $N$ dynamical binary units is trained to memorize $n \ll N$ state vectors $\boldsymbol{v}_s \in \{0,1\}^N$. Starting with an initial random symmetric weight matrix of mean zero, $T$, the training consists in mapping $T \mapsto T + \sum_{s=1}^{n} \boldsymbol{v}_s \boldsymbol{v}_s^\top$, resulting in a final weight matrix of effective rank $\leq n$.

— In an *echo-state network* [373], a random weighted directed graph of mean weight zero is used to generate a reservoir, which is the hidden recurrent part of the artificial neural network that is not affected by learning. The reservoir thus has a rank of zero (according to the first indicator, about the rank of the expected matrix defined in the paper).

— Training *shallow undercomplete autoencoders* is essentially a low-rank approximation problem [79]. The architecture formed by encoding/decoding weight matrices and a hidden layer thus form a low-rank model in itself.

— The *chaotic random neural network* of Sompolinsky et al. [544] is defined using random i.i.d. synaptic weights of mean 0 and variance $J^2/N$, thus corresponding to an expected weight matrix of rank 0. This model was later used to set the appropriate initial weights for training RNNs [569]. It has been generalized to include $P$ distinct neuron populations, leading to a rank-$P$ expected weight matrix [297]

— The synaptic weight matrix in the *Rajan-Abbott random neural network* [493] is given by the equation

$$W = \langle W \rangle + J \,,$$

where $J$ is a $N \times N$ random matrix whose elements are i.i.d. of mean 0 and variance $1/N$, while

$$\langle W \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathbf{1} \boldsymbol{v}^\top, \qquad \boldsymbol{v}^\top = (\mu_E, \ldots, \mu_E, \mu_I, \ldots, \mu_I) \,,$$

where $f$ denotes the fraction of excitatory neurons, whose mean synaptic weight is $\mu_E/\sqrt{N} > 0$, while $(1-f)$ denotes the fraction of inhibitory neurons, whose mean synaptic weight is $\mu_I/\sqrt{N} < 0$. The rank of the expected weight matrix is thus equal to 1.

— Another example is the *Gaussian mixture low-rank network* [53, 389, 532, 533] whose weight matrix is defined as

$$W = \sum_{r=1}^{R} \boldsymbol{m}_r \boldsymbol{n}_r^\top + R,$$

where $R$ is a zero-mean Gaussian random matrix while $\boldsymbol{m}_r$ and $\boldsymbol{n}_r$ respectively denote the $r$-th left singular vector of $\langle W \rangle$ and its right singular vector multiplied by the $r$-th singular value. The rank of $\langle W \rangle$ is thus equal to $R$. In Ref. [53], for example, the low-rank hypothesis is explicitly made: "We restrict the connectivity matrix to be of low rank, i.e., the number of nonzero singular values of the matrix $J$ is $R \ll N$." In Table 4.1,

we call this random graph the "*rank-perturbed Gaussian model*" (RPG) and we absorb the factor $1/N$ in $\boldsymbol{m}_\mu$ and $\boldsymbol{n}_\mu$. Moreover, in Ref. [389], "our theory suggests a simple conjecture: the low-dimensional structure in connectivity determines low-dimensional dynamics and computational properties of recurrent networks." Our paper proves partly this conjecture: by Corollary 4.55, if $\text{rank}(W) \ll N$ (low-dimensional structure), then the recurrent neural dynamics evolves in a $\text{rank}(W)$-dimensional space (low-dimensional dynamics) (more explanations in Example 4.57).

— Low-Rank Adaptation (LoRA) has been introduced to reduce the number of trainable parameters in large-language models [282]. In such case, the authors write: "We hypothesize that the change in weights during model adaptation also has a low "intrinsic rank", leading to our proposed Low-Rank Adaptation (LoRA) approach". Concretely, given a pre-trained weight matrix $W_0$ of dimension $d \times k$, the update matrix $\Delta W$ is such that $W_0 + \Delta W = W_0 + BA$ where $B$ and $A$ are of dimension $d \times r$ and $r \times k$ respectively while $r$ is assumed to be much smaller than $\min(d, k)$.

— It has also been observed experimentally that trained models have a low effective rank (the ones from NWS [162] in this paper and other references, such as Ref. [387]).

■

To illustrate the three indicators of the low-rank hypothesis, we use four of the random graphs introduced above, that is RPG, DCSBM, $S^1$ RGM, and WDSCM, and present the results in Fig. 4.3 for $N = 10^3$ vertices. Below, we list the parameters used in each model to generate the figure. We denote a $N$-dimensional realization of a truncated Pareto density $\boldsymbol{x} = p(N, x_{\min}, x_{\max}, \gamma)$, where $N = 10^3$ is the number of vertices, $x_{\min}$ is the minimum value of the distribution, $x_{\max}$ is the maximum value, and $\gamma$ is the shape parameter. Similarly, an $N$-dimensional instance of a Gaussian density is denoted $n(N, m, v)$, where $m$ is the mean of the Gaussian and $v$ is its variance, and $u(N, x_{\min}, x_{\max})$ is an $N$-dimensional instance of discrete uniform distribution.

— For RPG, we set the rank to 5, $\boldsymbol{m}_\mu = n(N, 0, 1/N)$, and $\boldsymbol{n}_\mu = n(N, (\mu - 1)/10, \mu/10)$ for all $\mu \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$. The $N \times N$ random noise matrix $R$ has elements following a Gaussian density with mean 0 and variance $g^2/N$ where we call $g$ the noise strength. We set $g = 1$ in Fig. 4.3b and $g = 3$ in Fig. 4.3f. The parameter $g$ is tuned from 0.01 to 4 in Fig. 4.3j to increase $\overline{\|R\|}_2$.

— For DCSBM, we set the number of blocks to 5 with respective sizes $N/10$, $2N/5$, $N/10$, $N/5$, and $N/5$. The expected degree distributions are $\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}} = p(N, 2, 100, 2.5)$ and $\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}} = p(N, 1, 50, 2)$ which are then normalized by groups as defined in Eq. (4.48). The expected

number of edges is

$$E = gN \begin{pmatrix} 0.40 & 0.10 & 0.10 & 0.02 & 0.13 \\ 0.05 & 0.80 & 0.02 & 0.09 & 0.10 \\ 0.02 & 0.02 & 0.30 & 0.05 & 0.02 \\ 0.10 & 0.05 & 0.05 & 0.40 & 0.01 \\ 0.10 & 0.09 & 0.05 & 0.05 & 0.30 \end{pmatrix},$$

where $g$ is a multiplicative factor that allows increasing $\overline{\|R\|}_2$. We set $g = 100$ in Fig. 4.3c and $g = 10$ in Fig. 4.3g. The parameter $g$ is tuned from 200 to 6 to increase $\overline{\|R\|}_2$ in Fig. 4.3k.

— For $S^1$ RGM, we set $R = N/2\pi$. To get the angular distance matrix, we set $t_i = 2\pi/[u(N, 1, 50)]_i$ and then compute $\theta_{ij} = \pi - |\pi - |t_i - t_j||$. We observed that the numerical computation of the singular values (and, hence, the rank) of $\theta$ is particularly sensitive to the choice of angular matrix and taking a discrete uniform distribution reduced the sensitivity (see tests/test_graphs/test_generate_s1_random_graph and the function "test_thetaij_rank" in the GitHub repository). We also have $\mu = \beta \sin(\pi/\beta)/(2\pi\langle\boldsymbol{\kappa}\rangle))$ where $\langle\,\rangle$ is the arithmetic mean and $\langle\boldsymbol{\kappa}\rangle = \langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}}\rangle = \langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}}\rangle$. The expected degree distributions are $\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}} = p(N, 2, 100, 2.5)$, $\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}} = p(N, 1, 50, 2)$, and then $\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}}$ is redefined to $\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}} - \langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}}\rangle\mathbf{1} + \langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}}\rangle\mathbf{1}$ $[\langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}}\rangle < \langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}}\rangle]$ to ensure that $\langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{in}}\rangle = \langle\boldsymbol{\kappa}_{\text{out}}\rangle$. The temperature $1/\beta$ allows increasing $\overline{\|R\|}_2$ and we tuned it from 0.01 to 0.96 in Fig. 4.3l. The temperature is 0.2 in Fig. 4.3d and 0.95 in Fig. 4.3h.

— For WDSCM, we set $\boldsymbol{y} = p(N, x_{\min}, 0.8, 2.5)$ and $\bar{\boldsymbol{y}} = p(N, x_{\min}, 0.7, 3)$ where $y_{\min} = \bar{y}_{\min} = x_{\min}$ is the parameter that we tune to increase $\overline{\|R\|}_2$. We set $x_{\min} = 0.6$ in Fig. 4.3e and $x_{\min} = 0.15$ in Fig. 4.3i. To get Fig. 4.3m, we increase $x_{\min}$ from 0.1 to 0.65.

Despite the clear dependence of $\langle W\rangle$ over a low-rank matrix $L$, it is not always clear whether $\langle W\rangle$ has an effective low-rank. This is the case of *soft configuration models* (see Example 4.6) for which the expected adjacency matrix does not have the explicit form of a rank factorization. In the next section, we introduce the directed soft configuration model as a maximally entropic random graph. Then, we demonstrate that its singular values decrease exponentially rapidly.

### 4.11.2 Exponential decrease of singular values in soft configuration models

In general, we only have partial information on complex networks. It is thus reasonable to define a set of networks where each network have a probability to describe the observed complex network. In order to do that in the least biased way, one can rely on the maximization of Shannon entropy to extract an adequate probability distribution [288]. A lot of random graphs are defined from a maximally entropic model and although there is a large literature on

the subject [60,124,459,547], we provide, for the sake of completeness, some important results and comments. We will later use them to demonstrate Theorem 4.22 and Theorem 4.23 on the exponential decrease of singular values in the directed soft configuration model and its weighted version, both maximally entropic random network models.

We begin by presenting general theorems about the use of Lagrange multipliers to obtain maximally entropic network models. Of course, the idea of Lagrange multipliers is old [99,223]. It goes back to Lagrange and even Euler, but in both of their work, the conditions in which the method applies are not clearly stated and no rigorous demonstration was provided. The first author who clearly stated the theorem is most likely Carathéodory, in the first German edition of his volume on the calculus of variations in 1935 [100, 186 and 187].

**Theorem 4.12** (Lagrange multipliers)**.**
*Let:*

1. *$U$, be an open set in $\mathbb{R}^N$;*
2. *$f, g_1, \dots, g_r$, be continuously differentiable real functions on $U$;*
3. *$E$, be a set such that $\boldsymbol{x} \in E$ iff $\boldsymbol{x} \in U$ and $g_1(\boldsymbol{x}) = \cdots = g_r(\boldsymbol{x}) = 0$.*

*If $\boldsymbol{x}^*$ maximizes or minimizes $f$ on $E$, then there exists a real vector $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_0, \dots, \lambda_r)$ such that:*

1. *$\boldsymbol{\lambda} \neq \mathbf{0}$;*
2. *$\lambda_0 \geq 0$;*
3. *$\lambda_0 \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$.*

*Moreover, if $\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*), \dots, \nabla g_r(\boldsymbol{x}^*)$ are linearly independent, then $\lambda_0 > 0$ and*

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{r} \lambda_i^* \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0} \tag{4.66}$$

*for some nonzero vector $\boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_r^*)$ in $\mathbb{R}^r$.*

*Proof.* The proof is long and often based on the local inversion theorem. See *Carathéodory multiplicative rule* in [483] or [116, Theorem 20.3]. □

**Remark 4.13.** On the one hand, the theorem is valid for a minimum or a maximum. This is an advantage that can turn out to be an inconvenience if we do not verify the nature of the point $\boldsymbol{x}^*$. On the other hand, Eq. (4.66) is only a *necessary condition* and it is not sufficient in general. We could, for example, find a solution of Eq. (4.66) that does not correspond to the desired extremum. Moreover, the theorem supposes that there exists an extremum in $E$. If this is not assumed, one has to consider an open domain of $\mathbb{R}^N$, which excludes, for example, the compact domain $\bar{D} = [0,1]^N$. Finally, the gradients of the constraints must be linearly independent; otherwise $\lambda_0$ can be 0 and that does not help to find the extremum. ■

The Lagrange multiplier method begins by solving Eq. (4.66) by expressing all $x_i^*$ in terms of the multipliers $\lambda_i$. Then, the multipliers are written in terms of the known variables by solving the set of constraints $g_1(\boldsymbol{x}) = \cdots = g_n(\boldsymbol{x}) = 0$, which is generally the most difficult step. We finally verify that the solution $\boldsymbol{x}^*$ corresponds to the desired extremum. The following theorem illustrates how the first part of the method can be applied to find the necessary form for the probability mass function $P$ that maximizes the network entropy under (soft) structural constraints.

**Theorem 4.14.** *Let $A$ be a $N \times N$ random adjacency matrix with support $\Omega_A$ that satisfies the soft equality constraints*

$$\mathbb{E}\left[h_\mu(A)\right] = h_\mu(a^*), \quad \mu \in \{1, ..., \ell\}, \tag{4.67}$$

*where $\mathbb{E}$ is the expected value on $\Omega_A$, $a^*$ is some $N \times N$ non-random adjacency matrix, and each $h_\mu : \{0,1\}^{N^2} \to \mathbb{R}^\ell$ is continuously differentiable. Then, the probability mass function $P$ that maximizes the entropy of $A$ under the equality constraints (4.67) must be of the form*

$$P(a) = \frac{1}{Z(\lambda_1, ..., \lambda_\ell)} \exp\left[\sum_{\mu=1}^{\ell} \lambda_\mu h_\mu(a)\right], \tag{4.68}$$

*where $Z : \mathbb{R}^\ell \to \mathbb{R}$ is the partition function and $\lambda_\mu \neq 0$ for all $\mu$.*

We can now provide the mathematical steps to show the rapid decrease of singular values in the directed soft configuration model. The next corollary is well known from Ref. [459].

**Corollary 4.15.** *Let $\boldsymbol{k}^{\text{in}}$ and $\boldsymbol{k}^{\text{out}}$ be two vectors with elements in $\{1, 2, \ldots, N\}$. Let $A$ be the adjacency matrix of a random directed graph of $N$ vertices, i.e., a random matrix of dimension $N \times N$ and support $\{0,1\}^{N \times N}$. Assume, moreover, that the following constraints are satisfied:*

$$\mathbb{E}[A\mathbf{1}] = \boldsymbol{k}^{\text{in}} \qquad \textit{and} \qquad \mathbb{E}[A^\top \mathbf{1}] = \boldsymbol{k}^{\text{out}}. \tag{4.69}$$

*Then the probability mass function $P$ that maximizes the entropy of $A$ must be of the form*

$$P(a) = \prod_{i,j=1}^{N} {p_{ij}}^{a_{ij}} (1 - p_{ij})^{1 - a_{ij}}, \qquad p_{ij} = \frac{\alpha_i \beta_j}{1 + \alpha_i \beta_j}, \tag{4.70}$$

*where $\alpha_i$ and $\beta_j$ are positive numbers $\forall\, i, j \in \{1, \ldots, N\}$.*

**Remark 4.16.** The $2N$ scalars $(\alpha_1, ..., \alpha_N, \beta_1, ..., \beta_N)$ are such that $\alpha_i = e^{\lambda_i}$ and $\beta_j = e^{\lambda_{N+j}}$ for all $i, j \in \{1, ..., N\}$ where $\lambda_1, ..., \lambda_N$ are the Lagrange multipliers related to the in-degree constraints, while $\lambda_{N+1}, ..., \lambda_{2N}$ are the Lagrange multipliers related to the out-degree constraints. ■

Having an explicit form for the probability of a graph in the ensemble allows finding an expression for the expected adjacency matrix, which turns out to have elements following a Fermi-Dirac distribution.

**Corollary 4.17.** *Let $A$ be the random matrix described in the previous corollary. Then, for all $i, j \in \{1, \dots, N\}$,*

$$\langle A_{ij} \rangle = \frac{\alpha_i \beta_j}{1 + \alpha_i \beta_j} \tag{4.71}$$

*and $0 < \langle A_{ij} \rangle < 1$.*

The next lemma shows that, under some mild conditions, the expected adjacency matrix is an infinite sum of rank-one matrices with singular values equal to $\ell_1$, $\ell_2$, ... or $N$, $m_1$, $m_2$, $m_3$, ...

**Lemma 4.18.** *Let $A$ be a random matrix satisfying Eq. (4.71). Let*

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^\top, \qquad \boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_N)^\top.$$

*(1) If $0 < \alpha_i \beta_j < 1$ for all $i, j \in \{1, \dots, N\}$, then*

$$\langle A \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} L_k \,, \tag{4.72}$$

*where $L_k$ denotes a rank-one $N \times N$ matrix whose only nonzero singular value is*

$$\ell_k = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} (\alpha_i \beta_j)^{2k}} \,. \tag{4.73}$$

*(2) If $\alpha_i \beta_j > 1$ for all $i, j \in \{1, \dots, N\}$, then*

$$\langle A \rangle = N \, \hat{\mathbf{1}} \hat{\mathbf{1}}^\top + \sum_{k=1}^{\infty} M_k \,,$$

*where $M_k$ denotes a rank-one $N \times N$ matrix whose only nonzero singular value is*

$$m_k = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} (\alpha_i \beta_j)^{-2k}} \,.$$

*Proof.* This lemma is essentially a direct consequence of expanding the closed form of the geometric series and normalizing the vectors in each term. Indeed, if $0 < \alpha_i \beta_j < 1$ for all $i, j \in \{1, \dots, N\}$, we can use the geometric series and get the following convergent series:

$$\langle A \rangle = \boldsymbol{\alpha} \, \boldsymbol{\beta}^\top - (\boldsymbol{\alpha} \circ \boldsymbol{\alpha}) \, (\boldsymbol{\beta} \circ \boldsymbol{\beta})^\top + (\boldsymbol{\alpha} \circ \boldsymbol{\alpha} \circ \boldsymbol{\alpha}) \, (\boldsymbol{\beta} \circ \boldsymbol{\beta} \circ \boldsymbol{\beta})^\top \; - + \dots$$

Setting

$$L_k = (-1)^{k+1}(\underbrace{\boldsymbol{\alpha}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\alpha}}_{k\text{ times}})(\underbrace{\boldsymbol{\beta}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\beta}}_{k\text{ times}})^\top,$$

we get Eq. (4.72). We see that each matrix $L_k$ is factorized as $\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^\top$, so we conclude that the rank of each element of the series is one. Moreover, the SVD for such a matrix is simply $\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^\top = \rho\,\widehat{\boldsymbol{u}}\,\widehat{\boldsymbol{v}}^\top$, where $\rho = \|\boldsymbol{u}\|\|\boldsymbol{v}\|$, $\widehat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u}/\|\boldsymbol{u}\|$, $\widehat{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{v}/\|\boldsymbol{v}\|$. Hence,

$$L_k = \ell_k\,\widehat{\boldsymbol{\alpha}_k}\,\widehat{\boldsymbol{\beta}_k}^\top, \tag{4.74}$$

where

$$\ell_k = \|\underbrace{\boldsymbol{\alpha}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\alpha}}_{k\text{ times}}\|\|\underbrace{\boldsymbol{\beta}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\beta}}_{k\text{ times}}\|, \qquad \widehat{\boldsymbol{\alpha}_k} = (-1)^{k+1}\frac{\overbrace{\boldsymbol{\alpha}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\alpha}}^{k\text{ times}}}{\|\underbrace{\boldsymbol{\alpha}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\alpha}}_{k\text{ times}}\|}, \qquad \widehat{\boldsymbol{\beta}_k} = \frac{\overbrace{\boldsymbol{\beta}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\beta}}^{k\text{ times}}}{\|\underbrace{\boldsymbol{\beta}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\beta}}_{k\text{ times}}\|}.$$

Simple calculations lead to Eq. (4.73), which completes the proof of the first part of the lemma. The second part is proved similarly starting with the geometric series of $\langle A_{ij}\rangle = 1/(1+1/(\alpha_i\beta_j))$. □

The last lemma will allow us to find upper bounds on the singular values of the expected adjacency matrix by using Weyl inequalities. However, some technical results are required before deducing the upper bounds. In particular, the coefficients $\ell_k$ and $m_k$ in Lemma 4.18 are ordered and bounded as stated in the next lemma.

**Lemma 4.19.** *Let $\ell_k$ and $m_k$ be the coefficients defined in Lemma 4.18.*
*(1) If $0 < \alpha_i\beta_j < 1$ for all $i \in \{1,\dots,N\}$, then*

$$\ell_{k+1} < \ell_k\,, \qquad \forall\, k \in \mathbb{Z}_+ \tag{4.75}$$

*and, with $\gamma = \max_{i,j}\alpha_i\beta_j$,*

$$\ell_k \le N\,\gamma^k\,, \qquad \forall\, k \in \mathbb{Z}_+\,. \tag{4.76}$$

*(2) If $\alpha_i\beta_j > 1$ for all $i,j \in \{1,\dots,N\}$, then*

$$m_{k+1} < m_k\,, \qquad \forall\, k \in \mathbb{Z}_+\,. \tag{4.77}$$

*and, with $\omega = \min_{i,j}\alpha_i\beta_j$,*

$$m_k \le N\,\omega^{-k}\,, \qquad \forall\, k \in \mathbb{Z}_+\,. \tag{4.78}$$

*Proof.* For the first case, for all $k \in \mathbb{Z}_+$ and from Eq. (4.73),

$$\ell_{k+1} = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N}(\alpha_i\beta_j)^{2(k+1)}} = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N}(\alpha_i\beta_j)^{2k}(\alpha_i\beta_j)^2} < \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N}(\alpha_i\beta_j)^{2k}} = \ell_k,$$

where we have used $(\alpha_i\beta_j)^2 < 1$ since $0 < \alpha_i\beta_j < 1$ for all $i, j \in \{1, ..., N\}$. The first inequality of case (1) is thus established. Moreover, if $\alpha_i\beta_j \leq \gamma$ for all $i, j \in \{1, \ldots, N\}$, then

$$\ell_k = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} (\alpha_i\beta_j)^{2k}} \leq \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} \gamma^{2k}} = N\,\gamma^k\,. \tag{4.79}$$

The second inequality of case (1) follows from the observation that $\gamma = \max_{i,j} \alpha_i\beta_j$ is the least value of $\gamma$ that satisfies $\alpha_i\beta_j \leq \gamma$ for all $i, j \in \{1, \ldots, N\}$. Case (2) is proved similarly. □

Moreover, for a given bound on $\alpha_i\beta_j$, there is a corresponding bound for the elements of the expected adjacency matrix.

**Lemma 4.20.** *Let $A$ be a random matrix satisfying Eq. (4.71). Let $\gamma$ and $\omega$ be two positive constants. Then,*

$$\alpha_i\beta_j \leq \gamma < 1 \iff \langle A_{ij}\rangle \leq \frac{\gamma}{1+\gamma} < \frac{1}{2} \qquad \textit{and} \qquad \alpha_i\beta_j \geq \omega > 1 \iff \langle A_{ij}\rangle \geq \frac{\omega}{1+\omega} > \frac{1}{2}. \tag{4.80}$$

*Proof.* Recall that all the parameters involved in this lemma are positive. The first part of both equivalences is obtained with basic inequality manipulations:

$$\alpha_i\beta_j \leq \gamma \iff \frac{1}{\alpha_i\beta_j} \geq \frac{1}{\gamma} \iff \frac{1}{1+\frac{1}{\alpha_i\beta_j}} \leq \frac{1}{1+\frac{1}{\gamma}} \iff \langle A_{ij}\rangle \leq \frac{\gamma}{1+\gamma}\,,$$
$$\alpha_i\beta_j \geq \omega \iff \frac{1}{\alpha_i\beta_j} \leq \frac{1}{\omega} \iff \frac{1}{1+\frac{1}{\alpha_i\beta_j}} \geq \frac{1}{1+\frac{1}{\omega}} \iff \langle A_{ij}\rangle \geq \frac{\omega}{1+\omega}\,.$$

The second part is an immediate consequence of $\gamma < 1 \iff \gamma/(1+\gamma) < 1/2$ and $\omega > 1 \iff \omega/(1+\omega) > 1/2$. □

**Remark 4.21.** The inequalities in the last lemma imply that for all $i \in \{1, ..., N\}$, the expected degrees $k_i^{\text{in}}$ and $k_i^{\text{out}}$ are both upper-bounded by $N\gamma/(1+\gamma)$ when $\alpha_i\beta_j < \gamma < 1$, and lower bounded by $N\omega/(1+\omega)$ when $\alpha_i\beta_j > \omega > 1$. However, these bounds on $k_i^{\text{in}}$ and $k_i^{\text{out}}$ do not necessarily imply that the inequalities in the last lemma are satisfied. ■

We are now ready to present the first main theorem of this section, which states that for two broad families of parameters defining the soft directed configuration model, the singular values of expected adjacency matrix decrease very rapidly, at least exponentially.

**Theorem 4.22.** *Let $\langle A\rangle$ be the $N \times N$ matrix defined in Eq. (4.71) and whose singular values are $\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_N$. Let $\ell_k$ and $m_k$ be the coefficients defined in Lemma 4.18.*

*(1) If $0 < \langle A_{ij}\rangle < 1/2$ for all $i, j \in \{1, \ldots, N\}$, then the singular values are upper-bounded as*

$$\sigma_i \leq \sum_{k=i}^{\infty} \ell_k \leq \frac{N\,\gamma^i}{1-\gamma}, \qquad \forall\ i \in \{1, ..., N\}\,, \tag{4.81}$$

*where* $\gamma = \max_{i,j} \alpha_i \beta_j$.

*(2) If* $1/2 < \langle A_{ij} \rangle < 1$ *for all* $i \in \{1, \ldots, N\}$*, then the singular values are upper-bounded as*

$$\sigma_i \leq N\, \delta_{i1} + \sum_{k=i}^{\infty} m_k \leq N\delta_{i1} + \frac{N\omega^{1-i}}{\omega - 1}, \qquad \forall\ i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.82}$$

*where* $\delta_{i1}$ *is a Kronecker delta and* $\omega = \min_{i,j} \alpha_i \beta_j$.

*Proof.*
(1) First of all, $0 < \langle A_{ij} \rangle < 1/2$ if and only if $0 < \alpha_i \beta_j < 1$ for all $i, j \in \{1, ..., N\}$ from Lemma 4.20. Lemma 4.18 then implies that the expected adjacency matrix is a convergent infinite sum of rank one matrices $L_k$, $k \in \mathbb{Z}_+$. Thus, the singular values of the expected adjacency matrix are the singular values of a sum of matrices:

$$\sigma_i(\langle A \rangle) = \sigma_i(\textstyle\sum_{k=1}^{\infty} L_k)\,, \qquad \forall\, i \in \{1, ..., N\},$$

where we write $\sigma_i(\langle A \rangle)$ instead of $\sigma_i$ for the sake of clarity in the proof.

Next, recall from Theorem 1.22 that the Weyl inequalities for $N \times N$ matrices $B$ and $C$ are

$$\sigma_{r+s-1}(B + C) \leq \sigma_r(B) + \sigma_s(C)\,, \qquad \forall\ 1 \leq r,\, s,\, r + s - 1 \leq N.$$

Setting $r = s = 1$ yields the familiar triangle inequality:

$$\sigma_1(B + C) \leq \sigma_1(B) + \sigma_1(C)\,. \tag{4.83}$$

The latter inequality implies that for all $1 \leq i \leq n - 1 < \infty$,

$$\sigma_1\Big(\sum_{k=i}^{n} L_k\Big) \leq \sum_{k=i}^{n} \sigma_1(L_k)\,.$$

However, given that $\sigma_1(L_k)$ is nonnegative,

$$\sum_{k=i}^{n} \sigma_1(L_k) \leq \sum_{k=i}^{n+1} \sigma_1(L_k) \leq \cdots \leq \sum_{k=i}^{\infty} \sigma_1(L_k) = \sum_{k=i}^{\infty} \ell_k\,,$$

where we have used the notation $\ell_k = \sigma_1(L_k)$ introduced in Lemma 4.18. To prove the convergence of the infinite series, we recall from Lemma 4.19 that $\ell_k \leq N\gamma^k$ with $\gamma = \max_{i,j} \alpha_i \beta_j$. This in turn implies that

$$\sum_{k=i}^{\infty} \ell_k \leq \frac{N\gamma^i}{1 - \gamma},$$

as stated in the rightmost inequality of (4.81). So far, we have proved that for all $1 \leq i \leq n - 1 < \infty$,

$$\sigma_1\Big(\sum_{k=i}^{n} L_k\Big) \leq \sum_{k=i}^{\infty} \ell_k \leq \frac{N\gamma^i}{1 - \gamma}\,.$$

The continuity of $\sigma_1 : \mathbb{R}^{N\times N} \to \mathbb{R}$, which is obvious since $\sigma_1$ is a norm, and the convergence of $\sum_{k=i}^{\infty} L_k$ allow us to take the limit $n \to \infty$ on the left-hand side of the previous inequality and conclude that

$$\sigma_1\Big(\sum_{k=i}^{\infty} L_k\Big) \leq \sum_{k=i}^{\infty} \ell_k \leq \frac{N\gamma^i}{1-\gamma}\,. \tag{4.84}$$

Let us now go back to the Weyl inequalities and set $r = i$, $s = 1$, $B = \sum_{k=1}^{i-1} L_k$, and $C = \sum_{k=i}^{\infty} L_k$. This yields the inequality

$$\sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{\infty} L_k\Big) = \sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{i-1} L_k + \sum_{k=i}^{\infty} L_k\Big) \leq \sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{i-1} L_k\Big) + \sigma_1\Big(\sum_{k=i}^{\infty} L_k\Big)\,,$$

which is valid for all $1 \leq i \leq N$. The matrix $\sum_{k=1}^{i-1} L_k$ is the sum of $i-1$ matrices of rank one, which means that the rank of $\sum_{k=1}^{i-1} L_k$ is at most $i-1$. Hence, $\sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{i-1} L_k\Big) = 0$, so that

$$\sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{\infty} L_k\Big) \leq \sigma_1\Big(\sum_{k=i}^{\infty} L_k\Big)\,, \qquad \forall\, i \in \{1,\dots,N\}\,. \tag{4.85}$$

Combining inequalities (4.84) and (4.85) leads to the desired result:

$$\sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{\infty} L_k\Big) \leq \sum_{k=i}^{\infty} \ell_k \leq \frac{N\gamma^i}{1-\gamma}\,, \qquad \forall\, i \in \{1,\dots,N\}\,.$$

(2) Similarly to the first case Lemmas 4.18-4.20, and Weyl inequalities imply that

$$\sigma_i(\langle A\rangle) = \sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{\infty} M_k\Big) \leq N\delta_{i1} + m_i + \sigma_1\Big(\sum_{k=i+1}^{\infty} M_k\Big).$$

Proceeding as for inequality (4.84) then leads to the inequality

$$\sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{\infty} M_k\Big) \leq N\delta_{i1} + \sum_{k=i}^{\infty} m_k,$$

where $m_k = \sigma_1(M_k)$. Additionally, Lemma 4.19 states that $m_k \leq N\omega^{-k}$ with $\omega = \min_{i,j} \alpha_i\beta_j$, which leads to

$$\sigma_i\Big(\sum_{k=1}^{\infty} M_k\Big) \leq N\delta_{i1} + N\sum_{k=i}^{\infty} \omega^{-k}\,.$$

Writing the truncated geometric series in closed form finally gives the expected result. □

The upper bounds in the last theorem theoretically validate the low-rank formulation of the directed soft configuration model. The last inequalities in Eqs. (4.81) and (4.82) are meant to explicitly show the exponential decrease of the singular values while the first inequalities

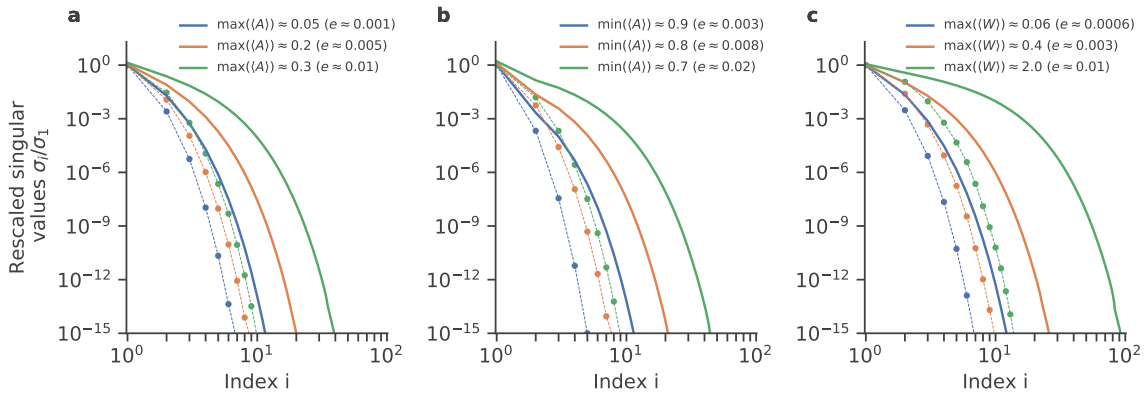



Figure 4.7 – Upper bounds (solid lines) on the singular values (markers) of the expected matrix of the directed soft configuration model (**a**, Eq. (4.81) and **b**, Eq. (4.82)) and its weighted version (**c**, Eq. (4.86)). The dashed lines between singular values are shown for the sake of visualization. In all the subfigures, the $N$-dimensional vectors $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{y}$, $\bar{\boldsymbol{y}}$ defining the expected matrices are obtained from truncated Pareto distributions and we denote one $N$-dimensional realization as $p_{\boldsymbol{x}}(N, x_{\min}, x_{\max}, \gamma)$, where $N = 10^3$ is the number of vertices, $\boldsymbol{x}$ is $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{y}$, or $\bar{\boldsymbol{y}}$, $x_{\min}$ is the minimum value of the distribution, $x_{\max}$ is the maximum value, and $\gamma$ is the shape parameter. **a**, $p_{\boldsymbol{\alpha}}(N, 2, \alpha_{\max}, 2)/\sqrt{N}$ where $\alpha_{\max} \in \{10, 20, 30\}$ and $p_{\boldsymbol{\beta}}(N, 1, \beta_{\max}, 2.5)/\sqrt{N}$ where $\beta_{\max} \in (5, 10, 15)$. **b**, $p_{\boldsymbol{\alpha}}(N, \alpha_{\min}, 200, 2)/\sqrt{N}$ where $\alpha_{\min} \in (150, 75, 50)$ and $p_{\boldsymbol{\beta}}(N, \beta_{\min}, 150, 2.5)/\sqrt{N}$ where $\beta_{\min} \in (120, 60, 40)$. **c**, $p_{\boldsymbol{y}}(N, 0.05, y_{\max}, 2)$ where $y_{\max} \in \{0.3, 0.6, 0.9\}$ and $p_{\bar{\boldsymbol{y}}}(N, 0.05, \bar{y}_{\max}, 2.5)$ where $\bar{y}_{\max} \in (0.2, 0.5, 0.8)$. All the tuples above correspond to the (blue, orange, green) solid lines.

in Eqs. (4.81) and (4.82) are tighter versions. In Fig. 4.7a and 4.7b, we illustrate the first inequalities in Eqs. (4.81) and (4.82) with both axes in log-log scale.

Following similar steps, we prove the second main theorem of the section: the singular values of $\langle W \rangle$ in the weighted directed soft configuration model (WDSCM) [Example 4.7] are at least exponentially decreasing.

**Theorem 4.23.** *Let $\langle W \rangle$ be the $N \times N$ matrix defined in Eq. (4.58) and whose singular values are $\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_N$ and let $n_k = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} (y_i \bar{y}_j)^{2k}}$ with $0 < y_i \bar{y}_j < 1$ for all $i, j$. Then, the singular values are upper-bounded as*

$$\sigma_i \leq \sum_{k=i}^{\infty} n_k \leq \frac{N \tau^i}{1 - \tau}, \qquad \forall\ i \in \{1, ..., N\}\,, \tag{4.86}$$

*where $\tau = \max_{i,j} y_i \bar{y}_j$.*

Contrarily to Theorem 4.22, there is no restriction on the domain of the elements of $\langle W \rangle$ for the inequality (4.86), which is a consequence of the Bose-Einstein distribution for the elements of the expected weight matrix. The bound in Eq. (4.86) is illustrated in Fig. 4.7c.

### 4.11.3 Impact of singular value distribution and density on effective ranks

In this subsection, we take advantage of the formula for the stable rank (srank), the nuclear rank (nrank), and the erank, which are amenable for analytic calculations, to assess the impact of different singular value decreases on the effective ranks through various inequalities. In the first part of the subsection, we prove that finding bounding curves, $\psi_*(x)$ and $\psi^*(x)$, that approximately delineate the region of possible singular value allows us to estimate the srank, nrank, and erank. In the second part, we show that linear $O(N)$, sublinear $O(N^{1-\epsilon})$, and constant $O(1)$ asymptotic behaviors emerge depending on the shape of the singular value distribution. We finally present, in a third part, the impact of the density of $W$ on srank($W$) through general inequalities.

*1. Singular-value envelopes*

We define the *singular-value envelopes* $\psi_*$ and $\psi^*$ for the singular values as functions that

1. decrease on the interval $[1, N] \subset \mathbb{R}$, that is
$$x \leq y \qquad \Longrightarrow \qquad \psi_*(x) \geq \psi_*(y), \qquad \psi^*(x) \geq \psi^*(y)\,; \tag{4.87}$$
2. are nonnegative on the interval $[1, N] \subset \mathbb{R}$;
3. provide lower and upper bounds for the rescaled singular values as
$$\psi_*(i) \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \leq \psi^*(i) \qquad \forall\, i \in \{1, \dots, N\}; \tag{4.88}$$
4. are $\sigma_1$–tight, meaning
$$\psi_*(1) = 1 = \psi^*(1)\,. \tag{4.89}$$

The last condition is imposed to always match the only value of the ratio $\sigma_i/\sigma_1$ that is known in all instances. In the next part of the subsection, it will also prevent us from multiplying $\psi_*$ and $\psi^*$ by global scaling factors such as $N^{-\epsilon}$, which could impose, somewhat artificially, asymptotic behaviors for the effective ranks such as $O(N^{1-\epsilon})$. The four properties of the singular-value envelopes readily imply general inequalities that will be useful to bound the effective ranks.

**Lemma 4.24** (Basic inequalities)**.** *If $\psi_*$ and $\psi^*$ satisfy conditions 1–4, then*

$$\int_1^N \psi_*(x)^q\, dx \;\leq\; \sum_{i=1}^N \psi_*(i)^q \;\leq\; \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sigma_i}{\sigma_1}\right)^q \;\leq\; \sum_{i=1}^N \psi^*(i)^q \;\leq\; 1 + \int_1^N \psi^*(x)^q\, dx \tag{4.90}$$

*for all $q \geq 0$ and*

$$\begin{aligned} 0 \leq \sum_{i=2}^N \psi_*(i) \ln \frac{1}{\psi^*(i)} \leq \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} &\leq \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^N \Big(\psi^*(i)^{1-\delta} - \psi_*(i)\Big) \\ &\leq \frac{1}{\delta} \int_1^N \Big(\psi^*(x)^{1-\delta} - \psi_*(x)\Big)\, dx + \Delta \end{aligned} \tag{4.91}$$

*for all* $\delta \in (0,1)$*, where*

$$\Delta = \frac{1}{\delta} \int_1^2 \psi_*(x)\, dx\,. \tag{4.92}$$

*Proof.* We first prove the inequalities involving the summations. Using inequality (4.88) and the nonnegativeness of $\psi_*$, $\psi^*$, and $\sigma_i/\sigma_1$, we deduce the inequality

$$\psi_*(i)^q \;\le\; \left(\frac{\sigma_i}{\sigma_1}\right)^q \;\le\; \psi^*(i)^q, \tag{4.93}$$

which is valid for all $q \ge 0$ and $i \in \{1, 2, \ldots, N\}$. Thus

$$\sum_{i=1}^N \psi_*(i)^q \;\le\; \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sigma_i}{\sigma_1}\right)^q \;\le\; \sum_{i=1}^N \psi^*(i)^q\,, \tag{4.94}$$

as expected.

We now concentrate on the first and last inequalities. We adopt a strategy analogous to the method used for proving the integral test for convergence. Notice that the $\psi_*$ and $\psi^*$ are integrable on any subinterval of $[1, N]$ since these functions are monotone. On the one hand,

$$\psi_*(i)^q = \int_i^{i+1} \psi_*(i)^q\, dx \ge \int_i^{i+1} \psi_*(x)^q\, dx \tag{4.95}$$

since $\psi_*(i)^q \ge \psi_*(x)^q$ for all $x \ge i$ (condition 1). The latter inequality and condition 2 then imply

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^N \psi_*(i)^q &= \sum_{i=1}^{N-1} \psi_*(i)^q + \psi_*(N)^q \\ &\ge \sum_{i=1}^{N-1} \int_i^{i+1} \psi_*(x)^q\, dx + \psi_*(N)^q = \int_1^N \psi_*(x)^q\, dx + \psi_*(N)^q \ge \int_1^N \psi_*(x)^q\, dx\,,\end{aligned} \tag{4.96}$$

which proves the leftmost inequality. On the other hand,

$$\psi^*(i)^q = \int_{i-1}^i \psi^*(i)^q\, dx \le \int_{i-1}^i \psi^*(x)^q\, dx \tag{4.97}$$

since $\psi^*(i)^q \le \psi^*(x)^q$ for all $x \le i$ (condition 1). Thus, with condition 4,

$$\sum_{i=1}^N \psi^*(i)^q = \psi^*(1)^q + \sum_{i=2}^N \psi^*(i)^q \le \psi^*(1)^q + \sum_{i=2}^N \int_{i-1}^i \psi^*(x)^q\, dx = 1 + \int_1^N \psi^*(x)^q\, dx\,, \tag{4.98}$$

which establishes the rightmost inequality.

To prove the last inequalities, we first notice that thanks to condition 4, the term corresponding to $i = 1$ in the summation can be omitted:

$$\sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} = \sum_{i=2}^N \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i}. \tag{4.99}$$

We then lower-bound each element of the sum as

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \geq 0 \tag{4.100}$$

since $\sigma_1/\sigma_i \geq 1$ for all $i$. To get the upper bound of (4.99), we use the classical inequality $\ln x \leq a(x^{1/a} - 1)$ for all $a, x > 0$ [149, (4.5.5)], which implies that

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \leq \frac{1}{\delta} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_i}\right)^{\delta} - \frac{1}{\delta} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} = \frac{1}{\delta} \left(\frac{\sigma_i}{\sigma_1}\right)^{1-\delta} - \frac{1}{\delta} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \qquad \forall\, \delta > 0, \tag{4.101}$$

where the equality is obtained when $\delta \to 0$. Thus,

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} &\leq \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{N} \left(\frac{\sigma_i}{\sigma_1}\right)^{1-\delta} - \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \\ &\leq \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{N} \psi^*(i)^{1-\delta} - \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{N} \psi_*(i) \leq \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{N} \psi^*(i)^{1-\delta} - \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{N-1} \psi_*(i) \end{aligned} \tag{4.102}$$

where the second inequality is the expected result while the third one is obtained by neglecting the last (negative) element of the sum. Now, considering that $\psi^*(x)^{1-\delta}$ (with $\delta < 1$) and $-\psi_*(x)$ are respectively decreasing and increasing in $x$, we can write

$$\sum_{i=2}^{N} \psi^*(i)^{1-\delta} = \sum_{i=2}^{N} \int_{i-1}^{i} \psi^*(i)^{1-\delta} dx \leq \sum_{i=2}^{N} \int_{i-1}^{i} \psi^*(x)^{1-\delta} dx = \int_{1}^{N} \psi^*(x)^{1-\delta} dx, \qquad \forall\, \delta \in (0,1) \tag{4.103}$$

and

$$-\sum_{i=2}^{N-1} \psi_*(i) = -\sum_{i=2}^{N-1} \int_{i}^{i+1} \psi_*(i)\, dx \leq -\sum_{i=2}^{N-1} \int_{i}^{i+1} \psi_*(x)\, dx = -\int_{2}^{N} \psi_*(x)\, dx \tag{4.104}$$

Hence,

$$\sum_{i=2}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \leq \frac{1}{\delta} \left( \int_{1}^{N} \psi^*(x)^{1-\delta} dx - \int_{2}^{N} \psi_*(x)\, dx \right), \tag{4.105}$$

which is equivalent to the desired result. □

In Theorems 4.22 and 4.23, we observed exponential decreases of the singular values occurs when working with the expected adjacency or weight matrix of two frequently used random graphs, namely the directed soft configuration model (DSCM) and its weighted version (WDSCM). A first consequence of the previous lemma is that an exponential decrease implies that srank, nrank, and erank are bounded by finite geometric series (or functions of them).

**Proposition 4.25** (Bounds on effective ranks – Exponential decrease)**.** *Suppose that the singular values of matrix $W$, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_N \geq 0$, satisfy the inequalities*

$$\alpha^{i-1} \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \leq \omega^{i-1}, \qquad i \in \{1, \ldots, N\}, \tag{4.106}$$

*for some* $0 < \alpha \leq \omega < 1$. *Then,*

$$g(\alpha^2, N) \leq \operatorname{srank}(W) \leq g(\omega^2, N) \tag{4.107}$$

$$g(\alpha, N) \leq \operatorname{nrank}(W) \leq g(\omega, N), \tag{4.108}$$

$$\omega\, g(\alpha, N) \exp\left(\frac{\alpha\, g'(\alpha, N)}{g(\omega, N)}\right) \leq \operatorname{erank}(W) \leq \alpha\, g(\omega, N) \exp\left(\frac{\omega\, g'(\omega, N)}{g(\alpha, N)}\right), \tag{4.109}$$

*where*

$$g(\alpha, N) = \frac{1-\alpha^N}{1-\alpha}, \qquad g'(\alpha, N) = \frac{\partial g(\alpha, N)}{\partial \alpha} = \frac{1 + (N-1)\alpha^N - \alpha^{N+1}}{(1-\alpha)^2}. \tag{4.110}$$

*Proof.* The inequalities for nrank and srank are easily derived from Lemma 4.24 by setting $q = 1$ and $q = 2$, respectively, together with $\psi_*(i) = \alpha^{i-1}$ and $\psi^*(i) = \omega^{i-1}$. Then, combining the first inequalities with Eq. (1.56), we obtain the following preliminary result:

$$g(\alpha, N) \exp\left(\frac{1}{g(\omega, N)} \sum_{i=1}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i}\right) \leq \operatorname{erank}(W) \leq g(\omega, N) \exp\left(\frac{1}{g(\alpha, N)} \sum_{i=1}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i}\right), \tag{4.111}$$

where it is understood that $0 \ln 0 = 0$. Now,

$$\alpha^{i-1} \ln \omega^{i-1} \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \leq \omega^{i-1} \ln \alpha^{i-1}$$

for all $i \in \{1, \ldots, N\}$. Hence,

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha^{i-1} \ln \omega^{i-1} \leq \sum_{i=1}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \leq \sum_{i=1}^{N} \omega^{i-1} \ln \alpha^{i-1},$$

which can be simplified as

$$\alpha \ln \omega \sum_{j=0}^{N-1} j\, \alpha^{j-1} \leq \sum_{i=1}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \leq \omega \ln \alpha \sum_{j=0}^{N-1} j\, \omega^{j-1}.$$

Using the geometric series and its derivative, we deduce that

$$\alpha \ln \omega\, g'(\alpha, N) \leq \sum_{i=1}^{N} \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \ln \frac{\sigma_1}{\sigma_i} \leq \omega \ln \alpha\, g'(\omega, N).$$

We finally get the desired result by taking the exponential of the previous expression and returning to inequality (4.111). □

In Lemma 4.24, the variable $x$ interpolates between the singular value indices $i$ and thus belongs to a domain that grows with $N$, which is particularly convenient for studying random network models individually, such as the soft configuration model. To allow the comparison of real networks of different sizes, as in Fig. 4.2e, we also need to treat the case where $x$ belongs to the closed interval $[0, 1]$, a compact domain that remains the same for all $N$. The following lemma allows one to go from one perspective to the other.

**Lemma 4.26** (Extensive vs. intensive domains)**.** *Let* $\psi : [1, N] \to [0, 1]$ *be monotonically decreasing. Define* $\Psi : [0, 1] \to [0, 1]$ *as*

$$\Psi(y) = \psi\big((N-1)y + 1\big) \qquad \forall\, y \in [0, 1]\,. \tag{4.112}$$

*Then, for all* $q > 0$*,*

$$\int_1^N \psi(x)^q\, dx = (N-1)\int_0^1 \Psi(y)^q\, dy\,, \qquad \int_1^2 \psi(x)^q\, dx = (N-1)\int_0^{\frac{1}{N-1}} \Psi(y)^q\, dy\,, \tag{4.113}$$

*Proof.* The first result is an immediate consequence of the following linear, and thus invertible, change of variables:

$$T : [1, N] \longrightarrow [0, 1] \tag{4.114}$$

$$x \longmapsto y = \frac{x-1}{N-1} \tag{4.115}$$

which maps $[\ell, m]$ onto $[(\ell-1)/(N-1),\ (m-1)/(N-1)]$ for all $1 \le \ell \le m \le N$. □

The two previous lemmas and formula (1.56) imply the following result stating that srank and nrank are essentially equal to $N$ times the area under the curves $\Psi(y)^2$ and $\Psi(y)$ with $y \in [0, 1]$, respectively, while erank is related to the area under the curves $\Psi(y)$ and $\ln \Psi(y)^{-1}$.

**Lemma 4.27** (Effective rank as area under a curve)**.** *Let* $\psi_*$ *and* $\psi^*$ *satisfy conditions 1–4. Define* $\Psi_* : [0, 1] \to [0, 1]$ *and* $\Psi^* : [0, 1] \to [0, 1]$ *as*

$$\Psi_*(y) = \psi_*\big((N-1)y + 1\big) \qquad \textit{and} \qquad \Psi^*(y) = \psi^*\big((N-1)y + 1\big). \tag{4.116}$$

*Then*

$$(N-1)\int_0^1 \Psi_*(y)^2\, dy \le \operatorname{srank}(W) \le 1 + (N-1)\int_0^1 \Psi^*(y)^2\, dy\,, \tag{4.117}$$

$$(N-1)\int_0^1 \Psi_*(y)\, dy \le \operatorname{nrank}(W) \le 1 + (N-1)\int_0^1 \Psi^*(y)\, dy\,. \tag{4.118}$$

*Moreover, for all* $\delta \in (0, 1)$*,*

$$(N-1)\int_0^1 \Psi_*(y)\, dy \le \operatorname{erank}(W) \le \left(1 + (N-1)\int_0^1 \Psi^*(y)\, dy\right) e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}}\,, \tag{4.119}$$

*where*

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\delta}\left(\frac{\int_0^1 \Psi^*(y)^{1-\delta}\, dy}{\int_0^1 \Psi_*(y)\, dy} - 1\right), \qquad \mathcal{P} = \frac{\int_0^{\frac{1}{N-1}} \Psi_*(y)\, dy}{\delta \int_0^1 \Psi_*(y)\, dy}\,. \tag{4.120}$$

This new perspective on the effective ranks allows us to consider a general family of singular-value envelopes that can be applied to our experimental results as illustrated in Fig. 4.2e. Interestingly, this family is related to the Gaussian hypergeometric function [149, Chap. 15].

**Theorem 4.28** (Bounds on effective ranks – Hypergeometric decrease)**.** *Suppose that the singular values of matrix $W$, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_N \geq 0$, satisfy the inequality*

$$\left(1-\frac{i-1}{N-1}\right)^{c^*-2}\left(1+\zeta^*\frac{i-1}{N-1}\right)^{-b^*} \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \leq \left(1-\frac{i-1}{N-1}\right)^{c_*-2}\left(1+\zeta_*\frac{i-1}{N-1}\right)^{-b_*} \tag{4.121}$$

*for some $0 \leq b_* \leq b^*$, $2 \leq c_* \leq c^*$, $0 < \zeta_* \leq \zeta^*$, and for all $i \in \{1,\ldots,N\}$. Then,*

$$\frac{N-1}{2c^*-3}\,{}_2F_1(1,2b^*;2c^*-2;-\zeta^*) \leq \operatorname{srank}(W) \leq 1+\frac{N-1}{2c_*-3}\,{}_2F_1(1,2b_*;2c_*-2;-\zeta_*) \tag{4.122}$$

$$\frac{N-1}{c^*-1}\,{}_2F_1(1,b^*;c^*;-\zeta^*) \leq \operatorname{nrank}(W) \leq 1+\frac{N-1}{c_*-1}\,{}_2F_1(1,b_*;c_*;-\zeta_*), \tag{4.123}$$

$$\frac{N-1}{c^*-1}\,{}_2F_1(1,b^*;c^*;-\zeta^*) \leq \operatorname{erank}(W) \leq \left(1+\frac{N-1}{c_*-1}\,{}_2F_1(1,b_*;c_*;-\zeta_*)\right)e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}}, \tag{4.124}$$

*where, for all $\delta \in (0,1)$,*

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\delta}\left(\frac{c^*-1}{(1-\delta)c_*+2\delta-1}\,\frac{{}_2F_1(1,(1-\delta)b_*;(1-\delta)c_*+2\delta;-\zeta_*)}{{}_2F_1(1,b^*;c^*;-\zeta^*)}-1\right), \tag{4.125}$$

$$\mathcal{P} = \frac{1}{N-1}\,\frac{(c^*-1)\rho(b^*,c^*,\zeta^*)}{\delta\;{}_2F_1(1,b_*;c_*;-\zeta_*)}, \tag{4.126}$$

*with $\rho(b^*,c^*,\zeta^*)$ being bounded as $0 \leq \rho(b^*,c^*,\zeta^*) \leq 1$ for all $b^* \geq 0$ and $c^* \geq 2$.*

*Proof.* We apply Lemma 4.27 to the case where the enveloping functions $\psi_*$ and $\psi^*$ are defined as

$$\psi_*(x) = \left(1-\frac{x-1}{N-1}\right)^{c^*-2}\left(1+\zeta^*\frac{x-1}{N-1}\right)^{-b^*},$$
$$\psi^*(x) = \left(1-\frac{x-1}{N-1}\right)^{c_*-2}\left(1+\zeta_*\frac{x-1}{N-1}\right)^{-b_*}$$

and changing the variable $x$ for $y=(x-1)/(N-1)$, we get the functions

$$\Psi_*(y) = \frac{(1-y)^{c^*-2}}{(1+\zeta^* y)^{b^*}}, \qquad \Psi^*(y) = \frac{(1-y)^{c_*-2}}{(1+\zeta_* y)^{b_*}}.$$

Now, using the integral representation of the hypergeometric function ${}_2F_1(a,b;c;z)$ [149, (15.6.1)] and the symmetry property ${}_2F_1(a,b;c;z) = {}_2F_1(b,a;c;z)$, we get the following formulas:

$$\int_0^1 \frac{(1-y)^{c-2}}{(1+\zeta y)^b}dy = \frac{1}{c-1}\,{}_2F_1(1,b;c;-\zeta)$$
$$\int_0^1 \left(\frac{(1-y)^{c-2}}{(1+\zeta y)^b}\right)^2 dy = \frac{1}{2c-3}\,{}_2F_1(1,2b;2c-2;-\zeta).$$

Thus, according to the bounds for nrank and srank provided in Lemma 4.27,

$$\frac{N-1}{c^*-1}\,{}_2F_1(1,b^*;c^*;-\zeta^*) \le \text{nrank}(W) \le 1+\frac{N-1}{c_*-1}\,{}_2F_1(1,b_*;c_*;-\zeta_*)\,,$$
$$\frac{N-1}{2c^*-3}\,{}_2F_1(1,2b^*;2c^*-2;-\zeta^*) \le \text{srank}(W) \le 1+\frac{N-1}{2c_*-3}\,{}_2F_1(1,2b_*;2c_*-2;-\zeta_*)\,,$$

as expected. Moreover, according to the lower bound in inequality (4.119),

$$\text{erank}(W) \ge \frac{N-1}{c^*-1}\,{}_2F_1(1,b^*;c^*;-\zeta^*)$$

To get the upper bound of erank$(W)$, we use once again inequality (4.119):

$$\text{erank}(W) \le \left(1+\frac{N-1}{c_*-1}\,{}_2F_1(1,b_*;c_*;-\zeta_*)\right)e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}}.$$

where $\mathcal{H}$ and $\mathcal{P}$ remain to be evaluated from Eq. (4.120). One the one hand, the integral

$$\int_0^1 \left(\frac{(1-y)^{c_*-2}}{(1+\zeta_* y)^{b_*}}\right)^{1-\delta} dy = \frac{1}{(1-\delta)c_*+2\delta-1}\,{}_2F_1(1,(1-\delta)b_*;(1-\delta)c_*+2\delta;-\zeta_*)$$

yields Eq. (4.125). On the other hand, the bounding inequality $\Psi_*(y) \le 1$, valid for all $b^* \ge 1$ and $c^* \ge 2$ implies that

$$\int_0^{\frac{1}{N-1}} \Psi_*(y)\,dy \le \int_0^{\frac{1}{N-1}} dy = \frac{1}{N-1}\,.$$

This allows us to define the function $\rho$ such that

$$\rho(b^*,c^*,\zeta^*) = (N-1)\int_0^{\frac{1}{N-1}} \Psi_*(y)\,dy\,, \qquad 0 \le \rho(b^*,c^*,\zeta^*) \le 1\,,$$

and Eq. (4.126) follows along with the theorem. □

The singular-value envelopes in the latter theorem are general in the sense that they include, as particular cases, sub-linear, linear, supra-linear, and power-law decreases or mixes of those shapes. As auxiliary result, we provide the following proposition for the the sub- to supra-linear decreases which is a direct implication of Lemma 4.27.

**Proposition 4.29** (Bounds on effective ranks for sub-linear to supra-linear decrease)**.** *Suppose that the singular values of matrix $W$, $\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \cdots \sigma_N \ge 0$, satisfy the inequalities*

$$\left(1-a\frac{i-1}{N-1}\right)^b \le \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \le \left(1-c\frac{i-1}{N-1}\right)^d, \qquad i \in \{1,\ldots,N\}, \tag{4.127}$$

*for some $0 < c \le a \le 1$ and $0 < d \le b$. Then,*

$$(N-1)\,\ell(a,2b,1) \le \text{srank}(W) \le 1+(N-1)\,\ell(c,2d,1)\,, \tag{4.128}$$
$$(N-1)\,\ell(a,b,1) \le \text{nrank}(W) \le 1+(N-1)\,\ell(c,d,1)\,, \tag{4.129}$$
$$(N-1)\,\ell(a,b,1) \le \text{erank}(W) \le [1+(N-1)\,\ell(c,d,1)]\,e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}}\,, \tag{4.130}$$

*where, for all* $\delta \in (0,1)$,

$$\ell(a,b,\alpha) = \frac{1-(1-\alpha\, a)^{1+b}}{a(1+b)}, \quad \mathcal{H} = \frac{1}{\delta}\left(\frac{\ell(c,d(1-\delta),1)}{\ell(a,b,1)} - 1\right), \quad \textit{and} \quad \mathcal{P} = \frac{\ell(a,b,\frac{1}{N-1})}{\delta\, \ell(a,b,1)}.$$

The results in this part of the subsection only depend on the curves enveloping the singular values and can thus be used for observed singular values of real networks or to random matrix/graph models. In the following, we relate each singular value decreases to asymptotic behaviors in random graphs.

### *2. Asymptotic behaviors of the effective ranks in growing graphs*

We start this part by highlighting a striking consequence of Proposition 4.25 : if the singular values decrease exponentially, then the basic effective ranks are $O(1)$ as $N \to \infty$. Thus, the effective rank to dimension ratios are negligible as $N \to \infty$. This is precisely stated in the next corollary.

**Corollary 4.30** (Exponential decrease implies $O(1)$ effective ranks)**.** *Let* $(W_N)_{N\in\mathbb{Z}_+}$ *be an infinite sequence of matrices in which* $W_N$ *has size* $N \times N$*. Suppose that there are parameters* $\alpha$ *and* $\omega$ *such that* $0 < \alpha \leq \omega < 1$ *and for each* $N$*, the singular values* $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_N \geq 0$ *of* $W_N$ *satisfy the inequalities*

$$\alpha^{i-1} \leq \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \leq \omega^{i-1}, \qquad i \in \{1,\dots,N\}\,. \tag{4.131}$$

*Then, as* $N \to \infty$*,*

$$\frac{1}{1-\alpha^2} + O(\alpha^{2N}) \leq \operatorname{srank}(W_N) \leq \frac{1}{1-\omega^2} + O(\omega^{2N})\,, \tag{4.132}$$

$$\frac{1}{1-\alpha} + O(\alpha^{N}) \leq \operatorname{nrank}(W_N) \leq \frac{1}{1-\omega} + O(\omega^{N}), \tag{4.133}$$

$$\frac{\omega}{1-\alpha}\exp\left(\frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2}\right) + O\left(\max\{\omega^N, N\alpha^N\}\right) \leq \operatorname{erank}(W_N) \leq \frac{\alpha}{1-\omega}\exp\left(\frac{\omega(1-\alpha)}{(1-\omega)^2}\right) + O(N\omega^N)\,. \tag{4.134}$$

*Proof.* We essentially expand the bounds of Proposition 4.25 and look for the first subdominant terms as $N \to \infty$. On the one hand,

$$g(\alpha^k, N) = \frac{1-\alpha^{kN}}{1-\alpha^k} = \frac{1}{1-\alpha^k}(1-\alpha^{kN})\,.$$

Hence,

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\left|g(\alpha^k,N) - \dfrac{1}{1-\alpha^k}\right|}{\alpha^{kN}} = \frac{1}{1-\alpha^k} < \infty$$

meaning that

$$g(\alpha^k, N) = \frac{1}{1-\alpha^k} + O(\alpha^{kN})\,.$$

The last asymptotic development readily implies the bounds for srank and nrank. On the other hand,

$$\frac{\alpha\, g'(\alpha, N)}{g(\omega, N)} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2}\left(1 + N\alpha^N - \alpha^N - \alpha^{N+1}\right)\left(1-\omega^N\right)^{-1},$$

which allows computing the limit

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\left|\dfrac{\alpha\, g'(\alpha, N)}{g(\omega, N)} - \dfrac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2\,(1-\omega^N)}\right|}{N\alpha^N} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2} < \infty\,.$$

Hence,

$$\frac{\alpha\, g'(\alpha, N)}{g(\omega, N)} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2\,(1-\omega^N)} + O\left(N\alpha^N\right)\,.$$

However,

$$\frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2\,(1-\omega^N)} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2} + O(\omega^N)$$

since

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\left|\dfrac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2\,(1-\omega^N)} - \dfrac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2}\right|}{\omega^N} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2} \lim_{N\to\infty} \frac{\left|\dfrac{\omega^N}{1-\omega^N}\right|}{\omega^N} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2}$$

Thus,

$$\frac{\alpha\, g'(\alpha, N)}{g(\omega, N)} = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2} + O(\omega^N) + O\left(N\alpha^N\right) = \frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2} + O\left(\max\{\omega^N, N\alpha^N\}\right)\,,$$

where we have invoked the basic property $O(u) + O(v) = O(\max\{u, v\})$. Consequently, the lower bound of erank has the following asymptotic expansion:

$$\begin{aligned}
\omega\, g(\alpha, N)\, \exp\left(\frac{\alpha\, g'(\alpha, N)}{g(\omega, N)}\right) &= \left(\frac{\omega}{1-\alpha} + O(\alpha^N)\right) \exp\left(\frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2} + O\left(\max\{\omega^N, N\alpha^N\}\right)\right) \\
&= \left(\frac{\omega}{1-\alpha} + O(\alpha^N)\right) \exp\left(\frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2}\right)\left(1 + O\left(\max\{\omega^N, N\alpha^N\}\right)\right) \\
&= \left(\frac{\omega}{1-\alpha} + O\left(\max\{\omega^N, N\alpha^N\}\right)\right) \exp\left(\frac{\alpha(1-\omega)}{(1-\alpha)^2}\right),
\end{aligned}$$

where the second line has been deduced using the well-known asymptotic formulas $O(u)O(v) = O(uv)$ and $O(u) + O(v) = O(\max\{u, v\})$. The upper bound for erank is obtained from the last result by permuting $\alpha$ and $\omega$, and considering $O(\max\{N\omega^N, \alpha^N\}) = O(N\omega^N)$. □

In light of Lemma 4.27, which bounds the effective ranks with terms proportional to $N - 1$, the previous asymptotic behavior was rather surprising. On the contrary, the next result is fully expected: slowly decreasing envelopes lead to effective ranks that grow linearly with $N$.

**Corollary 4.31** (Sub-linear to supra-linear decreases imply $O(N)$ effective ranks)**.** *Let $(W_N)_{N\in\mathbb{Z}_+}$ be an infinite sequence of matrices in which $W_N$ has size $N\times N$. Suppose that there are parameters $a$, $b$, $c$, $d$ such that $0<c\le a\le 1$ and $0<d\le b$, and for each $N$, the singular values $\sigma_1\ge\sigma_2\ge\cdots\sigma_N\ge 0$ of $W_N$ satisfy the inequalities*

$$\left(1-a\,\frac{i-1}{N-1}\right)^b \le \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \le \left(1-c\,\frac{i-1}{N-1}\right)^d, \qquad i\in\{1,\dots,N\}. \tag{4.135}$$

*Then, as $N\to\infty$ and for all $\delta\in(0,1)$,*

$$N\,\ell(a,2b,1)+O(1) \le \operatorname{srank}(W_N) \le N\,\ell(c,2d,1)+O(1), \tag{4.136}$$

$$N\,\ell(a,b,1)+O(1) \le \operatorname{nrank}(W_N) \le N\,\ell(c,d,1)+O(1), \tag{4.137}$$

$$N\,\ell(a,b,1)+O(1) \le \operatorname{erank}(W_N) \le N\,\ell(c,d,1)\exp\left[\frac{1}{\delta}\left(\frac{\ell(c,d(1-\delta),1)}{\ell(a,b,1)}-1\right)\right]+O(1), \tag{4.138}$$

*where $\ell$ is the function defined in Proposition 4.29.*

So far, we have obtained effective ranks that have either $O(1)$ or $O(N)$ asymptotic behaviors as $N\to\infty$. We are going to prove $O(N^{1-\epsilon})$ asymptotic behaviors are also possible for all $\epsilon>0$.

**Corollary 4.32** (Hypergeometric decrease admits $O(N^{1-\epsilon})$ effective ranks)**.** *Let $(W_N)_{N\in\mathbb{Z}_+}$ be an infinite sequence of matrices in which $W_N$ has size $N\times N$. Suppose that there are parameters $b_*$, $b^*$, $c_*$, $c^*$, $\zeta_*$, $\zeta^*$ such that $0\le b_*\le b^*$, $2\le c_*\le c^*$, $0<\zeta_*\le\zeta^*$ and such that for each $N$, the singular values $\sigma_1\ge\sigma_2\ge\cdots\sigma_N\ge 0$ of $W_N$ satisfy*

$$\left(1-\frac{i-1}{N-1}\right)^{c^*-2}\left(1+\zeta^*\frac{i-1}{N-1}\right)^{-b^*} \le \frac{\sigma_i}{\sigma_1} \le \left(1-\frac{i-1}{N-1}\right)^{c_*-2}\left(1+\zeta_*\frac{i-1}{N-1}\right)^{-b_*},$$

*for all $i\in\{1,\dots,N\}$. 1. If $c_*=c^*=N^\epsilon/d$ for some $d>0$ and $\epsilon\in(0,1]$, then as $N\to\infty$,*

$$\begin{aligned}
\frac{d}{2}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}) &\le \operatorname{srank}(W_N) \le 1+\frac{d}{2}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}),\\
d\,N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}) &\le \operatorname{nrank}(W_N) \le 1+d\,N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}),\\
d\,N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}) &\le \operatorname{erank}(W_N) \le (1+d\,N^{1-\epsilon})e^{\frac{1}{1-\delta}}+O(\max(1,N^{1-2\epsilon})),
\end{aligned}$$

*where the last inequality holds for all $\delta\in(0,1)$.*

*2. If $b_*>1$ , $\zeta_*=\zeta^*=N^\epsilon/d$ for some $d>0$ and $\epsilon\in(0,1]$, and $b_*,b^*\notin\mathbb{Z}$, then*

$$\begin{aligned}
\frac{d}{2b^*-1}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}) &\le \operatorname{srank}(W_N) \le 1+\frac{d}{2b_*-1}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon})\\
\frac{d}{b^*-1}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}) &\le \operatorname{nrank}(W_N) \le 1+\frac{d}{b_*-1}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon})\\
\frac{d}{b^*-1}N^{1-\epsilon}+O(N^{1-2\epsilon}) \le \operatorname{erank}(W_N) &\le \left(1+\frac{d}{b_*-1}N^{1-\epsilon}\right)\exp\left(\frac{b^*-b_\delta}{\delta(b_\delta-1)}\right)+O(\max\{1,N^{1-b_\delta\epsilon},N^{1-2\epsilon}\}),
\end{aligned}$$

*where the last inequality holds for all* $\delta \in (0, 1 - 1/b_*)$ *and* $b_\delta := (1-\delta)b_*$.

*3. If* $b^* < 1$, $\zeta_* = \zeta^* = N^\epsilon/d$ *for some* $d > 0$, *and* $\epsilon \in (0, 1]$, *and* $b_*, b^* \notin \mathbb{Z}$, *then*

$$g(2b^*, 2c^* - 2, d)\, N^{1-2b^*\epsilon} + O\left(N^{1-(2b^*+1)\epsilon}\right) \le \operatorname{srank}(W_N) \le 1 + g(2b_*, 2c_* - 2, d)\, N^{1-2b_*\epsilon} + O\left(N^{1-(2b_*+1)\epsilon}\right)$$

$$g(b^*, c^*, d)\, N^{1-b^*\epsilon} + O\left(N^{1-(b^*+1)\epsilon}\right) \le \operatorname{nrank}(W_N) \le 1 + g(b_*, c_*, d)\, N^{1-b_*\epsilon} + O\left(N^{1-(b_*+1)\epsilon}\right)$$

$$g(b^*, c^*, d)\, N^{1-b^*\epsilon} + O\left(N^{1-(b^*+1)\epsilon}\right) \le \operatorname{erank}(W_N) \le \left(1 + g(b_*, c_*, d)\, N^{1-b_*\epsilon}\right) e^{y(N)} + O\left(N^{1-\gamma\epsilon}\, e^{y(N)}\right),$$

*where the last inequality holds for all* $\delta \in (0, 1 + (1-2b^*)/b_*)$ *with* $b^* > 1/2$ *and* $b_* > 2b^* - 1$, $\gamma = 1 - 2(b^* - b_*) + \delta b_*$, *and*

$$g(b, c, d) = \frac{\Gamma(1-b)\Gamma(c-1)\, d^b}{\Gamma(c-b)}, \qquad y(N) = \frac{g((1-\delta)b_*, (1-\delta)c_* + 2\delta, d)}{\delta\, g(b^*, c^*, d)}\, N^{\epsilon(b^* - b_\delta)} - \frac{1}{\delta}. \tag{4.139}$$

*Proof.* First, we use the following asymptotic expansion for $c \to \infty$ [149, (15.12.2)]:

$${}_2F_1(a, b; c; -\zeta) = 1 - \frac{ab}{c}\zeta + O(c^{-2}).$$

Hence, for $c = N^\epsilon/d$,

$$\frac{N-1}{c-1}\, {}_2F_1(a, b; c; -\zeta) = dN^{1-\epsilon}\left(1 + O(N^{-\epsilon})\right),$$
$$\frac{N-1}{2c-3}\, {}_2F_1(a, b; c; -\zeta) = \frac{d}{2}N^{1-\epsilon}\left(1 + O(N^{-\epsilon})\right),$$

The substitution of the last equations into the bounds of Theorem 4.28 readily provides the desired inequalities for srank, nrank, and the lower bound of erank. For the upper bound of the erank, we need to get the asymptotics of

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\delta}\left(\frac{c^* - 1}{(1-\delta)c_* + 2\delta - 1}\, \frac{{}_2F_1(1, (1-\delta)b_*; (1-\delta)c_* + 2\delta; -\zeta_*)}{{}_2F_1(1, b^*; c^*; -\zeta^*)} - 1\right).$$

However,

$$\frac{{}_2F_1(1, (1-\delta)b_*; (1-\delta)c_* + 2\delta; -\zeta_*)}{{}_2F_1(1, b^*; c^*; -\zeta^*)} = 1 + O(N^{-\epsilon}), \quad \frac{c^* - 1}{(1-\delta)c_* + 2\delta - 1} = \frac{1}{1-\delta} + O(N^{-\epsilon}),$$

leading to the conclusion that $\mathcal{H} = \frac{1}{1-\delta} + O(N^{-\epsilon})$. Moreover,

$$\mathcal{P} = \frac{1}{N-1}\frac{(c^* - 1)\rho(b^*, c^*, \zeta^*)}{\delta\ {}_2F_1(1, b_*; c_*; -\zeta_*)} = O(N^{\epsilon-1}),$$

from which we deduce that asymptotic expansions

$$\mathcal{H} + \mathcal{P} = \frac{1}{1-\delta} + O(N^{-\epsilon}) + O(N^{\epsilon-1}) \qquad \text{and} \qquad e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}} = e^{\frac{1}{1-\delta}}\left(1 + O(N^{-\epsilon}) + O(N^{\epsilon-1})\right)$$

where the latter result holds for all $\delta \in (0, 1)$. Hence,

$$\begin{aligned}\operatorname{erank}(W_N) &\le \left(1 + d\, N^{1-\epsilon} + O(N^{1-2\epsilon})\right) e^{\frac{1}{1-\delta}}\left(1 + O(N^{-\epsilon}) + O(N^{\epsilon-1})\right) \\ &= e^{\frac{1}{1-\delta}} + d\, e^{\frac{1}{1-\delta}}\, N^{1-\epsilon} + O(\max(1, N^{1-2\epsilon}))\end{aligned}$$

as expected.

Second, we use the following identity valid for $|z| > 1$ and $a - b \notin \mathbb{Z}$ [149, (15.8.2)]:

$$
\begin{aligned}
{}_2F_1(a,b;c;z) = \frac{\Gamma(b-a)\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)\Gamma(b)} \frac{1}{(-z)^a}\ {}_2F_1\left(a, a-c+1; a-b+1; \frac{1}{z}\right) \\
+ \frac{\Gamma(a-b)\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)\Gamma(a)} \frac{1}{(-z)^b}\ {}_2F_1\left(b-c+1, b; b-a+1; \frac{1}{z}\right)
\end{aligned}
$$

Thus, for $a = 1$ and $z = -\zeta$,

$$
{}_2F_1(1,b;c;-\zeta) = \frac{c-1}{b-1}\frac{1}{\zeta}\ {}_2F_1\left(1, 2-c; 2-b; -\frac{1}{\zeta}\right) + \frac{\Gamma(1-b)\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)} \frac{1}{\zeta^b}\ {}_2F_1\left(b-c+1, b; b; -\frac{1}{\zeta}\right)
$$

However, according to [149, (15.2.1)],

$$
{}_2F_1\left(\alpha, \beta; \gamma; -\frac{1}{\zeta}\right) = 1 - \frac{\alpha\beta}{1!\gamma}\frac{1}{\zeta} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}\frac{1}{\zeta^2} - + \ldots = 1 + O(\zeta^{-1})
$$

The last two results imply that as $\zeta \to \infty$ ($\zeta := \zeta^* = \zeta_* = N^\epsilon/d$),

$$
{}_2F_1(1,b;c;-\zeta) = f(b,c,\zeta) + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-b-1}), \qquad f(b,c,\zeta) = \frac{c-1}{b-1}\frac{1}{\zeta} + \frac{\Gamma(1-b)\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)}\frac{1}{\zeta^b}\,. \tag{4.140}
$$

Substituting this result into Theorem 4.28, we get the following asymptotic expansion for $\zeta \to \infty$:

$$
\begin{aligned}
\frac{N-1}{2c^*-3}\left(R^* + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-2b^*-1})\right) &\le \mathrm{srank}(W) \le 1 + \frac{N-1}{2c_*-3}\left(R_* + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-2b_*-1})\right), \\
\frac{N-1}{c^*-1}\left(S^* + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-b^*-1})\right) &\le \mathrm{nrank}(W) \le 1 + \frac{N-1}{c_*-1}\left(S_* + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-b_*-1})\right), \\
\frac{N-1}{c^*-1}\left(S^* + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-b^*-1})\right) &\le \mathrm{erank}(W) \le \left(1 + \frac{N-1}{c_*-1}\left(S_* + O(\zeta^{-2}) + O(\zeta^{-b_*-1})\right)\right) e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}},
\end{aligned}
$$

where $R^* = f(2b^*, 2c^*-2, \zeta)$, $R_* = f(2b_*, 2c_*-2, \zeta)$, $S^* = f(b^*, c^*, \zeta)$, $S_* = f(b_*, c_*, \zeta)$. Setting $\zeta = N^\epsilon/d$ and simplifying the resulting expressions lead to the desired inequalities for srank, nrank, and the lower bound of erank. Regarding the upper bound of the erank, the use of Eq. (4.140) allows us to write

$$
\frac{{}_2F_1(1, b_\delta; c_\delta; -\zeta_*)}{{}_2F_1(1, b^*; c^*; -\zeta^*)} = \frac{(c_\delta - 1)(b^*-1)}{(b_\delta - 1)(c^*-1)}\left[\frac{1 - r(b_\delta, c_\delta, d)\ N^{\epsilon(1-b_\delta)} + O(N^{-\epsilon}) + O(N^{-\epsilon b_\delta})}{1 - r(b^*, c^*, d)\ N^{\epsilon(1-b^*)} + O(N^{-\epsilon}) + O(N^{-\epsilon b^*})}\right],
$$

where $b_\delta := (1-\delta)b_*$, $c_\delta := (1-\delta)c_* + 2\delta$, and

$$
r(b,c,d) = \frac{\Gamma(2-b)\,\Gamma(c-1)\,d^{b-1}}{\Gamma(c-b)}\,.
$$

Moreover, setting $b_\delta > 1$ implies that

$$
\begin{aligned}
\frac{{}_2F_1(1, b_\delta; c_\delta; -\zeta_*)}{{}_2F_1(1, b^*; c^*; -\zeta^*)} &= \frac{(c_\delta - 1)(b^*-1)}{(b_\delta - 1)(c^*-1)}\left(1 + O\left(N^{\epsilon(1-b_\delta)}\right)\right)\left(1 + O\left(N^{\epsilon(1-b^*)}\right)\right) \\
&= \frac{(c_\delta - 1)(b^*-1)}{(b_\delta - 1)(c^*-1)} + O\left(N^{\epsilon(1-b_\delta)}\right)
\end{aligned}
$$

along with

$$\mathcal{H} = \frac{b^* - b_\delta}{\delta(b_\delta - 1)} + O\left(N^{\epsilon(1-b_\delta)}\right) \qquad \text{and} \qquad \mathcal{P} = O\left(N^{\epsilon-1}\right).$$

Hence,

$$e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}} = \exp\left(\frac{b^* - b_\delta}{\delta(b_\delta - 1)}\right)\left(1 + O\left(N^{\epsilon(1-b_\delta)}\right) + O\left(N^{\epsilon-1}\right)\right)$$

and the upper bound of the erank is

$$\begin{aligned}\operatorname{erank}(W_N) &\leq \left(1 + \frac{d}{b_* - 1}N^{1-\epsilon} + O(N^{1-2\epsilon})\right)\exp\left(\frac{b^* - b_\delta}{\delta(b_\delta - 1)}\right)(1 + O(N^{\epsilon(1-b_\delta)}) + O(N^{\epsilon-1})) \\ &= \left(1 + \frac{d}{b_* - 1}N^{1-\epsilon}\right)\exp\left(\frac{b^* - b_\delta}{\delta(b_\delta - 1)}\right) + O(\max\{1, N^{1-\epsilon b_\delta}, N^{1-2\epsilon}\}).\end{aligned}$$

Third, setting $b^* < 1$ gives

$$\frac{{}_2F_1(1, b_\delta; c_\delta; -\zeta_*)}{{}_2F_1(1, b^*; c^*; -\zeta^*)} = \frac{g(b_\delta, c_\delta, d)}{g(b^*, c^*, d)}\, N^{\epsilon(b^*-b_\delta)} + O(N^{\epsilon(2b^*-b_\delta-1)}),$$

where the function $g$ is defined in Eq. (4.139). This leads to

$$\mathcal{H} = \frac{g(b_\delta, c_\delta, d)}{\delta\, g(b^*, c^*, d)}\, N^{\epsilon(b^*-b_\delta)} - \frac{1}{\delta} + O(N^{\epsilon(2b^*-b_\delta-1)}).$$

With $\mathcal{P} = O(N^{b^*\epsilon-1})$, we find

$$e^{\mathcal{H}+\mathcal{P}} = e^{y(N)}\, e^{O(N^{\epsilon(2b^*-b_\delta-1)})} \qquad \text{with} \qquad y(N) = \frac{g(b_\delta, c_\delta, d)}{\delta\, g(b^*, c^*, d)}\, N^{\epsilon(b^*-b_\delta)} - \frac{1}{\delta}$$

If $2b^* - b_\delta - 1 < 0$, or equivalently, $b^* < \frac{b_\delta+1}{2}$, then

$$\begin{aligned}\operatorname{erank}(W_N) &\leq \left(1 + g(b_*, c_*, d)\, N^{1-b_*\epsilon} + O\left(N^{1-(b_*+1)\epsilon}\right)\right) e^{y(N)}(1 + O(N^{\epsilon(2b^*-b_\delta-1)})) \\ &= \left(1 + g(b_*, c_*, d)\, N^{1-b_*\epsilon}\right)\, e^{y(N)} + O(N^{1-(1-2(b^*-b_*))\epsilon+\delta b_*\epsilon}\, e^{y(N)})\end{aligned}$$

as desired. □

**Remark 4.33.** For the upper bound of the erank, we also note the following. In the case 2, additionally, if $b^* - b_* = \delta$ for some $\delta \in (0, 1 - 1/b_*)$, then

$$\exp\left(\frac{b^* - b_\delta}{\delta(b_\delta - 1)}\right) = \exp\left(\frac{b_* + 1}{b_* - 1}\right) + O(\delta).$$

One can also simplify the upper bound for the erank in the case 3 by setting $b^* - b_* = \delta$ and $c^* - c_* = \gamma\delta$, by considering a small $\delta$, and by using Stirling's formula for the gamma functions in $g(b_\delta, c_\delta, d)$. ■

It is worth emphasizing that the hypergeometric envelopes of the previous corollary, given their generality, not only admit $O(N^{1-\epsilon})$ growth of the effective ranks, but can also produce

$O(1)$ and $O(N)$ growths. Indeed, when $b_* = b^* = 0$, one recovers special sub-linear to supra-linear decreasing envelopes included in Corollary 4.31, leading to $O(N)$ effective ranks. When $c_* = c^* = 2$ and $b_* = b^* \to \infty$, one gets exponentially decreasing envelopes as in Corollary 4.30, corresponding to $O(1)$ effective ranks. Finally, when $c_* = c^* = 2$ while $b_*$ and $b^*$ remain finite, one instead obtains power-law decreasing envelopes and it can be shown, using the asymptotics of the Hurwitz zeta function, that it leads to $O(N^{1-\epsilon})$ effective ranks.

We have thus proved that different choices for $\psi_*$ and $\psi^*$ can induce very distinct asymptotic behaviors of the above-mentioned effective ranks as $N \to \infty$. Figure 4.8 depicts these findings by showing different singular-value envelopes, leading to three different classes of maximum growth of nrank as $N$ becomes large: linear $O(N)$, sub-linear $O(N^{1-\epsilon})$ with $0 < \epsilon < 1$, and constant $O(1)$.

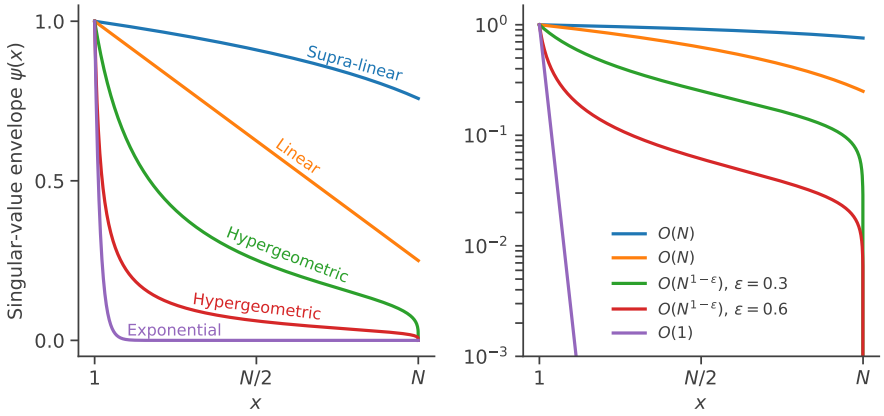



Figure 4.8 – Typical singular-value envelopes $\psi(x)$, describing the decreasing behavior of the normalized singular values $\sigma_i/\sigma_1$, vs. the continuous variable $x$, interpolating between the indices $i$, and their impact on the asymptotics of srank, nrank, and erank (bottom-right panel). The scale of values for $\psi(x)$ is linear on the left while it is logarithmic on the right. From top to bottom, the decreasing functions are: $\left(1 - a\frac{x-1}{N-1}\right)^b$ with $a = \frac{3}{4}$, $b = \frac{1}{5}$ (blue), and $b = 1$ (orange); $\left(1 - \frac{x-1}{N-1}\right)^{c-2} / \left(1 + \zeta\frac{x-1}{N-1}\right)^b$ with $b = \frac{3}{4}$, $c = 2\frac{1}{4}$, $\zeta = N^{0.3}$ (green), and $\zeta = N^{0.6}$ (red); $\omega^{x-1}$ with $\omega = 0.97$ (purple). For all cases, $N = 2000$.

As previously mentioned, the hypergeometric case generalizes several types of decrease, including the power-law decrease ($c_* = c^* = 2$). The latter has been observed in the adjacency spectrum of scale-free random graphs [122] and in the eigenspectra of covariance matrices in various settings, including fractional Brownian motion [209], EEG time series [520], neuronal activity in the mouse [564, 565] and macaque [316] visual cortex.

In their seminal work, Stringer et al. [564] examined the eigenspectrum of the covariance matrix derived from signals of large populations of neurons in the visual cortex of awake mice viewing natural images. They argued that the evoked neuronal population activity in this context is "high-dimensional". Their conception of high dimensionality is anchored in sophisticated theoretical findings, including methods from functional data analysis and fractal geometry.

As they noted [564, Supplementary information p.7]: *These results demonstrate that unless eigenspectra decay faster than $n^{-1}$ , population codes are pathological, either exhibiting discontinuous responses, or infinite population variance. Furthermore, for stimuli drawn from a set of manifold dimension $d$, codes with eigenspectra decaying slower than $n^{-1-2/d}$ are also pathological, displaying infinite variance of the code's derivative and fractal geometry of the response manifold. We conclude that our experimental observations of eigenspectrum decay only just faster than $n^{-1-2/d}$ indicate a neural code that is as high-dimensional as possible before hitting the regime where these pathological conditions must occur.* Therefore, the dimensionality of the neural code is deemed "high" when the eigenvalues of the covariance matrix decrease as slow as possible, nearing the threshold indicative of pathological responses, and "low" when the decrease is faster, significantly distanced from this critical threshold.

However, no measure of dimension is used to quantify the decrease of the eigenvalues. In fact, as shown below, the decrease of the covariance-matrix eigenvalues implied by the above power-law is fast enough to lead to effective ranks of order strictly less than $O(N)$, where $N$ corresponds to the number of neurons, thus suggesting low dimensionality from our perspective. Indeed, let us assume that the visual stimuli's manifold dimension $d_{\text{stim}} > 2$ and that the $n$-th eigenvalue of the covariance matrix is less than $n^{-1-2/d_{\text{stim}}}$ as described in [564], implying that its $n$-th singular value is bounded above by $n^{-1/2-1/d_{\text{stim}}}$. Moreover, let us assume without loss of generality that $\sigma_1 = 1$. This scenario aligns with the third case of Corollary 4.32 for $b_* = 1/2 + 1/d_{\text{stim}} < 1$, $c_* = 2$, and $\zeta_* = N - 1 \approx N$ (i.e., $d = 1$, $\epsilon = 1$). We can deduce from this that srank and nrank asymptotically grow as $1 + O(N^{-2/d_{\text{stim}}})$ and $O(N^{1/2-1/d_{\text{stim}}})$, respectively. This presents an intriguing case where at least two effective ranks exhibit completely different asymptotic behaviors. Yet, in this power-law scenario, both the stable rank to dimension ratio and nuclear rank to dimension ratio tend to zero as $N$ grows to infinity.

### *3. Impact of matrix density on the stable rank*

Let us now derive some intuitive inequalities for the stable rank of graphs based on inequalities for the weight matrix.

**Lemma 4.34.** *Let $W$ be a $N \times N$ matrix. Then the Frobenius norm of $W$ is upper bounded as*

$$\|W\|_F \leq N \max_{i,j} |W_{ij}| \,. \tag{4.141}$$

*Moreover, the spectral norm of $W$ is lower bounded as*

$$\|W\|_2 \geq \max\left\{ \max_i \|\boldsymbol{r}_i\|, \max_j \|\boldsymbol{c}_j\|, \frac{1}{\sqrt{N}}\|\boldsymbol{k}^{\text{in}}\|, \frac{1}{\sqrt{N}}\|\boldsymbol{k}^{\text{out}}\| \right\}, \tag{4.142}$$

*where $\boldsymbol{r}_i$ and $\boldsymbol{c}_j$ respectively denote the $i$-th row and $j$-th column of $W$ while $\boldsymbol{k}^{\text{in}} = W\mathbf{1}$ and $\boldsymbol{k}^{\text{out}} = W^\top \mathbf{1}$.*

*Proof.* The first inequality trivially follows from the definition of the Frobenius norm:

$$\|W\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} W_{ij}^2} \leq \sqrt{\sum_{i,j} W_{\max}^2} = \sqrt{N^2 W_{\max}^2} = N W_{\max}\,, \qquad W_{\max} = \max_{i,j} |W_{ij}|\,.$$

The second inequality is the maximum between four lower bounds. To derive them, we start with the definition

$$\|W\|_2 = \max_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \|W\boldsymbol{x}\|\,,$$

which implies that $\|W\|_2 \geq \|W\boldsymbol{x}\|$ for any $\boldsymbol{x}$ such that $\|\boldsymbol{x}\| = 1$. Choosing $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_j$, the $j$-th unit vector, leads to the inequality $\|W\|_2 \geq \|\boldsymbol{c}_j\|$. But this inequality holds for all $j$, so we can combine all the inequalities and infer that

$$\|W\|_2 \geq \max_j \|\boldsymbol{c}_j\|.$$

Now, because the spectral norm is invariant under matrix transposition, we also know that $\|W\|_2 \geq \left\|W^\top \boldsymbol{x}\right\|$ for any $\boldsymbol{x}$ such that $\|\boldsymbol{x}\| = 1$. Setting once again $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_i$ for all $i$, we conclude that

$$\|W\|_2 \geq \max_i \|\boldsymbol{r}_i\|.$$

Choosing $\boldsymbol{x} = \mathbf{1}/\sqrt{N}$ in $\|W\|_2 \geq \|W\boldsymbol{x}\|$ and in $\|W\|_2 \geq \left\|W^\top \boldsymbol{x}\right\|$ readily provides the two other lower bounds. □

**Proposition 4.35.** *Let $W$ be the adjacency matrix of a directed graph of $N$ vertices and $M$ edges. Moreover, let $k_{\max}$ be the maximum among all ingoing and outgoing degrees of the graph. Then,*

$$\operatorname{srank}(W) \leq \frac{M}{k_{\max}}\,. \tag{4.143}$$

*Proof.* We first note that when $W$ is an adjacency matrix, all its elements are either 0 or 1, which implies that its Frobenius norm squared is exactly equal to $M$. Indeed,

$$\|W\|_F^2 = \sum_{i,j} W_{ij}^2 = \sum_{\substack{(j,i) \\ j \to i}} 1 = M. \tag{4.144}$$

Moreover, we know from the previous lemma that the spectral norm squared is bounded by the degrees:

$$\begin{aligned}
\|W\|_2^2 &\geq \max\left\{ \max_i \sum_j W_{ij}^2,\, \max_j \sum_i W_{ij}^2 \right\} \\
&= \max\left\{ \max_i \sum_j W_{ij},\, \max_j \sum_i W_{ij} \right\} \\
&= \max\left\{ \max_i k_i^{\text{in}},\, \max_j k_j^{\text{out}} \right\} = k_{\max}\,.
\end{aligned}$$

Thus, $\operatorname{srank}(W) = \|W\|_F^2 / \|W\|_2^2 \leq M/k_{\max}$, as expected. □

In dense directed graphs of $N$ vertices, the number of edges $M$ typically scales as $N^2$ while the maximum degree scales as $N$. The previous proposition thus implies that the stable rank is of order $O(N)$ for such graphs. A slightly different scaling law exists for sparse graphs. Indeed, if $M = O(N^{2-\varepsilon})$ and $k_{\max} = O(N^{1-\epsilon})$ for some $\varepsilon > \epsilon > 0$, then the stable rank is of order $O(N^{1+\epsilon-\varepsilon}) = o(N)$. As shown in next proposition, similar scaling behaviors emerge when considering general square matrices, which are relevant for studying signed weighted directed graphs.

**Proposition 4.36.** *Let $p \geq 0$ and $0 < \alpha \leq \beta$. Let $W$ be a $N \times N$ matrix such that*

$$\alpha N^{-p} \leq W_{ij}^2 \leq \beta N^{-p} \tag{4.145}$$

*for all $1 \leq i, j \leq N$. Then, the stable rank satisfies the inequality*

$$\mathrm{srank}(W) \leq \alpha^{-1}\beta\, N\,. \tag{4.146}$$

*More generally, if the maximum number of nonzero elements in a row or in a column of $W$ is $\gamma N$, the total number of nonzero elements of $W$ is $\delta N^2$, and all these nonzero elements satisfy inequality (4.145), then*

$$\mathrm{srank}(W) \leq \alpha^{-1}\beta\gamma^{-1}\delta\, N\,. \tag{4.147}$$

*Proof.* We use Lemma 4.34 and proceed essentially as for Proposition 4.35. □

Sparse $N \times N$ matrices are characterized by a total number of nonzero elements of order strictly less than $N^2$ and a maximum number of nonzero elements in each row or column of order strictly less than $N$. In the last proposition, this situation corresponds to the case where $\gamma = \bar{\gamma}\, N^{-\epsilon}$ and $\delta = \bar{\delta} N^{-\varepsilon}$ for some $\varepsilon > \epsilon > 0$, which implies that once again, srank $= O(N^{1+\epsilon-\varepsilon}) = o(N)$. A typical sparse matrix has $\varepsilon = 2\epsilon$, leading to a stable rank scaling as $O(N^{1-\varepsilon})$, which tends to $O(1)$ when considering the ultra-sparse case $\epsilon = 1$. In words, the stable rank of (signed weighted directed) graphs having $N$ vertices increases at most linearly with $N$ and sparsity makes the increase become sub-linear. This means that sparse graphs are characterized by a ratio srank$/N$ that goes to zero as $N$ grows, obviously corresponding to a low effective rank.

### 4.11.4 *Adaptive networks

Complex systems are not only characterized by their nonlinear dynamics and network structure, but also by their capacity to adapt themselves to environmental changes [412]. The effective rank of a complex network should thus be expected to change according to time. We performed a preliminary investigation of this phenomenon by extracting the effective rank of the *C. elegans* connectome at different stages of its maturation [641] as shown in Fig 4.9. We observed that the stable rank decreases with age. More work should be done on this subject

to verify if this decrease is significant and to determine the biological meaning of an effective rank decrease with maturation.

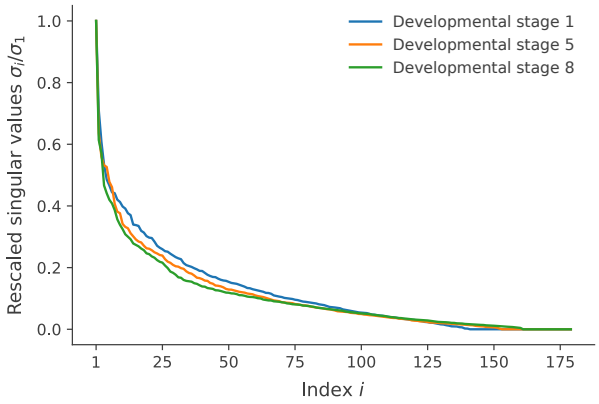



Figure 4.9 – Singular values of the matrices describing the connectivity of the *C. elegans* brain at different maturation stages. The stable ranks are 21.6 (developmental stage 1), 19.7 (developmental stage 5), 18.5 (developmental stage 8).

In Ref. [387], the authors numerically show that training a neural network decreases the stable rank, which is somewhat in line with what we observe in the latter biological example.

### 4.11.5 *SVD for dynamical systems

The applications of SVD for dynamical systems is very broad, especially in engineering and linear control systems [23]. SVD is also generalized for nonlinear operators [201] and it is even possible to perform a quasi-optimal low-rank approximation for matrix dynamics with time-evolving matrices $U, \Sigma, V^\top$ [315], which could have interesting applications in the study of temporal networks [274]. As illustrated in the paper, one can also leverage the power of SVD in the dimension reduction of dynamical systems on networks. As explained in Ref. [583, Appendix C], it can be very hard to choose adequately the reduction matrix $M$. Having real nonnegative singular values and real singular vectors is an advantage when it comes to interpreting the spectra and to define interpretable observables for the dynamics (as opposed to eigenvalue decomposition for general real matrices, which can raise the problem of dealing with complex reduction matrices and create complex reduced dynamics for an initially real dynamics [580, p.145] [583]). In the following section, we give details about the dimension reduction of complex systems and especially, in subsection 4.12.2, we show how to use the salient properties of SVD to get insights on the low-rank hypothesis of complex systems.

## 4.12 Appendix: Dimension reduction of complex systems

We have introduced generalities on dimension reduction in Sec. 3.4 and more specifically, the least-square optimal dimension reduction. Under the form $Mf(M^+X)$ or, elements by elements, $\sum_{i=1}^{N} M_{\mu i} f_i(\sum_{\nu=1}^{n} M^+_{i\nu} X_\nu)$, there is still an explicit dependence of the vector field

over $N$. Yet, we can sometimes eliminate this dependence by simplifying $Mf(M^+X)$ under certain properties of $f$ which reveals something special about the resulting interaction between the observables.

In this section, we first present how the least-square optimal dimension reduction leads to higher-order interactions. Second, we present the proof of the upper bound on the alignment error in the main text and we then present a family of dynamics whose dimension can be exactly reduced. We finally complete the section with four parts about numerical and mathematical technicalities of the dimension reduction.

### 4.12.1 Emergence of higher-order interactions

The critical role of higher-order interactions in complex systems is now increasingly recognized [49, 50, 249, 340, 350] and in this section, we aim at clarifying their origin by demonstrating the profound interplay between the description dimension of a system and the possibility of having higher-order interactions. When reducing the dimension of a dynamical system on a network, it is not always clear what to expect about the structure of the reduced dynamical system [see Fig. 4.4 in the paper]. We demonstrate that the structure that emerges from the dimension reduction in Theorem 3.45 generally yields higher-order interactions between the observables. For that, we first introduce some assumptions.

**Assumptions 4.37.**

*(1) The $N$-dimensional dynamics on a network of weight matrix $W$ is*

$$\dot{x}_i = h_i(x_i, y_i), \quad i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.148}$$

*where, for all $i$, $x_i : t \mapsto \mathbb{R}^N$, $y_i = \sum_{j=1}^N W_{ij}x_j$, and $h_i : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ is an analytic function.*

*(2) The $n$-dimensional reduced dynamics is the least-square optimal dynamics [Theorem 3.45]*

$$\dot{X}_\mu = \sum_{i=1}^N M_{\mu i} h_i(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i), \quad \mu \in \{1, ..., n\}, \tag{4.149}$$

*where $X = Mx$ with any real reduction matrix $M$, $\tilde{x} = M^+X$, and $\tilde{y} = WM^+X$.*

Condition (1) of Assumptions 4.37 might look restrictive because of the dependence over the linear function $x \mapsto Wx$. Yet, a considerable amount of complex system models satisfy condition (1) as shown in the following examples (from the power series in $x_i, y_i$ of their analytic vector field, it is possible to classify the dynamics on networks of the next examples).

**Example 4.38** (Epidemiology)**.** In the Susceptible-Infected-Susceptible (SIS) dynamics, an infected individual $i$ (e.g., from a virus or disinformation) transmits its infection at a rate $\gamma$

and recovers with rate $d_i$. In its exact form, the SIS dynamics is a homogeneous Markovian jump process and is described by master equations (forward Kolmogorov equations) [212,311, 549]. Yet, since there are $2^N$ equations in this complete description and $N$ is generally large, the typical approach is to consider some approximations of the process [311, 549, 617]. By neglecting the dynamical correlations between the states of the neighbors [548, Sec. 2.3.1], the quenched mean-field (QMF) approach [617] yields the deterministic system of equations

$$\dot{x}_i = -d_i x_i + \gamma(1 - x_i)\, y_i, \qquad i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.150}$$

called the QMF SIS model, where $x_i$ is the probability for the vertex $i$ to be infected. In Fig. 4.5, we use the latter dynamics as a simple introductory example. More generally, quenched mean-field approximations of many binary stochastic processes, such as the SIS dynamics above, the Cowan dynamics [135, 455], and the Glauber dynamics [226, 423] have the general form

$$\dot{x}_i = (1 - x_i)\, \alpha(k_i - y_i,\, y_i) + x_i\, \beta(k_i - y_i,\, y_i), \qquad i \in \{1, ..., N\}\,, \tag{4.151}$$

where $x_i$ is the probability for vertex $i$ to be active, $k_i = \sum_{i=1}^{N} W_{ij}$ is the in-degree of vertex $i$, $\alpha$ (resp. $\beta$) is some analytic activation (resp. deactivation) probability function $\mathbb{R}\times\mathbb{R} \to [0, 1]$. ■

**Example 4.39** (Neuroscience)**.** The Wilson-Cowan dynamics in Example 3.47 satisfies condition (1) of Assumption 4.37. Another popular model of neuronal activity, the threshold-linear model [257, 460], is defined by the equations

$$\dot{x}_i = -x_i + \left[\sum_{j=1}^{N} W_{ij} x_j + b_i\right]_+, \qquad i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.152}$$

where $y \mapsto [y]_+ = \max\{0, y\}$ is the standard rectifier or ReLU function. To meet condition (1), the latter must be replaced by an analytic approximation, such as the softplus function $y \mapsto \ln(1 + e^{ky})/k$ for some $k > 0$. ■

**Example 4.40** (Population dynamics)**.** Population dynamics are widely used in science from ecology [418] and game theory [249] to chemistry (e.g., kinetic equations) [352] and physics (e.g., lasers) [410]. The generalized Lotka-Volterra model [370,610] is a very typical population dynamics with the form

$$\dot{x}_i = -d x_i + \gamma x_i y_i\,. \tag{4.153}$$

Refined models such as

$$\dot{x}_i = -d x_i - s x_i^2 + \gamma \frac{x_i y_i}{\alpha + y_i} \tag{4.154}$$

in Ref. [418] or the microbial population dynamics [521]

$$\dot{x}_i = a - d\, x_i + b x_i^2 - c x_i^3 + \gamma\, x_i\, y_i. \tag{4.155}$$

have also been used to incorporate more realistic effects, like the Allee effect in which a population exhibits negative growth for low abundances [13, 208]. In the latter dynamics, which is used in the paper, the correspondences with the parameters of Ref. [521] are $a = F$, $b = B(1 + K/C)$, $c = B/C$, and $d = BK$ where $F$ is the migration rate, $B$ is the logistic growth rate, $C$ is the carrying capacity, and $K$ is the Allee effect strength. In Table 4.3, we consider that the parameter $d$ can vary for each vertex only for the sake of coherence with the other dynamics. ■

**Example 4.41** (Oscillators)**.** The Kuramoto-Sakaguchi dynamics [332, 515] is a canonical model for a large class of oscillatory systems [476, 580] and finds many applications, e.g., for Josephson junctions [628], nanoelectromechanical oscillators [390], and neuroscience [286]. The dynamics of the phase oscillators with a phase lag $\alpha$ is such that

$$\dot{\theta}_j = \omega_j + \gamma \sum_{k=1}^{N} W_{jk} \sin(\theta_k - \theta_j + \alpha), \tag{4.156}$$

where $\theta_j(t)$ is the position of the $j$-th oscillator at time $t$, $\omega_j$ is the $j$-th natural frequency, and $\gamma$ is the coupling constant. By setting $z_j = e^{i\theta_j}$ [583], the Kuramoto-Sakaguchi model becomes

$$\dot{z}_j = i\omega_j z_j + \gamma\, e^{-i\alpha}\, y_j - \gamma\, e^{i\alpha}\, z_j^2\, \bar{y}_j, \tag{4.157}$$

where $y_j = \sum_{k=1}^{N} W_{jk} z_k$ and $\bar{}$ denotes complex conjugation. Note that the Winfree model [638] and the theta model [170] on networks [583] also satisfy the condition (1) of Assumption 4.37. ■

**Example 4.42** (Machine learning)**.** The universal approximation theorem of Funahashi and Nakamura [202, Theorem 1] guarantees that a solution to a general dynamical system is approximately given, up to the desired accuracy, by a solution of a continuous-time recurrent neural network [52, 202]

$$\dot{x}_i = -\frac{1}{\tau_i} x_i + \sum_{j=1}^{N} W_{ij} \mathcal{S}(x_j) + I_i, \tag{4.158}$$

where $x_i$ is the trajectory of the $i$-th neuron, $\tau_i$ is the time-scale of neuron $i$, $\mathcal{S}$ is the sigmoid (logistic) function, $W_{ij}$ is the element $(i, j)$ of the $N \times N$ weight matrix $W$, and $I_i$ is the input current applied on neuron $i$. Equation (4.158) is also similar, up to some variations in its form, to the Cohen-Grossberg model [127, 250], the Hopfield model [277], the activation dynamics [265], the continuous rate RNN [309,310], or reservoir computers. This recurrent neural network does not directly have the form to satisfy the condition (1) of Assumption 4.37, but from Ref. [258], we know that there is a class of (continuous-time) recurrent neural networks with the form

$$\dot{x}_i = -d_i x_i + \tanh(\gamma y_i + c_i), \tag{4.159}$$

$d_1, ..., d_N$ are real constants, $c_i : t \mapsto c_i(t) \in \mathbb{R}$ is the $i$-th current, that is a universal approximator and satisfy the condition (1). ■

Following these considerations, we introduce a general proposition about the emergence of higher-order interactions when reducing the dimension of a dynamical system on network using Theorem 3.45.

**Proposition 4.43.** *If the conditions of Assumptions 4.37 hold, the reduced dynamics can be expressed in terms of higher-order interactions between the observables as*

$$\dot{X}_\mu = \mathcal{C}_\mu + \sum_{d_x=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{Z}_+^n} \mathcal{D}_{\mu\boldsymbol{\alpha}}^{(d_x+1)} X_{\boldsymbol{\alpha}} + \sum_{d_y=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{Z}_+^n} \mathcal{W}_{\mu\boldsymbol{\beta}}^{(d_y+1)} X_{\boldsymbol{\beta}} + \sum_{d_x,d_y=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{Z}_+^n} \mathcal{T}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}^{(d_x+d_y+1)} X_{\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}, \tag{4.160}$$

*where we have introduced the multi-indices* $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, ..., \alpha_{d_x})$ *and* $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, ..., \beta_{d_y})$ *with* $\alpha_p, \beta_q \in \{1, ..., n\}$*, the compact notation for products* $X_{\boldsymbol{\gamma}} = X_{\gamma_1} ... X_{\gamma_d}$*, while* $\mathcal{C}_\mu$ *denotes a real constant and* $\mu \in \{1, \dots, n\}$*. The higher-order interactions are described by three tensors of respective order* $d_x + 1$*,* $d_y + 1$*,* $d_x + d_y + 1$*, and whose elements are*

$$\mathcal{D}_{\mu\boldsymbol{\alpha}}^{(d_x+1)} = \sum_{i=1}^{N} c_{id_x0} M_{\mu i} M_{i\alpha_1}^{+} ... M_{i\alpha_{d_x}}^{+}, \tag{4.161}$$

$$\mathcal{W}_{\mu\boldsymbol{\beta}}^{(d_y+1)} = \sum_{i,j_1,...,j_{d_y}=1}^{N} c_{i0d_y} M_{\mu i} W_{ij_1} ... W_{ij_{d_y}} M_{j_1\beta_1}^{+} ... M_{j_{d_y}\beta_{d_y}}^{+}, \tag{4.162}$$

$$\mathcal{T}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}^{(d_x+d_y+1)} = \sum_{i,j_1,...,j_{d_y}=1}^{N} c_{id_xd_y} M_{\mu i} M_{i\alpha_1}^{+} ... M_{i\alpha_{d_x}}^{+} W_{ij_1} ... W_{ij_{d_y}} M_{j_1\beta_1}^{+} ... M_{j_{d_y}\beta_{d_y}}^{+}, \tag{4.163}$$

*for some real coefficients* $c_{id_xd_y}$ *with* $i \in \{1, ..., N\}$ *and* $d_x, d_y \in \mathbb{Z}_+$*.*

*Proof.* By definition of an analytic function, there is a convergent power series describing the vector field of the complete dynamics, i.e.,

$$h_i(x_i, y_i) = \sum_{d_x=0}^{\infty} \sum_{d_y=0}^{\infty} c_{id_xd_y} x_i^{d_x} y_i^{d_y}, \qquad i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.164}$$

where we have chosen to express the power series around $x_i = y_i = 0$ without loss of generality. The reduced dynamics is therefore

$$\dot{X}_\mu = \sum_{d_x,d_y=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{N} c_{id_xd_y} M_{\mu i} \left( \sum_{\alpha=1}^{n} M_{i\alpha}^{+} X_\alpha \right)^{d_x} \left( \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{n} W_{ij} M_{j\beta}^{+} X_\beta \right)^{d_y}.$$

The sum can be separated as

$$\begin{aligned}\dot{X}_\mu = \mathcal{C}_\mu &+ \sum_{d_x=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{N} c_{id_x0} M_{\mu i} \left( \sum_{\alpha=1}^{n} M_{i\alpha}^{+} X_\alpha \right)^{d_x} + \sum_{d_y=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{N} c_{i0d_y} M_{\mu i} \left( \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{n} W_{ij} M_{j\beta}^{+} X_\beta \right)^{d_y} \\ &+ \sum_{d_x,d_y=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{N} c_{id_xd_y} M_{\mu i} \left( \sum_{\alpha=1}^{n} M_{i\alpha}^{+} X_\alpha \right)^{d_x} \left( \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{n} W_{ij} M_{j\beta}^{+} X_\beta \right)^{d_y},\end{aligned}$$

where we have defined $\mathcal{C}_\mu = \sum_{i=1}^N M_{\mu i} c_{i00}$. Expanding the exponents and introducing the multi-indices directly provide the desired result. □

**Remark 4.44.**

1. As explained in Section 1.1 (p.3) of Ref. [489], the tensors above could be more precisely called hypermatrices.
2. For clarity, we specify the order of the tensor as an exponent in parentheses. In the paper and in Example 4.49, the order is clear from the indices and we thus avoid this notation for simplicity. Also, we let the indices differentiate the tensors, e.g., $\mathcal{T}_{1(2,3)(4)}$ ($d_x = 2$, $d_y = 1$) and $\mathcal{T}_{1(2)(3,4)}$ ($d_x = 1$, $d_y = 2$) are elements of two different tensors. Finally, when it's clear in the context, if a multi-index is a singleton, than we remove the parentheses, e.g., $\mathcal{T}_{\mu(\nu)(\kappa)}$ becomes $\mathcal{T}_{\mu\nu\kappa}$.
3. The coefficients $c_{id_xd_y}$ can be chosen as the ones of the Taylor series of $h_i$ for all $i$.
4. For the sake of simplicity, let us consider the case where $c_{i01} = 1$ for all $i$. We observe that $\mathcal{W}^{(2)} = MWM^+$ appears in the reduced dynamics, which can be viewed as the reduced weight matrix. From Lemma 3.43, it is also the unique solution to the compatibility equation [583] $\mathcal{W}M = MW$ when $\operatorname{rank} M = n$ and it is the least-square optimal solution to the problem $\|\mathcal{W}M - MW\|_F^2$ with $\mathcal{W}$ as the optimization variable. Remember from Ref. [583] that solving the compatibility equation is necessary to cancel the first-order errors in DART or less generally, to close the reduced dynamics of any linear dynamics $\dot{x} = Wx$. Indeed, for $X = Mx$, $\dot{X} = MWx = \mathcal{W}Mx = \mathcal{W}X$ where one can reasonably choose $\mathcal{W} = \mathcal{W}^{(2)}$ as explained before.
5. If there was already higher-order interactions in the complete dynamics, the least-square optimal reduced dynamics would have new higher-order interactions that depends on the original ones, the parameters of the dynamics, and the reduction matrix.
6. The latter proposition can easily be extended to complex variables. First assume that the complex dynamics has the form $\dot{x}_i = r_i(x_i, y_i, \bar{x}_i, \bar{y}_i)$, where $\bar{}$ is complex conjugation and $r_i : \mathbb{C}^4 \mapsto \mathbb{C}$ is a holomorphic function (and thus analytic):

$$r_i(x_i, y_i, \bar{x}_i, \bar{y}_i) = \sum_{d_x=0}^{\infty} \sum_{d_y=0}^{\infty} \sum_{\bar{d}_x=0}^{\infty} \sum_{\bar{d}_y=0}^{\infty} c_{id_xd_y\bar{d}_x\bar{d}_y} x_i^{d_x} y_i^{d_y} \bar{x}_i^{\bar{d}_x} \bar{y}_i^{\bar{d}_y}, \quad i \in \{1, ..., N\}. \tag{4.165}$$

   The rest of the proof is similar to its real counterpart. This is especially interesting for phase dynamics such as the Kuramoto model (see Example 4.49).
7. This is not the only dimension reduction that yields higher-order interactions. We did not realize it clearly at the moment of writing Ref. [583], but DART also yields higher-order interactions, which can be explicitly seen in Eqs. (28-30). However, these higher-order interactions could be avoided by noting that the phase dynamics have a vector field of the form $h_i(x_i, y_i)$. Indeed, using Taylor's theorem for both $x$ and $Wx$, there is no compatibility equation for the degrees that appears to cancel the first-order terms and it ultimately removes the higher-order contributions with $\mathcal{K}$ in Eqs. (28-30). In general,

a dimension reduction method where the original vector field is evaluated at a function of the original variables is susceptible to yield higher-order interactions.

■

In the last proposition, the graph with $N$ vertices of the complete dynamics (and its parameters encoded by all the coefficients $c_{id_xd_y}$) is thus replaced by a hypergraph $\mathcal{H}$ [58, 205, 489] (see definition 2.17) with $n$ vertices [see Fig. 4.4d of the paper], defined from the tensors $\mathcal{D}^{(d_x+1)}$, $\mathcal{W}^{(d_y+1)}$, and $\mathcal{T}^{(d_x+d_y+1)}$, in the reduced dynamics.

**Remark 4.45.** For the weight matrix with elements $W_{ij}$, we use the convention that the edge (or arc) $(i, j)$ is directed from $j$ to $i$. For consistency, in the definition above, we use the convention that the hyperarc $(H, T)$ (instead of $(T, H)$ as in Ref. [205]) is directed from the tail $T$ to the head $H$. As a consequence, in the tensor notation $\mathcal{T}^{(d_x+d_y+1)}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}$, the index $\mu$ and the multi-index $\boldsymbol{\alpha}$ are part of the head while $\boldsymbol{\beta}$ is part of the tail of the hyperarc. Thus, $\mathcal{T}_{1(2)(3)}$ ($n_T = 1$) is a forward hyperarc $((1, 2), (3))$ while $\mathcal{T}_{1()(2,3)}$ ($n_H = 1$) is a backward hyperarc $(1, (2, 3))$. Note that the tensor $\mathcal{W}^{(d_y+1)}$ with elements in Eq. (4.162) always form backward hyperarcs (from $\boldsymbol{\beta}$ to $\mu$) since $d_x = 0$, while the tensor with elements in Eq. (4.163) can be any type of hyperarc (with $\mu$ always belonging to the head). In the example of the paper for the epidemiological dynamics, Eq. (4.7) is a forward hyperarc (from $\kappa$ to $\mu\nu$). ■

We now derive two key consequences of Proposition 4.43. First, Proposition 4.43 shows that there can be an infinite number of higher-order interactions in the reduced dynamics. Yet, for a special family of vector fields, we prove that there is a finite number of them which are related to the nonlinearity of the original dynamics.

**Corollary 4.46.** *If $h_i(x_i, y_i)$ is a polynomial of total degree $\delta$ in $x_i$ and $y_i$ for all $i \in \{1, ..., N\}$ and condition (2) of Assumptions 4.37 holds, then the reduced dynamics has a polynomial vector field of total degree $\delta$ with interactions of maximal order $\delta + 1$.*

*Proof.* Since any polynomial is analytic, condition (1) of Assumptions 4.37 is satisfied. Then, by Proposition 4.43, the reduced dynamics is given by Eqs. (4.160-4.163). In the following, the conclusions are valid for all $i \in \{1, ..., N\}$. Let $\mathscr{I}_i = \{c_{id_xd_y}\}_{d_x,d_y=0}^{\infty}$ be the $i$-th (countable) infinite set of coefficients related to the $i$-th analytic function $h_i$. The fact that $h_i$ is a polynomial implies that there is a finite subset of nonzero coefficients $\mathscr{F}_i \subset \mathscr{I}_i$ describing a polynomial vector field for the reduced dynamics. Consider any coefficient $c_{i'd'_xd'_y} \in \mathscr{F}_i$ such that $d'_x + d'_y = \delta$, the total degree of the polynomial $h_i$. Then, at least one of the tensors $\mathcal{D}^{(d'_x+1)}$, $\mathcal{W}^{(d'_y+1)}$, $\mathcal{T}^{(d'_x+d'_y+1)}$, with elements in Eqs. (4.161-4.163), have the highest possible order $\delta + 1$. Moreover, there will be at least one monomial term $X_{\alpha_1}...X_{\alpha_{d'_x}}$, $X_{\beta_1}...X_{\beta_{d'_y}}$, or $X_{\alpha_1}...X_{\alpha_{d'_x}}X_{\beta_1}...X_{\beta_{d'_y}}$ in Eq. (4.160) that is of maximal degree $\delta$, which means that reduced dynamics has a polynomial vector field of total degree $\delta$. □

Second, the tensors described in Proposition 4.43 strongly depends on the reduction matrix $M$. In other words, the reduction matrix plays a role on the form of the higher-order interactions. One can therefore ask if one can choose $M$ in such a way that there are only pairwise interactions in the reduced dynamics. In the next corollary, we provide sufficient conditions to have pairwise interactions in the least-square reduced dynamics.

**Corollary 4.47.** *Let $s : \mathcal{V} \to \Upsilon$ be a surjection where $\mathcal{V} = \{1, ..., N\}$ and $\Upsilon \in \{1, ..., n\}$ are the vertex sets of the complete and reduced system respectively. If Assumptions 4.37 hold, the reduction matrix $M$ has elements $M_{\mu i} = m_{\mu i}\delta_{\mu\, s(i)}$ with $m_{\mu i} \in \mathbb{R}$ for all $\mu$, $i$, and $h_i$ linearly depends on $y_i$ for all $i$, then there are solely pairwise interactions in the reduced system. The result doesn't hold in general for nonlinear dependencies of $h_i$ over $y_i$.*

*Proof.* For such reduction matrix, the elements of its Moore-Penrose pseudoinverse are, for all $\mu \in \Upsilon$ and $i \in \mathcal{V}$, $M^+_{i\mu} = m_{\mu i}\delta_{s(i)\mu}/q_\mu$, where $q_\mu = \sum_{i=1}^N m^2_{\mu i}\delta_{s(i)\mu}$. Substituting $M$ and $M^+$ in Eqs. (4.161-4.163) yields

$$\mathcal{D}^{(d_x+1)}_{\mu\boldsymbol{\alpha}} = \frac{1}{q_{\boldsymbol{\alpha}}} \sum_{i=1}^N c_{id_x0} m_{\mu\boldsymbol{\alpha}i}\, \delta_{\mu\, s(i)}\delta_{s(i)\,\alpha_1} ... \,\delta_{s(i)\,\alpha_{d_x}},$$

$$\mathcal{W}^{(d_y+1)}_{\mu\boldsymbol{\beta}} = \frac{1}{q_{\boldsymbol{\beta}}} \sum_{i,j_1,...,j_{d_y}=1}^N c_{i0d_y} m_{\mu i}\, \delta_{\mu\, s(i)} W_{ij_1} ... W_{ij_{d_y}} \delta_{s(j_1)\,\beta_1} ... \,\delta_{s(j_{d_y})\,\beta_{d_y}},$$

$$\mathcal{T}^{(d_x+d_y+1)}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}} =$$

$$\frac{1}{q_{\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}}} \sum_{i,j_1,...,j_{d_y}=1}^N c_{id_xd_y} m_{\mu\boldsymbol{\alpha}i}\, \delta_{\mu\, s(i)}\delta_{s(i)\,\alpha_1} ... \,\delta_{s(i)\,\alpha_{d_x}} W_{ij_1} ... W_{ij_{d_y}} m_{\beta_1 j_1} ... m_{\beta_{d_y} j_{d_y}} \delta_{s(j_1)\,\beta_1} ... \,\delta_{s(j_{d_y})\,\beta_{d_y}},$$

where $q_{\boldsymbol{\gamma}} = q_{\gamma_1} ... q_{\gamma_d}$ and $m_{\mu\boldsymbol{\alpha}i} = m_{\mu i} m_{\alpha_1 i} ... m_{\alpha_d i}$. For $\mathcal{D}^{(d_x+1)}$ and any dependence of $h_i$ over $y_i$, it is straightforward to observe that the only nonzero elements are such that $\mu = \alpha_1 = ... = \alpha_{d_x}$. The tensor can therefore be mapped to a $n \times n$ diagonal matrix. Henceforth, we only consider $\mathcal{W}^{(d_y+1)}$ and $\mathcal{T}^{(d_x+d_y+1)}$.

The fact that $h_i(x_i, y_i)$ linearly depends on $y_i$ for all $i$ is equivalent to setting $d_y = 1$ in its power series in Eq. (4.164), i.e.,

$$h_i(x_i, y_i) = \sum_{d_x=0}^\infty c_{id_x1} x_i^{d_x} y_i, \qquad i \in \{1, ..., N\}.$$

Proposition 4.43 thus implies that

$$\mathcal{W}^{(2)}_{\mu\beta} = \frac{1}{q_\beta} \sum_{i,j=1}^N c_{i01} m_{\mu i} m_{\beta j} \delta_{\mu\, s(i)} W_{ij} \delta_{s(j)\,\beta}$$

$$\mathcal{T}^{(d_x+2)}_{\mu\boldsymbol{\alpha}\beta} = \frac{1}{q_{\boldsymbol{\alpha}\beta}} \sum_{i,j=1}^N c_{id_x1} m_{\mu\boldsymbol{\alpha}i} \delta_{\mu\, s(i)}\delta_{s(i)\,\alpha_1} ... \,\delta_{s(i)\,\alpha_{d_x}} W_{ij} m_{\beta j}\, \delta_{s(j)\,\beta}\,.$$

Clearly, $\mathcal{W}^{(2)}$ is a matrix and the nonzero elements of $\mathcal{T}^{(d_x+2)}$ are for $\mu = \alpha_1 = ... = \alpha_{d_x}$ (there are at most $n^2$ of them), which means that it can be mapped to a $n \times n$ matrix. Hence, there are solely pairwise interactions in the least-square reduced dynamics.

If $d_y > 1$ (i.e., for a nonlinear dependency of $h_i$ over $y_i$), a simple example suffices to prove the last statement. Let $d_y = 2$, $\mathcal{V} = \{1, 2, 3, 4, 5\}$, $\Upsilon = \{1, 2, 3\}$, and $s(1) = 1$, $s(2) = 1$, $s(3) = 2$, $s(4) = 3$, $s(5) = 3$. Moreover, consider that $W_{52}$, $W_{53}$, $m_{12}$, $m_{23}$, $m_{35}$, $c_{502}$ are not equal to zero. Then, Proposition 4.43 gives

$$\mathcal{W}^{(3)}_{\mu(\beta_1,\beta_2)} = \frac{1}{q_{\mu\beta_1\beta_2}} \sum_{i=1}^{N} c_{i02} m_{\mu i}\, \delta_{\mu\, s(i)} \left( \sum_{j,k=1}^{N} m_{\beta_1 j} m_{\beta_2 k} W_{ij} W_{ik} \delta_{s(j)\,\beta_1} \delta_{s(k)\,\beta_2} \right).$$

It only remains to prove that there can be nonzero elements for $\beta_1 \neq \beta_2$. For $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $j = 2$, and $k = 3$ in the parentheses, there is a term $m_{12} m_{23} W_{i2} W_{i3} \delta_{s(2)\,1} \delta_{s(3)\,2} = m_{12} m_{23} W_{i2} W_{i3}$. Considering the whole equation for $i = 5$ and $\mu = 3$, there is a nonzero term $c_{502} m_{35} m_{12} m_{23} W_{52} W_{53} / q_{312}$. Hence, in this example, $\mathcal{W}_{3(1,2)} \neq 0$ despite the fact that the observables are defined on disjoint sets of vertices. □

**Remark 4.48.** If $n = N$, the higher-order interactions between the observables do not necessarily disappear because of the linear transformation done by $M$ on $x$. Obviously, if $M = I$, $X = x$ and $\dot{X}_\mu = \dot{x}_i = h_i(x_i, y_i)$ for all $i$ and there are no higher-order interactions. However, the vector field $M \circ h \circ M^+$ will generally contain higher-order interactions. But of course, if $M$ has full rank $N$, it is invertible and one can transform back the dynamics of the observable $X$ (with higher-order interactions) to the dynamics in $x$ (without higher-order interactions), since $x = M^{-1} X$. ■

Let's now provide the details about the examples presented in Table 4.3.

**Example 4.49** (Emergence of higher-order interactions in typical models)**.** Proposition 4.43 and Corollary 4.46 imply the following results in different fields of application.

1. QMF SIS dynamics [Eq. (4.150) in Example 4.38]:

$$\dot{X}_\mu = \sum_{\nu=1}^{n} (\mathcal{D}_{\mu\nu} + \mathcal{W}_{\mu\nu}) X_\nu + \sum_{\nu,\kappa=1}^{n} \mathcal{T}_{\mu\nu\kappa} X_\nu X_\kappa, \tag{4.166}$$

   where $\mathcal{D} = -MDM^+$ with $D = \mathrm{diag}(d_1, ..., d_N)$, $\mathcal{W} = \gamma MWM^+$, and

$$\mathcal{T}_{\mu\nu\kappa} = -\gamma \sum_{i,j=1}^{N} M_{\mu i} M^+_{i\nu} W_{ij} M^+_{j\kappa},$$

   with $\boldsymbol{\alpha} = (\nu) = \nu$ and $\boldsymbol{\beta} = (\kappa) = \kappa$. Interestingly, for $n = 1$, one can find the exact solution since it is a Bernoulli differential equation.

2. Microbial population dynamics [Eq. (4.155) in Example 4.40]:

$$\dot{X}_\mu = \mathcal{C}_\mu + \sum_{\nu=1}^{n} \mathcal{D}_{\mu\nu} X_\nu + \sum_{\nu,\kappa=1}^{n} (\mathcal{D}_{\mu(\nu,\kappa)} + \mathcal{T}_{\mu\nu\kappa}) X_\nu X_\kappa + \sum_{\nu,\kappa,\tau=1}^{n} \mathcal{D}_{\mu(\nu,\kappa,\tau)} X_\nu X_\kappa X_\tau \quad (4.167)$$

where $\mathcal{D} = -dMM^+$ and

$$\mathcal{D}_{\mu(\nu,\kappa)} = b \sum_{i=1}^{N} M_{\mu i} M^+_{i\nu} M^+_{i\kappa}$$

$$\mathcal{T}_{\mu\nu\kappa} = \gamma \sum_{i,j=1}^{N} M_{\mu i} M^+_{i\nu} W_{ij} M^+_{j\kappa}$$

$$\mathcal{D}_{\mu(\nu,\kappa,\tau)} = -c \sum_{i=1}^{N} M_{\mu i} M^+_{i\nu} M^+_{i\kappa} M^+_{i\tau} .$$

3. Kuramoto-Sakaguchi dynamics [Eq. (4.157) in Example 4.41]:

$$\dot{X}_\mu = \sum_{\nu=1}^{n} (\mathcal{D}_{\mu\nu} + \mathcal{W}_{\mu\nu}) X_\nu + \sum_{\nu,\kappa,\tau=1}^{n} \mathcal{T}_{\mu(\nu,\kappa)\tau} X_\nu X_\kappa \bar{X}_\tau \quad (4.168)$$

where $\mathcal{D} = iMDM^+$ with $D = \mathrm{diag}(\omega_1, ..., \omega_N)$, $\mathcal{W} = \gamma e^{-i\alpha} MWM^+$, and

$$\mathcal{T}_{\mu(\nu,\kappa)\tau} = -\gamma e^{i\alpha} \sum_{j,k=1}^{N} M_{\mu j} M^+_{j\nu} M^+_{j\kappa} W_{jk} M^+_{k\tau},$$

with $\boldsymbol{\alpha} = (\nu, \kappa)$, $\boldsymbol{\beta} = (\tau) = \tau$. In this case, the reduced variables $X_1$,...,$X_n$ and the involved tensors are complex.

■

**Remark 4.50.**

— We found that there can be computational benefits to write the vector fields in terms of tensors (subsection 4.12.5).

— The fact that the least-square optimal reduced vector field contains higher-order interactions raises the problem of getting mathematical insights from dynamics on hypergraphs, which recalls again the pertinence of this field in the study of complex systems. Fortunately, many recent papers address the problem, such as Ref. [184] or Ref. [421]. See Ref. [50] for more references.

■

In phase reduction techniques [476], $dN$-dimensional weakly coupled limit-cycle oscillators dynamics, where each of the $N$ oscillators is described by $d$ variables, are reduced to a $N$-dimensional dynamics of their phase. It is known that these phase reductions lead to higher-order interactions between the phases [33, 349, 390] or, in other words, between microscopic

observables (i.e., there is a phase for each oscillator, considered as the microscopic level, except in Ref. [442, Fifth section]). In contrast, the higher-order interactions that we observe emerge from a large variety of dynamical systems and they are between observables that can cover different scales, which strongly depends over the choice reduction matrix. The generality of our results thus suggests that the emergence could be quite ubiquitous.

### 4.12.2 Upper bound on the alignment error and exact dimension reduction

In this subsection, we evaluate the impact of choosing the least-square optimal vector field in Theorem 3.45 on the alignment error $\mathcal{E}(x)$ in $\mathbb{R}^n$. In particular, we will see that obtaining an upper bound on $\mathcal{E}(x)$ is useful to find a reasonable choice of reduction matrix $M$. More importantly, to determine more quantitatively the repercussions of the low-rank hypothesis on the dynamics, we aim at estimating the error caused by the optimal reduced dynamics as a function of $n$. Let us start by listing the assumptions that will be made throughout this subsection.

**Assumptions 4.51.**

*(1) The $N$-dimensional complete dynamics on a network defined by the real $N \times N$ weight matrix $W$ is*

$$\dot{x} = g(x, y) = \begin{pmatrix} g_1(x_1, ..., x_N, y_1, ..., y_N) \\ \vdots \\ g_N(x_1, ..., x_N, y_1, ..., y_N) \end{pmatrix}, \tag{4.169}$$

*where $x : t \mapsto \mathbb{R}^N$, $y = Wx$, and $g : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ is a continuously differentiable function.*

*(2) The $n$-dimensional reduced dynamics ($n < N$) is the least-square optimal dynamics of Theorem 3.45, i.e.,*

$$\dot{X} = Mg(M^+X, WM^+X)\,. \tag{4.170}$$

*(3) The reduction matrix $M$ is the truncated left singular vector matrix $V_n^\top$ of $W$.*

Note the first assumption is less restrictive than the first one of the Assumptions 4.37. We chose $n < N$ to ensure dimension reduction and also, because it is obvious to show that we can have a zero alignment error when $n = N = \operatorname{rank} M$. In this case, the "reduced" dynamics is not reduced anymore, but it is still a linear transformation of the complete dynamics.

**Lemma 4.52.** *If conditions (1) and (2) in Assumptions 4.51 hold with $n = N = \operatorname{rank} M$, the alignment error is 0.*

*Proof.* If $M$ has rank $N$, the pseudoinverse of $M$ is its inverse and the related projector is $P = M^+M = M^{-1}M = I$. Hence, the alignment error in $\mathbb{R}^n$ is obviously zero: $\mathcal{E}(x) = \|M[g(x, Wx) - g(Px, WPx)]\|/\sqrt{n} = 0$. □

Let us now turn to one of the important results of the paper. The next theorem demonstrates that the alignment error between a high-dimensional vector field depending on a network and its optimally reduced version is intrinsically related to the network's singular value profile: when the singular values $\sigma_n$ decrease rapidly with $n$, so does the alignment error. Therefore, a low-rank hypothesis induces a low-dimension hypothesis for dynamical systems.

**Theorem 4.53.** *If all conditions of Assumptions 4.51 hold, the alignment error in $\mathbb{R}^n$ at $x \in \mathbb{R}^N$ is upper-bounded as*

$$\mathcal{E}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\Big[\|V_n^\top J_x(x', y')(I - V_n V_n^\top)x\| + \sigma_{n+1}\|V_n^\top J_y(x', y')\|_2\|x\|\Big], \tag{4.171}$$

*where $y' = Wx'$ with $x'$ being some point between $x$ and $V_n V_n^\top x$, $\sigma_i$ is the $i$-th singular value of $W$, and $J_x(x', y')$, $J_y(x', y')$ are the Jacobian matrices of $g$ with derivatives according to the vectors $x$ and $y$ respectively. Moreover, for any $x$ not at the origin of $\mathbb{R}^N$, the following upper bound on the relative alignment error holds:*

$$\frac{\mathcal{E}(x)}{\|x\|} \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\Big[\alpha(x', y') + \sigma_{n+1}\beta(x', y')\Big], \tag{4.172}$$

*where $\alpha(x', y') = \sigma_1(J_x(x', y'))$ and $\beta(x', y') = \sigma_1(J_y(x', y'))$.*

*Proof.* From the definition of the alignment error and the first two conditions in Assumptions 4.51, we have

$$\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\|M[g(x, y) - g(\tilde{x}, \tilde{y})]\|,$$

where $y = Wx$, $\tilde{x} = Px$, and $\tilde{y} = WPx$ with $P = M^+M$. Let's define the function

$$u(x) = g(x, \ell(x)), \tag{4.173}$$

with the linear function $\ell(x) = Wx$. Since $g$ is a continuously differentiable function, $u$ is also continuously differentiable and Taylor's theorem with 0-th order Lagrange remainder guarantees that

$$u(x) = u(\tilde{x}) + Du(x')(x - \tilde{x}) \tag{4.174}$$

for some $x'$ between $x$ and $Px$ and where $Du(x')$ is the total derivative of $u$. From Eq. (4.173) and the chain rule for the total derivative, we have (abusing the matrix notation)

$$Du(x') = Dg(x', y') = \frac{\partial g}{\partial x}(x', y') + \frac{\partial g}{\partial y}(x', y')\frac{\partial \ell}{\partial x}(x') = J_x(x', y') + J_y(x', y')W, \tag{4.175}$$

where $y' = \ell(x') = Wx'$, the elements of the Jacobian matrices $J_x(x', y'), J_y(x', y')$ are respectively

$$[J_x(x', y')]_{ij} = \left.\frac{\partial g_i(x, y)}{\partial x_j}\right|_{(x,y)=(x',y')}, \quad [J_y(x', y')]_{ij} = \left.\frac{\partial g_i(x, y)}{\partial y_j}\right|_{(x,y)=(x',y')},$$

and we have used the fact that $W$ is the Jacobian matrix of $\ell$. The Taylor expansion (4.174) of $u$ with $N$ variables $(x_i)_{i=1}^N$ for some $x'$ therefore implies a Taylor expansion for $g$ with $2N$ variables $(x_i, y_i)_{i=1}^N$ for some $x'$ with $y' = Wx'$:

$$g(x, y) = g(\tilde{x}, \tilde{y}) + J_x(x', y')(x - \tilde{x}) + J_y(x', y')W(x - \tilde{x}). \tag{4.176}$$

The alignment error becomes

$$\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\|M[J_x(x', y')(I - P)x + J_y(x', y')W(I - P)x]\|$$

and the triangle inequality gives

$$\mathcal{E}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\big[\|MJ_x(x', y')(I - P)x\| + \|MJ_y(x', y')W(I - P)x\|\big].$$

Moreover, the induced spectral norm for the second term yields

$$\mathcal{E}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\big[\|MJ_x(x', y')(I - P)x\| + \|MJ_y(x', y')W(I - P)\|_2\|x\|\big]$$

and the submultiplicativity of the spectral norm implies

$$\mathcal{E}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\big[\|MJ_x(x', y')(I - P)x\| + \|W(I - P)\|_2\|MJ_y(x', y')\|_2\|x\|\big]. \tag{4.177}$$

From condition (3) of Assumption 4.51, we have $M = V_n^\top$ which is, by Theorem 1.27, the optimal solution to the minimization of $\|W(I - P)\|_2$ with error $\sigma_{n+1}$ (square root of the problem (P2) and the error for the spectral norm in Eq. (1.38)). The second inequality is deduced as follows:

$$\frac{\mathcal{E}(x)}{\|x\|} \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\Big[\|V_n^\top J_x(x', y')(I - V_nV_n^\top)\|_2 + \sigma_{n+1}\|V_n^\top J_y(x', y')\|_2\Big] \tag{4.178}$$

$$\leq \frac{1}{\sqrt{n}}\Big[\|V_n^\top J_x(x', y')\|_2 + \sigma_{n+1}\|V_n^\top J_y(x', y')\|_2\Big] \tag{4.179}$$

$$\leq \frac{1}{\sqrt{n}}\Big[\|J_x(x', y')\|_2 + \sigma_{n+1}\|J_y(x', y')\|_2\Big], \tag{4.180}$$

where we have used successively the submultiplicativity of the spectral norm and identities $\|(I - V_nV_n^\top)\|_2 = 1$, $\|V_n^\top\|_2 = 1$. The desired upper bound is found upon noticing that $\|J_x(x', y')\|_2 = \sigma_1(J_x(x', y'))$ and $\|J_y(x', y')\|_2 = \sigma_1(J_y(x', y'))$. □

**Remark 4.54.**

— The dynamics used in the paper have the less general form (compared to condition (1) in Assumptions 4.51)

$$\dot{x}_i = h_i(x_i, y_i), \quad i \in \{1, ..., N\}, \tag{4.181}$$

where, for all $i$, $x_i : t \mapsto \mathbb{R}^N$, $y_i = \sum_{j=1}^N W_{ij} x_j$ and $h_i : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$. This implies that for all dynamics considered in the paper, the Jacobian matrices $J_x(x', y')$ and $J_y(x', y')$ are diagonal.

— Even if the effective ranks of real networks are low compared to $N$, they are generally larger than one, meaning that $\sigma_{n+1}$ is not negligible when $n = 1$. According to our analysis, we therefore do not expect one-dimensional reductions [208, 327, 346] to yield accurate results in general, which is consistent with numerical observations made in previous studies [290, 346, 583, 591, 599]. Some very simple synthetic networks, however, such as those generated by the Erdös-Rényi and Chung-Lu models, typically have a very small second singular value, suggesting that accurate one-dimensional reductions are possible for those cases.

— Using the induced spectral norm in the upper bound introduces a factor of about $\sqrt{N}/2$ when sampling $x$ uniformly between 0 and 1. This is one of the main reasons why the bound is not always tight. But our focus is not on magnitude of the error or the tightness of the bound, but on the decrease of the error. The extra $\sqrt{N}$ is removed by considering the relative alignment error.

— The relative alignment error $\mathcal{E}(x)/\|x\|$ is upper-bounded by purely spectral factors, which can be classified into two types: (1) those related to the Jacobians and thus depending upon the dynamics, and (2) $\sigma_{n+1}$ that only depends on the network. The second type is universal in the sense that it applies to all dynamics. Contrary to what is observed with $\sigma_{n+1}$ in real networks, the factors $\alpha(x', y')$ and $\beta(x', y')$ do not necessarily decrease as $n$ increases.

— The relative alignment error bound above can be improved, but it has a price. Indeed, the first steps of the theorem, the induced spectral norm and the submultiplicativity lead to $\mathcal{E}(x)/\|x\| \leq \|M\|_2 \|Du(x')(I - P)\|_2/\sqrt{n}$. From there, one could consider that $M$ is dependent over $x'$ and set $M := R_n^\top(x')$, the truncated right singular vector matrix of the Jacobian matrix $Du(x')$. Again, this choice minimizes $\|Du(x')(I - P)\|_2$ from Theorem 1.27 and one has the simple upper bound $\mathcal{E}(x)/\|x\| \leq \gamma_{n+1}(x')/\sqrt{n}$, where $\gamma_{n+1}(x')$ is the $(n+1)$-th singular value of $Du(x')$ depending on $x'$. The dependence of the reduction matrix over $x'$ is, however, not desired since we want the reduced dynamics to be independent of the $N$-dimensional dynamics.

■

As a byproduct of the last theorem, the fact that the term $\|W(I - M^+M)\|_2$ appears in the upper bound in Eq. (4.177) of the alignment error suggests a reasonable choice of reduction matrix, $M = V_n^\top$, which minimizes $\|W(I - M^+M)\|_2$ from Theorem 1.27. Of course, this doesn't mean that it is the reduction matrix that minimizes the alignment error in $\mathbb{R}^n$ (which is another problem in itself), but it provides a reduction matrix that is independent of position $x$ and time $t$: it solely depends on the structure of the system. The theorem also provides a criterion for exact dimension reduction or in images, perfect alignment of the complete and reduced vector fields, as shown in the following corollary.

**Corollary 4.55.** *If all conditions of Assumptions 4.51 hold, $J_x(x', y') = aI$ for some real constant $a$, and $n = \operatorname{rank} W$, then the alignment error $\mathcal{E}(x)$ vanishes for all $x$.*

*Proof.* Setting $J_x(x', y') = aI$ eliminates the first term of the bound in Theorem 4.53 for any $M$:

$$\|MJ_x(x', y')(I - P)x\| = a\|(M - MM^+M)x\| = 0, \tag{4.182}$$

since $MM^+M = M$ according to the defining properties of the Moore-Penrose pseudoinverse. Finally, if $n = \operatorname{rank} W$, then $\sigma_{n+1} = 0$, which cancels out the second term of the bound. □

Let $s$ be a vector of $N$ functions $s_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Let $W$ be a $N \times N$ matrix of rank $r < N$ with compact SVD $U_r\Sigma_r V_r^\top$. If $M = V_r^\top$, then by Corollary 4.55, the dynamics

$$\dot{x} = -d\,x + s(Wx) \tag{4.183}$$

can be exactly reduced to the $r$-dimensional reduced dynamics

$$\dot{X} = -d\,X + V_r^\top s(U_r\Sigma_r X), \qquad X = V_r^\top x\,. \tag{4.184}$$

**Example 4.56.** The simplest example is the linear dynamics

$$\dot{x} = Wx\,, \tag{4.185}$$

where $W$ is not restricted to be the weight matrix in itself and the exact reduction is

$$\dot{X} = V_r^\top U_r\Sigma_r X, \qquad X = V_r^\top x\,. \tag{4.186}$$

■

**Example 4.57.** A noteworthy example of dynamics of the form (4.183) is the RNN defined by Eqs. (4.159). Therefore, when $\operatorname{rank} W = r < N$ and $d_i = d$ for all $i \in \{1, ..., N\}$, the RNN exactly reduces to the $r$-dimensional dynamics

$$\dot{X} = -dX + V_r^\top \tanh(U_r\Sigma_r X + c), \qquad X = V_r^\top x\,, \tag{4.187}$$

where $U_r$, $\Sigma_r$, $V_r^\top$ form the compact SVD of the neural network $W$.

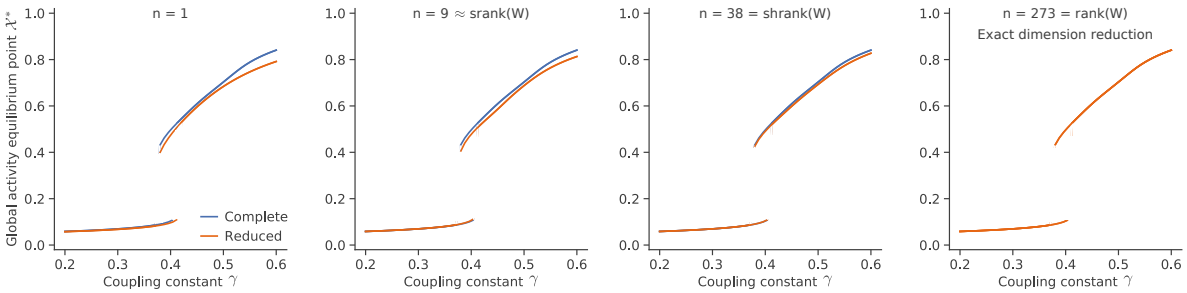



Figure 4.10 – Comparison between the global observable at equilibrium $\mathcal{X}^*$ of the complete (blue) and reduced (orange) Wilson-Cowan dynamics on the (unsigned) *C. elegans* connectomes ($N = 279$, $\text{rank}(W) = 273$) vs. the global coupling $\gamma$ for $n \in \{1, 9, 38, 273\}$. Parameters: $d = 1$, $a = 0$, $b = 1$, $c = 3$. For the weight matrix, see the GitHub repository, module get_real_network.py, function get_connectome_weight_matrix (graph_name="celegans"). The effective ranks of this connectome with weight matrix $W$ are $\text{srank}(W) \approx 9$, $\text{trank}(W) = 27$, $\text{elbow}(W) = 31$, $\text{nrank}(W) \approx 36$, $\text{shrank}(W) = 38$, $\text{energy}(W) = 106$, and $\text{erank}(W) \approx 192$.

The RNN used in reservoir computing [373] also involves a dynamics of the form (4.159) (with, of course, the important output equation $y = W^{(\text{out})}x$). It can thus be exactly reduced too. Note, however, that the learned matrix $W$ is generally of full rank, but it can have a low effective rank. By shrinking the singular values (with optimal shrinkage [216] for instance) of $W$, one can get a new RNN and then apply the last result to have a low-dimensional RNN. In other words, one can truncate the neural network $W$ at some rank $k$ —yielding the rank $k$ matrix $W_k$—in such a way that there is no cost at reducing to $k$ equations the $N$-dimensional RNN depending on $W_k$ (except the preliminary cost of truncating $W$). ■

**Example 4.58.** The Wilson-Cowan dynamics in Eq. (3.58) with $a = 0$ and $d_j = d$ for all $j \in \{1, ..., N\}$ is essentially equivalent, from a mathematical perspective, to the RNN of the last example. It can thus be exactly reduced to the dynamics

$$\dot{X} = -dX + V_r^\top \mathcal{S}[b(\gamma U_r \Sigma_r X - c)], \qquad X = V_r^\top x\,. \tag{4.188}$$

In Fig. 4.10, we illustrate this result for a real connectome by comparing the global observable at equilibrium (see subsection 4.12.4) of the complete and reduced dynamics $\dot{X} = -dX + V_n^\top \mathcal{S}[b(\gamma U_n \Sigma_n X - c)]$ with $X = V_n^\top x$ and different values of $n$. ■

**Example 4.59.** The threshold-linear model in Eq. (4.152) with $\text{rank}\, W = r < N$ can also be exactly reduced (despite the discontinuity in the vector field) to the $r$-dimensional reduced dynamics

$$\dot{X} = -X + V_r^\top \left[U_r \Sigma_r X + b\right]_+, \qquad X = V_r^\top x\,, \tag{4.189}$$

where $X = V_r^\top x$ and $U_r$, $\Sigma_r$, $V_r^\top$ form the compact SVD of the neural network $W$. To apply Corollary 4.55, one can simply replace $[\,]_+$ by the softplus function to satisfy the condition 1 of Assumptions 4.51. ■

In the case of a linear dynamics, not only the dimension reduction is exact for $n = r$ (Example 4.56), but the upper bound 4.172 on the relative alignment error in Theorem 4.53 takes a very simple form.

**Corollary 4.60.** *If the dynamics is a linear system $\dot{x} = Wx$ and Assumptions 4.51 (2) and (3) are satisfied, the relative alignment error in $\mathbb{R}^n$ at $x \in \mathbb{R}^N$ is*

$$\frac{\mathcal{E}(x)}{\|x\|} \leq \frac{\sigma_{n+1}}{\sqrt{n}}, \tag{4.190}$$

*where $\sigma_i$ is the $i$-th singular value of $W$.*

*Proof.* It is clearly seen by following the steps of Theorem 4.53. Indeed, for the linear case, the reduced dynamics is

$$\dot{X} = WM^+X \tag{4.191}$$

and the alignment error is

$$\mathcal{E}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\|M(Wx - WM^+X)\| = \frac{1}{\sqrt{n}}\|MW(I-P)x\|, \tag{4.192}$$

where $P = M^+M$. The induced spectral norm and the submultiplicativity imply that

$$\mathcal{E}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\|M\|_2\|W(I-P)\|_2\|x\|. \tag{4.193}$$

Assumption 4.51 (3) then leads to

$$\mathcal{E}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}\|W(I - V_nV_n^\top)\|_2\|x\| \tag{4.194}$$

and using Theorem 1.27 gives the desired result. □

For a linear system, the relative alignment error is solely dependent on the $(n+1)$-th singular values and a scaling factor $1/\sqrt{n}$. As a consequence, a rapid decrease of the singular values of $W$ directly induces a rapid decrease of the alignment error.

### 4.12.3 *Computation of the upper bound on the alignment error

The bound in Theorem 4.53 depends on some real point $x'$ which is unknown *a priori*. Yet, according to Eqs. (4.174-4.176), it is possible to find $x'$ analytically (sometimes exactly) or numerically from

$$\left[G_x(x') + G_y(x')W\right](I-P)x = u(x) - u(Px)\,, \tag{4.195}$$

where $G_x(x') = J_x(x', y')$, and $G_y(x') = J_y(x', y')$. Below, we give four examples, one for each dynamics used in the paper to produce Fig. 4.5, from the simplest to the more complex case.

**Example 4.61** (Epidemiological)**.** For the QMF SIS dynamics in Eq. (4.150), we can exactly find $x'$. We have

$$u(x) = -Dx + \gamma(1-x) \circ Wx \tag{4.196}$$

$$G_x(x') = -D - \gamma \operatorname{diag}(Wx') \tag{4.197}$$

$$G_y(x') = \gamma[I - \operatorname{diag}(x')], \tag{4.198}$$

where $D = \operatorname{diag}(d_1, ..., d_N)$. By substituting the expressions above in Eq. (4.195) and by canceling some terms, we have

$$Wx' \circ \chi + x' \circ W\chi = x \circ Wx - Px \circ WPx. \tag{4.199}$$

where $\chi = (I - P)x$. The commutativity of the Hadamard product implies

$$\chi \circ Wx' + W\chi \circ x' = x \circ Wx - Px \circ WPx, \tag{4.200}$$

which can be written as a linear equation in $x'$, i.e.,

$$[\operatorname{diag}(\chi)W + \operatorname{diag}(W\chi)]x' = x \circ Wx - Px \circ WPx, \tag{4.201}$$

If the matrix $\operatorname{diag}(\chi)W + \operatorname{diag}(W\chi)$ is invertible (which is true in general), then the unique solution to the linear system is

$$x' = [\operatorname{diag}(\chi)W + \operatorname{diag}(W\chi)]^{-1}(x \circ Wx - Px \circ WPx). \tag{4.202}$$

In rare cases, if the matrix $\operatorname{diag}(\chi)W + \operatorname{diag}(W\chi)$ is singular, then one can use the least-square optimal solution by using the pseudo-inverse. That being said, using Eq. (4.202), one can compute exactly the upper bound on the alignment error for the QMF SIS. In Fig. 4.5a, we compute the bound for the network of high school contacts from Netzschleuder. For each $n$ and each of the 1000 samples of $x$ with elements between 0 and 1 (the dynamics is bounded between 0 and 1), the diagonal elements in $D$ are sampled from a Gaussian probability density function with mean 1 and standard deviation 0.001 and the coupling constant $\gamma$ is sampled from a uniform probability density function between 0.01 and 4. In this parameter region, there is a transcritical bifurcation for the global observable defined in subsection 4.12.4 (see Fig. 4.5e). ■

It is sometimes unnecessary to find $x'$ in itself to compute the bound if the Jacobian matrices solely depend on a function of $x'$, as shown in the next example.

**Example 4.62** (RNN)**.** Another way to write the RNN (with no current) is

$$\dot{x}_i = -d_i x_i + \tanh(\gamma \textstyle\sum_{i=1}^N W_{ij} x_j) = -d_i x_i + 2\mathcal{S}(2\gamma \textstyle\sum_{i=1}^N W_{ij} x_j) - 1. \tag{4.203}$$

For the RNN dynamics, we have

$$u(x) = -Dx + \tanh(\gamma W x) = -Dx + 2\mathcal{S}(2\gamma W x) - 1 \tag{4.204}$$

$$G_x(x') = -D \tag{4.205}$$

$$G_y(x') = 4\gamma \operatorname{diag}\left[\mathcal{S}(2\gamma W x')[1 - \mathcal{S}(2\gamma W x')]\right] \tag{4.206}$$

where $D = \operatorname{diag}(d_1, ..., d_N)$, $\mathcal{S}$ is the sigmoid function. We observe that $G_x(x')$ do not depend over $x'$ and $G_y(x')$ solely depends on the derivative of $\mathcal{S}(2\gamma W x')$ so we won't have to look for $x'$. By substituting the expressions above in Eq. (4.195) and by canceling some terms, we get

$$\mathcal{S}(2\gamma W x')[1 - \mathcal{S}(2\gamma W x')] = \frac{1}{2\gamma} \operatorname{diag}[W(I - P)x]^{-1}[\mathcal{S}(2\gamma W x) - \mathcal{S}(2\gamma W P x)] \tag{4.207}$$

which can be directly substituted into $G_y(x')$ to compute the upper bound. In Fig. 4.5c, we compute the bound for the learned network mouse-control1-model.npz from Ref. [256]. For each $n$ and each of the 1000 uniform samples of $x$ with elements between -1 and 1 (the dynamics is bounded between -1 and 1), the diagonal elements in $D$ are sampled from a Gaussian probability density function with mean 1.6 and standard deviation 0.001 and the coupling constant $\gamma$ is sampled from a uniform probability density function between 0.16 and 4.8. This parameter region covers convergent and oscillatory dynamics for the RNN. See the script simulations/trajectories_rnn.py on the GitHub repository low-rank-hypothesis-complex-systems to generate trajectories. ■

Letting some parameters be small or using numerical optimization, one can get reasonable approximations of the upper bound.

**Example 4.63** (Neuronal)**.** For the Wilson-Cowan dynamics, we have

$$u(x) = -Dx + (1 - ax) \circ \mathcal{S}[b(\gamma W x - c)] \tag{4.208}$$

$$G_x(x') = -D - a \operatorname{diag}(\mathcal{S}[b(\gamma W x' - c)]) \tag{4.209}$$

$$G_y(x') = b\gamma[I - \operatorname{diag}(x')] \operatorname{diag}(\mathcal{S}[b(\gamma W x' - c)](1 - \mathcal{S}[b(\gamma W x' - c)])). \tag{4.210}$$

From there, various methods can be used to evaluate the upper bound.

1. If $a = 0$, one can get evaluate the upper bound exactly as in the RNN case, with the difference that the sigmoid function depends over the two other parameters $b$ and $c$. If $a$ is sufficiently close to 0, one can also proceed as in the RNN case, but it will give an approximation of the error bound. In this case, the Jacobian $G_x(x')$, depending on $a$ and appearing in the first term of the error bound, become more and more important *relatively to the second term* as $n$ increases.
2. Instead of trying to solve Eq. (4.195) for $x'$, one can naively set $x'$ as $x$ or $Px$ and choose the one that gives the maximum upper bound value on the alignment error. In this case, the approximation of the upper bound is more accurate for larger $n$ since $x$ and $Px$ get closer and $x'$ is a point between them.

3. Numerical optimization, such as a least-squares method, can be used to find $x'$. This method requires considerably more computational resources, since for each $n$ and each sample in $x$, one needs to solve a high-dimensional optimization problem.

The code and the tests for each case are given in simulations/errors_wilson_cowan.py and tests/test_error_vector_fields_wilson_cowan.py on GitHub (low-rank-hypothesis-complex-systems). In Fig 4.11, we show the correspondence between the three methods for the *C. elegans* signed network (see graphs/get_connectome_weight_matrix). For each $n$ and each of the uniform samples in $x$ with elements between 0 and 1 (the dynamics is bounded between 0 and 1), the diagonal elements in $D$ are sampled from a Gaussian probability density function with mean 1 and standard deviation 0.001, the parameter $a$ is sampled uniformly between 0.001 and 0.1, the parameter $b$ is sampled uniformly between 0.5 and 2, the parameter $c$ is sampled uniformly between 2 and 4, and the coupling constant $\gamma$ is sampled from a uniform probability density function between 0.01 and 1. In Fig. 4.5b, the same parameters as above are used and we apply the second method to get $x'$ since it is faster to compute and it is more precise for large $n$ than the first one. ■

For some dynamics, it is not trivial to find an approximation like the first method in Example 4.63 that helps solve Eq. (4.195) in $x'$.

**Example 4.64** (Microbial)**.** For the microbial population dynamics defined in Eq. (4.155),

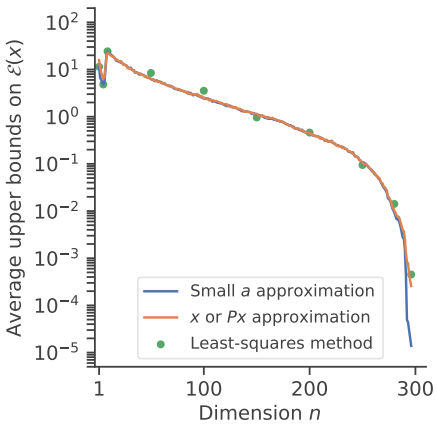



Figure 4.11 – The upper bounds on the alignment error $\mathcal{E}(x)$ of the neuronal dynamics for different approximation methods of $x'$. The blue line corresponds to the approximation $a \approx 0$ (1000 samples for each $n$), the orange line corresponds to the approximation that $x'$ is either $x$ or $Px$ (1000 samples for each $n$) and the green circles correspond to the approximation of $x'$ using a least-squares method (10 samples for each $n \in \{1, 50, 100, 150, 200, 250, 296\}$).

we have

$$u(x) = a - dx + b\,x \circ x - c\,x \circ x \circ x + \gamma\,x \circ Wx \tag{4.211}$$

$$G_x(x') = -dI + \mathrm{diag}(2bx' - 3c\,x' \circ x' + \gamma W x') \tag{4.212}$$

$$G_y(x') = \gamma\,\mathrm{diag}(x'). \tag{4.213}$$

In matrix form, it is easily shown that the system of equations to solve is

$$A(x' \circ x') + Bx' - C = 0, \tag{4.214}$$

where $\chi = (I - P)x$, $D_v = \mathrm{diag}(v_1, ..., v_N)$, and

$$A = -3cD_\chi \tag{4.215}$$

$$B = 2bD_\chi + \gamma D_{W\chi} + \gamma D_\chi W \tag{4.216}$$

$$C = b\,[x \circ x - Px \circ Px] - c\,[x \circ x \circ x - Px \circ Px \circ Px] + \gamma\,[x \circ (Wx) - (Px) \circ (WPx)]. \tag{4.217}$$

In this case, we could not find $x'$ mathematically, since we have to find a root of a system of $N$ coupled quadratic equations, which is a problem in the realm of geometric algebra. Concerning the possibility of making approximations, from our numerical experiments, neither the coupling term $\gamma D_\chi W x'$ nor the quadratic term can be neglected. Moreover, for the parameters $a = 5$, $b = 13$, $c = 10/3$ (or $c = 1$), $d = 30$, $\gamma \in [0.5, 3]$ and the human gut microbiome network [355, 521], the dynamics is not bounded above by 1. Since the alignment error is not a relative error, it can thus take very high values. Even if it's not a problem in itself, to be coherent with the dynamics in the three previous example, we rescale $x_i$ and $t$ in the dynamics to have trajectories approximately bounded between 0 and 1 and to normalize the human gut microbiome network by its largest singular value $\sigma_1 = 171$. To achieve that, we have generated trajectories for the given set of parameters above and we found that the trajectories are (safely) bounded by 30 given, and so we set $x_i \mapsto x_i/30$. Thus, with $t \mapsto 20\,\sigma_1\,t$, we get the differential equations

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = a - d\,x_i + b\,x_i^2 - c\,x_i^3 + \gamma\,x_i \sum_{j=1}^{N} \hat{W}_{ij} x_j, \tag{4.218}$$

where the parameters are redefined such that $a \mapsto a/T \approx 5 \times 10^{-5}$, $d \mapsto d/T \approx 0.01$, $b \mapsto bd/T \approx 0.1$, $c \mapsto cd^2/T \approx 0.9$, $\gamma \mapsto \gamma d/20 \in [0.5, 4.5]$, and $\hat{W} = W/\sigma_1$. In Fig. 4.5d, we use the second method in Example 4.63 ($x'$ is $x$ or $Px$), which is compared to the least-squares method in Fig. 4.12. Because this is just an approximation of the bound, it is not guaranteed that for a given instance in $x$ and a given $n$, the value of the bound is above the error, but it is above on average as one can see in Fig. 4.5d. Also, for each $n$ and each of the uniform samples in $x$ with elements between 0 and 1, $d = 0.01$, the parameter $a$ is sampled uniformly between 0.00001 and 0.0001, the parameter $b$ is sampled uniformly between 0.05 and 2, the parameter $c$ is sampled uniformly between 0.5 and 1.5, and the coupling constant $\gamma$ is sampled from a uniform probability density function between 0.1 and 5. ■

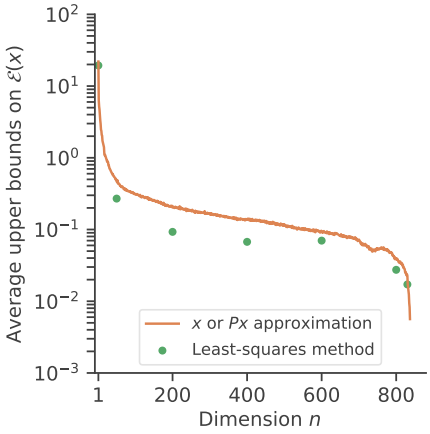



Figure 4.12 – The upper bounds on the alignment error $\mathcal{E}(x)$ of the microbial dynamics for different approximations of $x'$. The orange line is related to the approximation that $x'$ is $x$ or $Px$ (1000 samples for each $n$, 35h of simulations on a personal computer with an Intel i7 processor) and the green circles are related to the approximation of $x'$ using a least-squares method (7 samples for each $n \in \{1, 50, 200, 400, 600, 800, 830\}$).

### 4.12.4 *Global observables

We here describe how to define an observable that describes the activity (state) of dynamics on networks at large scale, allowing the production of a two-dimensional diagram depicting the influence of a structural parameter on the equilibrium states of the (macro-)dynamics.

Numerically, the SVD might give a right singular vector matrix $V = (v_1 \ ... \ v_N)$ with many negative entries. For instance, the leading singular vector might contain solely negative elements. Other singular vectors $v$ could be such that $\sum_i v_i < 0$. As a consequence, the dynamics of the observables $X_\mu$ (even the leading one, i.e., $X_1$ related to $\sigma_1$) can have equilibrium points below 0, which might be harder to interpret. One way to get more positive values without using any approximation (e.g., nonnegative matrix factorization [147, 583]) is to play with the non-uniqueness of the SVD by multiplying the singular vector matrices by a diagonal matrix $D_\pm$ of +1 and -1. Let

$$D_\pm = \text{diag}\left[\ s(\textstyle\sum_i (v_1)_i)\ ,\ ...\ ,\ s(\sum_i (v_N)_i)\ \right], \tag{4.219}$$

where $s$ is defined such that

$$s(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \geq 0 \\ -1 & \text{if } x < 0. \end{cases} \tag{4.220}$$

Since $D_\pm$ is diagonal, it commutes with any diagonal matrices. Moreover, $D_\pm D_\pm = I$. Therefore,

$$W = U\Sigma V^\top = U\Sigma D_\pm D_\pm V^\top = UD_\pm \Sigma D_\pm V^\top := U'\Sigma V'^\top. \tag{4.221}$$

To get an approximate reduced dynamics of dimension $n$, we use the truncated SVD $U_n \Sigma_n V_n^\top$,

where $\Sigma_n := \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_n)$ and the $N \times n$ truncated singular vector matrices are

$$U_n := (u'_1 \ ... \ u'_n) \text{ and } V_n := (v'_1 \ ... \ v'_n). \tag{4.222}$$

After integrating the reduced dynamics with $M = V_n^\top$ , we compute the global observable

$$\mathcal{X} = w \cdot X = m \cdot x \,, \tag{4.223}$$

where $w$ is a $n \times 1$ vector of constants, $m = w^\top M$ and $\cdot$ is the scalar product. From there, one can define observables on different scales (we will roughly say that we have a global/macroscopic observable if all or almost all vertices contributes to its value through their state). Indeed, depending on $w$ and $M$, the $1 \times N$ vector $w^\top M$ could have zero elements (say, elements $i, j, ...$), thus canceling the contribution of the activity of some vertices $(x_i, x_j, ...)$ to the observable $\mathcal{X}$. The weight matrices used in the paper (ultimately defining $M = V_n^\top$) and the chosen vector $w$ will lead to global observables, as defined in what follows.

For the epidemiological dynamics, we choose

$$w = (w_1 \ 0 \ ... \ 0)^\top \,, \quad \text{where} \quad w_1 = \frac{1}{\sum_{j=1}(v_1)_j} \tag{4.224}$$

with $v_1$ being the leading right singular vector. This defines, from Eq. (4.223), the leading right-singular-vector observable

$$\mathcal{X} = \sum_{i=1}^{N} m_i x_i \quad \text{with} \quad m_i = \frac{(v_1)_i}{\sum_{j=1}^{N}(v_1)_j}. \tag{4.225}$$

Since the high-school contact network is a nonnegative matrix, it satisfies the Perron-Frobenius theorem and the weight $m_i$ can be interpreted as the hub centrality of vertex $i$ (cf. Fig. 2.12). The leading right-singular-vector observable hence describes the activity of all the vertices by giving more importance to the ones with high centrality. For the neuronal dynamics, we use the rescaled leading right-singular-vector observable where

$$w = (w_1 \ 0 \ ... \ 0)^\top \,, \quad \text{where} \quad w_1 = \frac{1}{r\sum_{j=1}(v_1)_j} \tag{4.226}$$

with $r = 0.15$, to have a bifurcation diagram between 0 and 1 approximately in the range of coupling considered in Fig. 4.5f.

For the microbial dynamics on the gut microbiome (signed network), a different global observable to show positive, stable equilibrium point branches and to illustrate another way of defining a global observable with our framework. Two criteria are imposed to define the vector $m$ defining the global observable: (1) it does not vary with $n$ and (2) it is as close as possible to the uniform observable where $m_i^{\text{uni}} = 1/(rN)$ for all $i \in \{1, ..., N\}$ and for some rescaling constant $r$. The first one is imposed strictly while the other is not. To satisfy these

conditions, let $n_{\min}$ be the smallest dimension considered (in Fig. 4.5g, $n_{\min} = 76$) and define the $n$-dimensional vector

$$w = (w_1 \ ... \ w_{n_{\min}} \ 0 \ ... \ 0)^\top \tag{4.227}$$

and the $n_{\min}$-dimensional vector

$$\bar{w} = (w_1 \ ... \ w_{n_{\min}})^\top. \tag{4.228}$$

Satisfying condition (2) is equivalent to the problem of finding the coefficient $\bar{w}$ that minimizes $\|V_{n_{\min}}\bar{w} - \mathbb{1}/(rN)\|$ where $\mathbb{1}$ is a $N$-dimensional vector of ones, which simply gives

$$\bar{w} = \frac{1}{rN} V_{n_{\min}}^\top \mathbb{1}. \tag{4.229}$$

where we chose $r = 10$. Condition (1) is thus satisfied and one can compare the equilibrium points of the global observable at different values of $n \geq n_{\min}$ (such as $n \in \{76, 203, 735\}$ in Fig.4.5).

Note that the above global observables are not chosen in a way that the bifurcation diagram or the trajectories of the complete dynamics are described in the best way possible by the reduced dynamics (in other words, some global observable are better described by the reduced dynamics than others), but rather in a way that they are more intuitive.

### 4.12.5 *Numerical efficiency

When integrating the dynamics, the vector field is evaluated many times. For instance, with the integration method DOPRI45, the vector field is evaluated six times at each time step. It is therefore interesting to report a speed comparison for the evaluation of (1) the exact reduced vector field $M \circ h$, (2) the reduced dynamics $M \circ h \circ M^+$, and (3) the reduced dynamics in its tensor form.

As shown in Table 4.4, when we have the argument of each vector field in hand and $n$ is small, there can be significant benefits to use the reduced dynamics in its tensor form (approximately 10-100 times faster than the unsimplified reduced vector field and the complete vector field). The advantage of this reduced dynamics is that the tensors can be computed before the integration of the dynamics. Hence, only quantities depending on $n$ are involved in the integration. For reasonable sizes $n$, $N$, and for small enough tensor order, the tensors can be efficiently computed using some tensor calculus or using nested for loops optimized with Numba [see graphs/compute_tensors.py and the speed test in tests/test_graphs/test_compute_tensor.py].

Note, however, that for specific $M, W, X$, the vector field $M \circ h \circ M^+$ might be faster to evaluate than the closed-tensor form. For large values of $n$, the tensor form is particularly slow to compute, especially when the order of the tensor is higher (e.g., Kuramoto-Sakaguchi for $n = 100$). The time required to evaluate the unsimplified vector field is more stable

Table 4.4 – Average time taken to evaluate the exact vector field $M \circ h$, the unsimplified reduced vector field $M \circ h \circ M^+$, and the reduced vector field in closed form with higher-order interactions (tensor form) for different dynamics and values of $n$. Parameters: $N = 500$, $x_i \sim \mathcal{U}[0,1)$, $\theta_i, \alpha \sim \mathcal{U}[0,2\pi)$, $D_{ii} \sim \mathcal{U}[0,1)$, $W_{ij} \sim \mathcal{U}[-1,1)$. The average was computed over 500 samples of these parameters (10 for starred entries). Results were obtained on a basic laptop (Intel i7 MSI GL62 6Qf). See repository low-rank-hypothesis-complex-systems.

| | | **Average evaluation time [s]** | | |
|---|---|---|---|---|
| $n$ | Reduced vector field | Lotka-Volterra | QMF SIS | Kuramoto-Sakaguchi |
| 1 | Exact $M \circ h$ | $3.2 \times 10^{-4}$ | $3.3 \times 10^{-3}$ | $9.4 \times 10^{-3}$ |
| | Unsimplified $M \circ h \circ M^+$ | $3.3 \times 10^{-4}$ | $3.1 \times 10^{-3}$ | $9.0 \times 10^{-3}$ |
| | Tensor form | $1.0 \times 10^{-5}$ | $2.0 \times 10^{-5}$ | $5.6 \times 10^{-5}$ |
| 10 | Exact $M \circ h$ | $3.6 \times 10^{-4}$ | $3.4 \times 10^{-3}$ | $9.2 \times 10^{-3}$ |
| | Unsimplified $M \circ h \circ M^+$ | $3.0 \times 10^{-4}$ | $2.8 \times 10^{-3}$ | $8.9 \times 10^{-3}$ |
| | Tensor form | $2.0 \times 10^{-5}$ | $2.9 \times 10^{-5}$ | $9.2 \times 10^{-5}$ |
| 100 | Exact $M \circ h$ | $5.4 \times 10^{-4}$ | $3.4 \times 10^{-3}$ | $1.0 \times 10^{-2}$ * |
| | Unsimplified $M \circ h \circ M^+$ | $4.6 \times 10^{-4}$ | $3.3 \times 10^{-3}$ | $1.1 \times 10^{-2}$ * |
| | Tensor form | $8.6 \times 10^{-4}$ | $9.0 \times 10^{-4}$ | $1.2 \times 10^{0}$ * |

*Computed with 10 samples instead of 500.

according to the size $n$. We thus extensively used it to compute the alignment error and its upper bound. More exhaustive numerical work should be done in the future to assess the benefits and the limitations of choosing a particular form of the reduced vector field in terms of computation time.

### 4.12.6 *Numerical integration of the dynamics

The dynamics on real networks considered in Fig. 4.5 have very different properties at equilibrium and choosing a correct ordinary differential equation integrator is essential to ensure reliable results. For the epidemiological, neuronal and recurrent neural dynamics, using the algorithm DOPRI45 (see the github repository, dynamics/integrate.py, function integrate_dopri45) to get the equilibrium points of the dynamics worked properly when adjusting the time length and the integration step correctly. For the epidemiological dynamics, the phenomenon of critical slowing down appears, but it can be easily dealt with by increasing the number of time steps near the bifurcation.

The more challenging problem was the integration of the microbial dynamics on the gut microbiome, since the differential equations are stiff: a really small time step for DOPRI45

was needed to capture the very fast transitions in the first steps of the trajectories and the numerical integration was excessively long. Moreover, there are multiple branches of stable equilibrium points close to each other for the global observable (see subsection 4.12.4).

We have thus turned to solve_ivp from scipy.integrate with the backward differentiation formula (BDF), an implicit method with variable step length and order. As mentioned in the documentation [https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve_ivp.html] and in Ref. [553], the method is well suited for stiff problems and we have made great computational time gain by using this method since the integrator uses very small steps at the beginning and much larger steps near the equilibrium point. We observed that a relative tolerance of $10^{-8}$ and an absolute tolerance of $10^{-12}$ for the complete dynamics and a relative tolerance of $10^{-6}$ and an absolute tolerance of $10^{-10}$ for the reduced dynamics were reasonable in terms of integration reliability and computational time for our problem while being in line with the recent benchmarks in Ref. [553]. Moreover, we provided the Jacobian matrices of the complete and reduced dynamics to the integrator as recommended in the documentation of solve_ivp for the BDF method. We have already computed the Jacobian matrix for the complete microbial dynamics to compute the alignment errors in subsection 4.12.3, we recall that it is given by

$$Du(x) = G_x(x) + WG_y(x), \tag{4.230}$$

where $u$, $G_x$ and $G_y$ are given in Eqs. (4.211-4.213) for the microbial dynamics. One can then easily show that the Jacobian matrix of the reduced dynamics with vector field $U = MuM^+$ is

$$DU(X) = M\, Du(M^+X)\, M^+. \tag{4.231}$$

In our simulations, we observed that there are many lower (forward) branches of stable equilibrium points near 0 and many other stable equilibrium points (backward) branches at higher values for the global observable. Getting all these branches would be a tremendous challenge and would require sampling an 838-dimensional space of initial conditions, which is far from the goal of the paper. We thus sampled from different initial value uniform distributions to capture some of these branches. We have focused on one forward branch only to illustrate one transition: we observed that sampling the initial condition $x_0$ from a uniform distribution between 0 and 1 gave only one branch that eventually loses its stability to fall on some other branch at higher activity when increasing the coupling value. To obtain a backward branch, (1) we sampled the initial condition $x_0$ from a uniform distribution between 0 and $z$ where $z$ is a random integer between 1 and 15, (2) we integrated to get an equilibrium point, (3) we decreased the coupling and used the last equilibrium point as the initial condition for the integration in step (2), and (4) we repeat the steps (2) and (3) until the minimum coupling value (0.1 in Fig. 4.5g) was reached. We repeated these four steps 100 times (300 for $n = 76$) to generate different initial conditions and different stable branches while ensuring

at each iteration that the equilibrium points had reached the tolerance ($10^{-7}$) and that the equilibrium points were positive. The code to obtain Fig. 4.5g is on the GitHub repository, in simulations/bifurcations_microbial.py.

Because of the performances of BDF with the microbial dynamics, we also integrated the other dynamics with the BDF method with a relative tolerance of $10^{-8}$ and an absolute tolerance of $10^{-12}$.

## 4.13 *Appendix: Real network dataset

In this section, we list the real networks used in the paper and we provide two supplementary figures. Every network in the table is from Netzschleuder, except 31 of them, listed below.

— 'celegans_signed': It is obtained by completing (with Dale's principle) the connectome NT+R method prediction of the open-source database EleganSign [182] [see the function get_connectome_weight_matrix in graphs/get_real_networks.py from the GitHub repository].

— 'drosophila': It is taken from Ref. [527].

— 'cintestinalis' The Ciona intestinalis connectome is from Ref. [513] and is available on our GitHub repository in graphs/graph_data/connectome/ciona_intestinalis_lavaire_elife-16962-fig16-data1-v1_modified.xlsx.

— 'pdumerilii_neuronal': The neuronal Platynereis dumerilii connectome is from Ref. [600] and it is an updated version shared personally by the author G. Jékely to V. Thibeault. The connectome is in graphs/graph_data/connectome/pdumerilii_neuronal.xml from the GitHub repository.

— 'pdumerilii_desmosomal': The desmosomal Platynereis dumerilii connectome is from Ref. [287] and it is an updated version shared personally by the author G. Jékely to V. Thibeault. The connectome can be found on our GitHub repository under the path graphs/graph_data/connectome/pdumerilii_desmosomal.xml.

— 'mouse_meso': The mesoscopic mouse connectome is given in Ref. [449] and available on our GitHub repository in graphs/graph_data/connectome/mouse_connectome-Oh_Nature_2014.csv.

— 'zebrafish_meso': The zebrafish mesoscopic connectome is adapted from Ref. [330] and the treatment is available on the paper's GitHub repository low-rank-hypothesis-complex-systems.

— 'mouse_voxel': The mouse connectome at the level of voxels is available in Mendeley data mouse_connectome_voxelwise [130].

— 'mouse_control_rnn', 'mouse_rnn', 'zebrafish_rnn': recurrent neural networks from Hadjiabadi et al. [256].

— 'fully_connected_layer_cnn_XXXXX' with XXXXX in $\{00100, 00200, ..., 01000\}$ : fully connected layers from the convolutional neural networks in the repository NWS [162].

— 'gut': The human gut microbiome is from Ref. [355] and was constructed as in the supplementary material of Ref. [521] [see graphs/get_real_networks.py and the function get_microbiome_weight_matrix in the GitHub repository].

— 'AT_2008', 'CY_2015', 'EE_2010', 'PT_2009', 'SI_2016': Economic networks from Ref. [616].

— 'financial_institution07-Apr-1999', 'non_financial_institution04-Jan-2001', 'households_04-Sep-1998', 'households_09-Jan-2002': Economic networks from Ref. [495] on Dryad.

The code to extract each network made available on GitHub is in graphs/get_real_networks. Other information about the real networks in the dataset is available on the GitHub repository low-rank-hypothesis-complex-systems. More precisely, a detailed list of the networks and their properties is in real_networks_and_their_effective_ranks.pdf within graphs/graph_data for the source of each network or equivalently, supplementary_table_1_real_networks.pdf. Note that, in a preliminary treatment before getting the effective ranks, many Netzschleuder's networks have been removed from a larger dataset of 1145 networks to avoid over-representation of particular types of networks (specifically, 'board_directors_net1m...', 'edit_wikibooks...', 'ego_social_gplus...').

In subsection 4.11.3, asymptotic results about the effective ranks of graph models have been presented for different singular value decays, showing all sorts of behavior, ranging from constant $O(1)$, to sub-linear $O(N^{1-\epsilon})$ with $0 < \epsilon < 1$, to linear $O(N)$ growth as $N \to \infty$. Although we do not expect one graph model to describe every network in the dataset (which would allow doing asymptotic analysis), we can still wonder how the effective ranks are distributed according to the size $N$ of the networks. In Fig. 4.13, we present such distributions and perform nonlinear regressions, which suggest sub-linear increases of the effective ranks as $N$ increases. As mentioned in subsection 4.11.4, it would be pertinent to explore the behavior of the effective ranks in growing graphs and real growing networks to verify the presence of sub-linear growth.

Moreover, sparse matrices have been observed for many real and synthetic networks and in subsection 4.11.3, it was shown that sparse matrix models lead to a low stable rank. Yet, Fig. 4.14 illustrates that the effective ranks are rather anti-correlated with the density of the weight matrices of real networks, thus suggesting that it is really the rapid decrease of the singular values that lead to our observations on the effective ranks in Fig. 4.2.

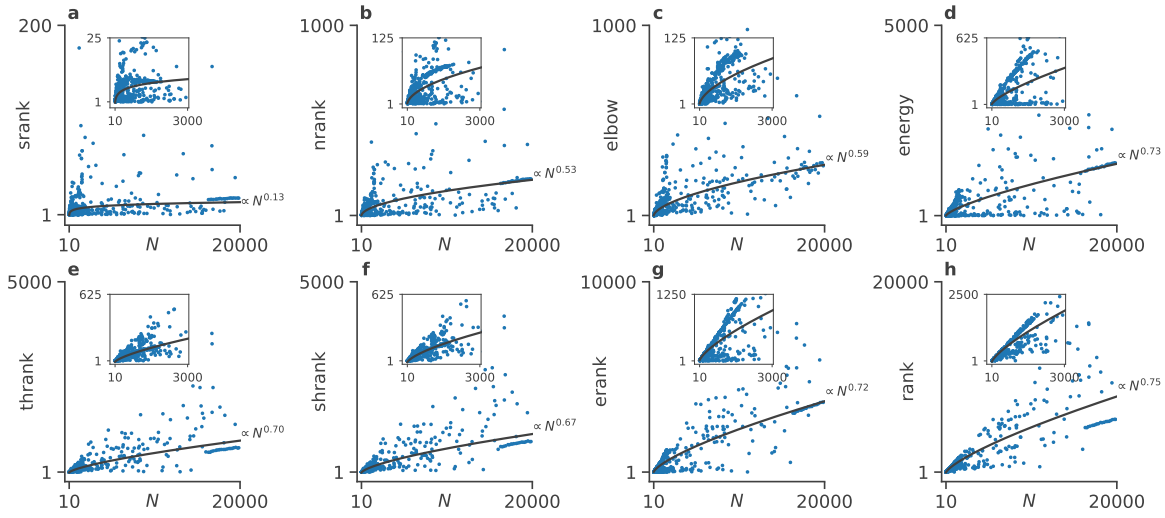



Figure 4.13 – Different effective ranks vs. the number of vertices $N$ for 679 real networks (see SI 4.13). The solid black lines are L1 nonlinear regressions with the function $aN^b + c$ and $a, b, c$ as the optimization variables. The insets show zoomed version of the data for the smaller values of effective ranks and $N$ where the nonlinearity is better seen especially in **a** to **d**. The optimization was performed with the method BFGS of scipy.optimize.minimize with the bounds (0, 10), (0, 1), (-100, 30) for $a$, $b$, $c$ respectively and the initial guesses $a_{\text{guess}} = 1$, $b_{\text{guess}} = 0.5$, and $c_{\text{guess}} = -1$ (see plot_fig_SI_effective_rank_vs_size.py on the GitHub repository). The L1 norm was chosen for its better robustness to outliers, but the conclusions hold when using the L2 norm instead. From srank to rank, the optimization parameters [$a$ $b$ $c$] are approximately [ 6.09, 0.13, -7.45], [ 1.04 0.53 -1.00], [ 0.76 0.59 -1.00], [ 1.02 0.73 -1.01], [ 0.78 0.70 -11.97 ], [ 1.27 0.67 -17.44], [ 2.92 0.72 -0.83 ], [ 4.80 0.75 -51.34] and the normalized mean absolute errors $\sum_{i=1}^{679} |y_i - \hat{y}_i| / [679\langle y \rangle]$ are 0.76, 0.69, 0.54, 0.72, 0.51, 0.49, 0.45, 0.41.

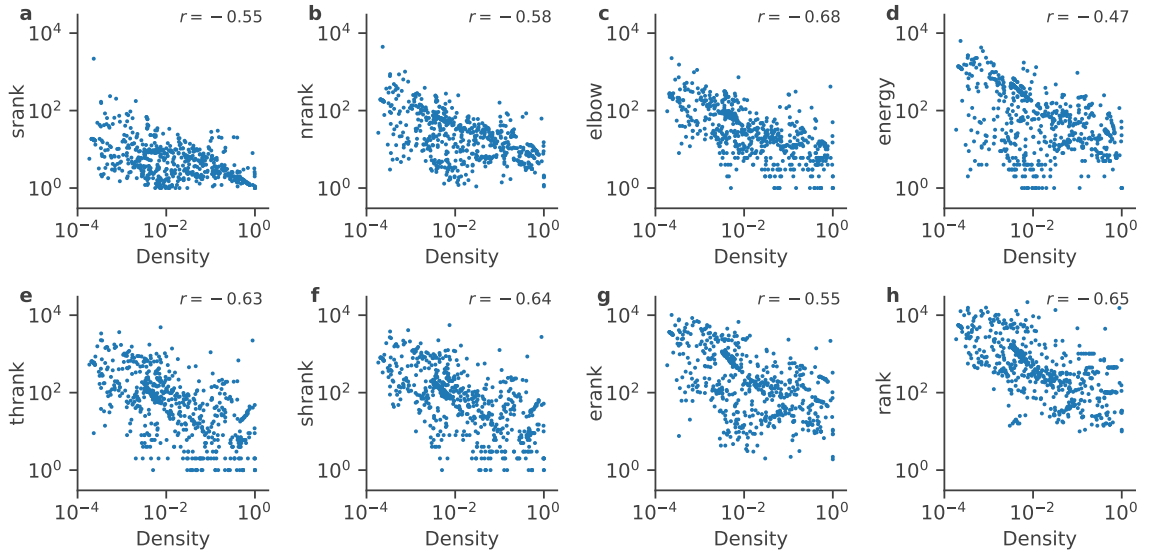



Figure 4.14 – Different effective ranks vs. the density for 679 real networks (see SI 4.13). The (matrix) density is the number of nonzero elements in the weight matrices of the networks divided by the total number of elements $N^2$. The parameter $r$ denotes Pearson's correlation coefficient between the log of the effective ranks and the log of the density.

# Chapitre 5

# Symétries des équations différentielles

> It is only slightly overstating to say that physics is the study of symmetry.
> P. W. Anderson, « More is different », Science, 1972 [20]

Les symétries des équations différentielles ont une longue histoire qui a fleuri dans les travaux de Sophus Lie et d'Emmy Noether. Nous n'en ferons qu'un bref exposé, non représentatif de toute la profondeur du sujet, dans le but d'appliquer la théorie au modèle de Kuramoto dans le prochain chapitre. Plusieurs ouvrages sont pertinents pour se familiariser avec les symétries, notamment les références [31, 68, 204, 283, 285, 450, 523, 559], qui offrent différents angles sur le sujet. Celui qui s'est démarqué par ses exemples reproductibles, ses remarques historiques, ses théorèmes utiles et sa vulgarisation de qualité, est le livre de Peter Olver [450].

Nous nous appuyons sur ce livre [1] pour les sections 5.1, 5.2 et 5.3 dans lesquelles sont introduits les concepts d'invariance, de symétries continues et de prolongation. Nous adoptons une approche plus informelle que les autres chapitres et les mêmes conventions de notation que la Réf. [450]. Puisque la notation n'est pas simple en première approche, nous prenons soin de laisser plus de détails dans les démarches. Nous omettons plusieurs sujets de la Réf. [450] qui ne sont pas utilisés dans la thèse pour orienter la discussion spécifiquement vers les systèmes dynamiques. En effet, la section 5.4 montre comment obtenir les symétries de Lie dans les équations différentielles ordinaires de premier ordre et présente des exemples qui mettent en évidence les défis associés.

De manière générale, une symétrie désigne une transformation sur un objet qui le laisse inchangé. En ce sens, l'objet est invariant sous la transformation. Cela illustre la proximité du concept d'invariance et de symétrie, telle qu'abordée à la prochaine section.

1. Plus particulièrement, son deuxième chapitre, lequel s'inspire du livre de D. Sattinger et O. Weaver [523, Chapitre 6] [450, Acknowledgments].

## 5.1 Invariance et groupe de symétrie

Dans cette sous-section, les sous-ensembles invariants et les fonctions invariantes sous un groupe sont introduits à l'aide d'exemples. La notion d'invariance mènera ensuite aux groupes de transformations dont l'action préserve certaines fonctions. Nous déduirons alors une forme générale des fonctions transformées par un groupe.

D'abord, intuitivement, un ensemble est $G$-invariant si l'action du groupe $G$ sur un élément de l'ensemble produit un élément du même ensemble. L'exemple suivant illustre ce concept.

**Exemple 5.1** (Ensembles invariants, Exemple 2.2 [450])**.**

(a) Soit le groupe des translations $G_c = \{T : (x, y) \mapsto (x + c\varepsilon, y + \varepsilon) \text{ avec } \varepsilon \in \mathbb{R}\}$ où $c \in \mathbb{R}$ est une constante fixe. Soit l'ensemble de droites $\mathcal{L}_d = \{(x, y) \,|\, x = cy + d \text{ avec } d \in \mathbb{R}\} \subset \mathbb{R}^2$. Pour $T \in G_c$ et $z = (x, y) \in \mathcal{L}_d$, l'action du groupe est donnée par $T(x, y) = (x + c\varepsilon, y + \varepsilon)$. Avec $u = x + c\varepsilon$ et $v = y + \varepsilon$, il en découle que

$$cv + d = cy + c\varepsilon + d = (cy + d) + c\varepsilon = x + c\varepsilon = u\,,$$

où le fait que $(x, y) \in \mathcal{L}_d$ a été utilisé à l'avant-dernière égalité. Par conséquent, $T(x, y) \in \mathcal{L}_d$ et le sous-ensemble $\mathcal{L}_d$ est $G_c$-invariant. Similairement, soit $\mathcal{S}_{k_1,k_2} = \{(x, y) \,|\, k_1 < x - cy < k_2\}$, où $k_1, k_2 \in \mathbb{R}$. Dans ce cas, pour $(x, y) \in \mathcal{S}_{k_1,k_2}$ et $T(x, y) = (x + c\varepsilon, y + \varepsilon) =: (u, v)$,

$$u - cv = x + c\varepsilon - cy - c\varepsilon = x - cy\,.$$

Ainsi, $k_1 < u - cv < k_2$, $T(x, y) \in \mathcal{S}_{k_1,k_2}$ et $\mathcal{S}_{k_1,k_2}$ est $G_c$-invariant.

(b) Soit le groupe de changement d'échelle $G_\alpha = \{s : (x, y) \mapsto (\lambda x, \lambda^\alpha y) \text{ avec } \lambda > 0\}$ où $\alpha \in \mathbb{R}$. Les ensembles suivants sont des ensembles $G_\alpha$-invariants :

1. $\mathcal{T} = \{(0, 0)\} \subset \mathbb{R}^2$, $s(0, 0) = (0, 0) \in \mathcal{T}$.
2. $\mathcal{X}^+ = \{(x, 0) \,|\, x > 0\}$, $s(x, 0) = (\lambda x, 0) \in \mathcal{X}^+$, car $\lambda > 0$ de sorte que $\lambda x > 0$ pour $x > 0$.
3. $\mathcal{X}^- = \{(x, 0) \,|\, x < 0\}$, $s(x, 0) = (\lambda x, 0) \in \mathcal{X}^-$, car $\lambda x < 0$ pour $x < 0$ et $\lambda > 0$.
4. $\mathcal{Y}^+ = \{(0, y) \,|\, y > 0\}$, $s(0, y) = (0, \lambda^\alpha y) \in \mathcal{Y}^+$, car $\lambda^\alpha > 0 \ \forall \alpha$ et $\lambda^\alpha y > 0$ pour $y > 0$.
5. $\mathcal{Y}^- = \{(0, y) \,|\, y < 0\}$, $s(0, y) = (0, \lambda^\alpha y) \in \mathcal{Y}^-$, car $\lambda^\alpha > 0 \ \forall \alpha$ et $\lambda^\alpha y < 0$ pour $y < 0$.

De plus, soit $\mathcal{A} = \mathcal{T} \cup \mathcal{X}^+ \cup \mathcal{X}^- \cup \mathcal{Y}^+ \cup \mathcal{Y}^- = \{(x, y) \,|\, xy = 0\}$, l'ensemble des points constituant les axes du plan euclidien. Alors, $\mathcal{A}$ est un ensemble $G_\alpha$-invariant, ce qui découle immédiatement des cas particuliers 1. à 5. précédents. En général, si deux ensembles sont $G$-invariants, alors leur union et leur intersection le sont aussi.

Examinons finalement l'ensemble $\mathcal{O}_k = \{(x, y) \,|\, y = k|x|^\alpha \,\text{pour}\, x > 0 \,\text{ou}\, x < 0\}$ pour $k \in \mathbb{R}$. Dans ce cas, $s(x, y) = s(x, k|x|^\alpha) = (\lambda x, \lambda^\alpha k|x|^\alpha) =: (u, v)$. Avec $\lambda > 0$, $u = \lambda x$ est plus grand que 0 pour $x > 0$ ou plus petit que 0 pour $x < 0$. De plus, $v = \lambda^\alpha k|x|^\alpha = k|\lambda x|^\alpha = k|u|^\alpha$. Par conséquent, $s(x, y) \in \mathcal{O}_k$ et $\mathcal{O}_k$ est un ensemble $G_\alpha$-invariant. ■

Une fonction $F$ est aussi dite $G$-invariante si $F(g \cdot x) = F(x)$ pour tout $x \in M$ et pour tout $g \in G$. La notion de fonction invariante découle naturellement de la notion d'ensemble invariant, ce qui est démontré dans la proposition suivante.

**Proposition 5.2** (Prop. 2.5 [450]). *Si un groupe $G$ agit sur une variété différentielle $M$ et $F : M \to \mathbb{R}^\ell$ est une fonction lisse, alors $F$ est une fonction $G$-invariante si et seulement si chaque ligne de niveau $L_c(F) = \{x \in M \,|\, F(x) = c\}$ pour $c \in \mathbb{R}^\ell$ est un sous-ensemble $G$-invariant de $M$.*

*Preuve.* ($\Leftarrow$) Soit $x \in L_c(F)$ et $g \cdot x$ pour un certain $g \in G$. Alors, $F(g \cdot x) = F(x) = c$, puisque $F$ est $G$-invariante et $x \in L_c(F)$. Il en résulte que $g \cdot x \in L_c(F)$ et $L_c(F)$ est $G$-invariant.

($\Rightarrow$) D'une part, si $L_c(F)$ est $G$-invariant, alors $g \cdot x \in L_c(F)$ pour tout $g \in G$ et $x \in L_c(F)$ de sorte que $F(g \cdot x) = c$. D'autre part, puisque $x \in L_c(F)$, alors $F(x) = c$ et donc, par comparaison, $F(g \cdot x) = F(x)$. □

**Exemple 5.3** (Fonctions invariantes, Exemple 2.4 [450]).

(a) Soit le groupe des translations $G_c$ de l'exemple 5.1(a) et $\zeta(x, y) = x - cy$. Alors,

$$\zeta(T(x, y)) = \zeta(x + c\varepsilon, y + \varepsilon) = x + c\varepsilon - cy - c\varepsilon = x - cy = \zeta(x, y) \tag{5.1}$$

pour $T \in G_c$, $\varepsilon \in \mathbb{R}$. La fonction $\zeta$ est donc $G_c$-invariante.

(b) Étudions un cas particulier du groupe de changement d'échelle $G_\alpha$ de l'exemple 5.1(b), soit $G_1$. Les fonctions suivantes sont $G_1$-invariantes :

1. $\zeta(x, y) = x/y$ tel que $y \neq 0$. En effet, $\zeta(s(x, y)) = \zeta(\lambda x, \lambda y) = \lambda x/\lambda y = x/y = \zeta(x, y)$.
2. $\zeta(x, y) = \arctan(y/x)$ tel que $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \setminus \{(x, y) \,|\, x \leq 0\}$. Dans ce cas, similairement à 1., $\zeta(s(x, y)) = \arctan(\lambda y/(\lambda x)) = \arctan(y/x) = \zeta(x, y)$.
3. $\zeta(x, y) = xy/(x^2 + y^2)$ tel que $x, y \neq 0$, car $\zeta(s(x, y)) = (\lambda^2 xy)/(\lambda^2 x^2 + \lambda^2 y^2) = \zeta(x, y)$.

■

**Exemple 5.4** (Rotation d'une droite, Exemple 2.21 [450]). Soit le groupe de rotations $G = \mathrm{SO}(2)$ [exemple C.3] agissant sur $X \times U \simeq \mathbb{R}^2$. Un élément du groupe, dans sa représentation matricielle, prend la forme

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}.$$

Considérons une fonction $f$ dont le graphe est $\Gamma_f = \{(x, u) \,|\, u = f(x)\} \subset X \times U$. L'action du groupe sur le graphe de la fonction est

$$R_\theta \cdot \Gamma_f = \left\{ \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\cos\theta - u\sin\theta \\ x\sin\theta + u\cos\theta \end{pmatrix} \,\middle|\, (x, u) \in \Gamma_f \right\}.$$

Pour éviter une possible confusion, mettons l'accent sur le fait que nous écrivons

$$\tilde{u} = g \cdot u = g \cdot f(x) = \tilde{f}(\tilde{x})$$

où $\tilde{f} = g \cdot f$ et il est supposé que la relation entre $x$ et $\tilde{x}$ s'inverse, ce que nous discuterons un peu plus en détail après l'exemple. Notons aussi que l'ensemble $R_\theta \cdot \Gamma_f$ n'est plus nécessairement le graphe d'une fonction pour un angle donné (voir figure 6 [450]). Si nous prenons la droite

$$u = f(x) = ax + b\,,$$

alors le groupe de rotations agit telle que

$$\begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\cos\theta - (ax+b)\sin\theta \\ x\sin\theta + (ax+b)\cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x(\cos\theta - a\sin\theta) - b\sin\theta \\ x(\sin\theta + a\cos\theta) + b\cos\theta \end{pmatrix}. \tag{5.2}$$

Cette dernière équation implique que

$$x = \frac{\tilde{x} + b\sin\theta}{\cos\theta - a\sin\theta} \tag{5.3}$$

pour $\operatorname{cotan}\theta \neq a$. La substitution de l'équation (5.3) dans l'équation (5.2) pour $\tilde{u}$ conduit finalement à

$$\tilde{u} = \tilde{f}(\tilde{x}) = \left(\frac{\tilde{x} + b\sin\theta}{\cos\theta - a\sin\theta}\right)(\sin\theta + a\cos\theta) + b\cos\theta = \left(\frac{\sin\theta + a\cos\theta}{\cos\theta - a\sin\theta}\right)\tilde{x} + \frac{b}{\cos\theta - a\sin\theta}\,.$$

Il s'ensuit, conformément à l'intuition géométrique, que la rotation d'une droite redonne une nouvelle droite dont la pente est donnée par une fonction non linéaire de la pente $a$ de la droite initiale et de l'angle $\theta$ de la rotation, alors que l'ordonnée à l'origine dépend de $a, b, \theta$. Il devient clair que certaines rotations font en sorte que $R_\theta \cdot \Gamma_f$ n'est plus le graphe d'une fonction : dans ce cas-ci, la droite est verticale pour $\operatorname{cotan}\theta = a$. ■

L'exemple précédent montre que l'action d'un groupe $G$ sur une fonction $f$, même pour un groupe simple et une fonction simple, n'a pas une forme triviale. Il existe tout de même une manière d'écrire la fonction $\tilde{f} = g \cdot f$ pour $g \in G$ de façon générale, ce qui correspond essentiellement à la démarche effectuée dans le dernier exemple. Considérons l'action d'un groupe tel que

$$(\tilde{x}, \tilde{u}) = g \cdot (x, u) = (\Lambda_g(x,u), \Phi_g(x,u))$$

pour certaines fonctions lisses $\Lambda_g$ et $\Phi_g$. En notant id la fonction identité ($\mathrm{id}(x) = x$) et $\times$ le produit cartésien, les points $(\tilde{x}, \tilde{u})$ formant le graphe $\Gamma_{\tilde{f}} = g \cdot \Gamma_f$ sont tels que

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= \Lambda_g \circ (\mathrm{id} \times f)(x) \\ \tilde{u} &= \Phi_g \circ (\mathrm{id} \times f)(x)\,, \end{aligned}$$

ce qui se vérifie aisément : $\tilde{x} = \Lambda_g(\mathrm{id}(x), f(x)) = \Lambda_g(\mathrm{id} \times f(x)) = \Lambda_g \circ (\mathrm{id} \times f)(x)$ et pareillement pour $\tilde{u}$. Nous avons alors $\tilde{u} = \Phi_g \circ (\mathrm{id} \times f)(x)$, mais $\Phi_g \circ (\mathrm{id} \times f)$ ne correspond pas encore à $\tilde{f}$ qui dépend pour sa part de $\tilde{x}$. Il faut donc pouvoir inverser $\Lambda_g \circ (\mathrm{id} \times f)$ pour avoir $x$ en fonction de $\tilde{x}$. Sous la condition que $\Lambda_g \circ (\mathrm{id} \times f)$ soit inversible,

$$x = [\Lambda_g \circ (\mathrm{id} \times f)]^{-1}(\tilde{x}) \,.$$

et la formule générale de l'action d'un groupe sur une fonction est alors

$$\tilde{f} = g \cdot f = [\Phi_g \circ (\mathrm{id} \times f)] \cdot [\Lambda_g \circ (\mathrm{id} \times f)]^{-1} \,. \tag{5.4}$$

L'exemple 5.4 illustre bien le principe de symétries d'une équation différentielle. En effet, soit l'équation différentielle $u_{xx} = 0$. Alors, l'ensemble de ses solutions est formé de droites $u = f(x) = ax + b$ et celui-ci est SO(2)-invariant. Autrement dit, l'action du groupe sur une solution est aussi une solution, ce qui constitue précisément la notion de groupe de symétrie d'une équation différentielle. Dans la prochaine définition, traduite de la Réf. [450], la notion plus flexible d'un groupe local de transformations est utilisée, ce qui est essentiellement un groupe de Lie (section C.4) restreint dans ses éléments et le domaine de leur action [450, Définition 1.25, Figure 3].

**Définition 5.5** ( [450]). Soit un système d'équations différentielles $\mathscr{S}$. Un *groupe de symétrie* du système $\mathscr{S}$ est un groupe local de transformations $G$ agissant sur un ouvert $M$ de l'espace $X \times U$ des variables indépendantes et dépendantes du système avec la propriété que si $u = f(x)$ est une solution de $\mathscr{S}$ et si $g \cdot f$ est défini pour $g \in G$, alors $\tilde{u} = g \cdot f(x)$ est aussi une solution du système, interprétée comme une fonction lisse sur un domaine $\Omega \subset X$.

**Remarque 5.6.** Les symétries sont plus spécifiquement appelées des symétries de Lie, des symétries de Lie ponctuelles ou des symétries continues, ce qui les distingue entre autres des symétries discrètes (par exemple, une réflexion). ■

Cette dernière définition est sans doute la plus intuitive pour comprendre ce qu'est un groupe de symétrie. Cependant, elle n'indique pas comment s'y prendre pour identifier un tel groupe de symétrie, ce qui n'est pas une tâche évidente en général. Un concept unificateur dans l'étude des symétries des équations différentielles est celui de la prolongation, ce qui fera l'objet des deux prochaines sections.

## 5.2 Prolongation d'une fonction et espace $n$-jet

La prolongation et les concepts qui y sont associés permettent d'interpréter géométriquement des systèmes d'équations différentielles généraux. De plus, la prolongation intervient dans des conditions importantes pour qu'un groupe soit un groupe de symétrie d'un système d'équations différentielles.

Nous resterons assez fidèles à la notation du livre [450], qui est la suivante. Soit les variables indépendantes $x = (x^1, ..., x^p) \in X$ et les variables dépendantes $u = (u^1, ..., u^q) \in U$ s'exprimant sous la forme $u^\alpha = f^\alpha(x^1, ..., x^p)$ pour tout $\alpha \in \{1, ..., q\}$ (souvent abrégé $u = f(x)$). Si la fonction $f$ est lisse, ses dérivées partielles à tous les ordres existent et il y a

$$p_k := \binom{p+k-1}{k}$$

dérivées partielles d'ordre $k$, soit

$$\partial_J f(x) = \frac{\partial^k f(x)}{\partial x^{j_1} ... \partial x^{j_k}}\,, \tag{5.5}$$

où $J = \{j_1, ..., j_k\}$ est un multi-indice non ordonné d'entiers satisfaisant $1 \leq j_\kappa \leq p$ et $\#J = k$ donne l'ordre de la dérivée. Il y a alors $qp_k$ composantes $u^\alpha_J$ de la dérivée $\partial_J f^\alpha$ évaluée au point $x$, c'est-à-dire

$$u^\alpha_J = \partial_J f^\alpha(x)\,, \qquad \forall\, \alpha, J\,. \tag{5.6}$$

Intuitivement, la prolongation d'une fonction $f$ est tout simplement une nouvelle fonction basée sur la fonction $f$ et ses dérivées. En effet, la fonction est prolongée à ses dérivées d'ordre supérieur. Pour être plus spécifique, introduisons d'abord une extension de l'espace $U$.

Soit l'espace $U_k \subset \mathbb{R}^{qp_k}$ muni des coordonnées $(u^\alpha_J)_{\alpha,J}$ contenant les dérivées d'ordre $k$. Construisons alors l'ensemble

$$U^{(n)} = U \times U_1 \times ... \times U_n$$

dont les éléments sont écrits $u^{(n)}$, les coordonnées $(u^\alpha_J)_{\alpha,J,k}$ avec $0 \leq k \leq n$ contiennent toutes les dérivées partielles d'ordre 0 à $n$. Par conséquent, la dimension de cet espace est

$$q + qp_1 + ... + qp_n = q\binom{p+n}{n} =: qp^{(n)} \tag{5.7}$$

et la prolongation d'une fonction est définie comme suit.

**Définition 5.7.** Soit une fonction lisse $f : X \to U$. La $n$-ième *prolongation* $\mathrm{pr}^{(n)}\, f$ de $f$ est une fonction de $X$ vers $U^{(n)}$.

**Remarque 5.8.** Cette notion est fortement reliée à la notion de $n$-jet, qui prend une fonction lisse et l'envoie vers un polynôme de Taylor de degré $n$. La prolongation ne diffère du jet que par le fait qu'elle donne un $qp^{(n)}$-tuple de nombres caractérisé par les dérivées d'ordre 0 à $n$ plutôt que le polynôme. Remarquons enfin que la terminologie "prolongement" est parfois utilisée plutôt que "prolongation" en français. ■

Donnons deux exemples simples pour clarifier cette notion.

**Exemple 5.9.** Considérons le cas $p = 1$ et $q = 1$ avec $(x, u) \in X \times U$ et $u = f(x) = x^2$. La dérivée de $f$ au point $x$ est $u_x = \frac{\partial f(x)}{\partial x} = 2x$. La première prolongation est donc $\mathrm{pr}^{(1)} f(x) = (u, u_x) = (x^2, 2x) = u^{(1)}$ et la deuxième prolongation est $\mathrm{pr}^{(2)} f(x) = (u, u_x, u_{xx}) = (x^2, 2x, 2) = u^{(2)}$. ∎

**Exemple 5.10.** Pour $p = 2$ et $q = 1$, la deuxième prolongation $\mathrm{pr}^{(2)} f$ de la fonction $f(x, y) = x^2y^2$ est

$$\begin{aligned}\mathrm{pr}^{(2)} f(x,y) &= \left(f(x,y), \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}, \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}, \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2}\right) \\ &= (x^2y^2, 2xy^2, 2x^2y, 2y^2, 4xy, 2x^2)\,.\end{aligned}$$ ∎

Le graphe de la prolongation d'une fonction appartient à un espace encore plus grand, de dimension $p+qp^{(n)}$, lequel sera utile pour définir les équations différentielles de façon générale.

**Définition 5.11.** Soit $M \subset X \times U$. L'*espace n-jet* de $M$ est

$$M^{(n)} = M \times U_1 \times ... \times U_n\,.$$

L'espace $n$-jet est donc un sous-ensemble d'un espace $X \times U^{(n)}$ de dimension $p+qp^{(n)}$ dont les coordonnées contiennent à la fois les variables indépendantes, les variables dépendantes via $f$ et toutes les coordonnées reliées aux dérivées partielles de $f$ d'ordre 0 à $n$. Une exposition plus avancée de cette notion se trouve dans le livre *The Geometry of Jet Bundles* de Saunders [524].

Définir un espace d'une telle généralité peut paraître excessif, mais c'est en son sein que prennent forme certains des objets les plus fondamentaux des mathématiques, à savoir les équations différentielles.

**Définition 5.12.** Soit la fonction $\Delta : M^{(n)} \subset X \times U^{(n)} \to \mathbb{R}^\ell$ telle que

$$\Delta(x, u^{(n)}) = (\Delta_1(x, u^{(n)}), ..., \Delta_\ell(x, u^{(n)}))\,,$$

considérée lisse. Un *système d'équations différentielles* avec $p$ variables indépendantes et $q$ variables dépendantes est un système d'équations

$$\Delta_\nu(x, u^{(n)}) = 0, \quad \nu \in \{1, ..., \ell\}\,. \tag{5.8}$$

Les équations différentielles sont donc les lignes de niveau de $\Delta$,

$$L_0(\Delta) = \{(x, u^{(n)}) \,|\, \Delta(x, u^{(n)}) = 0\}\,, \tag{5.9}$$

représentant une sous-variété de l'espace $n$-jet $M^{(n)}$. Cette interprétation est particulièrement éclairante : un système d'équations différentielles s'interprète géométriquement comme une

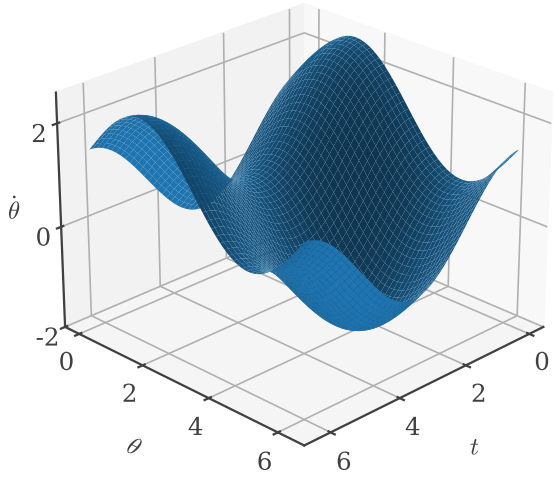



FIGURE 5.1 – Représentation de la surface associée à l'équation différentielle $\dot{\theta} = \omega + \sin(\theta) + \cos(t)$ (oscillateur non uniforme forcé) dans l'espace 1-jet où $t$ est la variable indépendante, $\theta$ est la variable dépendante, $\dot{\theta}$ est la coordonnée associée à la dérivée de $\theta$ par rapport à $t$ et $\omega$ est la vitesse angulaire de l'oscillateur.

surface dans l'espace $n$-jet. La figure 5.1 illustre la surface formée par l'équation différentielle d'un oscillateur non uniforme.

Le concept de prolongation s'applique également aux groupes locaux de transformation, ce que nous introduisons à la prochaine section pour enfin aborder les symétries des équations différentielles.

## 5.3 Prolongation et condition infinitésimale de symétrie

Pour un groupe local de transformation agissant sur $X \times U$, il y a une action induite sur l'espace $n$-jet appelée la prolongation $\mathrm{pr}^{(n)}\, g$ de l'action du groupe. Intuitivement, cette prolongation transforme $f$ et ses dérivées en la fonction transformée et ses dérivées. Cet objet est particulièrement utile, puisque le théorème 2.27 de la Réf. [450] démontre que si la prolongation d'un groupe laisse invariante la sous-variété de l'espace jet définissant l'équation différentielle, alors le groupe est un groupe de symétrie. L'exemple suivant est utile pour se familiariser avec ce résultat.

**Exemple 5.13** (Prolongation de l'action d'un groupe, Exemple 2.26 [450])**.**
Reprenons l'exemple 5.4 où $p = 1$ et $q = 1$ et $(x, u) \in X \times U \simeq \mathbb{R}^2$ pour calculer la première prolongation $\mathrm{pr}^{(1)}\, \mathrm{SO}(2)$. Pour ce faire, nous introduisons une fonction définie dans un voisinage de $x^0$, soit le polynôme de Taylor linéaire

$$f(x) = f(x^0) + (x - x^0) f'(x^0) = u^0 + (x - x^0) u_x^0 = u_x^0 x + (u^0 - x^0 u_x^0)\,.$$

Selon l'exemple 5.4, l'action du groupe de rotation donne

$$\tilde{f}(\tilde{x}) = R_\theta \cdot f(\tilde{x}) = \frac{\sin\theta + u_x^0 \cos\theta}{\cos\theta - u_x^0 \sin\theta}\,\tilde{x} + \frac{u^0 - x^0 u_x^0}{\cos\theta - u_x^0 \sin\theta}$$

pour $u_x^0 \neq \operatorname{cotan}\theta$. De plus, la dérivée de la fonction transformée par rapport à $\tilde{x}$ évaluée à $\tilde{x}^0$ s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{f}(\tilde{x}^0)}{\mathrm{d}\tilde{x}} = \frac{\sin\theta + u_x^0 \cos\theta}{\cos\theta - u_x^0 \sin\theta} =: \tilde{u}_x^0\,.$$

La première prolongation de l'action du groupe est alors

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, R_\theta \cdot (x^0, u^0, u_x^0) = \left(x^0\cos\theta - u^0\sin\theta, x^0\sin\theta + u^0\cos\theta, \frac{\sin\theta + u_x^0\cos\theta}{\cos\theta - u_x^0\sin\theta}\right)\,.$$

■

Le dernier exemple montre que même dans ce cas relativement simple, la prolongation de l'action d'un groupe ne possède pas une forme évidente. C'est pourquoi il est pertinent de passer au concept de prolongation du générateur d'un groupe, ou autrement dit, d'un champ vectoriel.

**Définition 5.14.** Soit $M \subset X \times U$ et le champ vectoriel $v$ sur $M$ dont le groupe local de transformations est formé des transformations $\exp(\varepsilon v)$. La *prolongation de* $v$, notée $\mathrm{pr}^{(n)}\, v$, est le générateur infinitésimal du groupe formé de $\mathrm{pr}^{(n)}[\exp(\varepsilon v)]$, c.-à-d.

$$\mathrm{pr}^{(n)}\, v\big|_{(x,u^{(n)})} = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} \mathrm{pr}^{(n)}[\exp(\varepsilon v)](x, u^{(n)})\,, \tag{5.10}$$

pour tout $(x, u^{(n)}) \in M^{(n)}$.

Cette définition devient plus claire en calculant la première prolongation du générateur infinitésimal de SO(2), à l'aide des résultats des exemples 5.4 et 5.13,

**Exemple 5.15** (Prolongation du générateur infinitésimal de SO(2). Exemple 2.29 [450])**.** Un élément $R_\varepsilon = e^{\varepsilon v}$ du groupe SO(2), où $v$ est son générateur infinitésimal, agit tel que $R_\varepsilon(x, u) = (x\cos\varepsilon - u\sin\varepsilon, x\sin\varepsilon + u\cos\varepsilon)$. Le générateur infinitésimal s'écrit

$$v = \left.\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}(x\cos\varepsilon - u\sin\varepsilon)\frac{\partial}{\partial x} + \left.\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}(x\sin\varepsilon + u\cos\varepsilon)\frac{\partial}{\partial u} = -u\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial u}\,.$$

La prolongation du champ vectoriel est le générateur du groupe à l'exemple 5.13 et il reste seulement à calculer

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} \frac{\sin\varepsilon + u_x\cos\varepsilon}{\cos\varepsilon - u_x\sin\varepsilon} = \left[1 + \left(\frac{\sin\varepsilon + u_x\cos\varepsilon}{\cos\varepsilon - u_x\sin\varepsilon}\right)^2\right]_{\varepsilon=0} = 1 + u_x^2\,.$$

Il en résulte que la première prolongation du générateur infinitésimal $v$ de SO(2) est

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v = v + (1 + u_x^2)\frac{\partial}{\partial u_x} = -u\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial u} + (1 + u_x^2)\frac{\partial}{\partial u_x}\,.$$

■

La prolongation du champ vectoriel est donc le champ vectoriel sur l'espace jet. Celle-ci est primordiale, puisque, tout comme c'était le cas pour la prolongation de l'action d'un groupe, elle intervient dans la condition garantissant qu'un groupe forme un groupe de symétries pour un système d'équations différentielles.

**Théorème 5.16** (Theorem 2.31, [450]). *Supposons que*

$$\Delta_\nu(x, u^{(n)}) = 0, \qquad \nu \in \{1, ..., N\}$$

*est un système d'équations différentielles de rang maximal [Définition 6.39] défini sur $M \subset X \times U$. Si $G$ est un groupe local de transformations agissant sur $M$ et, pour tout générateur infinitésimal $v$ de $G$,*

$$\mathrm{pr}^{(n)}\, v[\Delta_\nu(x, u^{(n)})] = 0 \quad \textit{lorsque} \quad \Delta_\nu(x, u^{(n)}) = 0\,, \quad \forall\, \nu \in \{1, ..., N\}\,, \tag{5.11}$$

*alors $G$ est un groupe de symétrie du système.*

**Remarque 5.17.** Au chapitre 6, nous utiliserons une version nécessaire et suffisante de ce théorème et nous le formulerons de manière originale en fonction du générateur de Koopman [sections 3.2 et 6.14.1]. ■

C'est donc dire qu'il est suffisant que les fonctions $\Delta_1, ..., \Delta_N$ définissant les équations différentielles soient des fonctions invariantes du groupe local de transformation prolongé $\mathrm{pr}^{(n)}\, G$, ce qui est équivalent à la proposition 2.6 de la Réf. [450].

**Exemple 5.18** (Groupe de symétrie d'une équation différentielle, Exemple 2.32 [450]). Supposons que SO(2) agit sur $X \times U \subset \mathbb{R}^2$ et que $f(x)$ satisfait l'équation différentielle ordinaire

$$(f(x) - x)\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + f(x) + x = 0\,. \tag{5.12}$$

En posant $\mathrm{d}f(x)/\mathrm{d}x = u_x$ et $f(x) = u$, la fonction scalaire $\Delta : X \times U^{(1)} \to \mathbb{R}$ reliée à l'équation différentielle est telle que

$$\Delta(x, u, u_x) = (u - x)u_x + u + x = 0\,. \tag{5.13}$$

D'une part, en vue d'utiliser le théorème 5.16, nous trouvons la matrice jacobienne de $\Delta$, soit

$$D\Delta(x, u, u_x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial\Delta(x,u,u_x)}{\partial x} & \dfrac{\partial\Delta(x,u,u_x)}{\partial u} & \dfrac{\partial\Delta(x,u,u_x)}{\partial u_x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - u_x & 1 + u_x & u - x \end{pmatrix},$$

ce qui est une matrice de rang 1 pour tout $(x, u, u_x) \in X \times U^{(1)}$. En effet, les éléments $1 - u_x$ et $1 + u_x$ de $D\Delta(x, u, u_x)$ ne peuvent pas être nuls simultanément et la matrice ne peut donc pas être de rang 0. Rappelons le piège de penser que $\partial u_x/\partial x = 0$ et non $u_{xx}$, puisque $u_x$ est considéré comme une coordonnée ici.

D'autre part, comme l'équation différentielle ne dépend que de la dérivée première de $f$, seule la première prolongation du champ vectoriel est à calculer, c.-à-d.

$$\begin{aligned}\operatorname{pr}^{(1)} v[\Delta](x,u,u_x) &= -u\frac{\partial \Delta(x,u,u_x)}{\partial x} + x\frac{\partial \Delta(x,u,u_x)}{\partial u} + (1+u_x^2)\frac{\partial \Delta(x,u,u_x)}{\partial u_x} \\ &= -u(1-u_x) + x(1+u_x) + (1+u_x^2)(u-x) \\ &= -u + uu_x + x + xu_x + u - x + (u-x)u_x^2 \\ &= u_x[(u-x)u_x + u - x] \\ &= u_x\,\Delta(x,u,u_x)\,.\end{aligned}$$

Par le théorème 5.16, puisque $\operatorname{pr}^{(1)} v[\Delta](x,u,u_x) = 0$ lorsque $\Delta(x,u,u_x) = 0$, alors SO(2) est un groupe de symétrie de l'équation différentielle (5.12). Autrement dit, le groupe de rotation transforme les solutions de l'équation différentielle (5.12) par d'autres solutions. Il est possible d'être plus explicite encore, en notant que le résultat ci-dessus suggère un changement pour des coordonnées polaires $x = r\cos\theta$, $u = r\sin\theta$ de sorte que la transformation des différentielles est

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}x \\ \mathrm{d}u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{d}r \\ \mathrm{d}\theta \end{pmatrix}$$

L'équation différentielle se réécrit $(u-x)\,\mathrm{d}u + (u+x)\,\mathrm{d}x = 0$. La substitution $x$, $u$ et des différentielles donne

$$(\sin\theta - \cos\theta)(\sin\theta\,\mathrm{d}r + r\cos\theta\,\mathrm{d}\theta) + (\sin\theta + \cos\theta)(\cos\theta\,\mathrm{d}r - r\sin\theta\,\mathrm{d}\theta) = 0\,.$$

En utilisant $\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$, l'équation se simplifie à $\mathrm{d}r - r\,\mathrm{d}\theta = 0$ ou bien $\mathrm{d}r/\mathrm{d}\theta = r$. Les solutions ont donc la forme de parties de spirales logarithmiques, soit $r = Ce^{\theta}$. Il est alors plus facile de comprendre comment les rotations représentent des symétries : elles transforment une spirale en une autre spirale qui est aussi une solution de l'équation différentielle. ■

Notons que la $n$-ième prolongation apparaît dans le théorème. À l'exemple 5.15, nous avons utilisé le fait que nous connaissions la première prolongation de l'action du groupe pour obtenir la première prolongation du générateur infinitésimal. Cependant, procéder de la même manière pour obtenir les prolongations d'ordre supérieur pour le générateur serait particulièrement difficile, puisque calculer les prolongations d'ordre supérieur de l'action d'un groupe devient vite très lourd. Pour appliquer le dernier théorème, il est utile d'avoir la formule générale pour la prolongation d'un champ vectoriel.

**Théorème 5.19** (Olver [450]). *Soit le champ vectoriel*

$$v = \sum_{i=1}^{p} \xi^i(x,u)\frac{\partial}{\partial x^i} + \sum_{\alpha=1}^{q} \phi_\alpha(x,u)\frac{\partial}{\partial u^\alpha}$$

*défini sur un sous-ensemble $M \subset X \times U$. La n-ième prolongation de $v$ est le champ vectoriel*

$$\mathrm{pr}^{(n)}\, v = v + \sum_{\alpha=1}^{q} \sum_{J} \phi_{\alpha}^{J}(x, u^{(n)}) \frac{\partial}{\partial u_{J}^{\alpha}} \tag{5.14}$$

*défini sur l'espace jet correspondant $M^{(n)} \subset X \times U^{(n)}$, la deuxième sommation étant sur tous les multi-indices non ordonnés $J = \{j_1, ..., j_k\}$ avec $1 \leq j_\kappa \leq p$ pour tout $\kappa \in \{1, ..., k\}$ et $1 \leq k \leq n$. Les coefficients $\phi_{\alpha}^{J}$ dans l'équation (5.14) sont donnés par*

$$\phi_{\alpha}^{J}(x, u^{(n)}) = D_J \left( \phi_\alpha - \sum_{i=1}^{p} \xi^i u_i^\alpha \right) + \sum_{i=1}^{p} \xi^i u_{J,i}^{\alpha} \tag{5.15}$$

*où*

$$u_i^\alpha = \frac{\partial u^\alpha}{\partial x^i} \qquad et \qquad u_{J,i}^{\alpha} = \frac{\partial u_J^\alpha}{\partial x^i} = \frac{\partial^{k+1} u^\alpha}{\partial x^i \partial x^{j_1} ... \partial x^{j_k}}\,.$$

La dérivée totale $D_J$ sur l'espace $n$-jet dans le dernier théorème s'écrit comme $D_J = D_{j_1} ... D_{j_k}$ où $D_i$ agit sur une fonction lisse $P : M^{(n)} \subset X \times U^{(n)} \to \mathcal{P}$ (pour un certain ensemble $\mathcal{P}$) tel que pour une fonction lisse $f$ caractérisant les variables indépendantes $u = f(x)$,

$$D_i P(x, \mathrm{pr}^{(n+1)}\, f(x)) = \frac{\partial}{\partial x^i}[P(x, \mathrm{pr}^{(n)}\, f(x))]\,.$$

En pratique, nous utilisons la proposition 2.35 de la Réf [450] qui montre que

$$D_i P = \frac{\partial P}{\partial x^i} + \sum_{\alpha=1}^{q} \sum_{J} u_{J,i}^{\alpha} \frac{\partial P}{\partial u_J^\alpha}\,,$$

où $u_{J,i}^{\alpha}$ est défini comme dans le dernier théorème, $u_J^\alpha$ est défini par les équations (5.6-5.5) et la somme est sur tous les $J$ d'ordre 0 à $n$ où $n$ est l'ordre le plus grand des dérivées dans $P$. Dans le prochain exemple, plusieurs détails sur la notation sont présentés afin de se familiariser avec la formule générale de prolongation plus concrètement.

**Exemple 5.20** (Premières dérivées totales, p.109 [450])**.** Considérons que $p = 2$, $q = 1$, $(x^1, x^2) \in \mathbb{R}^2$ et $u^1 = f(x^1, x^2) \in \mathbb{R}$. Le multi-indice est $J = \{j_1, ..., j_k\}$ avec $1 \leq j_\kappa \leq 2$, $\#J = k$ et $k$ dépend de l'ordre de la prolongation que l'on veut trouver. De plus,

$$u_J^1 = u_{j_1 ... j_k}^1 = \partial_J f(x) = \frac{\partial^k f(x)}{\partial x^{j_1} ... \partial x^{j_k}}\,,$$

où nous rappelons que $x^{j_\kappa}$ est une coordonnée. Par exemple, pour $k = 3$ et $J = \{2, 1, 1\} = \{1, 2, 1\} = \{1, 1, 2\}$ [2], nous avons

$$u_J^1 = \frac{\partial^3 f(x)}{\partial x^1 \partial x^1 \partial x^2} = \frac{\partial^3 f(x)}{\partial (x^1)^2 \partial (x^2)} \neq \frac{\partial^4 f(x)}{\partial x^4}\,, \tag{5.16}$$

2. Puisque c'est un multi-indice non ordonné. Nous favoriserons la convention d'ordonner des entiers en ordre croissant dans le multi-indice, donc $\{1, 1, 2\}$.

où la dernière relation de non-égalité est écrite pour mettre en évidence la distinction entre l'indice supérieur associé aux coordonnées et les exposants.

Cela dit, la dérivée totale $D_1$ d'une certaine fonction lisse $P$ sur $M^{(2)}$ (l'ordre de la plus grande dérivée impliquée est $n = 2$ et $(x, u^{(2)}) \in M^{(2)}$) est

$$\begin{aligned} D_1 P &= \frac{\partial P}{\partial x^1} + \sum_{\alpha=1}^{1} \sum_J u^\alpha_{J,1} \frac{\partial P}{\partial u^\alpha_J} \\ &= \frac{\partial P}{\partial x^1} + \sum_J u^1_{J,1} \frac{\partial P}{\partial u^1_J} \\ &= \frac{\partial P}{\partial x^1} + \frac{\partial u^1}{\partial x^1}\frac{\partial P}{\partial u^1} + \sum_{k=1}^{2} \sum_{\{j_1,\dots,j_k\}} \frac{\partial^{k+1} u^1}{\partial x^1 \partial x^{j_1} \dots \partial x^{j_k}} \frac{\partial P}{\partial u^1_{j_1 \dots j_k}} , \end{aligned}$$

où le sous-entendu dans la somme sur $J$ se voit mieux, c'est-à-dire que la somme sur $k$ est également présente. En posant $D_1 = D_x$, $(x^1, x^2) = (x, y)$, $u^1 = u$, $u^1_1 = u_x$, $u^1_2 = u_y$, $u^1_{12} = u_{xy}$ et ainsi de suite, il en découle que

$$D_x P = \frac{\partial P}{\partial x} + \underbrace{u_x \frac{\partial P}{\partial u}}_{k=0} + \underbrace{u_{xx}\frac{\partial P}{\partial u_x} + u_{xy}\frac{\partial P}{\partial u_y}}_{k=1} + \underbrace{u_{xxx}\frac{\partial P}{\partial u_{xx}} + u_{xxy}\frac{\partial P}{\partial u_{xy}} + u_{xyy}\frac{\partial P}{\partial u_{yy}}}_{k=2=n} \tag{5.17}$$

et similairement,

$$D_y P = \frac{\partial P}{\partial y} + \underbrace{u_y \frac{\partial P}{\partial u}}_{k=0} + \underbrace{u_{xy}\frac{\partial P}{\partial u_x} + u_{yy}\frac{\partial P}{\partial u_y}}_{k=1} + \underbrace{u_{xxy}\frac{\partial P}{\partial u_{xx}} + u_{xyy}\frac{\partial P}{\partial u_{xy}} + u_{yyy}\frac{\partial P}{\partial u_{yy}}}_{k=2=n} . \tag{5.18}$$

■

Calculons désormais une prolongation de champ vectoriel en s'autorisant encore les raccourcis de notation pour simplifier les calculs. Il se trouve que cette méthode est plus directe que celle de l'exemple 5.15.

**Exemple 5.21** (Formule de prolongation particulière, Exemple 2.33 [450])**.** Soit $p = 2$, $q = 1$, $x \in X$, $u = f(x) \in U$ et le champ vectoriel

$$v = \xi(x, y, u)\frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, y, u)\frac{\partial}{\partial y} + \phi(x, y, u)\frac{\partial}{\partial u} =: \xi(x, y)\frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, y)\frac{\partial}{\partial y} ,$$

pour lequel $\xi$ et $\eta$ ne dépendent pas de $u$ et le générateur relié à la variable dépendante $\frac{\partial}{\partial u}$ n'intervient pas, c'est-à-dire $\phi(x, y, u) = 0$. Sa première prolongation est

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v = v + \sum_J \phi^J(x, u^{(1)})\frac{\partial}{\partial u_J} = v + \phi^x \frac{\partial}{\partial u_x} + \phi^y \frac{\partial}{\partial u_y}$$

avec

$$\begin{aligned} \phi^x &= D_x(\phi - \xi u_x - \eta u_y) + \xi u_{xx} + \eta u_{xy} \\ \phi^y &= D_y(\phi - \xi u_x - \eta u_y) + \xi u_{xy} + \eta u_{yy} . \end{aligned}$$

Plus concrètement, posons $\xi(x,y) = -y$ et $\eta(x,y) = x$, ce qui donne le générateur associé au groupe de rotation SO(2) [3]. Il en découle que

$$\phi^x = D_x(yu_x - xu_y) - yu_{xx} + xu_{xy}$$
$$\phi^y = D_y(yu_x - xu_y) - yu_{xy} + xu_{yy}\,.$$

Les équations (5.17) et (5.18) pour $P(x,y,u_x,u_y) = yu_x - xu_y$ et $n = 1$ impliquent

$$D_x(yu_x - xu_y) = -u_y + yu_{xx} - xu_{xy}$$
$$D_y(yu_x - xu_y) = u_x + yu_{xy} - xu_{yy}\,,$$

ce qui donne $\phi^x = -u_y$, $\phi^y = u_x$ et finalement,

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v = v - u_y\frac{\partial}{\partial u_x} + u_x\frac{\partial}{\partial u_y} = -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y} - u_y\frac{\partial}{\partial u_x} + u_x\frac{\partial}{\partial u_y}\,.$$

■

Poursuivons désormais l'analyse amorcée dans les exemples 5.4, 5.13 et 5.15 en obtenant la première et la deuxième prolongation du générateur de SO(2) avec la formule générale. Pour y arriver, la formule de récursion [450, Eq.(2.44)]

$$\phi^{J,k}_\alpha = D_k\phi^J_\alpha - \sum_{i=1}^{p} D_k\xi^i\, u^\alpha_{J,i} \tag{5.19}$$

s'avère particulièrement utile lorsqu'une prolongation d'ordre inférieur a déjà été calculée.

**Exemple 5.22** (Première et deuxième prolongation avec la formule générale, [450])**.** Le générateur infinitésimal de SO(2) est $v = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \phi\frac{\partial}{\partial u} = -u\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial u}$. La formule pour la première prolongation est alors

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v = v + \sum_J \phi^J(x,u^{(1)})\frac{\partial}{\partial u_J} = v + \phi^x\frac{\partial}{\partial u_x}\,,$$

où, comme attendu, l'équation (5.15) donne

$$\phi^x = D_x(\phi - \xi u_x) + \xi u_{xx} = D_x(x + uu_x) - uu_{xx} = 1 + u_x^2\,.$$

La deuxième prolongation est

$$\mathrm{pr}^{(2)}\, v = \mathrm{pr}^{(1)}\, v + \phi^{xx}\frac{\partial}{\partial u_{xx}}\,.$$

L'équation (5.19) implique ensuite que

$$\phi^{xx} = D_x(1 + u_x^2) - u_{xx}D_x(-u) = u_{xx}(2u_x) + u_{xx}u_x = 3u_xu_{xx}\,.$$

3. Ce n'est pas exactement le même cas qu'aux exemples 5.4, 5.13 et 5.15, puisqu'il y a deux variables indépendantes plutôt qu'une variable indépendante et une variable dépendante.

Il en découle que la deuxième prolongation du générateur infinitésimal de SO(2) est

$$\mathrm{pr}^{(2)}\, v = -u\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial u} + (1+u_x^2)\frac{\partial}{\partial u_x} + 3u_x u_{xx}\frac{\partial}{\partial u_{xx}}\,.$$

■

La formule générale de prolongation d'un champ vectoriel et la formule de récursion offrent ainsi un moyen plus direct de calculer les prolongations d'ordre supérieur (comparer à l'approche des exemples 5.4, 5.13 et 5.15).

Avec la deuxième prolongation du générateur de SO(2), il est maintenant possible de donner une dernière application concrète du théorème 5.16 pour conclure la section.

**Exemple 5.23.** Soit l'équation différentielle $\Delta(x, u, u_x, u_{xx}) = u_{xx} = 0$. L'application de la deuxième prolongation à l'équation différentielle donne

$$\mathrm{pr}^{(2)}\, v[\Delta(x, u, u_x, u_{xx})] = \mathrm{pr}^{(2)}\, v[u_{xx}] = 3u_x u_{xx} = 3u_x \Delta(x, u, u_x, u_{xx}) = 0\,.$$

Le théorème 5.16 implique alors que SO(2) est un groupe de symétrie de $u_{xx} = 0$, comme nous en avions donné l'intuition au début du chapitre.

Une autre application de la deuxième prolongation de SO(2) est pour vérifier et trouver des invariants impliquant les coordonnées sur l'espace 2-jet. Soit la courbure signée [578]

$$\kappa_s(x, u_x, u_{xx}) = \frac{u_{xx}}{(1+u_x^2)^{3/2}}\,.$$

En appliquant la deuxième prolongation à la courbure, il se trouve que

$$\mathrm{pr}^{(2)}\, v[\kappa_s(x, u_x, u_{xx})] = (1+u_x^2)\left(\frac{-3}{2}\frac{u_{xx}(2u_x)}{(1+u_x^2)^{5/2}}\right) + \frac{3u_x u_{xx}}{(1+u_x^2)^{3/2}} = 0\,,$$

ce qui signifie que la courbure est un invariant de $\mathrm{pr}^{(2)}\, v$. Ce résultat est évidemment attendu, puisque la rotation d'une courbe ne change pas sa courbure. ■

Jusqu'à maintenant, une attention particulière a été portée aux définitions générales et a des exemples tangibles permettant de se familiariser avec les symétries de Lie.

Dans la thèse, nous voudrons toutefois trouver des symétries de Lie à partir d'un système d'équations différentielles ordinaires donné. En effet, au prochain chapitre, un des objectifs sera d'appliquer ces techniques aux dynamiques sur des graphes. La prochaine section présente alors les premiers pas effectués dans cette direction.

## 5.4 Calcul des symétries pour les systèmes dynamiques

Le calcul des groupes de symétries dans la Réf. [450] est surtout effectué pour les équations différentielles partielles. Les exemples donnés, comme l'équation de la chaleur $u_t = u_{xx}$ ou

l'équation d'onde en deux dimensions $u_{tt} - u_{xx} - u_{yy} = 0$, sont d'ailleurs très formateurs. En ce qui concerne les EDO de premier ordre, il s'avère que trouver des symétries de Lie donne parfois un changement de variables astucieux qui permet d'intégrer les équations par quadrature [annexe D.4]. Cette approche généralise plusieurs méthodes existantes pour intégrer les EDO. De plus, comme expliqué plus en détail dans le prochain chapitre, connaître une symétrie de Lie permet parfois de générer de nouvelles quantités conservées à partir de quantités conservées connues. Le problème est que le calcul des symétries peut être plus difficile que de résoudre la dynamique en soi. Néanmoins, il est possible de se restreindre de façon judicieuse dans la recherche, de manière à identifier certaines symétries plutôt que l'ensemble complet. Dans cette section, les conditions pour avoir un groupe de symétries dans les systèmes dynamiques sont présentées, de même que quelques exemples introductifs. Ces exemples mettront en évidence les différents défis concernant le calcul des symétries dans les systèmes dynamiques.

### Symétries dans les dynamiques unidimensionnelles

Afin de calculer les symétries pour les dynamiques, introduites à la définition 3.9 comme des EDO de premier ordre, il est pratique de déduire la condition infinitésimale (5.11) spécifique à celles-ci. Pour ce faire, il suffit d'utiliser la formule générale de prolongation du théorème 5.19 avec $p = 1$, $q = 1$, $U = \mathscr{X}$ et $X = \mathscr{T}$. La variable indépendante est celle du temps $t$ et la variable dépendante représentant l'état de la dynamique est notée $u$ (plutôt que $x$) afin d'éviter la confusion dans l'application de la formule générale de prolongation.

La dynamique unidimensionnelle s'écrit ainsi

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = F(t, u)\,, \tag{5.20}$$

où la dépendance en temps du champ vectoriel $F$ signifie que la dynamique est potentiellement non autonome, ce qui permet d'être plus général dans la prochaine démarche. En appliquant encore les raccourcis de notation, la fonction dans l'espace 1-jet qui lui est reliée est

$$\Delta(t, u, u_t) = u_t - F(t, u) = 0 \tag{5.21}$$

et le groupe de symétrie est $G$. Le générateur infinitésimal de $G$ prend la forme

$$v = \xi(t, u)\frac{\partial}{\partial t} + \phi(t, u)\frac{\partial}{\partial u}\,, \tag{5.22}$$

où $\xi$ et $\phi$ sont à déterminer et $v$ est un élément d'une algèbre de Lie comme l'assure le corollaire 2.40 de la Réf. [450]. Le théorème 1.57 de la Réf. [450] garantit ensuite que l'exponentiel des éléments de base de l'algèbre donne les éléments des groupes de symétrie. Ensuite, d'après le théorème 5.16, si la $n$-ième prolongation du générateur infinitésimal de $G$ appliqué à un système d'équations différentielles $\Delta$ d'ordre $n$ est nul lorsque $\Delta(x, u^{(n)})$ est nul, alors $G$ est un groupe de symétrie de $\Delta$. Pour une équation différentielle ordinaire de premier ordre

$(n = 1)$, seulement la première prolongation est nécessaire, soit

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v = v + \phi^t(t,u,u_t)\frac{\partial}{\partial u_t} = \xi(t,u)\frac{\partial}{\partial t} + \phi(t,u)\frac{\partial}{\partial u} + \phi^t(t,u,u_t)\frac{\partial}{\partial u_t}\,.$$

L'équation (5.15) donne

$$\phi^t = D_t(\phi - \xi u_t) + \xi u_{tt} = \phi_t + (\phi_u - \xi_t)u_t - \xi_u u_t^2\,.$$

La condition infinitésimale pour que $G$ soit un groupe de symétrie est donc

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v[\Delta] = \xi\frac{\partial \Delta}{\partial t} + \phi\frac{\partial \Delta}{\partial u} + \phi^t\frac{\partial \Delta}{\partial u_t} = 0\,,$$

lorsque $\Delta = 0$. Puisque $\partial\Delta/\partial u_t = 1$ et $u_t = F(t,u)$, la condition est ainsi [283, 450]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial u} - \frac{\partial \xi}{\partial t}\right)F - \frac{\partial \xi}{\partial u}F^2 = \xi\frac{\partial F}{\partial t} + \phi\frac{\partial F}{\partial u}\,. \tag{5.23}$$

Les symétries de Lie trouvées sont triviales si et seulement si $\phi(t,u) = F(t,u)\xi(t,u)$. En effet, dans un tel cas, cela correspond à résoudre le système d'équations différentielles ordinaires du départ.

L'objectif est alors de résoudre l'équation différentielle partielle (5.23), ce qui revient à trouver les fonctions $\xi$ et $\phi$, soit les coefficients du générateur infinitésimal de symétrie. Une fois que les coefficients $\xi$ et $\phi$ sont identifiés, ceux-ci peuvent être substitués dans le générateur infinitésimal de symétrie. Cependant, parvenir à cette étape est loin d'être évident en général. Une équation différentielle de premier ordre admet généralement une infinité de symétries, mais il n'y a pas de façon systématique de toutes les déterminer [559, p.27]. Malgré tout, il existe tout de même une procédure pour tenter d'extraire quelques symétries.

### Équations déterminantes et procédure

Pour résoudre l'équation différentielle partielle (5.23) pour $\xi$ et $\phi$, il est souvent nécessaire d'effectuer un Ansatz approprié qui restreint la forme de $\xi$ et $\phi$. Autrement dit, il est plus accessible de trouver des solutions particulières à la condition infinitésimale (5.23) que d'obtenir la solution générale à l'équation (5.23) [283, p.32] [75]. En général, la recherche de solutions à l'équation (5.23) implique un ensemble d'équations, normalement plus simples, permettant de déterminer les coefficients $\xi$ et $\phi$ du générateur de symétrie. Ces équations sont appelées les *équations déterminantes*.

Bien que le calcul de symétries requière souvent une certaine intuition sur le système, la procédure suivante est utile à suivre pour les identifier :

1. Écrire la condition infinitésimale de symétrie spécifique aux équations différentielles ;
2. Effectuer une hypothèse sur les coefficients pour extraire des équations déterminantes ;
3. Résoudre les équations déterminantes ;

4. Substituer les coefficients dans le générateur de symétrie et réarranger ;
5. Identifier l'algèbre de Lie associée aux générateurs de symétries (si possible ou désiré) ;
6. Déterminer l'action du groupe de symétrie .

La section 2.4 du livre d'Olver [450] est excellente pour se familiariser avec cette procédure dans les équations différentielles partielles. Dans ce qui suit, nous présenterons plutôt deux exemples pour des dynamiques unidimensionnelles d'oscillateurs illustrant clairement les défis liés à l'application de cette procédure pour les équations différentielles ordinaires de premier ordre.

### Oscillateur uniforme

Le prochain exemple montre que déterminer des symétries de Lie peut être beaucoup plus laborieux que de résoudre l'équation différentielle pour un système dynamique simple.

**Exemple 5.24.** Soit un oscillateur dont le mouvement est décrit par $\mathrm{d}\theta(t)/\mathrm{d}t = \omega$ avec $\theta(0) = \theta_0$, où $\theta(t)$ est la phase de l'oscillateur au temps $t$ et $\omega \in \mathbb{R}$ est sa vitesse angulaire. En notant les coordonnées sur l'espace jet $(t, \theta, \dot{\theta})$, la fonction associée à l'équation différentielle est $\Delta(t, \theta, \dot{\theta}) = \dot{\theta} - \omega = 0$. La forme générale du générateur infinitésimal du groupe de symétrie recherché est

$$v = \xi(t, \theta)\frac{\partial}{\partial t} + \phi(t, \theta)\frac{\partial}{\partial \theta}\,,$$

où $\xi$ et $\phi$ sont considérés analytiques.

1. La condition (5.23) implique que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta} - \frac{\partial \xi}{\partial t}\right)\omega - \omega^2\frac{\partial \xi}{\partial \theta} = 0$$

doit être satisfaite pour que $G$ soit un groupe de symétrie. Or, cette dernière équation, ne dépendant pas de $\theta$ explicitement, est déjà l'équation déterminante à résoudre pour trouver $\xi$ et $\phi$. Un réarrangement de la dernière expression donne

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \omega\frac{\partial \phi}{\partial \theta}\right) - \omega\left(\frac{\partial \xi}{\partial t} + \omega\frac{\partial \xi}{\partial \theta}\right) = 0\,, \tag{5.24}$$

soit une combinaison linéaire de deux équations du transport [452, Section 2.2].

2. Une solution particulière à l'équation précédente s'obtient en résolvant les deux équations du transport séparément, soit

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \omega\frac{\partial \xi}{\partial \theta} = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial \phi}{\partial t} + \omega\frac{\partial \phi}{\partial \theta} = 0\,.$$

3. Le changement de variables $\Phi = \theta - \omega t$ dans la première équation conduit à $\xi(t, \theta) = \eta(t, \theta - \omega t) = \eta(t, \Phi)$, de sorte que

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \eta}{\partial \Phi}\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial \eta}{\partial t} - \omega\frac{\partial \eta}{\partial \Phi} \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial \xi}{\partial \theta} = \frac{\partial \eta}{\partial \Phi}\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = \frac{\partial \eta}{\partial \Phi}\,.$$

La substitution de ces dérivées partielles dans l'équation du transport donne

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \omega \frac{\partial \xi}{\partial \theta} = \frac{\partial \eta}{\partial t} - \omega \frac{\partial \eta}{\partial \Phi} + \omega \frac{\partial \eta}{\partial \Phi} = \frac{\partial \eta}{\partial t} = 0\,,$$

ce qui implique que $\eta$ est une fonction indépendante du temps, que l'on note $\eta(t, \Phi) = \tau(\Phi)$. Par conséquent, la solution à l'équation de transport [annexe D] prend la forme

$$\xi(t, \theta) = \tau(\theta - \omega t)\,,$$

où $\tau$ est analytique en $\Phi$ ($\xi$ est analytique par hypothèse). La même procédure donne aussi

$$\phi(t, \theta) = \sigma(\theta - \omega t)\,,$$

où $\sigma$ est une fonction analytique en $\Phi$.

4. Puisque les fonctions sont analytiques, alors

$$\xi(t, \theta) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (\theta - \omega t)^i\,, \qquad \phi(t, \theta) = \sum_{i=0}^{\infty} b_i (\theta - \omega t)^i\,,$$

et la forme générale du générateur infinitésimal du groupe de symétrie est

$$v = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (\theta - \omega t)^i\ \partial_t + \sum_{i=0}^{\infty} b_i (\theta - \omega t)^i\ \partial_\theta\,.$$

Les éléments de base de l'algèbre de Lie sont donc de la forme

$$u_i = (\theta - \omega t)^i \partial_t \quad \text{et} \quad v_i = (\theta - \omega t)^i \partial_\theta$$

pour tout $i \in \mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, ...\}$.

5. Leurs relations de commutation sont

$$[u_i, u_j] = \omega(i - j) u_{i+j-1}\,, \qquad [v_i, v_j] \ = (j - i) v_{i+j-1}\,, \qquad [u_i, v_j] = -\omega\, j\, v_{i+j-1} - i\, u_{i+j-1}\,,$$

pour tout $i, j \in \mathbb{N}$, formant ainsi une algèbre de dimension infinie. En posant $L_i = -u_{i+1}/\omega$ et $M_i = v_{i+1}$, les relations de commutation deviennent

$$[L_i, L_j] = (j - i) L_{i+j}\,, \quad [M_i, M_j] \ = (j - i) M_{i+j}\,, \quad [L_i, M_j] = (j + 1)\, M_{i+j} - (i + 1)\, L_{i+j}\,,$$

pour tout $i, j \in \mathbb{N}$ de sorte que les deux premières relations sont associées à des algèbres de Witt d'indices non négatifs. Le changement de base $K_i = (L_i + M_i)/2$ et $N_i = (L_i - M_i)/2$ simplifie encore davantage les relations de commutations :

$$[K_i, K_j] = (j - i) K_{i+j}\,, \qquad [N_i, N_j] = 0\,, \qquad [K_i, N_j] = (j + 1)\, N_{i+j}\,,$$

où cette fois-ci, la première relation est reliée encore à l'algèbre de Witt et la deuxième est une algèbre abélienne. Bien que cette reformulation mette en évidence la structure algébrique,

nous n'exploiterons pas davantage cette identification dans l'exemple. Concentrons-nous plutôt sur les symétries engendrées par les générateurs infinitésimaux initiaux $u_i$ et $v_i$. L'objectif est d'illustrer une méthode basée sur le développement de l'exponentielle pour trouver l'action des symétries sur les solutions.

6. D'une part, nous avons $\tilde{\theta} = \exp(\varepsilon u_i)\theta = \theta$ et

$$\exp(\varepsilon u_i)t = t + \varepsilon(\theta - \omega t)^i \left[1 - \frac{1}{2}ix + \frac{\varepsilon^2}{6}i(2i-1)x^2 + \frac{\varepsilon^3}{24}i(2i-1)(3i-2)x^3 + ...\right]$$

où $x := \varepsilon\omega(\theta - \omega t)^{i-1}$. Un calcul symbolique avec Mathematica permet d'identifier le $k$-ième terme de la séquence $1, i, i(2i-1), i(2i-1)(3i-2), ...$ comme étant $(i-1)^k \left(\frac{i}{i-1}\right)_k$ où $(a)_k$ est le symbole de Pochhammer et $k \in \mathbb{N}$. Ainsi, l'expression se réécrit

$$\tilde{t} = \exp(\varepsilon u_i)t = t + \varepsilon(\theta - \omega t)^i \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i-1)^k \left(\frac{i}{i-1}\right)_k}{(k+1)!}(-x)^k \,.$$

La somme infinie admet la forme fermée

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i-1)^k \left(\frac{i}{i-1}\right)_k}{(k+1)!}(-x)^k = \frac{1 - [1 + (i-1)x]^{\frac{1}{1-i}}}{x} \,.$$

La réinsertion de $x := \varepsilon\omega(\theta - \omega t)^{i-1}$ dans l'expression et un réarrangement conduit à la forme générale

$$\tilde{t} = \exp(\varepsilon u_i)t = t + (\omega^{-1}\theta - t)\left(1 - [1 + \varepsilon\omega(i-1)(\theta - \omega t)^{i-1}]^{\frac{1}{1-i}}\right) \,.$$

Des manipulations similaires donnent également $\bar{t} = \exp(\varepsilon v_i)t = t$ et

$$\bar{\theta} = \exp(\varepsilon v_i)\theta = \theta + (\theta - \omega t)\left([1 + \varepsilon(1-i)(\theta - \omega t)^{i-1}]^{\frac{1}{1-i}} - 1\right) \,.$$

La connaissance de la solution générale à l'équation différentielle ordinaire $\theta(t) = \omega t + \theta_0$ permet de vérifier que les groupes de Lie trouvés sont effectivement des groupes de symétrie :

$$\begin{aligned}
\tilde{\theta}(\,\tilde{t}\,) &= \exp(\varepsilon u_i)\theta(t) = \omega\tilde{t} + \theta_0(1 + \varepsilon\omega(i-1)\theta_0^{i-1})^{\frac{1}{1-i}} =: \omega t + \hat{\theta}_0 \\
\bar{\theta}(\,\bar{t}\,) &= \exp(\varepsilon v_i)\theta(t) = \omega\bar{t} + \theta_0\left(1 + \varepsilon(1-i)\theta_0^{i-1}\right)^{\frac{1}{1-i}} =: \omega t + \bar{\theta}_0 \,,
\end{aligned}$$

puisque l'action de chaque groupe retourne une autre solution de l'équation différentielle. Dans ce cas, seul le paramètre $\theta_0$ relié à la condition initiale est (et peut être) transformé par l'action de chaque groupe. ■

Dans le dernier exemple, la condition infinitésimale de symétrie (5.24) a été séparée en deux équations du transport, ce qui a simplifié la recherche de symétries. Ce genre de simplification peut toutefois restreindre trop radicalement les solutions aux conditions infinitésimales. La prochaine partie montrera un exemple de ce phénomène, dans le cas où la dynamique de l'oscillateur est non uniforme.

**Oscillateur non uniforme**

L'exemple suivant illustre différentes formes que peuvent prendre les équations déterminantes pour les EDO. En effet, il est souvent délicat de les extraire directement de la condition infinitésimale.

**Exemple 5.25.** Soit l'oscillateur non uniforme décrit par $\dot{\theta} = \omega - a\sin\theta$, où $\omega$ et $a$ sont des constantes réelles correspondant respectivement à la vitesse angulaire et au paramètre de non-uniformité de l'oscillateur. Cette équation, parfois appelée l'équation d'Adler, décrit entre autres l'évolution d'un pendule dans la limite suramortie [69, 567] et la dynamique de deux oscillateurs de Kuramoto sous un changement de variables [exemple D.8].

1. En considérant encore le générateur infinitésimal de symétries $v = \xi(t,\theta)\partial_t + \phi(t,\theta)\partial_\theta$, la condition infinitésimale de symétrie est

$$\phi_t + (\phi_\theta - \xi_t)(\omega - a\sin\theta) - \xi_\theta(\omega - a\sin\theta)^2 + a\phi\cos\theta = 0\,.$$

En utilisant l'identité trigonométrique $2\sin^2\theta = 1 - \cos(2\theta)$, la condition se réécrit telle que

$$\left[\phi_t + (\phi_\theta - \xi_t)\omega - \left(\frac{a^2}{2} + \omega^2\right)\xi_\theta\right] + a(2\omega\xi_\theta - \phi_\theta + \xi_t)\sin\theta + a\phi\cos\theta + \frac{a^2}{2}\xi_\theta\cos(2\theta) = 0\,, \tag{5.25}$$

ce qui met en évidence un polynôme trigonométrique.

2.1. Poser chaque coefficient du polynôme comme égal à 0 donne les équations déterminantes :

$$\phi_t + (\phi_\theta - \xi_t)\omega - \left(\frac{a^2}{2} + \omega^2\right)\xi_\theta = 0\,, \qquad a(2\omega\xi_\theta - \phi_\theta + \xi_t) = 0\,, \qquad a\phi = 0\,, \qquad \frac{a^2}{2}\xi_\theta = 0\,.$$

Cependant, extraire directement les équations déterminantes en posant comme nul les coefficients de la condition (5.25) mène à une conclusion trop restrictive.

3.1. En effet, cette approche élimine d'emblée la contribution de $\phi$ (car $a \neq 0$) dans le générateur infinitésimal et implique $\xi(t,\theta) = c \in \mathbb{R}$. Autrement dit, le seul générateur trouvé est $v = c\partial_t$, le générateur des translations temporelles, qui est toujours une symétrie pour une dynamique autonome. Ce résultat s'explique entre autres par le fait que les fonctions $\xi$ et $\phi$ peuvent dépendre de $\sin\theta$ et $\cos\theta$. Dans un tel cas, les coefficients du polynôme trigonométrique de la condition infinitésimale (5.25) changent selon cette dépendance. Revenons alors à la deuxième étape de la procédure.

2.2. Effectuons l'Ansatz

$$\xi(t,\theta) = c_{11}(t) + c_{12}(t)\sin\theta + c_{13}(t)\cos\theta$$
$$\phi(t,\theta) = c_{21}(t) + c_{22}(t)\sin\theta + c_{23}(t)\cos\theta$$

pour tenter d'extraire d'autres générateurs de symétrie. Les dérivées sont

$$\xi_t = \dot{c}_{11} + \dot{c}_{12}\sin\theta + \dot{c}_{13}\cos\theta \qquad \xi_\theta = c_{12}\cos\theta - c_{13}\sin\theta$$
$$\phi_t = \dot{c}_{21} + \dot{c}_{22}\sin\theta + \dot{c}_{23}\cos\theta \qquad \phi_\theta = c_{22}\cos\theta - c_{23}\sin\theta$$

et la condition infinitésimale de symétrie devient

$$\begin{aligned}0 = {} & \dot{c}_{21} + \dot{c}_{22}\sin\theta + \dot{c}_{23}\cos\theta + \omega c_{22}\cos\theta - \omega c_{23}\sin\theta - \omega\dot{c}_{11} - \omega\dot{c}_{12}\sin\theta - \omega\dot{c}_{13}\cos\theta \\ & - bc_{12}\cos\theta + bc_{13}\sin\theta + 2a\omega(c_{12}\cos\theta - c_{13}\sin\theta)\sin\theta - a(c_{22}\cos\theta - c_{23}\sin\theta)\sin\theta \\ & + a(\dot{c}_{11} + \dot{c}_{12}\sin\theta + \dot{c}_{13}\cos\theta)\sin\theta + a(c_{21} + c_{22}\sin\theta + c_{23}\cos\theta)\cos\theta \\ & + (a^2/2)(c_{12}\cos\theta - c_{13}\sin\theta)\cos(2\theta)\,,\end{aligned}$$

où $b = a^2/2 + \omega^2$. Le développement de chaque terme, l'utilisation d'identités trigonométriques [4] donne et le réarrangement des termes selon les sinus et les cosinus de différents ordres implique

$$\begin{aligned}0 = {} & (\dot{c}_{21} - \omega\dot{c}_{11} - a\omega c_{13} + a\dot{c}_{12}/2 + ac_{23}) + (\dot{c}_{22} - \omega c_{23} - \omega\dot{c}_{12} + bc_{13} + a\dot{c}_{11} + a^2c_{13}/4)\sin\theta \\ & + (\dot{c}_{23} + \omega c_{22} - \omega\dot{c}_{13} - bc_{12} + a^2c_{12}/4 + ac_{21})\cos\theta + (a\dot{c}_{13}/2 + a\omega c_{12})\sin(2\theta) \\ & + (a\omega c_{13} - a\dot{c}_{12}/2)\cos(2\theta) + (a^2/4)c_{12}\cos(3\theta) - (a^2/4)c_{13}\sin(3\theta)\,,\end{aligned}$$

Imposer que chaque coefficient soit nul donne les équations déterminantes

$$\begin{aligned} \dot{c}_{12} &= 2\omega c_{13} & 0 &= -\omega\dot{c}_{11} + a\dot{c}_{12}/2 + \dot{c}_{21} - a\omega c_{13} + ac_{23} \\ \dot{c}_{13} &= -2\omega c_{12} & 0 &= a\dot{c}_{11} - \omega\dot{c}_{12} + \dot{c}_{22} - \omega c_{23} + \left(b + a^2/4\right)c_{13} \\ c_{12} &= c_{13} = 0 & 0 &= -\omega\dot{c}_{13} + \dot{c}_{23} + \omega c_{22} + \left(a^2/4 - b\right)c_{12} + ac_{21}\,. \end{aligned}$$

Puisque $c_{12}(t) = c_{13}(t) = 0$, il en découle seulement trois équations :

$$\omega\dot{c}_{11} - \dot{c}_{21} = ac_{23}\,, \qquad a\dot{c}_{11} + \dot{c}_{22} = \omega c_{23}\,, \qquad \dot{c}_{23} = -ac_{21} - \omega c_{22}\,.$$

Pour simplifier la suite du calcul, considérons le cas particulier $\omega = 0$. De cette manière, il reste le système sous-déterminé

$$\dot{c}_{21} = -ac_{23}\,, \qquad a\dot{c}_{11} + \dot{c}_{22} = 0\,, \qquad \dot{c}_{23} = -ac_{21}\,.$$

3.2. Avec $c_{11}(t) = f(t)$ pour une certaine fonction analytique $f$, nous obtenons

$$c_{21}(t) = b_1\cosh(at) - b_2\sinh(at)\,, \quad c_{22}(t) = b_3 - af(t)\,, \quad c_{23}(t) = b_2\cosh(at) - b_1\sinh(at)\,,$$

où un facteur $a$ a été absorbé dans $b_3$.

4. Il s'ensuit que le générateur infinitésimal est

$$\begin{aligned} v &= f(t)\partial_t + [b_1\cosh(at) - b_2\sinh(at) + (b_3 - af(t))\sin\theta + (b_2\cosh(at) - b_1\sinh(at))\cos\theta]\partial_\theta \\ &= b_1v_1 + b_2v_2 + b_3v_3 + v_4 \end{aligned}$$

4. Plus précisément, $2\cos\theta\cos(2\theta) = \cos\theta + \cos(3\theta)$, $2\sin\theta\cos(2\theta) = \sin(3\theta) - \sin\theta$, $2\sin^2\theta = 1 - \cos(2\theta)$, $2\cos^2\theta = 1 + \cos(2\theta)$ et $2\sin\theta\cos\theta = \sin(2\theta)$.

où

$$v_1 = (\cosh(at) - \sinh(at)\cos\theta)\partial_\theta \qquad v_3 = \sin\theta\,\partial_\theta$$
$$v_2 = (\cosh(at)\cos\theta - \sinh(at))\partial_\theta \qquad v_4 = f(t)(\partial_t - a\sin\theta\partial_\theta)\,.$$

Remarquons que $-av_3$ est le générateur de Koopman $\mathcal{K}$ [définition 3.20] [5] et $v_4$ est la symétrie triviale. De plus, pour $f(t) = 1$, le générateur de translations temporelles est $\partial_t = av_3 + v_4$.

5. En laissant de côté le générateur trivial, les relations de commutation sont

$$[v_1, v_2] = -v_3\,, \qquad [v_1, v_3] = v_2\,, \qquad [v_2, v_3] = v_1\,, \tag{5.26}$$

de sorte que $v_1, v_2, v_3$ forment une algèbre de Lie de dimension 3. En posant $h = 2v_2$, $e = -v_1 - v_3$ et $f = v_1 - v_3$, les relations de commutation sont $[h, e] = 2e$, $[h, f] = -2f$, $[e, f] = h$ et l'algèbre de Lie engendrée par $v_1, v_2, v_3$ est donc isomorphe à $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$.

6. Pour calculer l'action explicite de $\exp(\varepsilon v_i)$, l'approche d'utiliser la série de l'exponentielle comme à l'exemple 5.24 est plus compliquée, mais il y a une autre approche pour calculer l'action [285, p.146]. Celle-ci sera d'ailleurs utile à la section 6.14.7.

En effet, l'action du groupe de symétrie associé à $v_3$ est donnée par la solution à l'équation de Lie [285, Theorem 7.1.5, p.138]

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\theta}}{\mathrm{d}\varepsilon} = \sin\tilde{\theta}\,.$$

La solution est simplement $\tilde{\theta}(\varepsilon) = 2\arctan(\tilde{c}e^{\varepsilon})$. Avec $\tilde{\theta}(0) = \theta = 2\arctan(\tilde{c})$ ou $\tilde{c} = \tan(\theta/2)$, le groupe agit tel que $\tilde{\theta}(\varepsilon) = e^{\varepsilon v_3}\theta = 2\arctan\left(\tan\left(\theta/2\right)e^{\varepsilon}\right)$. L'équation différentielle pour l'oscillateur non uniforme avec $\omega = 0$ est encore suffisamment simple pour y trouver la solution. En effet, la solution au système initial est $\theta(t) = 2\arctan(ce^{-at})$. Par conséquent, nous pouvons montrer que nous avons bel et bien un groupe de symétrie. Effectivement,

$$e^{\varepsilon v_3}\theta(t) = 2\arctan(ce^{\varepsilon}e^{-at})\,.$$

Puisque $v_3$ est, à une constante près, le générateur de Koopman, l'action de la symétrie est attendue : elle ne fait qu'une translation dans le temps ($e^{\varepsilon}e^{-at} = e^{-a(t-\varepsilon/a)}$) [6].

Plus généralement, les symétries continues de l'exemple changeront la constante d'intégration $c$ (directement reliée aux conditions initiales) par une nouvelle constante $c'(\varepsilon, c)$. La constante $c'(\varepsilon, c)$ peut être plus compliquée que la multiplication de $c$ par un facteur d'échelle comme pour $v_3$, où $c'(\varepsilon, c) = ce^{\varepsilon}$. En effet, pour $v_1$ par exemple, l'équation de Lie est

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\theta}}{\mathrm{d}\varepsilon} = \cosh(at) - \sinh(at)\cos\tilde{\theta}\,,$$

5. Rappelons que $\omega = 0$ de sorte que le champ vectoriel de la dynamique est seulement $-a\sin\theta$.

6. Il est intéressant de noter que $\psi(\theta) = \tan(\theta/2)$ est une fonction propre du générateur de Koopman $\mathcal{K} = -a\sin(\theta)\partial_\theta$ de valeur propre $-a$. Les points d'équilibre à $\theta_k = 2k\pi$ pour $k \in \mathbb{Z}$ sont des zéros de la fonction propre et les points d'équilibre à $\theta_\ell = (2\ell + 1)\pi$ pour $\ell \in \mathbb{Z}$ sont des singularités de $\psi$. De plus, $\psi(\theta(t)) = e^{-at}\psi(\theta(0))$.

où il est important de traiter $t$ comme une constante. Il en découle que la nouvelle solution générée par la symétrie est

$$e^{\varepsilon v_1}\theta(t) = 2\arctan(c'(\varepsilon, c)e^{-at})\,,$$

où $c'(\varepsilon, c) = \tan(\varepsilon/2 + \arctan(c))$. En utilisant l'identité trigonométrique $\tan(\alpha+\beta) = (\tan(\alpha)+\tan(\beta))/(1-\tan(\alpha)\tan(\beta))$, la constante $c'(\varepsilon, c)$ s'exprime comme une transformation de Möbius de $c$ :

$$c'(\varepsilon, c) = \frac{c + \tan(\varepsilon/2)}{1 - c\tan(\varepsilon/2)}\,,$$

ce qui est un effet attendu de l'algèbre de Lie associée $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{R})$. La démarche est similaire pour obtenir l'action du groupe associée à $v_2$, où

$$e^{\varepsilon v_2}\theta(t) = 2\arctan(c'(\varepsilon, c)e^{-at}) \quad \text{avec} \quad c'(\varepsilon, c) = \frac{c + \tanh(\varepsilon/2)}{1 + c\tanh(\varepsilon/2)}\,.$$

La figure 5.2 illustre l'action des groupes générés par $v_1$, $v_2$ et $v_3$ sur une solution de la dynamique d'oscillateur non uniforme. ■

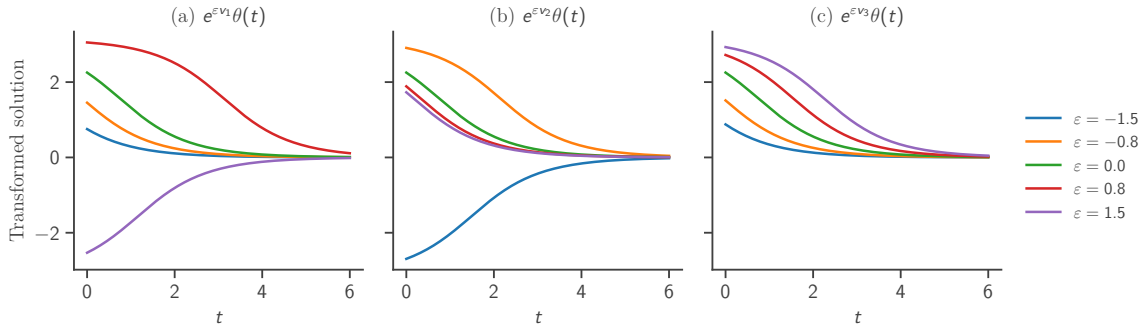



FIGURE 5.2 – Transformation d'une solution $\theta(t) = 2\arctan(ce^{-at})$ avec $a = 1$ et $c = 2.1$ (courbe verte, $\varepsilon = 0$) sous l'action des symétries (a) $e^{\varepsilon v_1}$, (b) $e^{\varepsilon v_2}$ et (c) $e^{\varepsilon v_3}$ pour différentes valeurs de $\varepsilon$.

Cet exemple souligne les limites d'une dérivation naïve des équations déterminantes et montre qu'il faut parfois faire des hypothèses sur les coefficients du générateur infinitésimal de symétrie pour trouver plus de symétries. Pour la suite, nous adopterons aussi cette approche dans le cas des dynamiques en $N > 1$ dimensions, mais avant d'en donner un exemple, les conditions infinitésimales pour ces dynamiques sont présentées.

### Symétries pour les dynamiques en $N$ dimensions

Pour un système de $N$ équations différentielles ordinaires couplées, la démarche pour obtenir les conditions infinitésimales de symétrie est essentiellement la même qu'en une dimension. Dans un tel cas, $p = 1$, $q = N$, $t \in \mathscr{T}$ et le système d'EDO est

$$\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t} = F_i(t, u_1, ..., u_N)\,, \quad i \in \{1, ..., N\}. \tag{5.27}$$

La $i$-ème fonction $\Delta_i$ sur l'espace 1-jet associée à la $i$-ième équation du système d'EDO est

$$\Delta_i(t,u,\dot{u}) = \dot{u}_i - F_i(t,u)\,, \tag{5.28}$$

où $u = (u_1, ..., u_N)$ et $\dot{u} = (\dot{u}_1, ..., \dot{u}_N)$. Considérant qu'il y a un groupe de symétrie $G$ associé aux équations, le générateur infinitésimal de $G$ prend la forme

$$v = \xi(t,u)\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N} \phi_j(t,u)\frac{\partial}{\partial u_j}$$

et sa première prolongation est

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v = v + \sum_{j=1}^{N} \phi_j^t(t,u,\dot{u})\frac{\partial}{\partial \dot{u}_j}\,.$$

L'équation (5.15) donne ensuite

$$\phi_j^t = D_t(\phi_j - \xi\dot{u}_j) + \xi\ddot{u}_j = \dot{\phi}_j + \sum_{k=1}^{N}(\partial_k\phi_j - \dot{\xi}\delta_{jk})F_k - \sum_{k=1}^{N}\partial_k\xi F_k F_j\,,$$

où $\partial_k = \partial/\partial u_k$ et nous utilisons aussi le point suscrit pour la dérivée partielle par rapport au temps. La condition infinitésimale pour que $G$ soit un groupe de symétrie est donc

$$\mathrm{pr}^{(1)}\, v[\Delta_i] = \xi\dot{\Delta}_i + \sum_{j=1}^{N}\phi_j\partial_j\Delta_i + \sum_{j=1}^{N}\phi_j^t\frac{\partial\Delta_i}{\partial\dot{u}_j} = 0\,,$$

pour $\Delta_i = 0$ et pour tout $i \in \{1, ..., N\}$. Quelques manipulations élémentaires mènent finalement à la condition infinitésimale

$$\dot{\phi}_i + \sum_{j=1}^{N}(\partial_j\phi_i - \dot{\xi}\delta_{ij})F_j - \sum_{j=1}^{N}\partial_j\xi F_j F_i = \xi\dot{F}_i + \sum_{j=1}^{N}\phi_j\partial_j F_i\,. \tag{5.29}$$

Dans ce cas, une symétrie est triviale si $\phi_i(t,u) = F_i(t,u)\xi(t,u)$ pour tout $i \in \{1, ..., N\}$.

L'exemple suivant, inspiré de la Réf. [75], illustre comment utiliser la condition infinitésimale (5.29) pour un système linéaire en deux dimensions.

**Exemple 5.26.** Soit le système linéaire $\dot{u} = Au$ tel que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}\,, \tag{5.30}$$

où la matrice $A$ est une matrice de rang 1. La solution s'obtient aisément par la diagonalisation de $A$, soit $ODO^\top$ où

$$O = (o_1\ o_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\,.$$

En effet, la solution a la forme $u(t) = Oe^{Dt}O^\top u(0)$, ce qui donne

$$u_1(t) = a_1 e^{2t} + a_2 \tag{5.31}$$
$$u_2(t) = a_1 e^{2t} - a_2\,, \tag{5.32}$$

où $a_1 = (u_1(0)+u_2(0))/2$ et $a_2 = (u_1(0)-u_2(0))/2$ sont des constantes dépendantes des conditions initiales. Notons que dans ce cas, en définissant les observables spectrales $f_1(u_1,u_2) = o_1^\top u = (u_1+u_2)/\sqrt{2}$ et $f_2(u_1,u_2) = o_2^\top u = (u_1-u_2)/\sqrt{2}$, le système d'équations devient découplé tel que $\dot{f}_1 = 2f_1$ et $\dot{f}_2 = 0$ [7].

Supposons que le système admette le générateur infinitésimal de symétrie

$$v = \xi(t,u)\partial_t + \phi_1(t,u)\partial_{u_1} + \phi_2(t,u)\partial_{u_2}\,.$$

1. Par l'équation (5.29), les conditions infinitésimales sont

$$\begin{aligned}
0 &= \dot{\phi}_1 - \phi_1 - \phi_2 + (\partial_1\phi_1 + \partial_2\phi_1 - \dot{\xi})(u_1+u_2) - (\partial_1\xi + \partial_2\xi)(u_1^2+u_2^2+2u_1u_2)\\
0 &= \dot{\phi}_2 - \phi_1 - \phi_2 + (\partial_1\phi_2 + \partial_2\phi_2 - \dot{\xi})(u_1+u_2) - (\partial_1\xi + \partial_2\xi)(u_1^2+u_2^2+2u_1u_2)\,.
\end{aligned}$$

2. En effectuant l'Ansatz linéaire [75]

$$\begin{aligned}
\xi(t,u) &= c_{11}(t) + c_{12}(t)u_1 + c_{13}(t)u_2\\
\phi_1(t,u) &= c_{21}(t) + c_{22}(t)u_1 + c_{23}(t)u_2\\
\phi_2(t,u) &= c_{31}(t) + c_{32}(t)u_1 + c_{33}(t)u_2\,,
\end{aligned}$$

les dérivées par rapport à $t$, $u_1$ et $u_2$ sont

$$\begin{aligned}
\dot{\xi} &= \dot{c}_{11} + \dot{c}_{12}u_1 + \dot{c}_{13}u_2 & \partial_1\xi &= c_{12} & \partial_2\xi &= c_{13}\\
\dot{\phi}_1 &= \dot{c}_{21} + \dot{c}_{22}u_1 + \dot{c}_{23}u_2 & \partial_1\phi_1 &= c_{22} & \partial_2\phi_1 &= c_{23}\\
\dot{\phi}_2 &= \dot{c}_{31} + \dot{c}_{32}u_1 + \dot{c}_{33}u_2 & \partial_1\phi_2 &= c_{32} & \partial_2\phi_2 &= c_{33}\,.
\end{aligned}$$

La substitution de l'Ansatz dans la condition infinitésimale et le regroupement des monômes donne

$$\begin{aligned}
0 &= \dot{c}_{21} - c_{21} - c_{31} + (\dot{c}_{22} - \dot{c}_{11} + c_{23} - c_{32})u_1 + (\dot{c}_{23} - \dot{c}_{11} + c_{22} - c_{33})u_2\\
&\quad - (c_{12}+c_{13}+\dot{c}_{12})u_1^2 - (c_{12}+c_{13}+\dot{c}_{13})u_2^2 - (\dot{c}_{12}+\dot{c}_{13}+2c_{12}+2c_{13})u_1u_2\\
0 &= \dot{c}_{31} - c_{21} - c_{31} + (\dot{c}_{32} - \dot{c}_{11} - c_{22} + c_{33})u_1 + (\dot{c}_{33} - \dot{c}_{11} - c_{23} + c_{32})u_2\\
&\quad - (c_{12}+c_{13}+\dot{c}_{12})u_1^2 - (c_{12}+c_{13}+\dot{c}_{13})u_2^2 - (\dot{c}_{12}+\dot{c}_{13}+2c_{12}+2c_{13})u_1u_2\,.
\end{aligned}$$

7. Autrement dit, l'observable $f_1$ est donc une fonction propre du générateur de Koopman de valeur propre 2 et l'observable spectrale $f_2$ est une quantité conservée (valeur propre 0). Sans surprise, le générateur de Koopman possède le même spectre discret que celui de $A$ [126, Sec. 1.6.1].

En imposant l'annulation de chaque coefficient, nous obtenons un cas particulier d'équations différentielles-algébriques [329] de la forme $A\dot{c} = Bc$ [75]. Dans cet exemple, ces équations se divisent en trois sous-systèmes indépendants, séparés dans les trois colonnes suivantes :

$$\begin{array}{lll} & & \dot{c}_{22} - \dot{c}_{11} = c_{32} - c_{23} \\ \dot{c}_{21} = c_{21} + c_{31} & \dot{c}_{12} = -c_{12} - c_{13} & \dot{c}_{23} - \dot{c}_{11} = c_{33} - c_{22} \\ \dot{c}_{31} = c_{21} + c_{31} & \dot{c}_{13} = -c_{12} - c_{13} & \dot{c}_{32} - \dot{c}_{11} = c_{22} - c_{33} \\ & & \dot{c}_{33} - \dot{c}_{11} = c_{23} - c_{32}\,. \end{array}$$

3. Les deux premiers sous-systèmes sont identiques (ou à un signe près) au système d'équations différentielles initial. Cela illustre donc une autre limitation au calcul des symétries dans les EDO de premier ordre, c'est-à-dire qu'il faut parfois résoudre les équations initiales pour trouver des générateurs de symétrie. Les solutions des EDO de l'exemple sont connues et les solutions aux équations déterminantes ayant une forme similaire sont donc

$$\begin{aligned} c_{12}(t) &= b_1 e^{-2t} + b_2 & c_{21}(t) &= b_3 e^{2t} + b_4 \\ c_{13}(t) &= b_1 e^{-2t} - b_2 & c_{31}(t) &= b_3 e^{2t} - b_4\,. \end{aligned}$$

Le troisième système d'équations est sous-déterminé. En posant $c_{11}(t) = f(t)$ où $f$ est une fonction analytique arbitraire, il s'ensuit que

$$\begin{aligned} c_{22}(t) &= b_5 + b_7 e^{2t} + b_8 e^{-2t} + f(t) & c_{32}(t) &= b_6 + b_7 e^{2t} - b_8 e^{-2t} + f(t) \\ c_{23}(t) &= b_6 - b_7 e^{2t} + b_8 e^{-2t} + f(t) & c_{33}(t) &= b_5 - b_7 e^{2t} - b_8 e^{-2t} + f(t) \end{aligned}$$

4. En substituant les coefficients dans l'équation du générateur, celui-ci devient

$$\begin{aligned} v = {} & f(t)\partial_t + (b_1 e^{-2t} + b_2)u_1\partial_t + (b_1 e^{-2t} - b_2)u_2\partial_t \\ & + (b_3 e^{2t} + b_4)\partial_1 + (b_5 + b_7 e^{2t} + b_8 e^{-2t} + f(t))u_1\partial_1 + (b_6 - b_7 e^{2t} + b_8 e^{-2t} + f(t))u_2\partial_1 \\ & + (b_3 e^{2t} - b_4)\partial_2 + (b_6 + b_7 e^{2t} - b_8 e^{-2t} + f(t))u_1\partial_2 + (b_5 - b_7 e^{2t} - b_8 e^{-2t} + f(t))u_2\partial_2 \\ = {} & f(t)(\partial_t + (u_1 + u_2)\partial_1 + (u_1 + u_2)\partial_2) + b_1 e^{-2t}(u_1 + u_2)\partial_t + b_2(u_1 - u_2)\partial_t + b_3 e^{2t}(\partial_1 + \partial_2) \\ & + b_4(\partial_1 - \partial_2) + b_5(u_1\partial_1 + u_2\partial_2) + b_6(u_2\partial_1 + u_1\partial_2) \\ & + b_7 e^{2t}(u_1 - u_2)(\partial_1 + \partial_2) + b_8 e^{-2t}(u_1 + u_2)(\partial_1 - \partial_2)\,. \end{aligned}$$

Par conséquent, la base du générateur est constituée des opérateurs

$$\begin{aligned} v_1 &= e^{-2t}(u_1 + u_2)\partial_t & v_6 &= u_2\partial_1 + u_1\partial_2 \\ v_2 &= (u_1 - u_2)\partial_t & v_7 &= e^{2t}(u_1 - u_2)(\partial_1 + \partial_2) \\ v_3 &= e^{2t}(\partial_1 + \partial_2) & v_8 &= e^{-2t}(u_1 + u_2)(\partial_1 - \partial_2) \\ v_4 &= \partial_1 - \partial_2 & v_9 &= f(t)(\partial_t + (u_1 + u_2)\partial_1 + (u_1 + u_2)\partial_2)\,. \\ v_5 &= u_1\partial_1 + u_2\partial_2 \end{aligned}$$

Notons que $v_9$ est la symétrie triviale reliée aux translations temporelles tel que $\partial_t = v_9 - v_5 - v_6$ avec $f(t) = 1$ et $v_5 + v_6$ est le générateur de Koopman.

5. Les relations de commutation de $v_0 := -2\partial_t, v_2, v_4, v_5, v_6$ sont données dans le Tableau 5.1 et définissent une algèbre de Lie de dimension 5. En particulier, $v_0$, $v_2$, $v_4$ forment une sous-algèbre isomorphe à l'algèbre de Heisenberg $\mathfrak{h}_3$. De plus, les générateurs $v_5$ et $v_6$ forment une sous-algèbre abélienne.

| $[v_i, v_j]$ | $v_0$ | $v_2$ | $v_4$ | $v_5$ | $v_6$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $v_0$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $v_2$ | 0 | 0 | $v_0$ | $-v_2$ | $v_2$ |
| $v_4$ | 0 | $-v_0$ | 0 | $v_4$ | $-v_4$ |
| $v_5$ | 0 | $v_2$ | $-v_4$ | 0 | 0 |
| $v_6$ | 0 | $-v_2$ | $v_4$ | 0 | 0 |

Tableau 5.1 – Relations de commutation de la sous-algèbre reliées aux symétries d'un système linéaire.

Soulignons que le générateur $v_4$ permet de déduire le changement de coordonnées de $u_1, u_2$ vers $f_1(u_1, u_2)$, $f_2(u_1, u_2)$ introduit par inspection au début de l'exemple, ce qui est une des applications des générateurs de symétries [section D.4].

De plus, rappelons que les générateurs infinitésimaux trouvés ne forment pas une algèbre de Lie comportant toutes les symétries. En effet, le commutateur $[v_1, v_2] = 2e^{-2t}(u_1^2 - u_2^2)\partial_t$, par exemple, ne s'exprime pas comme une combinaison linéaire de $v_1, ..., v_8$. Toutefois, ce dernier commutateur génère également un groupe de symétrie agissant comme

$$e^{\varepsilon[v_1,v_2]}t = t + \frac{1}{2}\ln(1 + 4\varepsilon e^{-2t}(u_1^2 - u_2^2))\,, \qquad e^{\varepsilon[v_1,v_2]}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a_1}{1+16\varepsilon a_1 a_2}e^{2t} + a_2 \\ \frac{a_1}{1+16\varepsilon a_1 a_2}e^{2t} - a_2 \end{pmatrix}.$$

Les commutateurs impliquant les générateurs de symétries donnent donc de nouveaux générateurs (les générateurs de symétries des EDO de premier ordre forment souvent une algèbre de Lie de dimension infinie [283, p.131]). Calculons maintenant l'action des groupes associés aux générateurs $v_1$, ..., $v_9$.

6. L'action de chaque groupe de symétries associé aux 8 générateurs non triviaux est

$$e^{\varepsilon v_1}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t + \frac{1}{2}\ln(1 + 2\varepsilon(u_1 + u_2)e^{-2t}) \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_5}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ e^{\varepsilon}u_1 \\ e^{\varepsilon}u_2 \end{pmatrix}$$

$$e^{\varepsilon v_2}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t + \varepsilon(u_1 - u_2) \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_6}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ \cosh(\varepsilon)u_1 + \sinh(\varepsilon)u_2 \\ \sinh(\varepsilon)u_1 + \cosh(\varepsilon)u_2 \end{pmatrix}$$

$$e^{\varepsilon v_3}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ u_1 + \varepsilon e^{2t} \\ u_2 + \varepsilon e^{2t} \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_7}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ (1 + \varepsilon e^{2t})u_1 - \varepsilon e^{2t}u_2 \\ \varepsilon e^{2t}u_1 + (1 - \varepsilon e^{2t})u_2 \end{pmatrix}$$

$$e^{\varepsilon v_4}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ u_1 + \varepsilon \\ u_2 - \varepsilon \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_8}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ (1 + \varepsilon e^{-2t})u_1 + \varepsilon e^{-2t}u_2 \\ -\varepsilon e^{-2t}u_1 + (1 - \varepsilon e^{-2t})u_2 \end{pmatrix},$$

où des translations, des changements d'échelle et des combinaisons spéciales des deux qui dépendent du temps sont observés. Pour le générateur trivial avec $f(t) = 1$, l'action du groupe est

$$e^{\varepsilon v_9}\begin{pmatrix} t \\ u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t+\varepsilon \\ \frac{u_1+u_2}{2}e^{2\varepsilon} + \frac{u_1-u_2}{2} \\ \frac{u_1+u_2}{2}e^{2\varepsilon} - \frac{u_1-u_2}{2} \end{pmatrix}.$$

La solution du système linéaire étant connue [Éq. (5.31)], il est possible de vérifier que les groupes trouvés sont des groupes de symétries :

$$e^{\varepsilon v_1}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1e^{2t}/(1+4\varepsilon a_1) + a_2 \\ a_1e^{2t}/(1+4\varepsilon a_1) - a_2 \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_5}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\varepsilon}a_1e^{2t} + e^{\varepsilon}a_2 \\ e^{\varepsilon}a_1e^{2t} - e^{\varepsilon}a_2 \end{pmatrix}$$

$$e^{\varepsilon v_2}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1e^{-4\varepsilon a_2}e^{2t} + a_2 \\ a_1e^{-4\varepsilon a_2}e^{2t} - a_2 \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_6}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\varepsilon}a_1e^{2t} + e^{-\varepsilon}a_2 \\ e^{\varepsilon}a_1e^{2t} - e^{-\varepsilon}a_2 \end{pmatrix}$$

$$e^{\varepsilon v_3}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (a_1+\varepsilon)e^{2t} + a_2 \\ (a_1+\varepsilon)e^{2t} - a_2 \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_7}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (a_1+2\varepsilon a_2)e^{2t} + a_2 \\ (a_1+2\varepsilon a_2)e^{2t} - a_2 \end{pmatrix}$$

$$e^{\varepsilon v_4}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1e^{2t} + a_2 + \varepsilon \\ a_1e^{2t} - (a_2+\varepsilon) \end{pmatrix} \qquad e^{\varepsilon v_8}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1e^{2t} + a_2 + 2\varepsilon a_1 \\ a_1e^{2t} - (a_2+2\varepsilon a_1) \end{pmatrix}.$$

Pour ce qui est du générateur trivial avec $f(t) = 1$, il génère une translation dans le temps le long de la solution comme attendu :

$$e^{\varepsilon v_9}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1e^{2(t+\varepsilon)} + a_2 \\ a_1e^{2(t+\varepsilon)} - a_2 \end{pmatrix}.$$

■

Au prochain chapitre, la condition infinitésimale de symétrie (5.29) sera généralisée et réexprimée de manière plus élégante en termes du générateur de Koopman [section 6.14.1], ce qui est l'un des résultats originaux de la thèse. Nous utiliserons ensuite cette condition pour trouver des symétries dans le modèle de Kuramoto [section 6.14] et ultimement, de nouvelles quantités conservées.

# Chapitre 6

# Quantités conservées, symétries et motifs d'oscillateurs de Kuramoto

**Kuramoto meets Koopman : Constants of motion, symmetries, and network motifs**

Vincent Thibeault[1,2], Benjamin Claveau[1,2], Antoine Allard,[1,2] et Patrick Desrosiers[1,2,3]

[1] Département de physique, de génie physique et d'optique,
Université Laval, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

[2] Centre interdisciplinaire en modélisation mathématique,
Université Laval, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

[3] Centre de recherche CERVO, Québec (Québec), Canada G1J 2G3

Sous révision dans *Science Advances*

Référence arXiv : 2504.06248

## 6.1 Avant-propos

De nouvelles constantes du mouvement sont obtenues pour le modèle de Kuramoto, un modèle paradigmatique d'oscillateurs couplés qui ont la capacité de se synchroniser [exemple 4.41]. Pour y parvenir, nous tirons profit de la théorie de Koopman [section 3.2] qui, de façon analogue à la mécanique quantique, se base sur les propriétés spectrales des opérateurs différentiels et sur la théorie de Lie [chapitre 5].

Les résultats se déploient en quatre théorèmes qui montrent comment la présence de constantes du mouvement dans la dynamique est intrinsèquement reliée à la structure des interactions entre les oscillateurs. En effet, les conditions des théorèmes révèlent des motifs qui admettent des quantités conservées et qui se retrouvent en proportion surprenante dans les réseaux complexes empiriques. Les théorèmes permettent aussi d'analyser des scénarios non triviaux de synchronisation entre des oscillateurs, notamment lorsque certains tendent à être en phase et d'autres en anti-phase.

Ce chapitre s'aligne donc avec les objectifs de la thèse et répond aux interrogations qui persistaient dans mon mémoire [580], plus particulièrement ceux qui concernent l'intégrabilité partielle des dynamiques de phase sur les réseaux hétérogènes. Les résultats du chapitre et de celui qui suit confirment que l'intégrabilité partielle de ces dynamiques est effectivement possible lorsque des motifs particuliers, mais variés, sont présents dans le réseau.

## 6.2 Résumé

Les quantités conservées dans les dynamiques de phase sont bien établies pour des oscillateurs couplés de manière identique, ou pour des groupes de tels oscillateurs. Toutefois, les conditions structurelles explicites sous lesquelles des réseaux plus complexes admettent des constantes du mouvement restent difficiles à identifier. À l'aide de la théorie de Koopman, nous obtenons des conditions générales garantissant l'existence de quantités conservées distinctes dans le modèle de Kuramoto sur des graphes pondérés, orientés et signés avec déphasages hétérogènes. À cette fin, nous déterminons des fonctions propres de Koopman et des symétries de Lie continues qui engendrent différentes familles de constantes du mouvement. Les conditions obtenues mettent en évidence de vastes classes de motifs de réseau admettant des quantités conservées, dont nous détectons la présence dans des centaines de réseaux complexes empiriques. Ces résultats révèlent ainsi des structures susceptibles de préserver les fonctions des phases au cours du temps et motivent de nouvelles recherches sur les propriétés spectrales de Koopman pour les dynamiques sur des réseaux complexes.

## 6.3 Abstract

Conserved quantities in phase-oscillator dynamics are well established for identically coupled oscillators, or groups thereof, but the explicit connectivity conditions under which more complex networks admit constants of motion remain difficult to identify. Using Koopman theory, we derive general conditions for the existence of distinct conserved quantities in the Kuramoto model with heterogeneous phase lags on any weighted, directed, and signed graph. To this end, we find Koopman eigenfunctions and continuous Lie symmetries that generate different families of constants of motion. The derived conditions reveal a broad class of network motifs that support conserved quantities and we detect these motifs in hundreds of complex empirical networks. The results thus point to connectivity patterns that can preserve phase relationships over time and motivate further investigations of Koopman spectral properties for dynamics on complex networks.

## 6.4 Introduction

The Kuramoto model is a paradigmatic model of oscillators exhibiting synchronization [5,332, 502]. In its general form [515], the model describes the evolution of each oscillator's phase by the system of differential equations

$$\frac{\mathrm{d}\theta_j}{\mathrm{d}t} = \omega_j + \sum_{k=1}^{N} W_{jk} \sin(\theta_k - \theta_j - \alpha_{jk}) \,, \tag{6.1}$$

where $j \in \mathcal{V} := \{1, ..., N\}$, $\theta_j(t) \in \mathbb{R}$ is the phase of oscillator $j$ at time $t \in \mathbb{R}$, $\omega_j \in \mathbb{R}$ is the natural frequency of oscillator $j$, $W_{jk} \in \mathbb{R}$ is the $(j,k)$ element of the weight matrix $W$, encoding the strength of the interaction from oscillator $k$ to oscillator $j$, and $-\pi/2 < \alpha_{jk} \leq \pi/2$ is the $(j,k)$ element of the phase-lag matrix $\alpha$. Without loss of generality, we set $W_{jj} = 0$, $\alpha_{jj} = 0$ for all $j$.

The model has a rich dynamics, giving rise to chaos [64, 166, 301], chimeras [3, 4, 193, 320, 333], explosive synchronization [239, 326, 328, 463], and it has been used, for example, to describe Josephson junctions [619,620,628], nanoelectromechanical oscillators [390], associative memory [29, 446] in artificial intelligence, and even BOLD signal dynamics from the human cerebral cortex [481]. Over the years, it has become a central model for studying complex systems, whose high-dimensional nonlinear dynamics and intricate interactions give rise to emergent collective phenomena. [322, 339, 412].

In this paper, we show that the Kuramoto model finds a natural and insightful formulation within Koopman theory [88, 91, 102, 317, 318]. Introduced in 1931 by Bernard Koopman [317] and further developed with John von Neumann [318, 612], Koopman theory was originally motivated by the formal analogy between classical and quantum mechanics: it sought to

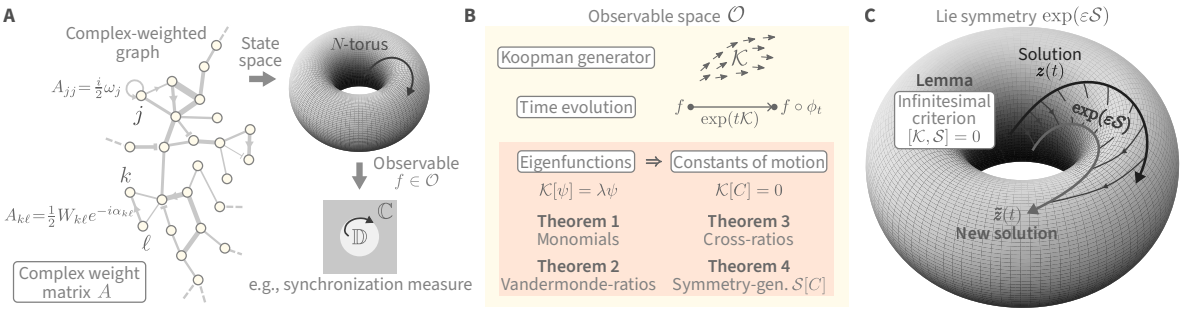



Figure 6.1 – **The Kuramoto model, its constants of motion, and its Lie symmetries under Koopman's perspective.** (**A**) The complex weight matrix $A$ in Eq. (6.3) encodes all the parameters of any network of Kuramoto oscillators, whose evolution is described by $\boldsymbol{z} = (z_1, ..., z_N)$ on the $N$-torus. Observables $f$ for the model are complex-valued functions on the $N$-torus. For instance, the observable $(1/N)\sum_{j=1}^{N} z_j$ lies in the closed unit disk $\mathbb{D}$ and its modulus, the Kuramoto order parameter [531], measures synchronization. (**B**) The observables belong to a function space $\mathcal{O}$. The Koopman generator $\mathcal{K}$ is the total derivative $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ that generates the time evolution of the observables through the Koopman operator $\exp(t\mathcal{K})$, which composes the observables with the flow $\phi_t$ of the dynamics. An eigenfunction $\psi$ of $\mathcal{K}$ (e.g., monomials in Thm. 6.1) gives key information about the dynamics (e.g., isostables [395] as level sets of $|\psi|$). Notably, an eigenfunction with eigenvalue 0 is a constant of motion $C$ (e.g., cross-ratios in Thm. 6.3). The existence of an eigenfunction $\psi$ with eigenvalue $\lambda$ directly provides a constant of motion $C = \psi e^{-\lambda t}$. (**C**) A Lie symmetry transforms a solution of the Kuramoto model to a new solution. A transformation is a symmetry provided that an infinitesimal criterion is satisfied: a symmetry generator $\mathcal{S}$ commutes with the Koopman generator $\mathcal{K}$, under specific conditions. Indeed, the general form of the criterion is slightly more subtle and is provided in Eq. (6.12).

recast classical nonlinear dynamics in terms of linear operators by focusing on the evolution of observables rather than states [294].

In recent decades, Koopman theory has been primarily advanced through foundational mathematical works [394, 395, 406–408] and through data-driven or algorithmic studies—such as dynamic mode decomposition and its various extensions [129, 314, 439, 505, 517, 528, 529]. It now stands as a unifying language at the intersection of dynamical systems, spectral theory, integrable systems, differential geometry, ergodic theory, and functional analysis. Yet, the extent to which this framework can yield analytical and conceptual insights into high-dimensional dynamics on complex networks remains an open question.

Motivated by this question, we leverage the operator-theoretic advantages of Koopman theory and argue for its conceptual relevance in understanding complex systems. Indeed, the Koopman operator is the time-evolution operator for functions of the system's state—the observables—including those describing emergent collective phenomena. Therefore, the goal of finding informative observables and their time evolution in complex systems is inherently aligned with the Koopmanian way of describing dynamical systems [Fig. 6.1].

Under Koopman's perspective, the finite-dimensional nonlinear system describing the model is traded for a *linear* differential operator, the generator of the Koopman operator, or simply the Koopman generator. This linearity enables the spectral analysis of the operator, notably

through the search for Koopman eigenfunctions and eigenvalues. While the representation of the generator under some basis of observables is typically infinite-dimensional, this will not be a problem in our approach. For the Kuramoto model in Eq. (6.1) under the change of coordinates $z_j = e^{i\theta_j}$ for all $j$ and $\theta_j \in \mathbb{R}$, it is straightforward to show that the Koopman generator is [Sec. 6.10]

$$\mathcal{K} = \sum_{j,k\in\mathcal{V}} \left(A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2\right) \partial_j \,, \tag{6.2}$$

where $\partial_j$ is the partial derivative with respect to $z_j$ and

$$A = \frac{1}{2}\left(W \circ e^{-i\alpha} + i\,\mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega})\right) \,, \tag{6.3}$$

with $e^{-i\alpha} = (e^{-i\alpha_{jk}})_{j,k\in\mathcal{V}}$, $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1 \ \cdots \ \omega_N)^\top$, and the Hadamard product $\circ$. The complex weight matrix $A$ encapsulates every parameter of the dynamics and describes a directed, signed and complex-weighted graph [76], where the off-diagonal weights are complex due to the non-zero phase lags [Fig. 6.1A]. The Koopman generator (6.2) will serve as our starting point for extracting constants of motion, whose connection to network motifs will be emphasized throughout the paper.

Nearly 20 years after the publication of Kuramoto's paper, constants of motion for identical phase oscillators were brought to light in the seminal works of Watanabe and Strogatz [619, 620]. Since then, by shifting the focus away from identical oscillators, there has been a surge of studies on complex networks of phase oscillators and their synchronization, as heterogeneous connections are a key feature of complex systems and substantially influence synchronization patterns [27, 140, 152, 198, 220, 238, 502].

This raises the question: under what network conditions is it still possible to find constants of motion for phase oscillators? Pikovsky and Rosenblum [477] recognized that Watanabe-Strogatz (WS) theory is applicable to networks with $m$ all-to-all coupled communities, leading to $N - 3m$ constants of motion [275, 477]. Another step towards heterogeneity was to analyze the Kuramoto dynamics on star graphs [113, 239, 306, 328, 583]—prevalent motifs of complex networks. WS theory can be applied to these systems, because periphery vertices are identically connected to the core [114, 604, 605, 607, 645, 646].

Yet, complex networks feature diverse motifs with potentially important stability and synchronizability properties [7, 22, 145, 359, 409, 417, 526]. Such motifs have been extensively studied for diverse dynamics on networks together with their link to network symmetries, equivariance, pseudosymmetries, and fibrations [34, 188, 235–238, 382, 419, 420, 443]. Despite this progress, how network motifs support Koopman eigenfunctions and conserved quantities in complex oscillator networks remains, to our knowledge, an open question. We address this problem in the general Kuramoto model on networks (6.1), using it as a concrete and analytically tractable setting for Koopman theory.

Table 6.1 – **Eigenfunctions and constants of motion of the Koopman generator in Eq. (6.2) for the Kuramoto model (6.1).** The table lists the phase-shifted families of eigenfunctions with the shifts given by $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, ..., \alpha_N) \in \mathbb{R}^N$ [Sec. 6.6]. Products of these eigenfunctions with themselves and with other Koopman eigenfunctions yield different forms of eigenfunctions. In particular, monomial and Vandermonde-ratio eigenfunctions allows to generate different constants of motion. The vector $\boldsymbol{\mu}$ is in $\mathbb{R}^N$ and contains the exponents of the monomial eigenfunction. For the Vandermonde-ratio eigenfunction, the vertex subsets $I, J \subset \mathcal{V}$ are disjoint, $\sigma_{pq}, \tau_{rs}$ for all $p, q \in I$, $r, s \in J$ are real constants, $\Omega_I, \Omega_J \in \mathbb{R}$ are natural frequencies for the oscillators in $I$ and $J$ respectively, $\Sigma_I, \Sigma_J \in \mathbb{R}$ are rescaled in-strengths in $J$ and $I$ respectively, and $\beta_{jk} = \alpha_j - \alpha_k \in \mathbb{R}$. The constants $\beta := \alpha_a - \alpha_b, \gamma := \alpha_a - \alpha_c, \delta := \alpha_a - \alpha_d$ are also real numbers that parametrize the cross-ratio family. For the family of Watanabe-Strogatz (WS) integrals, the constants are $\beta_u := \alpha_{j_{u+1}} - \alpha_{j_u}$ for all $u$ with $j_{\ell+1} = j_1$ and they satisfy $\beta_1 + ... + \beta_\ell = 0$. The operator $\mathcal{S}_\eta$ is the continuous symmetry generator in Eq. (6.16) and $c_{abcd}$ is the parametrized cross-ratio presented in the table. Note that we have defined $S^\phi_{jk} = \sin\left((\theta_j - \theta_k + \phi)/2\right)$ to simplify the expressions.

| Eigenfunction family | Form in $z_1, ..., z_N$ | Form in $\theta_1, ..., \theta_N$ | Eigenvalue |
|---|---|---|---|
| Monomial $z^{\boldsymbol{\mu}}$ | $\prod_{j=1}^{N} z_j^{\mu_j}$ | $\exp\left(i\sum_{j=1}^{N}\mu_j\theta_j\right)$ | $i\boldsymbol{\mu}^\top\boldsymbol{\omega}$ |
| Vandermonde-ratio $V_{IJ}$ | $\frac{\prod_{p<q\in I}(\bar{z}_p - e^{-i\beta_{pq}}\bar{z}_q)^{\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s\in J}(z_r - e^{i\beta_{rs}}z_s)^{\tau_{rs}}}$ | $\frac{\prod_{p<q\in I}\left(e^{-i(\theta_p+\theta_q)/2}\,S^{\beta_{pq}}_{pq}\right)^{\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s\in J}\left(e^{i(\theta_r+\theta_s)/2}\,S^{\beta_{rs}}_{rs}\right)^{\tau_{rs}}}$ | $-i\left(\Sigma_I\Omega_I + \Sigma_J\Omega_J\right)$ |
| Cross-ratio $c_{abcd}$ | $\frac{(e^{i\gamma}z_c - z_a)(e^{i\delta}z_d - e^{i\beta}z_b)}{(e^{i\gamma}z_c - e^{i\beta}z_b)(e^{i\delta}z_d - z_a)}$ | $\frac{S^{\gamma}_{ca}S^{\delta-\beta}_{db}}{S^{\gamma-\beta}_{cb}S^{\delta}_{da}}$ | 0 |
| *Watanabe-Strogatz $C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}$ | $\prod_{u=1}^{\ell}\left(1 - e^{i\beta_u}\frac{z_{j_u}}{z_{j_{u+1}}}\right)$ | $\prod_{u=1}^{\ell} S^{\beta_u}_{j_u j_{u+1}}$ | $0^*$ |
| Peripheral | $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}(\boldsymbol{z})]$ | $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}(\boldsymbol{\theta})]$ | 0 |

*Under the conditions for conserving $c_{abcd}$, the $C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}$'s are instead Darboux functions sharing a common cofactor [Sec. 6.13.7].

In Sec. 6.5, we find general conditions for the existence of monomial eigenfunctions and what we call Vandermonde-ratio eigenfunctions. Combining these eigenfunctions yields families of constants of motion associated with different network motifs. We then reframe WS theory through Koopman theory and derive necessary and sufficient conditions that highlight the network-theoretic mechanisms behind the conserved quantities. In Sec. 6.6, we generate families of conserved quantities from continuous Lie symmetries applied to Vandermonde-ratio eigenfunctions, cross-ratios, and WS integrals. The results of the first two sections are summarized in Table 6.1 and their associated network motifs are illustrated in Fig. 6.2. Finally, Sec. 6.7 provides concrete examples and applications of these results. Notably, we detect motifs admitting conserved quantities in a dataset of 652 empirical networks including social networks, power grids, and connectomes.

## 6.5 Constants of motion and network motifs

To begin with, a nonconstant scalar function $C$ of time and $\boldsymbol{z} := (z_1, ..., z_N)$ is a constant of motion (first integral [242]) of the dynamics with Koopman generator $\mathcal{K}$ if and only if $(\partial_t + \mathcal{K})[C(t, \boldsymbol{z})] = 0$, where $\partial_t$ is the partial derivative with respect to time. If $\partial_t C = 0$ and

$\mathcal{K}[C] = 0$, the constant of motion $C$ is an eigenfunction of the Koopman generator with null eigenvalue [Fig. 6.1B]. One way to obtain constants of motion is to look for an eigenfunction $\psi(\boldsymbol{z})$ of the Koopman generator with eigenvalue $\lambda \in \mathbb{C}$, as it implies that $C(t, \boldsymbol{z}) = \psi(\boldsymbol{z})e^{-\lambda t}$ is conserved. A Koopman eigenfunction is also known as a time-dependent first integral or a second integral [243].

If $\psi_1, ..., \psi_m$ are eigenfunctions of $\mathcal{K}$ with eigenvalues $\lambda_1, ..., \lambda_m$ and $a_1, ..., a_m \in \mathbb{C}$, then the product $\psi_1^{a_1} ... \psi_m^{a_m}$ is also an eigenfunction with eigenvalue $\sum_{j=1}^m a_j \lambda_j$. Therefore, if $\boldsymbol{a} = (a_1, ..., a_m)$ is chosen to be orthogonal to $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, ..., \lambda_m)$, $\sum_{j=1}^m a_j \lambda_j = 0$ and $\psi_1^{a_1} ... \psi_m^{a_m}$ is conserved [91, 317]. While this way of finding constants of motion long predates Koopman theory, going back at least to Darboux [137, 243, 655], the Koopman formalism offers a concise and insightful way of framing the problem in spectral terms. Moreover, the eigenvalues $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ also provide insights into the synchronization properties of the dynamics, since global frequency synchronization requires the imaginary parts of the corresponding eigenvalues to be rationally related [407]. Koopman eigenfunctions are thus valuable for uncovering both conserved quantities and synchronization constraints in oscillator networks, and we now turn to identifying explicit eigenfunctions of $\mathcal{K}$.

### Monomial eigenfunctions

Since the vector field is polynomial for the Kuramoto model described in $\boldsymbol{z}$, we begin by searching for monomial eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}} := z_1^{\mu_1} ... z_N^{\mu_N}$. In terms of the phases, a monomial eigenfunction corresponds to a complex-valued eigenfunction $\exp(i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\theta})$, where $\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\theta}$ is a real-valued linear observable with linear time evolution. The next theorem establishes necessary and sufficient conditions for the existence of these eigenfunctions, which are determined by the presence of specific network motifs [proof outline in Materials and Methods].

**Theorem 6.1** (Monomial eigenfunction)**.** *Let $\mathcal{W} \subset \mathcal{V}$ be a non-empty subset of vertices such that $|\alpha_{jk}| < \pi/2$ for all $j, k \in \mathcal{W}$. Let $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1 \ \cdots \ \mu_N)^\top \in \mathbb{R}^N$ satisfy $\mu_j \neq 0$ if and only if $j \in \mathcal{W}$. There exists a $\boldsymbol{\mu}$ such that $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is an eigenfunction of $\mathcal{K}$ in Eq. (6.2) if and only if :*

*1.1. $W_{jk} = 0$ for all $j \in \mathcal{W}$ and $k \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{W}$ ;*

*1.2. $W_{jk} \neq 0$ whenever $W_{kj} \neq 0$ for all $j, k \in \mathcal{W}$ ;*

*1.3. $W_{i_1 i_2} ... W_{i_{\eta-1} i_\eta} W_{i_\eta i_1} = W_{i_1 i_\eta} W_{i_\eta i_{\eta-1}} ... W_{i_2 i_1}$ $\forall$ sequences $i_1, i_2, ..., i_\eta$ of elements of $\mathcal{W}$ ;*

*1.4. $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$ whenever $j, k \in \mathcal{W}$, $j \neq k$, $W_{jk} \neq 0$ .*

*If $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is an eigenfunction, then its eigenvalue is $i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\omega}$.*

The previous theorem establishes the existence of a monomial eigenfunction, but its exponents are in fact easily constructed. Indeed, in the connected case, start from some $\ell \in \mathcal{W}$, choose an initial $\mu_\ell$ and walk through the subgraph induced by $\mathcal{W}$, setting iteratively $\mu_j = (W_{kj}/W_{jk})\mu_k$

[Sec. 6.11.2]. The regularity of monomial eigenfunctions is discussed in Materials and Methods. Also, since the eigenvalue of $\mathcal{K}$ associated with $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is purely imaginary, the corresponding Koopman-operator eigenvalue $\exp(i\boldsymbol{\mu}^\top\boldsymbol{\omega}t)$ lies on the unit circle. This is reminiscent of earlier extensions of the Koopman-von Neumann framework, in which eigenfunctions beyond invariants were considered [408].

As illustrated in Fig. 6.2A, condition 1.1 ensures that the subgraph induced by the vertex set $\mathcal{W}$ is a source within the whole network. Then, condition 1.2 constrains reciprocity : there cannot be a unidirectional edge within the subgraph [Fig. 6.2A]. Condition 1.3 restricts cycles : the product of the weights in the subgraph when circling clockwise in any cycle must be the same as the product of the weights when circling counterclockwise. In matrix terms, the second and third conditions mean that $(W_{jk})_{j,k\in\mathcal{W}}$ is symmetrizable [Lem. 6.12]. To construct the associated (source) motif, one can thus define a symmetric matrix and multiply it by any real, nonzero diagonal matrix. Finally, condition 1.4 implies that the submatrix $(\alpha_{jk})_{j,k\in\mathcal{W}}$ (with $\alpha_{jk} = 0$ whenever $W_{jk} = 0$) is antisymmetric. Thus, if the interaction from $k$ to $j$ depends on the shifted phase difference $\theta_k - \theta_j - \alpha_{jk}$, then the interaction from $j$ to $k$ involves the opposite shifted phase difference $-(\theta_k - \theta_j - \alpha_{jk})$.

Following Thm. 6.1, it is straightforward to show that for a symmetrizable weight matrix $W = (W_{jk})_{j,k\in\mathcal{V}}$, a monomial eigenfunction exists for any phase dynamics of the form

$$\frac{\mathrm{d}\theta_j}{\mathrm{d}t} = \omega_j + \sum_{k\in\mathcal{V}} W_{jk}H_{jk}(\theta_j,\theta_k)\,, \tag{6.4}$$

where $(H_{jk})_{j,k\in\mathcal{V}}$ are periodic functions satisfying $H_{jk}(\theta_j,\theta_k) = -H_{kj}(\theta_k,\theta_j)$ for all $j,k\in\mathcal{V}$. If, instead, $H_{jk}(\theta_j,\theta_k) = H_{kj}(\theta_k,\theta_j)$, then $(W_{jk})_{j,k\in\mathcal{V}}$ must rather be skew-symmetrizable. The generalization to higher-order interactions $\sum_{k_1,\ldots,k_m} W_{jk_1\ldots k_m}H_{jk_1\ldots k_m}(\theta_j,\theta_{k_1},\ldots,\theta_{k_m})$ is also straightforward.

If there are $q$ functionally independent monomial eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}_1},\ldots,z^{\boldsymbol{\mu}_q}$ for $\mathcal{K}$ with $\boldsymbol{\mu}_\rho\in\mathbb{R}^N$ and eigenvalues $i\boldsymbol{\mu}_\rho^\top\boldsymbol{\omega}$, then there are $q$ constants of motion $z^{\boldsymbol{\mu}_\rho}\exp(-i\boldsymbol{\mu}_\rho^\top\boldsymbol{\omega}\,t)$. If the natural frequencies are such that $\boldsymbol{\mu}_\rho^\top\boldsymbol{\omega} = 0$ for some $\rho$, the associated constant of motion is time-independent. Otherwise, given the $q$ monomial eigenfunctions, one can always construct $q-1$ functionally independent, time-independent monomial constants of motion $z^{\boldsymbol{\nu}_1}, ,\ldots, z^{\boldsymbol{\nu}_{q-1}}$ whose exponents satisfy the matrix equation $(\boldsymbol{\nu}_1\ \cdots\ \boldsymbol{\nu}_{q-1}) = (\boldsymbol{\mu}_1\ \cdots\ \boldsymbol{\mu}_q)\,O$, where $O\in\mathbb{R}^{q\times(q-1)}$ has linearly independent columns orthogonal to $(i\boldsymbol{\mu}_1^\top\boldsymbol{\omega}\ \cdots\ i\boldsymbol{\mu}_q^\top\boldsymbol{\omega})^\top$ [Lem. 6.15].

In other words, the existence of a (time-independent) monomial conserved quantity is guaranteed by the presence of two or more source subgraphs with monomial eigenfunctions. Thm. 6.1 thus provides a first class of Koopman eigenfunctions to build constants of motion. In the next section, we introduce another type of eigenfunction that can be combined with monomials to generate constants of motion, again related to a specific network structure : bipartite graphs.

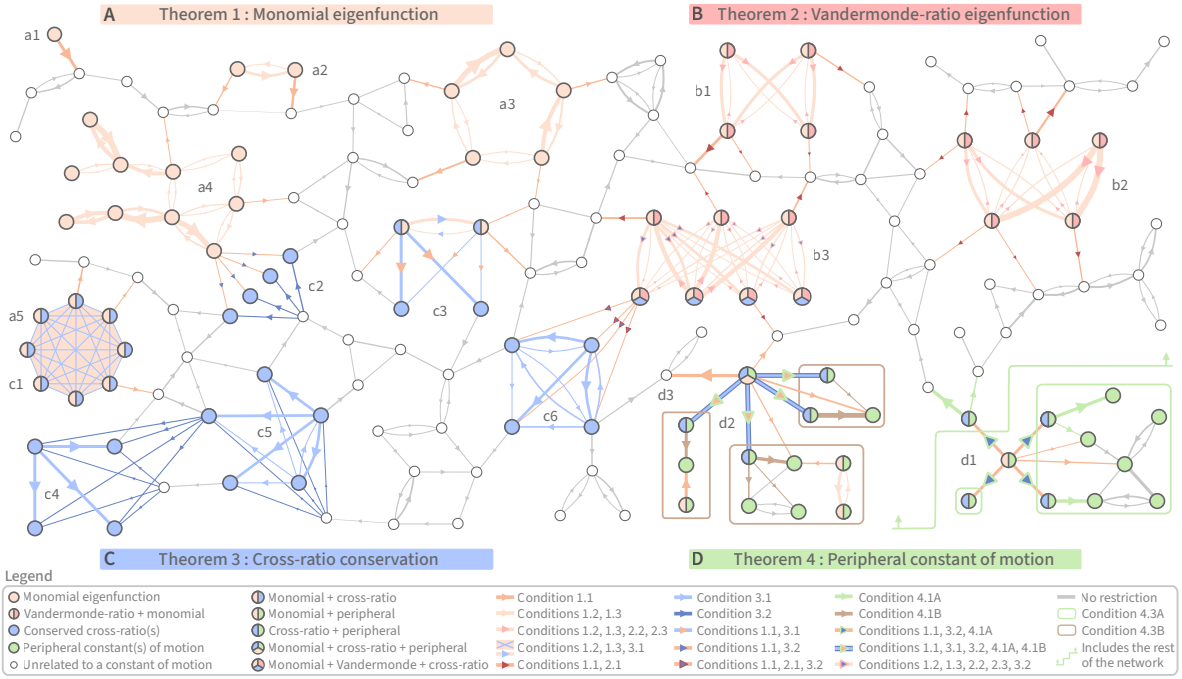



Figure 6.2 – **Network of Kuramoto oscillators with motifs supporting various constants of motion.** (**A**) Examples for Thm. 6.1. (a1) A single source vertex satisfies Thm. 6.1. (a2) Two oscillators satisfying 1.1 and 1.2 always satisfy 1.3. (a3) A 5-cycle illustrating 1.3. (a4) A more complex motif yielding a monomial eigenfunction. (a5) A source complete graph of oscillators with antisymmetric phase-lag matrix induces a monomial eigenfunction. (**B**) Examples for Thm. 6.2. (b1) Smallest weighted bipartite graph admitting a Vandermonde-ratio eigenfunction. (b2) Bipartite graph with layers of different sizes inducing a Vandermonde-ratio eigenfunction. (b3) Bipartite motif with a layer of 4 vertices that also admits a conserved cross-ratio. (**C**) Examples for Thm. 6.3. (c1) Eight globally coupled identical oscillators lead to 5 conserved cross-ratios. (c2) An empty subgraph (3.1) of identical-frequency oscillators (3.3) yields a conserved cross-ratio. (c3) Motif inducing a conserved cross-ratio with two vertices admitting a monomial eigenfunction. (c4) The smallest directed star inducing a conserved cross-ratio. (c5) Five-vertex motif admitting 2 functionally independent cross-ratios. (c6) Non-complete, non-empty and non-star graph yielding a conserved cross-ratio. (**D**) Examples for Thm. 6.4. (d1) Four (blue and green) vertices with identical natural frequencies (4.2A) only receiving from a source with identical weights (4.1A) and distributed into 3 disjoint parts (4.3A) admit 3 distinct symmetry generators and peripheral constants of motion. (d2) Four (blue and green) vertices with frequency $\omega_s - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_s)$ (4.2B) receiving one edge from source $s$ with weight $\mathcal{A}_s$ (4.1B) are distributed in 3 disjoint parts (4.3B). This yields 2 conserved cross-ratios and 3 symmetries acting on them to form peripheral constants of motion. (d3) The subgraph (i.e., the rest of the network) admits a symmetry but it yields no constant of motion.

## Vandermonde-ratio eigenfunctions

While studying symmetry-breaking mechanisms leading to chimera states in two pairs of Kuramoto oscillators, Burylko et al. [94] identified a constant of motion that appears when oscillators are uncoupled within each pair and coupled across pairs, with zero phase lags and identical natural frequencies. If we denote the vertex sets of these pairs by $I = \{1, 2\}$ and $J = \{3, 4\}$, the constant of motion is $\cot\left((\theta_1 - \theta_2 + \theta_3 - \theta_4)/4\right) \tan\left((\theta_1 - \theta_2 - \theta_3 + \theta_4)/4\right)$.

Motivated by this result, we identify a mechanism underlying this conservation, generalize

the conserved quantity, and derive conditions for its existence in networks of nonidentical oscillators. This mechanism relies on the coexistence of a monomial eigenfunction [Thm. 6.1] and another Koopman eigenfunction, which exists under the following general conditions [proof outline in Materials and Methods].

**Theorem 6.2** (Vandermonde-ratio eigenfunction)**.** *Let $I$ and $J$ be disjoint subsets of $\mathcal{V}$ of respective sizes $m \geq 2$ and $n \geq 2$ with $m + n \leq N$. Define $S_p := \sum_{q \in I \setminus \{p\}} \sigma_{pq}$, $T_r := \sum_{s \in J \setminus \{r\}} \tau_{rs}$, and*

$$V_{IJ}(\boldsymbol{z}) := \frac{\prod_{p<q \in I} (\bar{z}_p - \bar{z}_q)^{\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s \in J} (z_r - z_s)^{\tau_{rs}}}\,, \tag{6.5}$$

*where $\sigma_{pq} = \sigma_{qp} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for all $p, q \in I$ and $\tau_{rs} = \tau_{sr} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for all $r, s \in J$. If*

*2.1. $A_{jk} = 0$ for all $j \in I \cup J$ and $k \in \mathcal{V} \setminus (I \cup J)$,*

*2.2. $A_{pq} = 0$ for all distinct $p, q \in I$ and $A_{rs} = 0$ for all distinct $r, s \in J$,*

*2.3. $A_{pr} = \mathcal{A} T_r$ and $A_{rp} = \bar{\mathcal{A}} S_p$ for all $p \in I$, $r \in J$ and $\mathcal{A} \in \mathbb{C}$,*

*2.4. $\omega_p = \Omega_I \in \mathbb{R}$ for all $p \in I$ and $\omega_r = \Omega_J \in \mathbb{R}$ for all $r \in J$,*

*then $V_{IJ}(\boldsymbol{z})$ is an eigenfunction of $\mathcal{K}$ with eigenvalue*

$$\lambda = -i(\Sigma_I \Omega_I + \Sigma_J \Omega_J)\,, \tag{6.6}$$

*where $\Sigma_I = \frac{1}{2} \sum_{p \in I} S_p$ and $\Sigma_J = \frac{1}{2} \sum_{r \in J} T_r$.*

We refer to this eigenfunction as a "Vandermonde-ratio eigenfunction", since it is the ratio of two Vandermonde determinants with different exponents for each factor. The regularity of these eigenfunctions is discussed in Sec. 6.12.1.

The first condition states that the subgraph induced by $I \cup J$ is a source subgraph, while the second imposes a bipartite structure between $I$ and $J$. This bipartite graph can be weighted, directed, and signed according to the third condition : a vertex $k_1 \in J$ (resp. $I$) can send equally-weighted edges to vertices in $I$ (resp. $J$) and another vertex $k_2 \in J$ (resp. $I$) can do the same with different equally-weighted edges. At the same time, similarly to monomials, the phase lag $\alpha_{pr}$ associated with $A_{pr}$ must take a common value $\mathrm{Arg}(\mathcal{A})$ for all $p \in I$, $r \in J$, and the opposite value for all $p \in J$, $r \in I$. Finally, the fourth condition allows the two parts $I$ and $J$ to have distinct natural frequencies, while requiring these frequencies to be identical within each part.

The quantity $\Sigma_I$ (resp. $\Sigma_J$) has a clear network interpretation : it is the in-strength $s_J^{\mathrm{in}}$ (resp. $s_I^{\mathrm{in}}$) of each vertex in $J$ (resp. $I$) up to a scale factor $2|\mathcal{A}|$. If $\Sigma_I \Omega_I = -\Sigma_J \Omega_J$, or equivalently, $s_I^{\mathrm{in}}/s_J^{\mathrm{in}} = -\Omega_I/\Omega_J$, the eigenvalue vanishes and the Vandermonde-ratio eigenfunction is itself a conserved quantity.

More generally, for any $\Sigma_I, \Sigma_J, \Omega_I, \Omega_J$, there will always be a (time-independent) constant of motion, because the conditions of Thm. 6.2 also directly imply the existence of a monomial eigenfunction. Indeed, choosing $\mu_j = S_j/2$ for $j \in I$, $\mu_j = T_j/2$ for $j \in J$, and $\mu_j = 0$ otherwise makes $z_1^{\mu_1}...z_N^{\mu_N}$ an eigenfunction with eigenvalue $+i(\Sigma_I\Omega_I + \Sigma_J\Omega_J)$. Hence, the product of eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}}V_{IJ}(\boldsymbol{z})$ gives a constant of motion, whose real form is

$$\frac{\prod_{p<q\in I} \sin\left(\frac{\theta_p-\theta_q}{2}\right)^{\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s\in J} \sin\left(\frac{\theta_r-\theta_s}{2}\right)^{\tau_{rs}}} \,. \tag{6.7}$$

For $m = n = 2$ and $\sigma_{12} = \tau_{34} = 1$, one recovers the result of Ref. [94], which can be expressed as the ratio $\sin((\theta_1 - \theta_2)/2)/\sin((\theta_3 - \theta_4)/2)$.

Bipartite graphs of phase oscillators enable various synchrony and stability patterns [415, 440, 472, 488, 518] and interestingly, the conditions of Thm. 6.2 are general enough to guarantee the existence of the conserved quantity for particular Janus oscillators [440, 472] and excitation-inhibition Kuramoto oscillators [415] [Sec. 6.12.2]. Figure 6.2B shows three examples of bipartite graphs admitting this conserved quantity. Since there are only two vertices in each layer of the motif (b1), the edge weights from $I$ to $J$ (resp. $J$ to $I$) need to be identical (resp. with a different weight). By contrast, when one layer, say $I$, contains 3 or more vertices, vertices in $J$ can receive edges whose weights differ from one vertex of $I$ to another by condition 2.3 (e.g., motifs (b2) and (b3)).

The conserved quantity in Eq. (6.7) differs from those encountered in WS theory, but it is similarly built from products and ratios of sine factors involving half-angles. In the next subsection, we reframe WS theory within the Koopman framework and revisit the conservation of cross-ratios with an emphasis on their network-theoretic interpretation.

### Conserved cross-ratios

As a starting point, it is instructive to look more carefully at the Koopman generator and address the case of identical oscillators ($\omega_j = \omega \in \mathbb{R}$, $\alpha_{jk} = 0$ and $W_{jk} = 1$ for all $j, k \in \mathcal{V}$). Under these conditions, the generator becomes

$$\mathcal{K}_{\text{id}} = p(\boldsymbol{z})L_{-1} + i\omega L_0 - \overline{p(\boldsymbol{z})}L_1 \,, \tag{6.8}$$

which is associated with an element of the Lie algebra for the projective special unitary group PSU(1, 1), where $L_n = \sum_{j=1}^N z_j^{n+1}\partial_j$ for $n \in \{-1, 0, 1\}$ are the generators of the algebra and $p(\boldsymbol{z}) = (1/2)\sum_{j=1}^N z_j$.

More generally, consider any dynamics with Koopman generator of the form

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta\gamma} = \alpha(t, \boldsymbol{z})L_{-1} + \beta(t, \boldsymbol{z})L_0 + \gamma(t, \boldsymbol{z})L_1 \,, \tag{6.9}$$

including the Winfree model [638], the theta model [170] or any Riccati-type dynamics. If one finds a joint invariant [450, 451] for $L_{-1}, L_0, L_1$, i.e., such that $L_n[C(\boldsymbol{z})] = 0$ for all

$n \in \{-1, 0, 1\}$, then $C$ is a constant of motion. The method of characteristics makes it possible to deduce such a joint invariant : the cross-ratio

$$c_{abcd}(\boldsymbol{z}) = \frac{(z_c - z_a)(z_d - z_b)}{(z_c - z_b)(z_d - z_a)} \tag{6.10}$$

for distinct indices $a, b, c, d \in \mathcal{V}$ [Sec. 6.13.2]. This represents a simple systematic method for deriving the conservation of cross-ratios for phase oscillators, which is also already understood in the literature through projective geometry and complex analysis [388, 561].

Knowing that cross-ratios are constants of motion for any dynamics with a vector field of the form (6.9), what are the conditions on $A$ so that $\mathcal{K}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = 0$ ? Answering this question brings the network interpretation of cross-ratio conservation into focus. The following theorem formalizes this interpretation by giving conditions that are both necessary and sufficient [proof outline in Materials and Methods].

**Theorem 6.3** (Cross-ratio conservation)**.** *The cross-ratio $c_{abcd}$ is a constant of motion of the Kuramoto model (6.1) if and only if the vertices $a$, $b$, $c$, and $d$ of the graph described by the complex matrix in Eq. (6.3) have the same:*

*3.1. outgoing interactions within $\{a, b, c, d\}$, i.e.,*

$$A_{ba} = A_{ca} = A_{da} =: \mathcal{A}_a\,, \qquad A_{ac} = A_{bc} = A_{dc} =: \mathcal{A}_c\,,$$
$$A_{ab} = A_{cb} = A_{db} =: \mathcal{A}_b\,, \qquad A_{ad} = A_{bd} = A_{cd} =: \mathcal{A}_d\,,$$

*3.2. incoming interactions from $\mathcal{V} \setminus \{a, b, c, d\}$, i.e.,*

$$A_{ak} = A_{bk} = A_{ck} = A_{dk}\,, \quad \forall k \in \mathcal{V} \setminus \{a, b, c, d\}$$

*3.3. shifted natural frequencies*

$$\omega_j - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_j) = \omega_k - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_k), \quad \forall j, k \in \{a, b, c, d\}\,.$$

As illustrated in Fig. 6.2C, condition 3.1 constrains the possible directed network motifs that allow a cross-ratio to be a constant of motion. Condition 3.2 restricts how these motifs can receive incoming edges from other vertices, e.g., a vertex $k_1$ can send equally-weighted edges to $\{a, b, c, d\}$ and another vertex $k_2$ can do the same with different equally-weighted edges. Finally, condition 3.3 requires the oscillators to have the same effective natural frequency. Basic examples of motifs admitting conserved cross-ratios are given in Fig. 6.2C and in Sec. 6.13.5.

Thm. 6.3 also provides the necessary and sufficient conditions to have $N - 3$ conserved cross-ratios. Indeed, the model maximally has $N-3$ functionally independent conserved cross-ratios if and only if

3A. $A_{j\ell} = A_{k\ell} =: \mathcal{A}_\ell$ for all $\ell \in \mathcal{V}$,

3B. $\omega_j - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_j) = \omega_k - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_k)$,

for all pairs $(j,k)$ with $j,k \in \mathcal{V}$ and $k,\ell \neq j$ [Cor. 6.31]. These conditions were previously recognized to be sufficient [363] and we add that they are also necessary. Thus, there are $N$ different directed graphs (non-isomorphic, weakly connected, binary) leading to $N-3$ integrals, and complex weights satisfying 3A can be included.

When $\omega_j = \omega$, $\alpha_{jk} = \delta - \pi/2$, $\sin\delta = 0$, and $W_{jk} = 1/N$ for all $j,k$ in Eq. (6.1), the model satisfies conditions 3A-3B, reduces to a Hamiltonian system [620], and admits an elegant interpretation in hyperbolic geometry [111, 112, 356]. In this regime, there are $N-2$ WS integrals :

$$C^{\mathrm{ws}}_{j_1\ldots j_N} = S_{j_1 j_2} S_{j_2 j_3} \ldots S_{j_{N-1} j_N} S_{j_N j_1} \,, \tag{6.11}$$

where $S_{jk}(\boldsymbol{\theta}) = \sin((\theta_j - \theta_k)/2)$ [227,619,620]. An example of a motif admitting six WS integrals is shown in Fig. 6.2 (c1), with the corresponding conditions stated in Lem. 6.53. As shown in Ref. [388], cross-ratios are ratios of WS integrals, i.e., $c_{abcd} = -C^{\mathrm{ws}}_{acdb\,j_5\ldots j_N}/C^{\mathrm{ws}}_{adcb\,j_5\ldots j_N} = S_{ca}S_{db}/S_{cb}S_{da}$. Away from this special parameter regime, however, the WS quantities in Eq. (6.11) are generally not constants of motion. For the Koopman generator in Eq. (6.9), they are instead Darboux functions, $\mathcal{K}_{\alpha\beta\gamma}[C^{\mathrm{ws}}_{j_1\ldots j_N}] = \Lambda(\boldsymbol{z}) C^{\mathrm{ws}}_{j_1\ldots j_N}$, and they all share the same cofactor $\Lambda(\boldsymbol{z}) = 2(\gamma(t,\boldsymbol{z})p(\boldsymbol{z}) - \alpha(t,\boldsymbol{z})\overline{p(\boldsymbol{z})})$, which is another way to explain the conservation of their ratios [Sec. 6.13.7].

Thus far, Theorems 6.1, 6.2, and 6.3 have provided general conditions that closely link the existence of constants of motion to specific motifs in the graph connecting the oscillators. On the one hand, these oscillator motifs, taken in isolation, can admit different Koopman eigenfunctions simultaneously, because the conditions of Theorems 6.1, 6.2, and 6.3 can overlap. This is illustrated in several examples in Fig. 6.2. On the other hand, since there is no restriction on the outgoing edges from these motifs to the rest of the network (white vertices in Fig. 6.2) and the motifs admitting conserved cross-ratios can have incoming edges in general, it is possible to connect the motifs in multiple ways. Each source subgraph then imposes a potentially complex forcing pattern on the rest of the network, and if such a motif admits a Koopman eigenfunction with imaginary eigenvalue $i\lambda$, the possible synchronization frequencies are constrained to harmonics, i.e., integer multiples of $\lambda$. Altogether, this general setup yields a broad family of weighted, directed, signed, and modular networks with nontrivial synchronization that admit Koopman eigenfunctions and conserved quantities.

From there, it is natural to ask whether the conserved quantities are associated with any symmetry in the oscillators' connections or dynamics. In fact, the conditions established in this section are not conditions on the existence of graph automorphisms (a.k.a., network symmetries [377]), known to have crucial implications for cluster synchronization [7, 115, 382, 441, 447, 465, 526, 546]. However, another type of symmetry will be useful, that is, Lie symmetries (a.k.a., point symmetries, continuous symmetries): transformations that map a solution of a system of differential equations to another solution [Fig. 6.1B] [450]. Indeed, in the next sec-

tion, we use continuous symmetries to generate additional constants of motion and extend the families of conserved quantities presented in Sec. 6.5, thereby completing the list of quantities presented in Table 6.1.

## 6.6 Symmetry-generated constants of motion

For variational problems, Noether's theorem guarantees that continuous symmetries are associated with constants of motion, thus allowing a reduction of the system's order [448, 450]. Although there is no guarantee that such symmetries underlie the presence of constants of motion in non-Lagrangian and non-Hamiltonian systems [17,18], finding a Lie symmetry may still allow one to build new functionally independent constants of motion from known ones [241].

In this section, we introduce a lemma that formulates a criterion for Lie symmetries in terms of the Koopman generator. The lemma then leads us to find continuous Lie symmetries in the Kuramoto model that generate functionally independent constants of motion.

### Koopmanian condition for continuous symmetries in dynamical systems

The general method to derive Lie symmetries for differential equations involves computing the prolongation of the symmetry group action or its generators $\mathcal{S}$ [450, Theorem 2.71], often requiring lengthy calculations. For Euler-Lagrange problems and Hamiltonian systems, the prolongation condition amounts to identifying commuting operators. As shown below, such a simplification is also possible for first-order ODEs. Indeed, for $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{y})$ with $\mathcal{U} = \partial_t + \mathcal{K}$ and $\mathcal{K} = \sum_{j=1}^{N} F_j(t, \boldsymbol{y})\partial_j$, the next lemma gives the symmetry criterion in terms of operator commutation [Sec. 6.14.1].

**Lemma (Infinitesimal condition for Lie symmetries)** *A connected local group of transformations $G$ acting on an open subset of $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^N$ is a symmetry group of the first-order ODEs $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{y})$ if and only if*

$$[\mathcal{U}, \mathcal{S}] - \mathcal{U}[\xi(t, \boldsymbol{y})]\,\mathcal{U} = 0 \tag{6.12}$$

*for every generator $\mathcal{S} = \xi(t, \boldsymbol{y})\partial_t + \sum_{j=1}^{N} \phi_j(t, \boldsymbol{y})\partial_j$ of $G$.*

For symmetry generators where $\xi$ is constant and $\phi_1, ..., \phi_N$ are time-independent, the infinitesimal criterion (6.12) takes the more familiar and elegant form

$$[\mathcal{K}, \mathcal{S}] = 0\,. \tag{6.13}$$

If $\gamma_\varepsilon = \exp(\varepsilon\mathcal{S}) \in G$ is the symmetry generated by $\mathcal{S}$, the associated (non infinitesimal) criterion to Eq. (6.13) is $(D\gamma_\varepsilon)\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}(\gamma_\varepsilon)$, which is the usual $G$-equivariance condition [94, 188, 235, 237].

To find a symmetry generator, one uses a general symmetry generator $\mathcal{S}$ (or a specific ansatz on the form of $\mathcal{S}$), which leads to partial differential equations called the determining equations. Solving these equations hopefully lead to specific forms of $\xi, \phi_1, ..., \phi_N$. Although

Eqs. (6.12-6.13) enable using commutation relations to search for symmetries, there is no general procedure to obtain particular solutions of the determining equations [68]: this is the *art* of Lie's method [450].

When successful, however, this search is especially valuable : Lie symmetries can generate constants of motion and Koopman eigenfunctions from known ones. This can be easily shown using the previous lemma. Indeed, for a constant of motion $C$ and a symmetry generator $\mathcal{S}$, Eq. (6.12) and $\mathcal{U}[C] = 0$ directly lead to

$$\mathcal{U}[\mathcal{S}[C]] = \mathcal{S}[\mathcal{U}[C]] + \mathcal{U}[\xi]\,\mathcal{U}[C] = 0\,, \tag{6.14}$$

meaning that $\mathcal{S}[C]$ is conserved. For $\xi = 0$, the same calculation shows that if $[\mathcal{U}, \mathcal{S}] = 0$ and $\psi$ is a Koopman eigenfunction, then $\mathcal{S}[\psi]$ is a Koopman eigenfunction with the same eigenvalue and $\mathcal{S}[\psi]/\psi$ is a constant of motion. Yet, these calculations do not guarantee that $\mathcal{S}[C]$ or $\mathcal{S}[\psi]$ are functionally independent of the known constants of motion and eigenfunctions, as the next subsection will illustrate.

### Continuous symmetries of the Kuramoto model

For the Kuramoto model, the generator $\mathcal{U} = \partial_t + \mathcal{K}$ with $\mathcal{K}$ given in Eq. (6.2) acts on observables depending on $(t, \boldsymbol{z})$ and we want the symmetries to be automorphisms of the $N$-torus [Fig. 6.1C] potentially acting on time. Using the criterion (6.12), it is straightforward to show that the global dilatation generator $i\,L_0$ (rotation of all the oscillators), the Koopman generator $\mathcal{K}$, and the trivial generator $f(t)\mathcal{U}$ for some smooth function $f$ are symmetry generators. Yet, the symmetry generators $iL_0$, $\mathcal{K}$, $f(t)\mathcal{U}$ do not generate independent constants of motion from the monomials, the Vandermonde-ratios or the cross-ratios.

To go further, a simple intuition comes in handy : the symmetries must map periodic solutions to periodic solutions. This restricts $\phi_1, ..., \phi_N$ in $\mathcal{S}$ to periodic functions, enabling their expansion in Fourier series $\phi_\ell(\boldsymbol{z}) = \sum_{\boldsymbol{p}\in\mathbb{Z}^N} \varphi_{\ell\boldsymbol{p}} z^{\boldsymbol{p}}$, under the assumptions $\xi = 0$ and $\partial_t \phi_\ell(t, \boldsymbol{z}) = 0$. After using commutation relations and simplifying, the general determining equations take the form of an infinite differential-algebraic system of equations [Sec. 6.14.3]. To narrow our search, we limit $\boldsymbol{p}$ to a finite subset of $\mathbb{Z}^N$ with fixed total degree $\sum_{j=1}^N p_j$, leading to a finite overdetermined linear system [Sec. 6.14.3-6.14.4]

$$D(A)\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{0}\,, \tag{6.15}$$

where the "determining matrix" $D(A)$ depends only on the interaction matrix $A$.

Finding a symmetry then amounts to identifying $A$ for which the determining matrix has a zero singular value, with the corresponding right singular vector $\boldsymbol{\varphi}$ giving the coefficients of a symmetry generator. This simplification highlights the link between continuous Lie symmetries and the underlying network structure in the Kuramoto model. Reversing Yang's

statement [648], one can say that interaction dictates symmetry, a viewpoint in the spirit of the classic work of Golubitsky, Stewart and collaborators [235, 237, 238, 382].

This approach, combined with symbolic calculations in basic examples [Sec. 6.14.5], leads us to infer a family of network motifs admitting continuous symmetries in the Kuramoto model. Whenever there is a source oscillator $s$ with natural frequency $\omega_s$ connecting disjoint subgraphs with vertex sets $\mathcal{W}_1, ..., \mathcal{W}_r$ in the network, the Koopman generators of the subgraphs in the rotating frame of $s$,

$$\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_s L_0^\eta\,, \quad \eta \in \{1, ..., r\}\,,\ r > 1\,, \tag{6.16}$$

are Lie symmetry generators, where $L_0^\eta = \sum_{j\in\mathcal{W}_\eta} z_j\partial_j$ and $\mathcal{K}_\eta = \sum_{j\in\mathcal{W}_\eta}\sum_{k\in\mathcal{W}_\eta\cup\{s\}}(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2)\partial_j$ [Lem. 6.44]. Given a solution $(z_j(t))_{j\in\mathcal{V}}$, such symmetries make the oscillators in the subgraphs evolve in time in the frame of $s$ while leaving the dynamics of the other oscillators unchanged, which gives another solution $(\tilde{z}_j(t))_{j\in\mathcal{V}}$.

In some cases, it is possible to derive the explicit form of the symmetries. Let $\omega_s = 0$ and $\theta_s(0) = 0$ without loss of generality and

$$\mathcal{S}_\eta = \rho_\eta(\boldsymbol{z})L_{-1}^\eta + i\Omega_\eta L_0^\eta - \overline{\rho_\eta(\boldsymbol{z})}L_1^\eta \tag{6.17}$$

with $\rho_\eta(\boldsymbol{z}) = \mathcal{A}_s + \sum_{k\in\mathcal{W}_\eta}\mathcal{A}_{\eta k}z_k$, $\Omega_\eta = \omega_{\ell_\eta} - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\eta\ell_\eta})$, $\ell_\eta \in \mathcal{W}_\eta$, and $\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_{\eta k} \in \mathbb{C}$ (e.g., when the vertices in $\mathcal{W}_\eta$ with $\#\mathcal{W}_\eta \geq 4$ satisfy the conditions from Thm. 6.3). The generator $\mathcal{S}_\eta$ is thus associated with $\mathrm{PSU}(1,1)$ and given a solution $z_j(t) \in \mathbb{T}$ for all $t$ and $j \in \mathcal{V}$, the symmetry acts as a Möbius transformation to generate the transformed solution

$$\tilde{z}_j(t) = \exp(\varepsilon\mathcal{S}_\eta)z_j(t) = \frac{e^{i\phi_\eta(\varepsilon)}z_j(t) + Z_\eta(\varepsilon)}{1 + e^{i\phi_\eta(\varepsilon)}\overline{Z_\eta(\varepsilon)}z_j(t)} \tag{6.18}$$

where $j \in \mathcal{W}_\eta$, $(Z_\eta(0), \phi_\eta(0)) = (0, 0)$, and

$$\frac{\mathrm{d}Z_\eta}{\mathrm{d}\varepsilon} = F_\eta + i\Omega_\eta Z_\eta - \bar{F}_\eta Z_\eta^2 \tag{6.19}$$

$$\frac{\mathrm{d}\phi_\eta}{\mathrm{d}\varepsilon} = \Omega_\eta + i(\bar{F}_\eta Z_\eta - F_\eta\bar{Z}_\eta) \tag{6.20}$$

$$F_\eta(Z_\eta, \phi_\eta, t) = \mathcal{A}_s + \sum_{k\in\mathcal{W}_\eta}\mathcal{A}_{\eta k}\frac{e^{i\phi_\eta}z_k(t) + Z_\eta}{1 + e^{i\phi_\eta}\overline{Z_\eta}z_k(t)}\ . \tag{6.21}$$

In this case, the corresponding symmetry subgroup is therefore a Möbius group. We describe how to apply the above methodology numerically in Sec. 6.14.7 and we provide a concrete example in Sec. 6.7.

We now turn to the generation of new constants of motion from Lie symmetries in the Kuramoto model.

### Peripheral constants of motion

The symmetry generators in Eq. (6.16) enable us to extract new forms of constants of motion in the Kuramoto model [Fig. 6.2D, example in Eq. (6.26)], as stated in the next theorem [proof outline in Materials and Methods].

**Theorem 6.4** (Peripheral constants of motion)**.** *Consider that the Kuramoto model in Eq. (6.1) has a symmetry generator $\mathcal{S}_\eta$ as defined in Eq. (6.16) related to the subgraph induced by $\mathcal{W}_\eta$ and the source oscillator $s$.*

4A. *If four vertices $a, b, c, d \in \mathcal{V} \setminus \{s\}$ have*

*4.1A. a unique incoming edge with weight $\mathcal{A}_s$ from $s$;*

*4.2A. identical natural frequencies $\omega$;*

*4.3A. and one, two or three of them belong to $\mathcal{W}_\eta$,*

*then the cross-ratio $c_{abcd}$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ are functionally independent constants of motion.*

4B. *If three vertices $u, v, w \in \mathcal{V} \setminus \{s\}$ have*

*4.1B. a unique incoming edge with weight $\mathcal{A}_s$ from $s$;*

*4.2B. identical natural frequencies $\omega = \omega_s - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_s)$;*

*4.3B. and one or two of them belong to $\mathcal{W}_\eta$,*

*then the cross-ratio $c_{suvw}$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ are functionally independent constants of motion.*

Because the symmetry acts on peripheral oscillators of a source, we refer to $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ as "peripheral constants of motion".

As a consequence of the preceding theorem, if there is a source star with $n \geq 4$ leaves having identical frequencies $\omega$ (to satisfy 4.2A), where all edges from the source $s$ to the leaves have identical complex weight $\mathcal{A}_s$ (to satisfy 4.1A), Thm. 6.3 (and Lem. 6.24) implies that there are $n-3$ conserved cross-ratios $(c_\rho)_{\rho\in\{1,\ldots,n-3\}}$ associated with the leaves. There is also one additional conserved and functionally independent cross-ratio $c_s$ depending on the core if $\omega = \omega_s - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_s)$ (condition 4.2B).

Now, recall that there are no restrictions on the outgoing edges from the $n$ leaves to conserve the related cross-ratios and that $B_n$ is the Bell number. Hence, there are $r = B_n - 1$ ways of partitioning the leaves in at least two sets (to satisfy 4.3A and 4.3B) while including them as sources in their respective subgraphs' vertex sets $\mathcal{W}_1, \ldots, \mathcal{W}_r$ [Fig. 6.2D] (to satisfy 4.1A and 4.1B). This setup makes $r$ symmetry generators act on at least one of the $n-3$ cross-ratios in such a way that $\mathcal{S}_\eta[c_\rho]$ for some $\rho$ and $\eta$ are conserved. If $\omega_s = \omega + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_s)$ is satisfied, $\mathcal{S}_\eta[c_s(\boldsymbol{z})]$ is also conserved for all $\eta$. Yet, not all of these constants are functionally independent; their independence hinges on the specific network structure.

We have thus identified symmetries that generate constants of motion through the time evolution of peripheral parts in networks admitting conserved cross-ratios. We now consider translations of the phases and the phase lags. Except for monomials, these transformations provide parameterized versions of the conserved quantities introduced above.

### Parametrized families of conserved quantities

Although global phase translations generated by $iL_0$ are symmetries, non-uniform translations generated by $iL_0^{\boldsymbol{\alpha}} = i\sum_{j=1}^N \alpha_j z_j \partial_j = \sum_{j=1}^N \alpha_j \partial_{\theta_j}$ with $\alpha_j \in \mathbb{R}$ are not symmetries since $[\mathcal{K}, L_0^{\boldsymbol{\alpha}}] \neq 0$. However, if $g_j(\boldsymbol{\theta}) := \omega_j + \sum_{k=1}^N W_{jk}\sin(\theta_k - \theta_j - \alpha_{jk})$, then

$$e^{iL_0^{\boldsymbol{\alpha}}}[g_j(\boldsymbol{\theta})] = \omega_j + \sum_{k=1}^N W_{jk}\sin(\theta_k - \theta_j - \alpha_j - \alpha_{jk} + \alpha_k) \tag{6.22}$$

and replacing $\alpha_{jk}$ by $-\alpha_j + \alpha_{jk} + \alpha_k$ gives the original vector field. If the phase lags are treated as state variables satisfying $\dot{\alpha}_{jk} = 0$, this equivalently means that

$$\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_{j=1}^N \alpha_j \partial_{\theta_j} - \sum_{p,q=1}^N (\alpha_p - \alpha_q)\,\partial_{\alpha_{pq}}\,, \tag{6.23}$$

generates the translation symmetry $e^{\varepsilon\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}$, where

$$e^{\varepsilon\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}} f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\alpha}) = f(\boldsymbol{\theta} + \varepsilon\boldsymbol{\alpha}\,,\ \alpha + \varepsilon(\mathbf{1}\boldsymbol{\alpha}^\top - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{1}^\top))\,, \tag{6.24}$$

for some function $f$ and $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, ..., \alpha_N)$ [Sec. 6.14.8]. The associated translation group $G_{\boldsymbol{\alpha}}$ is a symmetry group of the extended system (6.1) with $\dot{\alpha}_{jk} = 0$ for all $j, k$.

These translations do not produce fundamentally different algebraic types of Koopman eigenfunctions or constants of motion, but they generate $G_{\boldsymbol{\alpha}}$-orbits of such quantities. In other words, if $\psi$ is a Vandermonde-ratio eigenfunction, a cross-ratio, a WS integral, or a peripheral constant of motion, then $\exp(\varepsilon\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}})[\psi]$ gives the corresponding members of the family, as presented in Table 6.1 for $\varepsilon = -1$. The conditions of the previous theorems are also transformed accordingly under the same action to preserve these members.

For Vandermonde-ratio eigenfunctions, applying the symmetry to condition 2.3 of Thm. 6.2 yields

2.3.' $A_{pr} = e^{i\alpha_p}\mathcal{A}\,T_r e^{-i\alpha_r}$ and $A_{rp} = e^{i\alpha_r}\bar{\mathcal{A}}\,S_p e^{-i\alpha_p}$,

for all $p \in I$, $r \in J$. In the case of cross-ratios, choosing $a$ as the label of reference, the transformation gives

$$e^{-\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = \frac{(e^{i\beta_c}z_c - z_a)(e^{i\beta_d}z_d - e^{i\beta_b}z_b)}{(e^{i\beta_c}z_c - e^{i\beta_b}z_b)(e^{i\beta_d}z_d - z_a)}\,, \tag{6.25}$$

for all $\beta_\ell = \alpha_a - \alpha_\ell \in \mathbb{R}$ with $\ell \in \mathcal{W} := \{a, b, c, d\}$, forming a three-parameter family of cross-ratios. The conservation of these cross-ratios in the Kuramoto model (6.1) follows from applying the symmetry to the conditions of Thm. 6.3, leading to

3.1'. $e^{i\beta_\ell} A_{k\ell} =: \mathcal{A}_\ell \in \mathbb{C}$, $\forall \ell \in \mathcal{W}$ and $\forall k \in \mathcal{W} \setminus \{\ell\}$;

3.2'. $A_{ak} = e^{i\beta_b} A_{bk} = e^{i\beta_c} A_{ck} = e^{i\beta_d} A_{dk}$, $\forall k \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{W}$;

3.3'. $\omega_a - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a) = \omega_\ell - 2\,\mathrm{Im}(e^{-i\beta_\ell}\mathcal{A}_\ell)$, $\forall \ell \in \{b, c, d\}$.

Such a family of cross-ratios is not specific to the Kuramoto model: the same construction holds for general complex Riccati-type dynamics, such as those considered by Cestnik and Martens [105]. The families of peripheral constants of motion and WS integrals are also obtained in the same way [Sec. 6.14.8, Lemma 6.53].

While the preceding theorems establish the formal groundwork, they also enable practical insights into synchronization and conserved phase relationships in complex empirical networks. The next section provides examples that make these theorems and their implications more explicit.

## 6.7 Examples and applications

In this section, we first use a basic example to illustrate the geometric restrictions that constants of motion and Lie symmetries impose on the oscillators. Then, we shortly present an application to the synchronization of conformist-contrarian oscillators. We finally show that various network motifs admitting conserved quantities are present in empirical networks.

### Visualizing constants of motion and symmetries

Let us now consider the example illustrated in Fig. 6.3. The simplest part of the graph in panel A is the directed star of five oscillators (vertices 1 to 5) with Koopman generator $\partial_t + i\omega_1 z_1 \partial_1 + \mathcal{K}_2 + \mathcal{K}_3 + \mathcal{K}_4 + \mathcal{K}_5$, where $\mathcal{K}_\eta = (i\omega z_\eta + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_\eta^2)\,\partial_\eta$ for $\eta \in \{2, 3, 4, 5\}$ and $\mathcal{A}_1 \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. The presence of a source $s = 1$ implies that there is a monomial eigenfunction $z_1$ with eigenvalue $i\omega_1$ [Thm. 6.1] and $z_1 e^{-i\omega_1 t}$ is conserved. Thm. 6.3 then guarantees the conservation of $c_{2345}$. There are also five symmetry generators $\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_1 L_0^\eta$ with $\eta \in \{2, ..., 6\}$ [Lem. 6.44] and Thm. 6.4 ensures that $\mathcal{S}_\eta[c_{2345}]$ for all $\eta \in \{2, 3, 4, 5\}$ are conserved. If $\omega_1 = \omega + 2\ \mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$, then $c_{1234}$ is also conserved along with $\mathcal{S}_\eta[c_{1234}]$ for all $\eta \in \{2, 3, 4\}$.

Altogether, there are five independent constants of motion, say $z_1 e^{-i\omega_1 t}$, $c_{1234}$, $c_{2345}$, $\mathcal{S}_2[c_{2345}]$, $\mathcal{S}_3[c_{2345}]$, for this star and this subsystem is completely integrable [Sec. 6.14.6]. For $\mathcal{A}_1 = \sigma/4 \in \mathbb{R}$, the real form of the peripheral constant of motion generated by $\mathcal{S}_2$ and $c_{2345}$ (assumed positive) is

$$\mathcal{S}_2[(2/\sigma)\ln c_{2345}] = \frac{C_{12} S_{12} S_{45}}{S_{42} S_{52}} \tag{6.26}$$

with $S_{jk} = \sin\left((\theta_j - \theta_k)/2\right)$ and $C_{jk} = \cos\left((\theta_j - \theta_k)/2\right)$.

The vertices 6 and 7 admit a second monomial eigenfunction. One can thus form the time-independent constant of motion $z_1^{\nu_1} z_6^{\nu_6} z_7^{\nu_7}$ and illustrate the level set of its real form, i.e., a

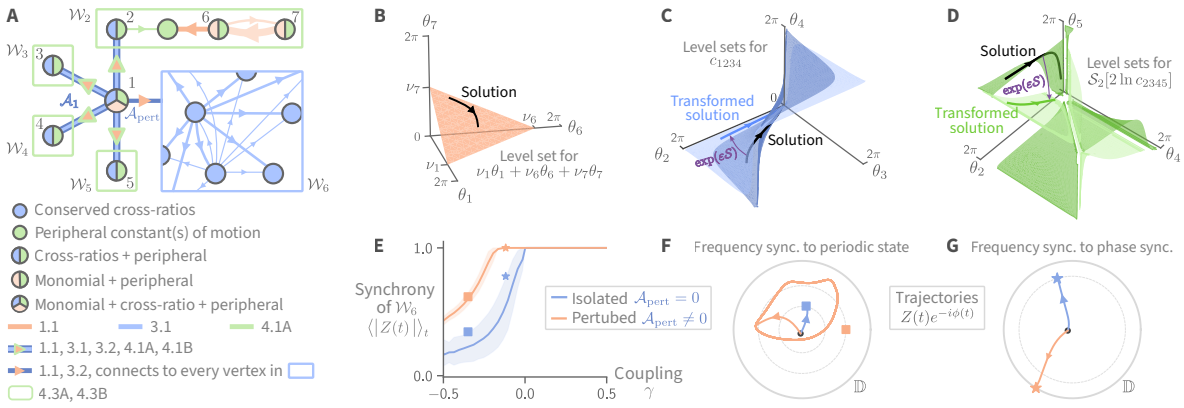



Figure 6.3 – **Illustration of constants of motion, Lie symmetries, and the synchronization of 101 conformist-contrarian oscillators.** (**A**) Complex-weighted graph for the example. Edges between vertices in $\mathcal{W}_6$ exist with Bernoulli probability $p_\ell$ and have random weights $\mathcal{A}_\ell \in \mathbb{C}$ (Gaussian modulus and phase). The operators $\mathcal{S}_2$, ..., $\mathcal{S}_6$ related to $\mathcal{W}_2$, ..., $\mathcal{W}_6$ form an abelian Lie subalgebra of symmetry generators (6.16). (**B**) The trajectories of $\theta_1, \theta_6, \theta_7$ are constrained by a plane representing the level set of the conserved quantity $\nu_1\theta_1 + \nu_6\theta_6 + \nu_7\theta_7$ (i.e., the argument of the conserved monomial $z_1^{\nu_1} z_6^{\nu_6} z_7^{\nu_7}$). (**C**, **D**) The symmetry $\exp(\varepsilon\mathcal{S})$ with $\mathcal{S} = \mathcal{S}_3 + \mathcal{S}_4 + \mathcal{S}_5$ and $\varepsilon = 5$ sends a solution (black curves) constrained by the invariant sets of $c_{1234} \approx 5.0$ and $\mathcal{S}_2[2\ln c_{2345}] \approx 4.2$ [Eq. (6.26)] to a new solution (blue and green curves) evolving in other invariant sets ($c_{1234} \approx 1.3$, $\mathcal{S}_2[2\ln c_{2345}] \approx -0.6$). (**E**) Synchronization transitions measured by the time-averaged modulus $\langle|Z(t)|\rangle_t$ vs. the coupling $\gamma$ when the oscillators from $\mathcal{W}_6$ are isolated and when they are perturbed ($\mathcal{A}_{\text{pert}} = 20e^{-i\alpha_s}$, $\alpha_s \in \mathcal{N}(1, 10^{-4})$). Squares and stars indicate corresponding trajectories in (**F**) and (**G**); $(Z(t), \phi(t))$ is obtained by integrating the WS equations of $\mathcal{W}_6$ [Materials and Methods]. (**F**) Trajectory of $Z(t)e^{-i\phi(t)}$ when $\mathcal{A}_{\text{pert}} = 0$ reaches an equilibrium point $|Z(t)| < 1$ (blue curve, frequency synchronization). Under the same conditions, except $\mathcal{A}_{\text{pert}} = 20e^{-0.892i}$, the order parameter instead reaches a limit cycle (orange curve). (**G**) Trajectory of $Z(t)e^{-i\phi(t)}$ for $\mathcal{A}_{\text{pert}} = 0$ characterizing frequency synchronization. Under the same conditions, except $\mathcal{A}_{\text{pert}} = 20e^{-0.823i}$, phase synchronization is achieved (orange curve reaching $|Z(t)| = 1$).

plane [Fig. 6.3B]. Also, the Lie symmetries $\exp(\varepsilon(\mathcal{S}_3 + \mathcal{S}_4 + \mathcal{S}_5))$ or $\exp(\varepsilon\mathcal{S}_6)$ act as Möbius transformations and $\exp(\varepsilon(\mathcal{S}_3 + \mathcal{S}_4 + \mathcal{S}_5))$ maps the solution from one invariant set to another [Fig. 6.3 C and D]. The system is set in the reference frame of the source ($\omega_1 = 0$), making it possible to illustrate the level sets entirely.

## Perturbing the synchronization of conformist-contrarian oscillators

Consider again the example in Fig. 6.3. Lohe [363] showed that for the isolated part $\mathcal{W}_6$ ($\mathcal{A}_{\text{pert}} = 0$) satisfying conditions 3A-3B, the coupling parameter $\gamma = \sum_{\ell \in \mathcal{W}_6} \text{Re}(\mathcal{A}_\ell)$ measures whether the conformists or the contrarians dominate the long-term behavior of the system. In short, for $\gamma < 0$, the system becomes frequency synchronized; for $\gamma = 0$, periodic states are possible; and for $\gamma > 0$, it synchronizes perfectly. Connecting only a single leader to $\mathcal{W}_6$ can preserve all the $\#\mathcal{W}_6 - 3$ cross-ratios (condition 3.2), while inducing notable changes in the synchrony of $\mathcal{W}_6$.

When the contrarians prevail in $\mathcal{W}_6$ ($\gamma < 0$), the independent conformist leader 1 disrupts the

frequency synchronization. In its frame, the leader is stationary and drives the oscillators in $\mathcal{W}_6$ to stop moving. But if its influence is not strong enough, the conformists and contrarians continue to push the system toward frequency synchronization. These opposing forces lead to the limit cycle in Fig. 6.3F. If the leader exerts a stronger influence, every oscillator in $\mathcal{W}_6$ converges to a fixed position [Fig. 6.3G]. This also explains the shift of the synchronization threshold toward negative values of $\gamma$ [Fig. 6.3E].

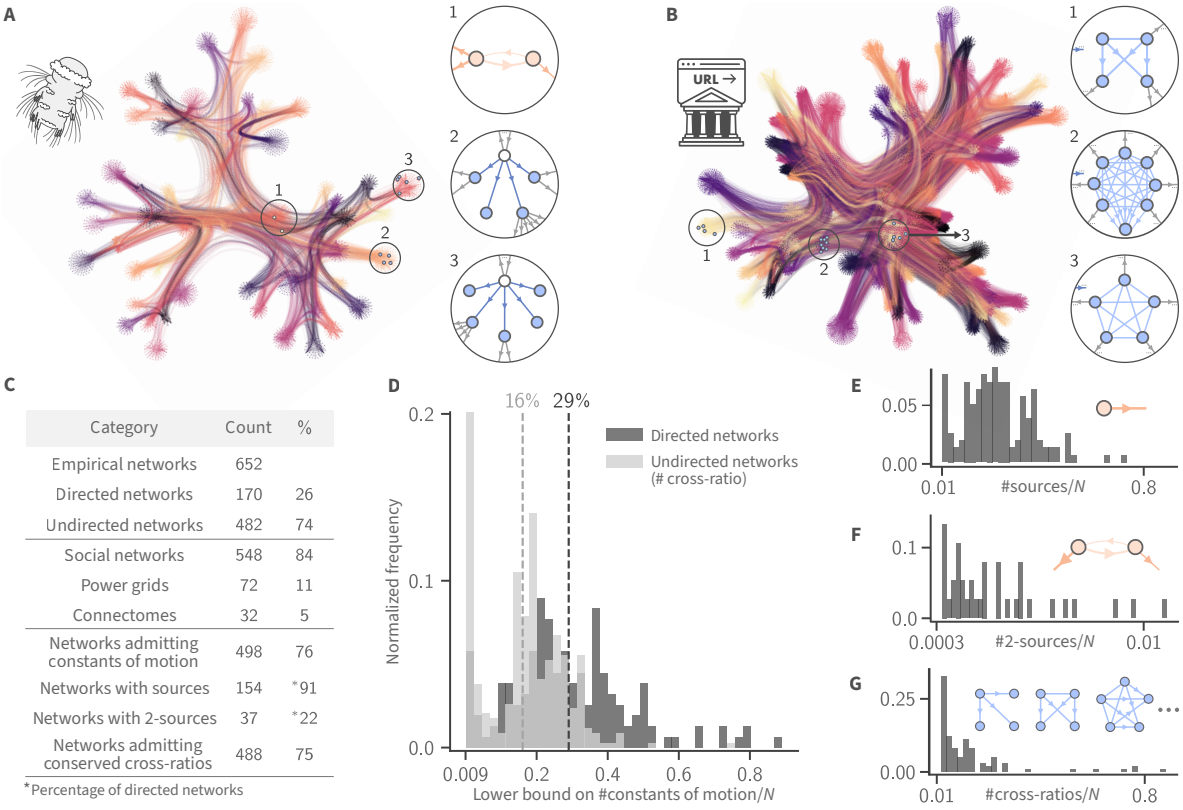
### Detecting network motifs admitting conserved quantities in empirical networks

Generalized Kuramoto models arise as limiting cases of distinct models of complex systems. For instance, a phase reduction of the Wilson-Cowan model [635], which describes the activity of excitatory and inhibitory regions in the brain, leads to a generalized Kuramoto model as in Eq. (6.1) [476, 534]. For power grids, approximating power balance equations leads to a second-order Kuramoto model providing insights into grid robustness [189, 503, 656]. The model is also interpretable as a model of social opinion formation [275], which motivates the terminology used in the previous subsection.

In all these examples, the phase description of the Kuramoto model should not be seen as a realistic mechanistic model of the underlying system, but rather as a mathematically tractable limit that preserves certain qualitative features of the collective dynamics. In fact, the Kuramoto model has even been used as a tool to reveal the topological scales [28] or the detailed connectivity [585] of complex networks through synchronization. In a similar spirit, the previous theorems establish how conserved phase relationships are linked to specific network motifs. But do such motifs actually appear in empirical networks ?

Answering this question requires the detection of network motifs [15, 382, 409, 652] that admit constants of motion; a task that quickly becomes computationally intensive. For this application, we restrict our attention to a subset of these motifs, namely sources, 2-sources (e.g., (a2) in Fig. 6.2), and network motifs admitting conserved cross-ratios. In Materials and Methods, we introduce a method to detect these motifs using the binary versions of empirical networks.

By analyzing 652 empirical networks, including social networks, power grids, and connectomes, we found 498 networks admitting at least one constant of motion [Fig. 6.4C] and we establish lower bounds on the number of conserved quantities [Fig. 6.4D]. The average lower bound on the number of constants of motion, divided by $N$, reaches 16% for undirected networks and 29% for directed networks. These large averages are mostly explained by the presence of sources [Fig. 6.4E], stars (e.g., in power grids), and maximal cliques with at least four vertices (e.g., in social networks). Yet, we also found less typical motifs such as 2-sources (e.g., Fig. 6.4A) and those admitting conserved cross-ratios that are neither stars nor maximal cliques (e.g., Fig. 6.4B).




| Category | Count | % |
|---|---|---|
| Empirical networks | 652 | |
| Directed networks | 170 | 26 |
| Undirected networks | 482 | 74 |
| Social networks | 548 | 84 |
| Power grids | 72 | 11 |
| Connectomes | 32 | 5 |
| Networks admitting constants of motion | 498 | 76 |
| Networks with sources | 154 | *91 |
| Networks with 2-sources | 37 | *22 |
| Networks admitting conserved cross-ratios | 488 | 75 |

*Percentage of directed networks

Figure 6.4 – **Presence of network motifs admitting conserved quantities in empirical networks.** (**A**, **B**) Examples of motifs admitting constants of motion found in the connectome of the annelid *P. dumerilii* [601] and the web-based network of US government agencies (California) [319]. The blue arrows pointing toward the motifs in (**B**) mean that each vertex in the motifs has many incoming edges (satisfying 3.2) from vertices outside the motif. The grey arrows with the ellipses indicate that the vertices have many outgoing edges. (**C**) Composition of the dataset, with networks drawn mainly from Netzschleuder and Matpower, and number of admitted constants of motion. (**D**) Histogram of the lower bound on the number of (time-dependent) constants of motion in the 498 networks admitting at least one conserved quantity. We count the number of sources, 2-sources (each associated with a conserved quantity $z^{\boldsymbol{\mu}}e^{-\lambda t}$), and for each motif of size $m$ admitting conserved cross-ratios, we count the $m-3$ functionally independent ones. We exclude the conserved cross-ratios associated with the presence of at least four single sources (similarly for (**G**)). For undirected networks, there are no monomial eigenfunctions by Thm. 6.1 (the undirected empirical networks are of course not empty, not complete, considered connected, and they have no sources). Moreover, the only two motifs that admit conserved cross-ratios by Thm. 6.3 are mutually disconnected vertices in a motif of at least four vertices (forming the periphery of star graphs with one or multiple cores in connected networks) or completely connected motifs of at least four vertices (a maximal clique). (**E**, **F**, **G**) Histograms of the number of sources, 2-sources, and motifs admitting cross-ratios.

On the one hand, the presence of sources and 2-sources indicates that it is possible for some oscillators to have their phase constrained to (hyper)planes, as illustrated in Fig. 6.3B. On the other hand, having a motif admitting a conserved cross-ratio with a given non-zero value means that the phases of the involved oscillators cannot cross. While the concrete consequences of these observations are application-dependent, our results shed light on specific structural patterns that can sustain stable quantities over time in complex oscillator systems.

## 6.8 Discussion

Spectral properties of linear operators, such as adjacency, Laplacian, and Jacobian matrices, have been central to understanding nonlinear dynamics on complex networks, from stability [398, 402, 429] and control [193, 357] to critical transitions [103, 304, 498, 499, 597] and dimension reduction [219, 290, 346, 581]. Yet, the spectral properties of the Koopman generator for such dynamics on networks remain largely unexplored. The Koopman generator encodes both the structure and the dynamics, making it a particularly relevant linear operator to characterize the structure-function relationship in complex systems. Uncovering its spectral properties is challenging, however.

In this paper, we identified various network motifs admitting Koopman eigenfunctions in the celebrated Kuramoto model. We combined these eigenfunctions and found Lie symmetries that generate conserved quantities determined by heterogeneous connection patterns between the oscillators. This provides different possibilities for obtaining $1 \leq n \leq N$ constants of motion, which, by the preimage theorem, constrains trajectories to a manifold of dimension $N - n$. The results thus offer a clear path toward partial integrability of general coupled oscillator dynamics [105, 289, 356, 364, 366] on more complex networks.

Another direction concerns a deeper investigation of continuous symmetries, but also various other types of symmetries, to generate other Koopman eigenfunctions and constants of motion. For instance, we have not considered discrete symmetries [94] and since constants of motion are not necessarily linked to continuous symmetries in general, adjoint symmetries may also provide complementary insights [17, 18]. Network-based notions of symmetry, including graph automorphisms, groupoid formalisms, and graph fibrations [237, 382, 419, 420, 443], also offer promising avenues for relating conserved quantities to network patterns.

Detecting the motifs in empirical networks from the four theorems in their full generality (for directed, weighted, and signed networks) remains an open problem. The conditions of the theorems are also expected to be satisfied only approximately for some motifs in empirical networks. The prevalence of these motifs, as well as their ability to support observables that are nearly conserved over finite time intervals, is yet to be characterized. In fact, beyond partial integrability, the framework provides a natural basis for approximate dimension reductions of oscillator networks [220, 244, 453] using nonlinear observables rather than linear ones [208,

346, 583, 599]. In this regard, spectral methods from Koopman theory [88, 91, 129, 505] and perturbative approaches [606] are promising avenues for future work.

More generally, the present framework suggests an inverse spectral perspective for dynamical systems on networks, where one seeks classes of dynamics admitting prescribed Koopman eigenfunctions or conserved quantities. In this respect, the framework is not restricted to Kuramoto-type dynamics and naturally extends to much broader classes of nonlinear systems, as will be further developed in a subsequent paper.

## 6.9 Methods

### Proof outline for Thm. 6.1

Applying $\mathcal{K}$ directly to $z^{\boldsymbol{\mu}}$ yields

$$\sum_{\substack{j,k\in\mathcal{W}\\k\neq j}} \left(A_{jk}\mu_j - \bar{A}_{kj}\mu_k\right) z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} + \sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{k\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{W}} \left(A_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} - \bar{A}_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\right) + iz^{\boldsymbol{\mu}}\sum_{j\in\mathcal{W}}\mu_j\omega_j\,, \tag{6.27}$$

where $(\boldsymbol{e}_j)_\ell = \delta_{j\ell}$ and all monomials are linearly independent. Clearly, if $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is an eigenfunction, its eigenvalue is $i\sum_{j\in\mathcal{W}}\mu_j\omega_j$. The necessary and sufficient conditions on $\boldsymbol{\mu}$ and $A$ for the eigenvalue equation to be satisfied become $A_{jk} = 0$ for all $j \in \mathcal{W}$ and $k \in \mathcal{V}\setminus\mathcal{W}$, and $A_{jk}\mu_j = \bar{A}_{kj}\mu_k$ for all $j,k\in\mathcal{W}$ with $j\neq k$. In terms of $W$ and $\alpha$, these conditions are equivalent to $W_{jk} = 0$ for all $j \in \mathcal{W}$ and $k \in \mathcal{V}\setminus\mathcal{W}$ (condition 1.1), and

$$\mu_j W_{jk} e^{i\alpha_{jk}} = \mu_k W_{kj} e^{-i\alpha_{kj}} \tag{6.28}$$

for all $j,k\in\mathcal{W}$ with $j\neq k$. Since $|\alpha_{jk}| < \pi/2$ and $\mu_j W_{jk}\in\mathbb{R}$, it is straightforward to show that this is equivalent to $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$ (condition 1.4) and $\mu_j W_{jk} = \mu_k W_{kj}$. The latter means that $(W_{jk})_{j,k\in\mathcal{W}}$ is symmetrizable and is satisfied if and only if the second and third conditions of the theorem are satisfied, by Lem. 6.12. The detailed proof is in Sec. 6.11.1, along with a discussion on the extension of the theorem for phase lags in the interval $(-\pi/2,\pi/2]$.

When the exponents $\mu_j$ are not integers, the monomial eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}} = e^{i\boldsymbol{\mu}^\top\boldsymbol{\theta}}$ are naturally understood as smooth functions on $\mathbb{R}^N$, the universal cover of the torus $\mathbb{T}^N$, where the phase variables $\theta_j$ are not identified modulo $2\pi$. Ultimately, the corresponding real observable related to the eigenfunction is the linear function $\sum_{j=1}\mu_j\theta_j$ with $\theta_j\in\mathbb{R}$. However, the monomial observables themselves do not define globally continuous functions on $\mathbb{T}^N$, since $e^{i\mu_j(\theta_j+2\pi)} = e^{i2\pi\mu_j}e^{i\mu_j\theta_j}$, which differs from $e^{i\mu_j\theta_j}$ when $\mu_j\notin\mathbb{Z}$. Nevertheless, they remain smooth after restriction to any simply connected coordinate patch of $\mathbb{T}^N$, where continuous phase coordinates can be chosen locally.

### Proof outline for Thm. 6.2

Computing $\mathcal{K}[\ln V_{IJ}(\boldsymbol{z})]$ and applying the first two conditions give $\mathcal{K}[\ln V_{IJ}(\boldsymbol{z})] = F_{\text{diagonal}} + F_{\text{bipartite}}$ with

$$F_{\text{diagonal}} = \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq} z_q \frac{A_{pp} - \bar{A}_{pp}}{z_p - z_q} - \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs} z_s \frac{A_{ss} - \bar{A}_{ss}}{z_s - z_r} \tag{6.29}$$

$$F_{\text{bipartite}} = \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sum_{k\in J} \sigma_{pq}\, z_q \frac{A_{pk} z_k \bar{z}_p - \bar{A}_{pk} \bar{z}_k z_p}{z_p - z_q} - \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \sum_{k\in I} \tau_{rs} z_s \frac{A_{sk} z_k \bar{z}_s - \bar{A}_{sk} \bar{z}_k z_s}{z_s - z_r}\,. \tag{6.30}$$

Recalling that $A_{jj} = i\omega_j/2$, the fourth condition implies that $F_{\text{diagonal}} = -i(\Sigma_I \Omega_I + \Sigma_J \Omega_J)$, i.e., the eigenvalue. It remains to show that $F_{\text{bipartite}} = 0$. Applying the third condition yields

$$F_{\text{bipartite}} = \mathcal{A}\Big( \sum_{r\in J} T_r z_r \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq} \frac{\bar{z}_p z_q}{z_p - z_q} + \sum_{p\in I} S_p \bar{z}_p \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs} \frac{z_r^2}{z_r - z_s} \Big)\,. \tag{6.31}$$

Yet, note that

$$\sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \frac{\sigma_{pq} \bar{z}_p z_q}{z_p - z_q} = -\sum_{p\in I} S_p \bar{z}_p\,, \qquad \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \frac{\tau_{rs} z_r^2}{z_r - z_s} = \sum_{r\in J} T_r z_r\,. \tag{6.32}$$

Substituting these relations in Eq. (6.31) makes $F_{\text{bipartite}}$ vanish, which demonstrates the result. The detailed proof is given in Sec. 6.12.1.

### Proof outline for Thm. 6.3

The Koopman generator can be expressed as $\mathcal{K} = \boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{L}_{-1} - \bar{\boldsymbol{p}}^\top \boldsymbol{L}_1$ with $\boldsymbol{L}_n = (\ell_1^n,\ \ldots,\ \ell_N^n)^\top$, $\boldsymbol{p} = A\boldsymbol{z} = (p_1,\ \ldots,\ p_N)^\top$, and $\ell_j^n = z_j^{n+1}\partial_j$ for all $n \in \mathbb{Z}$ and $j \in \{1, \ldots, N\}$. Simple calculations lead to

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{L}_{-1}[\ln c_{abcd}(\boldsymbol{z})] &= \frac{p_c - p_a}{z_c - z_a} + \frac{p_d - p_b}{z_d - z_b} - \frac{p_c - p_b}{z_c - z_b} - \frac{p_d - p_a}{z_d - z_a} \\
\bar{\boldsymbol{p}}^\top \boldsymbol{L}_1[\ln c_{abcd}(\boldsymbol{z})] &= \frac{\bar{p}_c z_c^2 - \bar{p}_a z_a^2}{z_c - z_a} + \frac{\bar{p}_d z_d^2 - \bar{p}_b z_b^2}{z_d - z_b} - \frac{\bar{p}_c z_c^2 - \bar{p}_b z_b^2}{z_c - z_b} - \frac{\bar{p}_d z_d^2 - \bar{p}_a z_a^2}{z_d - z_a}\,.
\end{aligned}$$

Further algebraic manipulations then give expressions for $\mathcal{K}[\ln c_{abcd}]$ involving only factorized differences between pairs of elements of $A$. To prove sufficiency, this enables the direct use of the first and second conditions. Only a sum of independent monomials remains with coefficients involving the diagonal terms of $A$ (i.e., the natural frequencies) and $\mathcal{A}_a$, $\mathcal{A}_b$, $\mathcal{A}_c$, $\mathcal{A}_d$. Using the third condition cancels each of these coefficients. To prove necessity, it is convenient to separate the sum over $k \in \mathcal{V}$ as $k \in \{a, b, c, d\}$ and $k \notin \{a, b, c, d\}$. Then, one expands the expressions and collects all the terms with the same monomial. This leads to a linear system of equations that can be solved to deduce the conditions and their necessity. The detailed proof is provided in Sec. 6.13.4.

### Proof outline for Thm. 6.4

Condition 4.1A implies that the four vertices are mutually disconnected ($A_{jk} = 0$ for all $j, k \in \{a, b, c, d\}$ with $j \neq k$) as they can only have an incoming edge from the source. Therefore, condition 3.1 is satisfied. Condition 4.1A also states that the weights of these incoming edges are all equal to $\mathcal{A}_s$, meaning that condition 3.2 holds. Then, condition 3.3 is also fulfilled from condition 4.2A and the fact that $A_{jk} = 0$ for all $j, k \in \{a, b, c, d\}$ with $j \neq k$. Altogether, Thm. 6.3 guarantees the conservation of $c_{abcd}$. Lemma 6.44 then shows that $\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_s L_0^\eta$ is a symmetry generator and condition 4.3A ensures that $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ is not zero. Therefore, $\mathcal{K}[\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]] = \mathcal{S}_\eta[\mathcal{K}[c_{abcd}]] = 0$, i.e., $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ is another constant of motion. Since $\mathcal{K}_\eta$ depends on the source's state $z_s$, $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ also does. Therefore, $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ is functionally independent of $c_{abcd}$, which only depends on $z_a, z_b, z_c, z_d$. The proof of part B is similar, with an additional step to show the functional independence. A detailed proof is given in Sec. 6.14.5.

### Settings for Fig. 6.3 E, F, G

The set $\mathcal{W}_6$ in Fig. 6.3A admits $\#\mathcal{W}_6 - 3$ cross-ratios because its oscillators satisfy conditions 3A-3B. Assuming $\omega_1 = 0$ and $\theta_1(0) = 0$ without loss of generality, the dynamics becomes $\dot{z}_j = \rho(\boldsymbol{z}) + i\Omega z_j - \overline{\rho(\boldsymbol{z})} z_j^2$ with $j \in \mathcal{W}_6$, $\rho(\boldsymbol{z}) = \mathcal{A}_{\text{pert}} + \sum_{\ell \in \mathcal{W}_6} \mathcal{A}_\ell z_\ell$, $\mathcal{A}_{\text{pert}} \in \mathbb{C}$, $\mathcal{A}_\ell = r_\ell e^{-i\beta_\ell} \in \mathbb{C}$, and $\Omega = \omega_x - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_x)$ for any $x \in \mathcal{W}_6$. The parameters $\omega_x$, $r_\ell$, $\beta_\ell$ for all $\ell \in \mathcal{W}_6$, are drawn from arbitrarily chosen Gaussian distributions. Each $r_\ell$ is also set to zero with probability $1 - p_\ell$. In this setup, if $r_\ell < 0$, the $\ell$-th oscillator is a contrarian and if $r_\ell > 0$, the $\ell$-th oscillator is a conformist. If $r_\ell = 0$, the oscillator is neutral. Using the WS transformation in Eq. (6.18) for $j \in \mathcal{W}_6$

$$z_j(t) = \frac{e^{i\phi(t)} w_j + Z(t)}{1 + e^{i\phi(t)} \overline{Z(t)} w_j}, \quad j \in \mathcal{W}_6$$

leads to the differential equations

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}t} = F(Z, \phi) + i\Omega Z - \overline{F(Z, \phi)} Z^2 , \tag{6.33}$$

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t} = \Omega + i(\overline{F(Z, \phi)} Z - F(Z, \phi)\bar{Z}) , \tag{6.34}$$

$$F(Z, \phi) = \mathcal{A}_{\text{pert}} + \sum_{\ell \in \mathcal{W}_6} \mathcal{A}_\ell \frac{e^{i\phi} w_\ell + Z}{1 + e^{i\phi} \overline{Z} w_\ell} , \tag{6.35}$$

which are integrated using DOPRI45 to generate Fig. 6.3 E, F, G. Assuming there is no majority cluster [620, p.217], the initial conditions $Z(0), \phi(0)$, and $(w_j)_{j \in \mathcal{W}_6} = (e^{i\psi_j})_{j \in \mathcal{W}_6}$ are obtained from a real optimization problem designed to satisfy the conditions $\sum_{k \in \mathcal{W}_6} \cos \psi_k = 0$, $\sum_{k \in \mathcal{W}_6} \sin \psi_k = 0$, and the arbitrary condition $\psi_x = 0$ for some $x \in \mathcal{W}_6$.

In Ref. [582], "*synchronization_cross_ratio_part.py*" and "*fig3_plot_synchro_transition.py*" allow reproducing Fig. 6.3E. Note that some trajectories $(Z(t), \phi(t))$ obtained numerically with

DOPRI45 were sensible to larger time steps and the module of $Z(t)$ could get greater than one. When such phenomenon happened, we set the data point for $\langle |Z(t)| \rangle_t$ to *nan*. The scripts "*synchronization_cross_ratio_part_oneinstance.py*" and "*fig3_plot_synchro_trajectories.py*" allow reproducing Fig. 6.3 F,G. The specific parameters used for the paper are in the folder "simulations/kooku1_fig3_data".

### Detection of motifs in Fig. 6.4

Sources are vertices with in-degree zero and 2-sources are pairs of mutually connected vertices with in-degree one, so these monomials are easily found numerically. To detect the motifs admitting conserved cross-ratios, we consider the binary version of the weight matrices representing the empirical networks. From Thm 6.3, detecting a motif admitting one or more conserved cross-ratios requires finding a set of at least four rows in the weight matrix $W$ with identical elements except for those associated with the diagonal (imagine a shuffled version of $W$ in Fig. 6.6). This exception related to the diagonal elements makes the detection more subtle, as one cannot directly use a standard similarity matrix to identify identical rows.

To detect the motifs admitting conserved cross-ratios, we set the weights in $W$ that are greater than a tolerance ($10^{-8}$) to one, we fix the diagonal elements to 0, and we keep only the weakly connected component, yielding a binary adjacency matrix $B$. Then, we construct a special similarity matrix $\Sigma$ from the binary matrix $B$, for which the off-diagonal zero entries are replaced by the imaginary unit $i$. Let us denote this new complex matrix $Q$ and the similarity matrix as the Hermitian matrix $\Sigma = (QQ^\dagger - I)/(N-2)$, where $\dagger$ is the Hermitian conjugation. In this way, an element $\Sigma_{jk} = 1$ indicates that the row $\boldsymbol{b}_j$ and the row $\boldsymbol{b}_k$ in $B$ are identical up to the diagonal elements, as desired. Indeed, if $\boldsymbol{q}_j$ and $\boldsymbol{q}_k$ are the associated (complex) rows in $Q$, the division of $QQ^\dagger$ by $N-2$ normalizes the scalar product $\boldsymbol{q}_j^\dagger \boldsymbol{q}_k$. The subtraction of $I/(N-2)$ also ensures that the diagonal elements of $\Sigma$ are ones. Once $\Sigma$ is obtained, we define a new graph $\mathcal{G}_\Gamma$ with adjacency matrix $\Gamma$ such that $\Gamma_{jk} = 1$ if $\Sigma_{jk} = 1$ and $\Gamma_{jk} = 0$ otherwise. Finding motifs admitting conserved cross-ratios then amounts to finding the maximal cliques of size greater than or equal to 4 in $\mathcal{G}_\Gamma$, which is achieved using the Bron-Kerbosh algorithm implemented in graph-tool.

**Code and data availability**: The symbolic calculations (*Mathematica*, *Matlab*), the *Python* code to generate Fig. 6.3 and 6.4, and the network dataset are available in Ref. [582].

## 6.10 Appendix: Introduction to the Kuramoto model under Koopman's perspective

Koopman theory was initially developed to formulate classical dynamics using linear operators on spaces of observables—mirroring the structure of quantum mechanics [102, 317, 318, 612]. Despite this elegant framework, the theory long lacked concrete theoretical examples for com-

plex systems, where intricate interactions among many constituents give rise to emergent phenomena such as synchronization. Since, moreover, these dynamical systems are transformed into infinite-dimensional systems as a price to pay for having a linear operator, this has cast doubt among many researchers on the usefulness of Koopman theory. For these reasons, one of our goals is to provide concrete analytical results on a widely-used dynamics on networks. For its 50th anniversary and its substantial impact on the study of complex systems, the Kuramoto model is a natural choice to achieve this goal. In this section, we introduce different descriptions of the Kuramoto model and derive the Koopman generator $\mathcal{K}$ of the Kuramoto model presented in the paper.

### 6.10.1 Different descriptions for the Kuramoto model

First of all, we provide more precise descriptions of the Kuramoto model. Note that we define a more general form of the model than the original one [332] and the Kuramoto-Sakaguchi model (or Sakaguchi-Kuramoto model if preferred) [515], where $\alpha_{jk} = \alpha$ for all $j, k$. To highlight the original contribution of Kuramoto, we will stick to the name "Kuramoto model".

**Definition 6.5.** The Kuramoto model is an initial value problem of dimension $N$ such that, for $\theta_j : \mathscr{T} \to E$ with $\mathscr{T}, E \subset \mathbb{R}$,

$$\dot{\theta}_j(t) = \omega_j + \sum_{k=1}^{N} W_{jk} \sin(\theta_k(t) - \theta_j(t) - \alpha_{jk}) \,, \qquad j \in \{1, ..., N\} \tag{6.36}$$

$$\theta_j(0) = \vartheta_j \in E \tag{6.37}$$

where $t \in \mathscr{T}$, $\omega_j, W_{jk} \in \mathbb{R}$ and $-\pi/2 < \alpha_{jk} \leq \pi/2$ for all $j, k$ with $W_{jj} = 0$, $\alpha_{jj} = 0$ for all $j$.

**Remark 6.6.** In the definition, we set $W_{jj} = 0$, $\alpha_{jj} = 0$ for all $j$ without loss of generality. Indeed, consider that $W_{jj} \neq 0$, $\alpha_{jj} \neq 0$ for all $j$. Then, Eq. (6.36) can be expressed as

$$\dot{\theta}_j(t) = \omega_j - W_{jj} \sin(\alpha_{jj}) + \sum_{k \neq j} W_{jk} \sin(\theta_k(t) - \theta_j(t) - \alpha_{jk})$$

which means that the self-interaction term $W_{jj} \sin(\alpha_{jj})$ only acts as a shift to the natural frequency and one can always redefine $\omega_j$ as $\omega_j - W_{jj} \sin(\alpha_{jj})$ without loss of generality. Note also that we could absorb the coupling constant in $W$, but it is useful to control the global weight of the interactions, which can be proportional to $1/N$. ■

**Lemma 6.7.** *There exists a constant $a > 0$ such that the Kuramoto model possesses a unique solution $\theta_1(t), ..., \theta_N(t)$ on $t \in [-a, a]$.*

*Proof.* By the fundamental existence-uniqueness Thm. [471, p.74], it is sufficient to show that the partial derivatives of

$$f_j(\vartheta_1, ..., \vartheta_N) = \omega_j + \sum_{k=1}^{N} W_{jk} \sin(\vartheta_k - \vartheta_j - \alpha_{jk}) \,, \qquad j \in \{1, ..., N\} \,,$$

forming the vector field $\boldsymbol{f} = (f_1, ..., f_N)$ of the model exist and are continuous. For all $j, \ell$, recalling that $W_{jj} = 0$ and $\alpha_{jj} = 0$, the partial derivatives are

$$\frac{\partial f_j(\vartheta_1, ..., \vartheta_N)}{\partial \vartheta_\ell} = \sum_{k \neq j} W_{jk} \frac{\partial \sin(\vartheta_k - \vartheta_j - \alpha_{jk})}{\partial \vartheta_\ell} = \begin{cases} -\sum_{k \neq j} W_{jk} \cos(\vartheta_k - \vartheta_j - \alpha_{jk}), & \text{if } j = \ell \\ W_{j\ell} \cos(\vartheta_\ell - \vartheta_j - \alpha_{j\ell}), & \text{if } j \neq \ell \end{cases},$$

which are evidently continuous functions on $\mathbb{R}^N$. □

It is often convenient to rather work with the model described in the complex plane.

**Lemma 6.8.** *Let $z_j(t) = e^{i\theta_j(t)}$ with $\theta_j$ and $t$ as in Def. 6.5. The initial value problem in $z_1, ..., z_N$ related to Def. 6.5 is*

$$\dot{z}_j(t) = p_j(\boldsymbol{z}(t)) + i\omega_j z_j(t) - \overline{p_j(\boldsymbol{z}(t))} z_j(t)^2, \qquad p_j(\boldsymbol{z}(t)) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N W_{jk} e^{-i\alpha_{jk}} z_k(t) \tag{6.38}$$

$$z_j(0) = e^{i\vartheta_j} \in \mathbb{T} \tag{6.39}$$

*for all $j \in \{1, ..., N\}$.*

*Proof.* The derivative of $z_j$ is $\dot{z}_j = i z_j \dot{\theta}_j$. Substituting Eq. (6.36) and expressing the sine function with complex exponentials readily yields the result. □

**Remark 6.9.** Note that $z_j(t) = e^{i\theta_j(t)}$ is not bijective when $\theta_j(t) \in \mathbb{R}$ (e.g., $\theta_j(t) = 0$ or $2\pi$ both yield $z_j(t) = 1$). Yet, restricting the initial condition $\vartheta_1, ..., \vartheta_N$ such that $\vartheta_j \in [0, 2\pi)$ and assuming $\theta_j(t)$ is continuous in time for all $j$ is sufficient to guarantee the correspondence of the trajectories for the dynamics in $\boldsymbol{\theta}$ and $\boldsymbol{z}$. ■

Another useful formulation of the model, where all the parameters are regrouped in only one matrix, is the following.

**Lemma 6.10.** *The initial value problem (6.38-6.39) is equivalent to*

$$\dot{z}_j(t) = \sum_{k=1}^N A_{jk} z_k(t) - \left( \sum_{k=1}^N \bar{A}_{jk} \bar{z}_k(t) \right) z_j(t)^2 \tag{6.40}$$

$$z_j(0) = e^{i\vartheta_j} \in \mathbb{T}, \tag{6.41}$$

*where $A$ is a complex matrix of interactions satisfying*

$$A = \frac{1}{2} \left( W \circ e^{-i\alpha} + i \operatorname{diag}(\boldsymbol{\omega}) \right), \tag{6.42}$$

*where $e^{-i\alpha} = (e^{-i\alpha_{jk}})_{j,k}$, $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, ..., \omega_N)$, $\circ$ is the element-wise product and $\operatorname{diag}(W) = \operatorname{diag}(\alpha) = \mathbf{0}$. There exists a constant $a > 0$ such that the problem (6.40-6.41) possesses a unique solution $z_1(t), ..., z_N(t)$ on $t \in [-a, a]$.*

*Proof.* From Lem. 6.8, the model is equivalently described by

$$\dot{z}_j = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} W_{jk} e^{-i\alpha_{jk}} z_k + i\omega_j z_j - \overline{\left(\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} W_{jk} e^{-i\alpha_{jk}} z_k\right)} z_j^2 \,. \tag{6.43}$$

The term related to the natural frequencies can be separated such that

$$i\omega_j z_j = \frac{i}{2}\omega_j z_j + \frac{i}{2}\omega_j z_j = \frac{i}{2}\omega_j z_j - \overline{\left(\frac{i}{2}\omega_j \bar{z}_j\right)} \,.$$

Since $\bar{z}_j = \bar{z}_j^2 z_j$, then

$$i\omega_j z_j = \frac{i}{2}\omega_j z_j - \overline{\left(\frac{i}{2}\omega_j z_j\right)} z_j^2 = \frac{i}{2}\sum_{k=1}^{N} \omega_k z_k \delta_{jk} - \overline{\left(\frac{i}{2}\sum_{k=1}^{N} \omega_k z_k \delta_{jk}\right)} z_j^2 \,.$$

The substitution of the latter equation into Eq. (6.43) gives

$$\dot{z}_j = \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{1}{2}W_{jk}e^{-i\alpha_{jk}} + \frac{i}{2}\omega_k\delta_{jk}\right) z_k - \overline{\left(\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{1}{2}W_{jk}e^{-i\alpha_{jk}} + \frac{i}{2}\omega_k\delta_{jk}\right) z_k\right)} z_j^2 \,,$$

which is the desired result by defining $A_{jk} = \frac{1}{2}W_{jk}e^{-i\alpha_{jk}} + \frac{i}{2}\omega_k\delta_{jk}$ for all $j,k$. The proof of uniqueness of the solutions is similar to Lem. 6.7: the elements of the Jacobian matrix of $\boldsymbol{F} = (F_1, ..., F_N)$ with $F_j(\boldsymbol{w}) = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} w_k - \left(\sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk}\bar{w}_k\right) w_j^2$ and $\bar{w}_k = 1/w_k$ are

$$\frac{\partial F_j(\boldsymbol{w})}{\partial w_\ell} = A_{j\ell} + \bar{A}_{j\ell}\bar{w}_\ell^2 w_j^2 - 2\sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk}\bar{w}_k w_j \delta_{j\ell}$$

and thus, the partial derivatives exist and are continuous on $\mathbb{T}^N$. □

**Remark 6.11.** The first term $\frac{1}{2}W \circ e^{-i\alpha}$ encodes the interaction between the oscillators ($\mathrm{diag}(W) = \mathrm{diag}(\alpha) = \mathbf{0}$), while the natural frequencies are the self-interaction terms (self-loops with imaginary weights). ■

### 6.10.2 Koopman generator for the Kuramoto model

We refer to standard articles such as Refs. [88,91] for a more complete introduction to Koopman theory. One can also see subsection 6.14.1 for the definition of the Koopman operator and its generator for general non-autonomous systems.

For the Kuramoto model in terms of the phases in Def. 6.5, the Koopman generator is

$$\mathcal{K} = \sum_{j=1}^{N}\left(\omega_j + \sum_{k=1}^{N} W_{jk}\sin(\theta_k - \theta_j - \alpha_{jk})\right)\frac{\partial}{\partial\theta_j} \tag{6.44}$$

and acts on functions of the phases $(\theta_1, ..., \theta_N) \in \mathbb{R}^N$ (recall the abuse of notation $\theta_j(t) = \theta_j \in \mathbb{R}$), giving another real function. The Koopman generator is a Lie derivative $\mathcal{L}_{\boldsymbol{F}}$ along the

dynamics' vector field $\boldsymbol{F}$ acting on scalar functions. The related Koopman operator encodes all the information on the flow when the state space is compact [164, Theorem 4.13].

Under the change of variables $z_j = e^{i\theta_j}$ for all $j$, the partial derivatives for the phases become $\partial/\partial\theta_j = iz_j\partial/\partial z_j$ and one readily gets the Koopman generator of the Kuramoto model under the form given in Lem. 6.10:

$$\mathcal{K} = \sum_{j,k=1}^{N} \left(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2\right) \frac{\partial}{\partial z_j}\,, \tag{6.45}$$

In matrix form, one can write

$$\mathcal{K} = \boldsymbol{z}^\top A^\top \boldsymbol{L}_{-1} - \bar{\boldsymbol{z}}^\top \bar{A}^\top \boldsymbol{L}_1\,, \tag{6.46}$$

where

$$\boldsymbol{L}_n = \left(z_1^{n+1}\frac{\partial}{\partial z_1},\ \ldots,\ z_N^{n+1}\frac{\partial}{\partial z_N}\right)^\top, \qquad n \in \mathbb{Z}. \tag{6.47}$$

are the vectorial Euler differential operators. The elements of the vectorial operators $\boldsymbol{L}_n$ form a larger algebra. Indeed, defining

$$\ell_j^n = z_j^{n+1}\frac{\partial}{\partial z_j}, \qquad n \in \mathbb{Z}, \quad j \in \{1,\ldots,N\}, \tag{6.48}$$

the Koopman generator becomes

$$\mathcal{K} = \sum_{j,k=1}^{N} A_{jk}z_k\ell_j^{-1} - \sum_{j,k=1}^{N} \bar{A}_{jk}z_k^{-1}\ell_j^1\,. \tag{6.49}$$

We adopt $\boldsymbol{L}_n$ and $\ell_j^n$ as notation by analogy with the elements of the Witt (more generally, Virasoro) algebra, to which the special linear algebra naturally forms a subalgebra.

All the forms of the Koopman generator can be useful depending on the context. We will typically use Eq. (6.45) as in the paper, because of its simple form.

In the next section, we show how one can find monomial eigenfunctions for the generator $\mathcal{K}$ and how they lead to constants of motion.

## 6.11 Appendix: Monomial eigenfunctions and their conservation

Among the most fundamental objects in Koopman theory are the eigenfunctions. The goal of this section is to provide the proof of Thm. 6.1 on monomial eigenfunctions from the main text and the details regarding their conservation, along with some basic examples.

### 6.11.1 Proof of Theorem 1: Monomial eigenfunctions

Before providing the proof of the first theorem of the paper, we need to introduce an important lemma that defines symmetrizable matrices in a more general way than Ref. [401].

**Lemma 6.12.** *Consider a real matrix $B$ of size $b \times b$. The following statements are equivalent:*

1. *$B$ is symmetrizable;*
2. *$DB$ is symmetric, where $D$ is a real diagonal matrix with nonzero diagonal elements;*
3. *$\mu_j B_{jk} = \mu_k B_{kj}$ for some $\mu_j, \mu_k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for all $1 \leq j < k \leq b$;*
4. *a) $B_{jk} \neq 0$ whenever $B_{kj} \neq 0$ for all $1 \leq j < k \leq b$;*
   *b) $B_{i_1 i_2} B_{i_2 i_3} ... B_{i_{\eta-1} i_\eta} B_{i_\eta i_1} = B_{i_1 i_\eta} B_{i_\eta i_{\eta-1}} ... B_{i_3 i_2} B_{i_2 i_1}$ for all sequences $i_1, i_2, ..., i_\eta$ of elements of $\{1, ..., b\}$.*

*Proof.* $(1 \Leftrightarrow 2)$ By definition.

$(2 \Leftrightarrow 3)$ Since all the elements of $\boldsymbol{\mu} = (\mu_j)_{j=1}^b$ and those of the diagonal of $D$ are nonzero, suppose that $D = \mathrm{diag}(\boldsymbol{\mu})$. Element-wise, $DB = (DB)^\top$ is then equivalent to $\mu_j B_{jk} = \mu_k B_{kj}$ for all $1 \leq j < k \leq b$.

$(3 \Rightarrow 4)$ First, all the elements of $\boldsymbol{\mu}$ are nonzero and thus, $\mu_j B_{jk} = \mu_k B_{kj}$ implies that $B_{jk} = \mu_k B_{kj}/\mu_j$ for all $j, k \in \{1, ..., b\}$. Consequently, $B_{kj} \neq 0$ implies that $B_{jk} \neq 0$. Second, multiplying together $\mu_k B_{kj} = \mu_j B_{jk}$ for any sequence $i_1, i_2, ..., i_\eta$ of elements of $\{1, ..., b\}$ gives

$$\mu_{i_1} \mu_{i_2} ... \mu_{i_{\eta-1}} \mu_{i_\eta} B_{i_1 i_2} B_{i_2 i_3} ... B_{i_{\eta-1} i_\eta} B_{i_\eta i_1} = \mu_{i_1} \mu_{i_\eta} ... \mu_{i_3} \mu_{i_2} B_{i_1 i_\eta} B_{i_\eta i_{\eta-1}} ... B_{i_3 i_2} B_{i_2 i_1} \,. \tag{6.50}$$

But $\mu_j \neq 0$ for all $j$ and therefore,

$$B_{i_1 i_2} B_{i_2 i_3} ... B_{i_{\eta-1} i_\eta} B_{i_\eta i_1} = B_{i_1 i_\eta} B_{i_\eta i_{\eta-1}} ... B_{i_3 i_2} B_{i_2 i_1} \,. \tag{6.51}$$

$(3 \Leftarrow 4)$ Let us interpret $B$ as the weight matrix of a graph. If the graph is not connected, simply repeat the following procedure for each connected component. Otherwise, $B$ can be interpreted as the weight matrix of a strongly connected graph (because of condition 4(a)). If $b = 1$, then the implication is trivially satisfied. Otherwise, for $b > 1$, choose $\mu_\ell \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for some $\ell \in \{1, ..., b\}$. Since the graph is strongly connected, there exists a $j \in \{1, ..., b\}$ with $j \neq \ell$ such that $B_{\ell j}/B_{j\ell}$ is a well-defined, nonzero ratio from condition 4(a). Their product allows defining a new nonzero real number $\mu_j$ such that

$$\mu_j := \frac{B_{\ell j}}{B_{j\ell}} \mu_\ell \,. \tag{6.52}$$

Again, because the graph is strongly connected, one can repeat the procedure iteratively to set $\mu_k$ for all $k \in \{1, ..., b\} \setminus \{j, \ell\}$. This implies that all the elements of $\mu_1, ..., \mu_b$ satisfy $\mu_p B_{pq} = \mu_q B_{qp}$ for at least one given pair $(p, q)$, because $\mu_p$ was built from $\mu_q$ using Eq. (6.52).

Let us now deal with null matrix elements and ensure that $\mu_j B_{jk} = \mu_k B_{kj}$ *for all* $1 \leq j < k \leq b$ with $j \neq k$. Condition 4(a) ensures that $B_{kj} \neq 0 \Rightarrow B_{jk} \neq 0$. The contrapositive of this statement is that $B_{jk} = 0 \Rightarrow B_{kj} = 0$. But condition 4(a) applies for all $1 \leq j < k \leq b$, so $B_{kj} = 0$ also implies that $B_{jk} = 0$. When $B_{jk} = B_{kj} = 0$, condition 3 is trivially satisfied for any finite values of $\mu_j$ and $\mu_k$.

For nonzero $B_{jk}$ and $B_{kj}$, consider the cycle condition 4(b) with a sequence $i_1, i_2, ..., i_{\eta-1}, i_\eta$ of elements in $\{1, ..., b\}$ where $i_1 = j$, $i_\eta = k$ and $B_{i_m i_{m+1}} \neq 0$ for all $m \in \{1, ..., \eta - 1\}$. Since the graph is connected, this type of sequence exists and can be chosen in such a way that, from the building procedure of $\mu_1, ..., \mu_b$,

$$\mu_{i_m} B_{i_m i_{m+1}} = \mu_{i_{m+1}} B_{i_{m+1} i_m} \,, \tag{6.53}$$

or equivalently, since all elements involved are nonzero,

$$\mu_{i_{m+1}} / \mu_{i_m} = B_{i_m i_{m+1}} / B_{i_{m+1} i_m} \,. \tag{6.54}$$

According to the cycle condition 4(b),

$$B_{j\, i_2} B_{i_2 i_3} ... B_{i_{\eta-1} k} B_{kj} = B_{jk} B_{k\, i_{\eta-1}} ... B_{i_3 i_2} B_{i_2 j} \,. \tag{6.55}$$

Since $B_{kj} \neq 0$ and $B_{i_m i_{m+1}} \neq 0$ for all $m$, it can be rewritten as

$$\frac{B_{jk}}{B_{kj}} = \frac{B_{j\, i_2} B_{i_2 i_3} ... B_{i_{\eta-1} k}}{B_{k\, i_{\eta-1}} B_{i_{\eta-1} i_\eta} ... B_{i_2 j}} \,, \tag{6.56}$$

and Eq. (6.54) then implies

$$\frac{B_{jk}}{B_{kj}} = \frac{\mu_{i_2} ... \mu_{i_{\eta-1}} \mu_k}{\mu_j \mu_{i_2} ... \mu_{i_{\eta-1}}} = \frac{\mu_k}{\mu_j} \,. \tag{6.57}$$

Therefore, $\mu_j B_{jk} = \mu_k B_{kj}$ for all $1 \leq j < k \leq b$ as desired. □

The relevance of the latter lemma lies in the fact that it enables stating Thm. 6.1 solely in terms of the weight matrix and the phase lags.

**Theorem 6.13.** *[Thm. 6.1 of the paper] Let* $\mathcal{W} \subset \mathcal{V}$ *be a non-empty subset of vertices such that* $|\alpha_{jk}| < \pi/2$ *for all* $j, k \in \mathcal{W}$. *Let* $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1 \ \cdots \ \mu_N)^\top \in \mathbb{R}^N$ *satisfy* $\mu_j \neq 0$ *if and only if* $j \in \mathcal{W}$. *There exists a* $\boldsymbol{\mu}$ *such that the monomial* $z^{\boldsymbol{\mu}} := z_1^{\mu_1} ... z_N^{\mu_N}$ *is an eigenfunction of the Koopman generator* $\mathcal{K}$ *in Eq. (6.45) if and only if*

1. $W_{jk} = 0$ *for all* $j \in \mathcal{W}$ *and* $k \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{W}$;
2. $W_{jk} \neq 0$ *whenever* $W_{kj} \neq 0$ *for all* $j, k \in \mathcal{W}$ ;
3. $W_{i_1 i_2} ... W_{i_{\eta-1} i_\eta} W_{i_\eta i_1} = W_{i_1 i_\eta} W_{i_\eta i_{\eta-1}} ... W_{i_2 i_1}$ $\forall$ *sequences* $i_1, i_2, ..., i_\eta$ *of elements of* $\mathcal{W}$;
4. $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$ *whenever* $j, k \in \mathcal{W}$, $j \neq k$, $W_{jk} \neq 0$.

*If* $z^{\boldsymbol{\mu}}$ *is an eigenfunction, then its eigenvalue is* $i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\omega}$.

*Proof.* The action of the Koopman generator on a monomial $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is

$$\mathcal{K}\left[z^{\boldsymbol{\mu}}\right] = \sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{k\in\mathcal{V}}\left(A_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} - \bar{A}_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_k+\boldsymbol{e}_j}\right), \tag{6.58}$$

where $(\boldsymbol{e}_j)_\ell = \delta_{j\ell}$. Splitting the sum over $k \in \mathcal{V}$ to $\mathcal{W}$ and $\mathcal{V}\setminus\mathcal{W}$ yields

$$\mathcal{K}\left[z^{\boldsymbol{\mu}}\right] = \sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{k\in\mathcal{W}}\left(A_{jk}\mu_j - \bar{A}_{kj}\mu_k\right) z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} + \sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{k\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{W}}\left(A_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} - \bar{A}_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_k+\boldsymbol{e}_j}\right). \tag{6.59}$$

The diagonal terms can also be separated from the off-diagonal ones to obtain

$$\begin{aligned}\mathcal{K}\left[z^{\boldsymbol{\mu}}\right] = &\sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{\substack{k\in\mathcal{W}\\k\neq j}}\left(A_{jk}\mu_j - \bar{A}_{kj}\mu_k\right) z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} + \sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{k\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{W}}\left(A_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} - \bar{A}_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_k+\boldsymbol{e}_j}\right)\\ &+ iz^{\boldsymbol{\mu}}\sum_{j\in\mathcal{W}}\omega_j\mu_j\,.\end{aligned} \tag{6.60}$$

The monomial $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is an eigenfunction of the Koopman generator if and only if it satisfies the eigenvalue equation

$$\mathcal{K}[z^{\boldsymbol{\mu}}] = \lambda z^{\boldsymbol{\mu}}\,, \tag{6.61}$$

which is equivalent, by Eq. (6.60), to

$$\begin{aligned}\lambda z^{\boldsymbol{\mu}} = &\sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{\substack{k\in\mathcal{W}\\k\neq j}}\left(A_{jk}\mu_j - \bar{A}_{kj}\mu_k\right) z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} + \sum_{j\in\mathcal{W}}\sum_{k\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{W}}\left(A_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} - \bar{A}_{jk}\mu_j z^{\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\right)\\ &+ iz^{\boldsymbol{\mu}}\sum_{j\in\mathcal{W}}\mu_j\omega_j\,.\end{aligned} \tag{6.62}$$

All monomials on the right-hand side are linearly independent. Clearly, if $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is an eigenfunction, its eigenvalue is $i\sum_{j\in\mathcal{W}}\mu_j\omega_j$. Also, the necessary and sufficient conditions on $\boldsymbol{\mu}$ and $A$ for the eigenvalue equation to be satisfied with eigenvalue $i\sum_{j\in\mathcal{W}}\mu_j\omega_j$ are $A_{jk} = 0$ for all $j \in \mathcal{W}$ and $k \in \mathcal{V}\setminus\mathcal{W}$, and

$$A_{jk}\mu_j = \bar{A}_{kj}\mu_k \tag{6.63}$$

for all $j, k \in \mathcal{W}$ with $j \neq k$. In terms of the weight matrix $W$ and the phase-lag matrix $\alpha$, these conditions are equivalent to $W_{jk} = 0$ for all $j \in \mathcal{W}$ and $k \in \mathcal{V}\setminus\mathcal{W}$ (condition 1), and

$$\mu_j W_{jk} e^{i\alpha_{jk}} = \mu_k W_{kj} e^{-i\alpha_{kj}} \tag{6.64}$$

for all $j, k \in \mathcal{W}$ with $j \neq k$. The two complex numbers in Eq. (6.64) are equal if and only if their modulus coincide and, when their modulus is nonzero, their principal argument also coincide. In other words, Eq. (6.64) is satisfied if and only if either one of the following conditions is satisfied:

1. $|\mu_j W_{jk}| = |\mu_k W_{kj}| = 0$;
2. $|\mu_j W_{jk}| = |\mu_k W_{kj}| \neq 0$ and $\alpha_{jk} + \mathrm{Arg}(\mu_j W_{jk}) = -\alpha_{kj} + \mathrm{Arg}(\mu_k W_{kj})$.

In the last condition, $\mathrm{Arg}(z) \in (-\pi, \pi]$ denotes the principal argument of $z$. The first condition is equivalent to $W_{jk} = W_{kj} = 0$ because $\mu_j$ is non-zero for each $j \in \mathcal{W}$. For the second condition, recall that $|\alpha_{jk}| < \pi/2$, while $\mu_j W_{jk} \in \mathbb{R}$ is equivalent to the fact that the arguments $\mathrm{Arg}(\mu_j W_{jk})$ and $\mathrm{Arg}(\mu_k W_{kj})$ are 0 or $\pi$. Therefore, $\alpha_{jk} + \mathrm{Arg}(\mu_j W_{jk}) = -\alpha_{kj} + \mathrm{Arg}(\mu_k W_{kj})$ if and only if $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$ and $\mathrm{Arg}(\mu_j W_{jk}) = \mathrm{Arg}(\mu_k W_{kj})$. The second condition is thus equivalent to $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$, $\mathrm{Arg}(\mu_j W_{jk}) = \mathrm{Arg}(\mu_k W_{kj})$, and $|\mu_j W_{jk}| = |\mu_k W_{kj}| \neq 0$. This first equation provides the fourth condition 4 of the theorem: $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$ for all $j, k \in \mathcal{W}$ such that $W_{jk} \neq 0$. Together, $\mathrm{Arg}(\mu_j W_{jk}) = \mathrm{Arg}(\mu_k W_{kj})$ and $|\mu_j W_{jk}| = |\mu_k W_{kj}| \neq 0$ are equivalent to $\mu_j W_{jk} = \mu_k W_{kj}$. Then, by Lem. 6.12, there exists at least one $\boldsymbol{\mu}$ such that $\mu_j W_{jk} = \mu_k W_{kj}$ for all $j, k \in \mathcal{W}$ with $j \neq k$ if and only if $W_{jk} \neq 0$ whenever $W_{kj} \neq 0$ for all $j, k \in \mathcal{W}$ (condition 2) and $W_{i_1 i_2} W_{i_2 i_3} ... W_{i_{\eta-1} i_\eta} W_{i_\eta i_1} = W_{i_1 i_\eta} W_{i_\eta i_{\eta-1}} ... W_{i_3 i_2} W_{i_2 i_1}$ for all sequences $i_1, i_2, ..., i_\eta$ of elements of $\mathcal{W}$ (condition 3). Altogether, conditions 1-4 are necessary and sufficient for the monomial $z^{\boldsymbol{\mu}}$ to be an eigenfunction of $\mathcal{K}$. □

**Remark 6.14.** The theorem can be extended to phase lags in the interval $-\frac{\pi}{2} < \alpha_{jk} \leq \frac{\pi}{2}$ for all $j, k \in \mathcal{W}$, but $\pi/2$ phase lags imply different specific conditions that we wanted to avoid for the sake of simplicity. Indeed, if $\alpha_{jk} = \pi/2$ for some $j, k \in \mathcal{W}$ with $W_{jk} \neq 0$, Eq. (6.64) becomes $i\mu_j W_{jk} = \mu_k W_{kj} e^{-i\alpha_{kj}}$. Since $-\pi/2$ phase lags are excluded from the interval and $\mu_j W_{jk} \in \mathbb{R}$ for all $j, k \in \mathcal{W}$, the matching of the modulus and complex phase results in $\alpha_{jk} = \alpha_{kj} = \pi/2$ and $\mu_j W_{jk} = -\mu_k W_{kj}$. If $\mu_j W_{jk} = -\mu_k W_{kj}$ for all $j, k \in \mathcal{W}$, $(W_{jk})_{j,k \in \mathcal{W}}$ is skew-symmetrizable. If there is a mix of phase lags equal to $\pi/2$ and in the interval $(-\pi/2, \pi/2)$, the symmetrizability conditions (2 and 3) apply not directly to $W$, but to another matrix equal to $W$ up to the sign inversion of some elements. ■

### 6.11.2 Procedure for constructing the monomial eigenfunction exponent $\boldsymbol{\mu}$

The procedure for constructing $\boldsymbol{\mu}$ from $W$ is identical to the one from the proof of Lemma 6.12. For the sake of clarity, we reproduce the procedure explicitly in this subsection with very few adjustments.

First, define $B$ as the submatrix related to the subgraph with vertex set $\mathcal{W}$ of size $b$ from Thm. 6.13. If the subgraph is not connected, one can repeat the following procedure for each connected component. In the connected case, condition 2 of Thm. 6.13 implies that $B$ is the weight matrix of a strongly connected graph. If $b = 1$, then $\boldsymbol{\mu}$ contains a single arbitrary nonzero element. Otherwise, for $b > 1$, choose $\mu_\ell \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for some $\ell \in \mathcal{W}$. Since the graph is strongly connected, there exists a $j \in \mathcal{W}$ with $j \neq \ell$ such that $B_{\ell j}/B_{j\ell}$ is a well-defined, nonzero ratio from condition 2 of Thm. 6.13. Their product allows defining a new nonzero real number $\mu_j$ such that

$$\mu_j := \frac{B_{\ell j}}{B_{j\ell}} \mu_\ell \,. \tag{6.65}$$

Again, because the graph is strongly connected, one can repeat the procedure iteratively to set $\mu_k$ for all $k \in \mathcal{W} \setminus \{j, \ell\}$, which completes the construction of $\boldsymbol{\mu}$.

### 6.11.3 Monomials as constants of motion

Having a monomial eigenfunction $z^{\boldsymbol{\mu}}$ implies the existence of a constant of motion with the form $z^{\boldsymbol{\mu}} e^{-i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\omega} t}$. If $\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\omega} = 0$, the time dependence disappears, which is convenient when making a change of variables. This is, however, a rather specific case, because the powers of monomial eigenfunctions are determined by the weight matrix, thus restricting the natural frequencies satisfying the orthogonality condition. In the more general case, it is possible to combine eigenfunctions with nonzero eigenvalues to obtain constants of motion with no time dependence, as presented in the following lemma.

**Lemma 6.15.** *Let the Kuramoto model in Lem. 6.10 have natural frequencies $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1 \cdots \omega_N)$ and Koopman generator $\mathcal{K}$. Suppose that $\mathcal{K}$ admits $1 \leq q \leq N$ functionally independent monomial eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}_1}, \ldots, z^{\boldsymbol{\mu}_q}$, where $\boldsymbol{\mu}_\rho \in \mathbb{R}^N$ for each $1 \leq \rho \leq q$, whose corresponding eigenvalues are given by the vector $\boldsymbol{\lambda} = (i\boldsymbol{\mu}_1^\top \boldsymbol{\omega} \ \cdots \ i\boldsymbol{\mu}_q^\top \boldsymbol{\omega})^\top$. If all eigenvalues are nonzero, then there are $q-1$ functionally independent monomial constants of motion $z^{\boldsymbol{\nu}_1}, \ldots, z^{\boldsymbol{\nu}_{q-1}}$, defined by the matrix equation $(\boldsymbol{\nu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\nu}_{q-1}) = (\boldsymbol{\mu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\mu}_q)O$ where $O$ is a real $q \times (q-1)$ matrix having linearly independent columns orthogonal to $\boldsymbol{\lambda}$.*

*Proof.* Denote $\psi_\rho(\boldsymbol{z}) = z^{\boldsymbol{\mu}_\rho}$ for all $\rho \in \{1, ..., q\}$. Since $\boldsymbol{z} \in \mathbb{T}^N$, these $q$ monomials are non-vanishing eigenfunctions of $\mathcal{K}$. Moreover, since the eigenfunctions are also assumed to be functionally independent, the vectors $\boldsymbol{\mu}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_q$ are linearly independent and thus span a $q$-dimensional subspace in $\mathbb{R}^N$.

Now, it is known that the product of non-vanishing eigenfunctions yields an eigenfunction with sums of eigenvalues [91, Proposition 5]. Explicitly, for any real numbers $a_1, ..., a_q$,

$$\mathcal{K}\left[\prod_{\rho=1}^{q} \psi_\rho^{a_\rho}\right] = \left(\sum_{\eta=1}^{q} a_\eta \lambda_\eta\right) \prod_{\rho=1}^{q} \psi_\rho^{a_\rho}.$$

Then, $\prod_{\rho=1}^{q} \psi_\rho^{a_\rho}$ is a constant of motion if and only if the new orthogonality condition $\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{\lambda} = 0$ is met. This condition is nontrivial since, by assumption, no component of $\boldsymbol{\lambda}$ is zero. Clearly, in this case, the imaginary part of $\boldsymbol{\lambda}$ lies in $\mathbb{R}^q$ and has a $(q-1)$-dimensional orthogonal complement. This implies that we can find $q-1$ linearly independent vectors $\boldsymbol{a}_\tau = (a_{\tau 1} \cdots a_{\tau q})^\top \in \mathbb{R}^q$, for $\tau \in \{1, \ldots, q-1\}$, that are orthogonal to $\boldsymbol{\lambda}$. Since monomials of linearly independent powers are functionally independent, there are $q-1$ constants of motion having the form

$$\Psi_\tau(\boldsymbol{z}) = \prod_{\rho=1}^{q} \psi_\rho^{a_{\tau\rho}}(\boldsymbol{z}) = \prod_{\rho=1}^{q} \left(z_1^{a_{\tau\rho}(\boldsymbol{\mu}_\rho)_1} \cdots z_N^{a_{\tau\rho}(\boldsymbol{\mu}_\rho)_N}\right) = \prod_{j=1}^{N} z_j^{\sum_{\rho=1}^{q} (\boldsymbol{\mu}_\rho)_j a_{\tau\rho}} = z^{\boldsymbol{\nu}_\tau}$$

for $\tau \in \{1, ..., q-1\}$, where $\boldsymbol{\nu}_\tau = U\boldsymbol{a}_\tau$ with $U = (\boldsymbol{\mu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\mu}_q)$. Altogether, the vectors $\boldsymbol{\nu}_1, \ldots, \boldsymbol{\nu}_{q-1}$, which define the monomial constants of motion, satisfy the matrix equation $(\boldsymbol{\nu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\nu}_{q-1}) = UO$, where $O = (\boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_{q-1})$. The latter is a real $q \times (q-1)$ matrix with linearly independent columns satisfying $O^\top \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$, and the lemma follows. □

**Remark 6.16.** The above lemma remains valid if the condition "all eigenvalues are nonzero" is replaced by "at least one eigenvalue is nonzero." However, in this case, some eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}_\rho}$ are themselves constants of motion, and thus some of the resulting constants of motion $z^{\boldsymbol{\nu}_\tau}$ may factor through them — that is, they include terms like $z^{\boldsymbol{\mu}_\rho}$ as multiplicative factors. As a result, the two sets of constants of motion become functionally dependent. The condition that all eigenvalues are nonzero therefore ensures the cleanest setting, where the only functionally independent constants of motion are precisely the monomials $z^{\boldsymbol{\nu}_\tau}$. ■

### 6.11.4 Basic examples for Theorem 1 and the conservation of monomials

**Example 6.17.** Consider a (sink) directed star of five Kuramoto oscillators such that

$$\dot{z}_1 = i\omega_1 z_1 + (A_{12}z_2 - \bar{A}_{12}\bar{z}_2 z_1^2) + (A_{13}z_3 - \bar{A}_{13}\bar{z}_3 z_1^2) + (A_{14}z_4 - \bar{A}_{14}\bar{z}_4 z_1^2) + (A_{15}z_5 - \bar{A}_{15}\bar{z}_5 z_1^2)$$
$$\dot{z}_k = i\omega_k z_k\,, \quad k \in \{2,3,4,5\}.$$

Clearly, the last four equations readily inform that $z_2, z_3, z_4, z_5$ are $q = 4$ monomial eigenfunctions with respective eigenvalues $\boldsymbol{\lambda} = (i\omega_2 \ \ i\omega_3 \ \ i\omega_4 \ \ i\omega_5)$ (let's assume they are not zero). From Lem. 6.15, those eigenfunctions can be combined to obtain 3 functionally independent constants of motion. For example, $z_2^{\omega_3} z_3^{-\omega_2}$, $z_3^{\omega_4} z_4^{-\omega_3}$ and $z_4^{\omega_5} z_5^{-\omega_4}$ is a set of independent constants of motion, along with the time-dependent integral $z_5 e^{-i\omega_5 t}$. ■

**Example 6.18.** Consider the system of 10 Kuramoto oscillators associated with the complex matrix $A$ given by

$$\begin{bmatrix}
i\omega_1/2 & \mathcal{B}_{12}e^{i\alpha_{12}} & \mathcal{B}_{13}e^{i\alpha_{13}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\mathcal{B}_{21}e^{-i\alpha_{12}} & i\omega_2/2 & \mathcal{B}_{23}e^{i\alpha_{23}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\mathcal{B}_{31}e^{-i\alpha_{13}} & \mathcal{B}_{32}e^{-i\alpha_{23}} & i\omega_3/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & i\omega_4/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & i\omega_5/2 & \mathcal{C}_{12}e^{i\alpha_{56}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \mathcal{C}_{21}e^{-i\alpha_{56}} & i\omega_6/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\omega_7/2 & \mathcal{D}_{12}e^{i\alpha_{78}} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathcal{D}_{21}e^{-i\alpha_{78}} & i\omega_8/2 & 0 & 0 \\
A_{9,1} & A_{9,2} & A_{9,3} & A_{9,4} & A_{9,5} & A_{9,6} & A_{9,7} & A_{9,8} & i\omega_9/2 & A_{9,10} \\
A_{10,1} & A_{10,2} & A_{10,3} & A_{10,4} & A_{10,5} & A_{10,6} & A_{10,7} & A_{10,8} & A_{10,9} & i\omega_{10}/2
\end{bmatrix}, \tag{6.66}$$

where $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{D}$ are respectively $3 \times 3$, $2 \times 2$ and $2 \times 2$ real matrices with null diagonal and nonzero off-diagonal elements. Let

$$\boldsymbol{\mu}_\mathcal{B} = (\mu^1_\mathcal{B}, \mu^2_\mathcal{B}, \mu^3_\mathcal{B}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^\top,$$
$$\boldsymbol{\mu}_\mathcal{C} = (0, 0, 0, 0, \mu^5_\mathcal{C}, \mu^6_\mathcal{C}, 0, 0, 0, 0)^\top,$$
$$\boldsymbol{\mu}_\mathcal{D} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, \mu^7_\mathcal{D}, \mu^8_\mathcal{D}, 0, 0)^\top.$$

Since $2 \times 2$ matrices are always symmetrizable, let $\mathrm{diag}(\mu_{\mathcal{C}}^5, \mu_{\mathcal{C}}^6)\mathcal{C}$ and $\mathrm{diag}(\mu_{\mathcal{D}}^7, \mu_{\mathcal{D}}^8)\mathcal{D}$ be symmetric and also consider that $\mathcal{B}$ is symmetrizable, i.e., $\mathrm{diag}(\mu_{\mathcal{B}}^1, \mu_{\mathcal{B}}^2, \mu_{\mathcal{B}}^3)\mathcal{B}$ is symmetric. The second and third conditions of Thm. 6.13 are thus satisfied. Moreover, the first and fourth conditions of Thm. 6.13 are satisfied by construction. Altogether Thm. 6.13 guarantees that the Koopman generator possesses four monomial eigenfunctions

$$\psi_{\mathcal{B}}(\boldsymbol{z}) = z^{\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{B}}}\,, \quad \psi_4(\boldsymbol{z}) = z_4\,, \quad \psi_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{z}) = z^{\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{C}}}\,, \quad \psi_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{z}) = z^{\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{D}}}\,, \tag{6.67}$$

where

$$\lambda_{\mathcal{B}} = i\,\tilde{\omega}_{\mathcal{B}}\,, \quad \lambda_4 = i\,\omega_4\,, \quad \lambda_{\mathcal{C}} = i\,\tilde{\omega}_{\mathcal{C}}\,, \quad \lambda_{\mathcal{D}} = i\,\tilde{\omega}_{\mathcal{D}} \tag{6.68}$$

and

$$\tilde{\omega}_{\mathcal{B}} := \mu_{\mathcal{B}}^1\omega_1 + \mu_{\mathcal{B}}^2\omega_2 + \mu_{\mathcal{B}}^3\omega_3\,, \quad \tilde{\omega}_{\mathcal{C}} := \mu_{\mathcal{C}}^5\omega_5 + \mu_{\mathcal{C}}^6\omega_6\,, \quad \tilde{\omega}_{\mathcal{D}} := \mu_{\mathcal{D}}^7\omega_7 + \mu_{\mathcal{D}}^8\omega_8\,. \tag{6.69}$$

To further specify the example, suppose that $\omega_4, \tilde{\omega}_{\mathcal{B}}, \tilde{\omega}_{\mathcal{D}} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ and $\tilde{\omega}_{\mathcal{C}} = 0$. Since $\psi_{\mathcal{C}}$ is a monomial eigenfunction of null eigenvalue, it is a constant of motion and there are $q = 3$ monomial eigenfunctions with nonzero eigenvalues. We can construct $q - 1 = 2$ time-independent conserved monomials according to Lem. 6.15. The constants of motion are $z^{\boldsymbol{\nu}_1}$ and $z^{\boldsymbol{\nu}_2}$, where $V = UO$ for the $10 \times 3$ matrix $U = (\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{B}}\ \boldsymbol{e}_4\ \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{D}})$ for $\boldsymbol{e}_4$ the unit vector with the fourth entry being unity, $V = (\boldsymbol{\nu}_1\ \boldsymbol{\nu}_2)$, and $O$ is a $3 \times 2$ matrix where the columns are linearly independent vectors which are orthogonal to $\tilde{\boldsymbol{\omega}} = (\tilde{\omega}_{\mathcal{B}}\ \omega_4\ \tilde{\omega}_{\mathcal{D}})^\top$. For example, the matrix $O$ can be of the form

$$O = \begin{bmatrix} \omega_4 & 0 \\ -\tilde{\omega}_{\mathcal{B}} & \tilde{\omega}_{\mathcal{D}} \\ 0 & -\omega_4 \end{bmatrix}. \tag{6.70}$$

Then, the monomial constants of motion are

$$z^{\boldsymbol{\nu}_1} = \psi_{\mathcal{B}}^{\omega_4}\psi_4^{-\tilde{\omega}_{\mathcal{B}}} = z^{\omega_4\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{B}}}z_4^{-\tilde{\omega}_{\mathcal{B}}} = z_1^{\mu_{\mathcal{B}}^1\omega_4}z_2^{\mu_{\mathcal{B}}^2\omega_4}z_3^{\mu_{\mathcal{B}}^3\omega_4}z_4^{-(\mu_{\mathcal{B}}^1\omega_1+\mu_{\mathcal{B}}^2\omega_2+\mu_{\mathcal{B}}^3\omega_3)}\,, \tag{6.71}$$

$$z^{\boldsymbol{\nu}_2} = \psi_4^{\tilde{\omega}_{\mathcal{D}}}\psi_{\mathcal{D}}^{-\omega_4} = z_4^{\tilde{\omega}_{\mathcal{D}}}z^{-\omega_4\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{D}}} = z_4^{\mu_{\mathcal{D}}^7\omega_7+\mu_{\mathcal{D}}^8\omega_8}z_7^{-\mu_{\mathcal{D}}^7\omega_4}z_8^{-\mu_{\mathcal{D}}^8\omega_4}\,. \tag{6.72}$$

■

## 6.12 Appendix: Vandermonde-ratio eigenfunctions

In the last section, we have established the class of networks that admit monomial eigenfunctions and we have shown how to combine these Koopman eigenfunctions to define monomial constants of motion. As explained in the main text, monomial eigenfunctions can also be combined with Vandermonde-ratio eigenfunctions to generate another family of constants of motion. In the following subsection, we provide the proof for the second theorem of the paper.

### 6.12.1 Proof of Theorem 2: Vandermonde-ratio eigenfunction

**Theorem 6.19** (Thm. 6.2 of the paper)**.** *Let $I$ and $J$ be disjoint subsets of $\mathcal{V}$ of respective sizes $m \geq 2$ and $n \geq 2$ with $m + n \leq N$. Define*

$$V_{IJ}(z) := \frac{\displaystyle\prod_{\substack{p,q \in I \\ p<q}} (\bar{z}_p - \bar{z}_q)^{\sigma_{pq}}}{\displaystyle\prod_{\substack{r,s \in J \\ r<s}} (z_r - z_s)^{\tau_{rs}}}, \qquad S_p := \sum_{q \in I \setminus \{p\}} \sigma_{pq}\,, \qquad T_r := \sum_{s \in J \setminus \{r\}} \tau_{rs}\,,$$

*where $\sigma_{pq} = \sigma_{qp} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for all $p, q \in I$ and $\tau_{rs} = \tau_{sr} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ for all $r, s \in J$. If*

1. *$A_{jk} = 0$ for all $j \in I \cup J$ and $k \in \mathcal{V} \setminus (I \cup J)$,*
2. *$A_{pq} = 0$ for all distinct $p, q \in I$ and $A_{rs} = 0$ for all distinct $r, s \in J$,*
3. *$A_{pr} = \mathcal{A}\, T_r$ and $A_{rp} = \bar{\mathcal{A}}\, S_p$ for all $p \in I$, $r \in J$ and $\mathcal{A} \in \mathbb{C}$,*
4. *$\omega_p = \Omega_I \in \mathbb{R}$ for all $p \in I$ and $\omega_r = \Omega_J \in \mathbb{R}$ for all $r \in J$,*

*then $V_{IJ}(z)$ is an eigenfunction of $\mathcal{K}$ with eigenvalue*

$$\lambda = -i(\Sigma_I \Omega_I + \Sigma_J \Omega_J) \qquad \text{where} \qquad \Sigma_I = \frac{1}{2}\sum_{p \in I} S_p\,, \quad \Sigma_J = \frac{1}{2}\sum_{r \in J} T_r\,.$$

*Proof.* The logarithm of the eigenfunction is

$$\ln V_{IJ}(z) = \sum_{\substack{p,q \in I \\ p<q}} \sigma_{pq} \ln(\bar{z}_p - \bar{z}_q) - \sum_{\substack{r,s \in J \\ r<s}} \tau_{rs} \ln(z_r - z_s)$$

and its derivative is

$$\partial_j \ln V_{IJ}(z) = \sum_{\substack{p,q \in I \\ p<q}} \sigma_{pq}\, \frac{\bar{z}_p z_q\, \delta_{jp} - z_p \bar{z}_q\, \delta_{jq}}{z_p - z_q}\, \mathbf{1}_{j \in I} + \sum_{\substack{r,s \in J \\ r<s}} \tau_{rs}\, \frac{\delta_{js} - \delta_{jr}}{z_r - z_s}\, \mathbf{1}_{j \in J}\,.$$

With $\sigma_{pq} = \sigma_{qp}$ for all $p, q \in I$, $\tau_{rs} = \tau_{sr}$ for all $r, s \in J$, and the cancellation of the terms through the Kronecker deltas, one obtains

$$2\,\partial_j \ln V_{IJ}(z) = \Big(\sum_{\substack{q \in I \\ q \neq j}} \sigma_{jq} \frac{\bar{z}_j z_q}{z_j - z_q} - \sum_{\substack{p \in I \\ p \neq j}} \sigma_{pj} \frac{z_p \bar{z}_j}{z_p - z_j}\Big)\mathbf{1}_{j \in I} + \Big(\sum_{\substack{r \in J \\ r \neq j}} \tau_{rj} \frac{1}{z_r - z_j} - \sum_{\substack{s \in J \\ s \neq j}} \tau_{js} \frac{1}{z_j - z_s}\Big)\mathbf{1}_{j \in J}\,.$$

The derivative of the logarithm is thus simplified to

$$\partial_j \ln V_{IJ}(z) = \sum_{\substack{q \in I \\ q \neq j}} \sigma_{jq} \frac{z_q \bar{z}_j}{z_j - z_q}\, \mathbf{1}_{j \in I} - \sum_{\substack{r \in J \\ r \neq j}} \tau_{rj} \frac{1}{z_j - z_r}\, \mathbf{1}_{j \in J}\,.$$

The Koopman generator applied to $\ln V_{IJ}(z)$ is then

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\ln V_{IJ}(z)] = &\sum_{\substack{j,q,k\in I\\ j\neq q}} \sigma_{jq} z_q \frac{A_{jk} z_k \bar{z}_j - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j}{z_j - z_q} - \sum_{\substack{j,r,k\in J\\ j\neq r}} \tau_{rj} z_j \frac{A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2}{z_j - z_r} \\ &+ \sum_{\substack{j,q\in I\\ j\neq q}} \sum_{k\in J} \sigma_{jq} z_q \frac{A_{jk} z_k \bar{z}_j - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j}{z_j - z_q} - \sum_{\substack{j,r\in J\\ j\neq r}} \sum_{k\in I} \tau_{rj} z_j \frac{A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2}{z_j - z_r} \\ &+ \sum_{\substack{j,q\in I\\ j\neq q}} \sum_{k\in \mathcal{V}\setminus(I\cup J)} \sigma_{jq} z_q \frac{A_{jk} z_k \bar{z}_j - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j}{z_j - z_q} - \sum_{\substack{j,r\in J\\ j\neq r}} \sum_{k\in \mathcal{V}\setminus(I\cup J)} \tau_{rj} z_j \frac{A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2}{z_j - z_r}\,,\end{aligned}$$

where the first two terms are the intra-block terms (within $I, J$), the second and the third terms are the bipartite terms (between $I$ and $J$), and the last two terms are the inputs in $I, J$ from the rest of the graph. If the first and second conditions are applied, only the diagonal part of the intra-block terms remain along with the bipartite terms, so the latter expression becomes $\mathcal{K}[\ln V_{IJ}(z)] = F_{\text{diagonal}} + F_{\text{bipartite}}$ with

$$\begin{aligned}F_{\text{diagonal}} &= \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq} z_q \frac{A_{pp} - \bar{A}_{pp}}{z_p - z_q} - \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs} z_s \frac{A_{ss} - \bar{A}_{ss}}{z_s - z_r}\,, \\ F_{\text{bipartite}} &= \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sum_{k\in J} \sigma_{pq}\, z_q \frac{A_{pk} z_k \bar{z}_p - \bar{A}_{pk} \bar{z}_k z_p}{z_p - z_q} - \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \sum_{k\in I} \tau_{rs} z_s \frac{A_{sk} z_k \bar{z}_s - \bar{A}_{sk} \bar{z}_k z_s}{z_s - z_r}\,.\end{aligned}$$

Using $A_{pp} = i\omega_p/2$, the diagonal part is

$$F_{\text{diagonal}} = \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \frac{i\omega_p \sigma_{pq} z_q}{z_p - z_q} - \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \frac{i\omega_s \tau_{rs} z_s}{z_s - z_r} = i \sum_{\substack{p,q\in I\\ p<q}} \sigma_{pq} \frac{\omega_p z_q - \omega_q z_p}{z_p - z_q} - i \sum_{\substack{r,s\in J\\ r<s}} \tau_{rs} \frac{\omega_r z_r - \omega_s z_s}{z_r - z_s}\,.$$

If $\omega_p = \Omega_I$ for all $p \in I$ and $\omega_r = \Omega_J$ for all $r \in J$ (fourth condition), then

$$F_{\text{diagonal}} = -i\,\Omega_I \sum_{p<q\in I} \sigma_{pq} - i\,\Omega_J \sum_{r<s\in J} \tau_{rs} = -i(\Sigma_I \Omega_I + \Sigma_J \Omega_J)\,.$$

It thus remains to show that $F_{\text{bipartite}} = 0$ by the third condition to have $\mathcal{K}[\ln V_{IJ}(z)] = \lambda$ with $\lambda = -i(\Sigma_I \Omega_I + \Sigma_J \Omega_J)$ as the eigenvalue. Applying the third condition ($A_{pr} = T_r\,\mathcal{A}$ and $A_{rp} = S_p\,\bar{\mathcal{A}}$ for all $p \in I$, $r \in J$ and $\mathcal{A} \in \mathbb{C}$) gives

$$F_{\text{bipartite}} = \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sum_{r\in J} T_r \sigma_{pq}\, z_q \frac{\mathcal{A} z_r \bar{z}_p - \bar{\mathcal{A}} \bar{z}_r z_p}{z_p - z_q} - \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \sum_{p\in I} S_p \tau_{rs} z_r \frac{\bar{\mathcal{A}} z_p \bar{z}_r - \mathcal{A} \bar{z}_p z_r}{z_r - z_s}\,,$$

which is equivalent to

$$\begin{aligned}F_{\text{bipartite}} = &\mathcal{A} \sum_{r\in J} T_r z_r \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq} \frac{\bar{z}_p z_q}{z_p - z_q} - \bar{\mathcal{A}} \sum_{r\in J} T_r \bar{z}_r \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq} \frac{z_p z_q}{z_p - z_q} \\ &- \bar{\mathcal{A}} \sum_{p\in I} S_p z_p \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs} \frac{1}{z_r - z_s} + \mathcal{A} \sum_{p\in I} S_p \bar{z}_p \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs} \frac{z_r^2}{z_r - z_s}\,.\end{aligned}$$

The second and third terms vanish by antisymmetry, which leaves

$$F_{\text{bipartite}} = \mathcal{A}\Big(\sum_{r\in J} T_r z_r \sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq}\,\frac{\bar z_p z_q}{z_p - z_q} + \sum_{p\in I} S_p \bar z_p \sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs}\,\frac{z_r^2}{z_r - z_s}\Big)\,. \tag{6.73}$$

But note that

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{p,q\in I\\ p\neq q}} \sigma_{pq}\,\frac{\bar z_p z_q}{z_p - z_q} &= \sum_{\substack{p,q\in I\\ p<q}} \sigma_{pq}\,\frac{\bar z_p z_q - z_p \bar z_q}{z_p - z_q} = -\sum_{\substack{p,q\in I\\ p<q}} \sigma_{pq}(\bar z_p + \bar z_q) = -\sum_{p\in I}\Big(\sum_{q>p}\sigma_{pq} + \sum_{q<p}\sigma_{pq}\Big)\bar z_p \\
&= -\sum_{p\in I} S_p \bar z_p\,, \\
\sum_{\substack{r,s\in J\\ r\neq s}} \tau_{rs}\,\frac{z_r^2}{z_r - z_s} &= \sum_{\substack{r,s\in J\\ r<s}} \tau_{rs}\,\frac{z_r^2 - z_s^2}{z_r - z_s} = \sum_{\substack{r,s\in J\\ r<s}} \tau_{rs}\,(z_r + z_s) = \sum_{r\in J}\Big(\sum_{s>r}\tau_{rs} + \sum_{s<r}\tau_{rs}\Big) z_r \\
&= \sum_{r\in J} T_r z_r\,.
\end{aligned}$$

Inserting these relations in Eq. (6.73) completes the proof :

$$F_{\text{bipartite}} = \mathcal{A}\Big(\Big(\sum_{r\in J} T_r z_r\Big)\Big(-\sum_{p\in I} S_p \bar z_p\Big) + \Big(\sum_{p\in I} S_p \bar z_p\Big)\Big(\sum_{r\in J} T_r z_r\Big)\Big) = 0\,.$$

□

**Remark 6.20.** When there are four oscillators, $V_{IJ}(\boldsymbol{z}) = \frac{(\bar z_a - \bar z_b)^\sigma}{(z_c - z_d)^\tau}$ with $\sigma, \tau \in \mathbb{R}\setminus\{0\}$, we also proved that the conditions are necessary (not shown here). ■

**Remark 6.21.** When the exponents $\sigma_{pq}$ or $\tau_{rs}$ are not integers, the Vandermonde-ratio eigenfunctions are naturally understood on the universal cover $\mathbb{R}^N$ of the torus $\mathbb{T}^N$, where the phase variables $\theta_j$ are not identified modulo $2\pi$. Indeed,

$$e^{i\theta_p} - e^{i\theta_q} = 2i\, e^{i(\theta_p+\theta_q)/2} \sin\Big(\frac{\theta_p - \theta_q}{2}\Big)$$

so that the eigenfunctions can be locally expressed in terms of smooth phase variables on $\mathbb{R}^N$. However, for non-integer exponents, the complex powers $(z_p - z_q)^{\sigma_{pq}}$ and $(z_r - z_s)^{\tau_{rs}}$ require a choice of branch and therefore do not define globally continuous observables on $\mathbb{T}^N$. In addition, extra regularity issues arise near collision configurations where $z_p = z_q$ (equivalently $\theta_p - \theta_q \in 2\pi\mathbb{Z}$), since the sine factors vanish there. Nevertheless, away from these collision sets, the eigenfunctions remain smooth after restriction to simply connected coordinate patches where continuous phase coordinates and consistent branches can be chosen locally. ■

### 6.12.2 Conserved quantity for Janus and excitation-inhibition oscillators

In this subsection, we consider two models from the literature, namely Janus oscillators and excitation-inhibition Kuramoto oscillators, that can be adapted to admit Vandermonde-ratio eigenfunctions and their corresponding conserved quantities.

**Example 6.22.** In Ref. [440], Janus oscillators are introduced to show how various synchronization phenomena, such as chimera states, explosive synchronization, and asymmetry-induced synchronization, can co-occur within the same system of oscillators. Following Sec. IIIC of Ref. [440] and Ref. [472], these oscillators can be described by a particular Kuramoto model where

$$\dot{\theta}_p = \Omega + \sum_{r\in J} W_{pr} \sin(\theta_r - \theta_p)\,, \quad p \in I\,,$$
$$\dot{\theta}_r = -\Omega + \sum_{p\in I} W_{rp} \sin(\theta_p - \theta_r)\,, \quad r \in J\,,$$

with $\Omega_I = -\Omega_J =: \Omega$ and

$$W = \begin{pmatrix} 0_{m\times m} & S \\ T & 0_{n\times n} \end{pmatrix}\,, \quad S \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad T \in \mathbb{R}^{n\times m}\,.$$

This form readily satisfies the second and fourth conditions of Thm. 6.19. Condition 1 is trivially satisfied since no other oscillators than those in the bipartite graph are considered. Note also that more generally, one has the freedom to set $\Omega_I$ and $\Omega_J$ as desired (e.g., $\Omega_I = -c\Omega_J$ with $c > 0$). In Refs. [440, 472], $m = n$ and the matrices $S, T$ have particular forms, so that the Janus oscillators form a ring or a symmetric network ($T = S^\top = \beta I + \sigma B$, for constants $\beta, \sigma$ and a matrix $B$). Yet, it is interesting to note that it suffices to choose $S$ and $T$ to satisfy the third condition of Thm. 6.19 (yielding a specific network of Janus oscillators, in which one could add phase lags) to get a Vandermonde-ratio eigenfunction. ■

**Example 6.23.** In 2018, E. Montbrió and D. Pazó [415] introduced a Kuramoto model with excitatory (E) and inhibitory (I) coupling to reproduce the generation of EI-based neuronal rhythms observed in the brain. In the paper, they also consider the effect of having bipartite coupling in their Fig. 2, 3, 4 and it yields non trivial phase and bifurcation diagrams. Below, we start from their EI Kuramoto model and make adjustments so that it satisfies the conditions of Thm. 6.19. First, we rename the set $I$ as $E$ and the set $J$ as $I$ to avoid confusion, but abandon the subscripts $\sigma \in \{E, I\}$. Then, by setting the noise $\xi_i$ to zero and imposing conditions 2, 3, 4 of Thm. 6.19 (condition 1 is automatically satisfied) yields

$$\dot{\theta}_p = \Omega_E + K\sum_{r\in I} T_r \sin(\theta_r - \theta_p + \pi/2) = \Omega_E + K\sum_{r\in I} T_r \cos(\theta_r - \theta_p)\,, \quad p \in E\,,$$
$$\dot{\theta}_r = \Omega_I + K\sum_{p\in E} S_p \sin(\theta_p - \theta_r - \pi/2) = \Omega_I - K\sum_{p\in E} S_p \cos(\theta_p - \theta_r)\,, \quad r \in I\,,$$

where $K \in \mathbb{R}$ and the coupling constants that would shift the natural frequencies in the original model are absorbed in $\Omega_E$, $\Omega_I$. In other terms, with $\mathcal{A} = Ke^{i\pi/2}/2 = iK/2$, the

corresponding complex weight matrix $A$ to this EI Kuramoto model is

$$A = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} \Omega_E & \cdots & 0 & KT_1 & \cdots & KT_n \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \Omega_E & KT_1 & \cdots & KT_n \\ -KS_1 & \cdots & -KS_m & \Omega_I & \cdots & 0 \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -KS_1 & \cdots & -KS_m & 0 & \cdots & \Omega_I \end{pmatrix}.$$

■

In both these examples, monomial eigenfunctions, Vandermonde-ratio eigenfunctions, and conserved cross-ratios are possible according to the first three theorems of the paper.

## 6.13 Appendix: Conservation of cross-ratios

In 1994, Watanabe and Strogatz found constants of motion for identical phase oscillators, shaping subsequent years of theoretical studies on such oscillators. Fifteen years later [388], these constants of motion were linked to the cross-ratios. Finding various constants of motion for phase oscillators on general heterogeneous networks, however, remained challenging. In the last two sections, we found general conditions to have monomial and Vandermonde-ratio eigenfunctions and they strongly depend on the network structure; in this section, we provide the necessary and sufficient conditions for the conservation of cross-ratios in the Kuramoto model, with a focus on the network-theoretic interpretation. The first three subsections introduce the cross-ratios and their properties (functional independence and their joint invariance under the special linear algebra). Section 6.13.4 contains the proof of Theorem 3 from the main text while its corollaries are in Section 6.13.6. Finally, we explain in Sec. 6.13.7 how WS integrals are rather Darboux functions with identical cofactors when the Koopman generator has the form that allows cross-ratios to be conserved.

### 6.13.1 *Introduction to cross-ratios

In this subsection, we present some facts about the cross-ratios (also called the anharmonic ratio), which are central quantities in the paper. The cross-ratio of four different points $z_a, z_b, z_c, z_d$ in $\mathbb{C} \cup \{\infty\}$ is

$$c_{abcd}(\boldsymbol{z}) = (z_a, z_b\,; z_c, z_d) = \frac{(z_c - z_a)(z_d - z_b)}{(z_c - z_b)(z_d - z_a)} \tag{6.74}$$

and we will use the notation $c_{abcd}(\boldsymbol{z})$, $(z_a, z_b\,; z_c, z_d)$ or even $\gamma_{abcd}$ at our convenience.

The cross-ratios are the only projective invariant of a quadruple of collinear points (see Fig. 6.5), i.e.,

$$(z_a, z_b\,; z_c, z_d) = (z'_a, z'_b\,; z'_c, z'_d)\,,$$

which gives them a special place in projective geometry. They are also invariant under Möbius transformations

$$M_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}(z) = \frac{\alpha z + \beta}{\gamma z + \delta}\,, \tag{6.75}$$

where $z, \alpha, \beta, \gamma, \delta$ are complex numbers and $\alpha\delta - \beta\gamma \neq 0$, i.e.,

$$(M_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}(z_a), M_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}(z_b)\ ; M_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}(z_c), M_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}(z_d)) = (z_a, z_b\ ; z_c, z_d)\,. \tag{6.76}$$

A cross-ratio is real if and only if the four points are distributed on a circle (concyclic points) or on a line (collinear points). In the case of interest in the paper, the cross-ratios depend on the state vector $(z_1, ..., z_N) = (e^{i\theta_1}, ..., e^{i\theta_N})$, describing the positions of the oscillators rotating on the unit circle, so the values of the cross-ratios belong to $\mathbb{R} \cup \{\infty\}$ and the cross-ratios can be expressed in terms of the phases $\theta_a$, $\theta_b$, $\theta_c$, $\theta_d$:

$$\begin{aligned} c_{abcd}(\boldsymbol{z}) &= \frac{(e^{i\theta_c} - e^{i\theta_a})(e^{i\theta_d} - e^{i\theta_b})}{(e^{i\theta_c} - e^{i\theta_b})(e^{i\theta_d} - e^{i\theta_a})} \\ &= \frac{e^{i\left(\frac{\theta_c+\theta_a}{2}\right)}\left[e^{i\left(\frac{\theta_c-\theta_a}{2}\right)} - e^{-i\left(\frac{\theta_c-\theta_a}{2}\right)}\right] e^{i\left(\frac{\theta_d+\theta_b}{2}\right)}\left[e^{i\left(\frac{\theta_d-\theta_b}{2}\right)} - e^{-i\left(\frac{\theta_d-\theta_b}{2}\right)}\right]}{e^{i\left(\frac{\theta_c+\theta_b}{2}\right)}\left[e^{i\left(\frac{\theta_c-\theta_b}{2}\right)} - e^{-i\left(\frac{\theta_c-\theta_b}{2}\right)}\right] e^{i\left(\frac{\theta_d+\theta_a}{2}\right)}\left[e^{i\left(\frac{\theta_d-\theta_a}{2}\right)} - e^{-i\left(\frac{\theta_d-\theta_a}{2}\right)}\right]} \\ &= \frac{\sin\left(\frac{\theta_c-\theta_a}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta_d-\theta_b}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\theta_c-\theta_b}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta_d-\theta_a}{2}\right)}\,. \end{aligned} \tag{6.77}$$

Different perspectives are given in group theory, hyperbolic geometry [485, Chap. 11] and other fields for the cross-ratios that we will not put forward here. Yet, we will address two other properties in more detail, that is, the fact that they are the joint invariants of a Lie algebra and their functional dependencies.

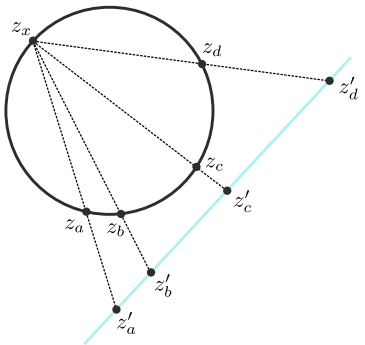



Figure 6.5 – **Cross-ratio as a projective invariant**. Projection of the different points $z_a, z_b, z_c, z_d \in \mathbb{T}^1 \setminus \{z_x\}$ to a line in $\mathbb{C}$ from a point $z_x \in \mathbb{T}^1$.

### 6.13.2 *Cross-ratios as joint invariants of the special linear algebra

In this subsection, we show that the cross-ratios are joint invariants of

$$L_{-1} := \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial z_j}\,, \qquad L_0 := \sum_{j=1}^{n} z_j \frac{\partial}{\partial z_j}\,, \qquad L_1 := \sum_{j=1}^{n} z_j^2 \frac{\partial}{\partial z_j}\,,$$

where $4 \leq n \leq N$ and $L_{-1}, L_0, L_1$ are associated with the basis elements of $\mathfrak{sl}_2$. This is an old, known result [451] and method [450] that we present here for the sake of completeness and because we did not see it explicitly elsewhere.

The idea is to successively (1) apply the method of characteristics to the partial differential equation $L_k[\eta] = 0$ for some $k \in \{-1, 0, 1\}$, (2) find the characteristic curves (invariants of $L_k$) and (3) use them as new coordinates for the next $L_\ell[\eta] = 0$ for some $\ell \in \{-1, 0, 1\} \setminus \{k\}$ and (4) repeat steps (1) to (3) until the three partial differential equations are treated. The easiest way to proceed is to address the partial differential equations in this order: $L_{-1}[\eta] = 0$, $L_0[\eta] = 0$ and then, $L_1[\eta] = 0$.

First, we find the general form of the invariants of $L_{-1}$. They obey the first-order partial differential equation

$$L_{-1}[\eta] = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial \eta}{\partial z_j} = 0\,, \tag{6.78}$$

where $\eta$ is a complex-valued function of $\mathbb{T}^N$. The characteristic equations are $\mathrm{d}z_a = \mathrm{d}z_j$ for some $a \in \{1, ..., n\}$ and for all $j \in \{1, ..., n\} \setminus \{a\}$. Integrating yields $n - 1$ functionally independent characteristic curves having the form $z_j - z_a = C_{ja} \in \mathbb{C}$.

Let $\Delta_j := z_j - z_a$. The change of coordinates from $z_1, ..., z_n$ to $z_a$, $(\Delta_j)_{j\neq a}$ gives $\partial/\partial z_j = \partial/\partial \Delta_j$ for $j \neq a$ and

$$L_0[\eta] = \sum_{j=1}^{n} z_j \frac{\partial \eta}{\partial z_j} = z_a \frac{\partial \eta}{\partial z_a} + \sum_{j\neq a} (\Delta_j + z_a) \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} = z_a L_{-1}[\eta] + \sum_{j\neq a} \Delta_j \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} = \sum_{j\neq a} \Delta_j \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} = 0\,, \tag{6.79}$$

because $L_{-1}[\eta] = 0$. Hence, the characteristic equations and curves are respectively $\mathrm{d}\Delta_b/\Delta_b = \mathrm{d}\Delta_j/\Delta_j$ and $\Delta_j/\Delta_b = C'_{jb} \in \mathbb{C}$ for some $b \in \{1, ..., n\} \setminus \{a\}$ and for all $j \in \{1, ..., n\} \setminus \{a, b\}$.

Applying the same change of coordinates to the partial differential equation for $L_1$ gives

$$L_1[\eta] = \sum_{j=1}^{n} z_j^2 \frac{\partial \eta}{\partial z_j} = z_a^2 L_{-1}[\eta] + 2 z_a \sum_{j\neq a} \Delta_j \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} + \sum_{j\neq a} \Delta_j^2 \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} = 0\,. \tag{6.80}$$

But again, $L_{-1}[\eta] = 0$ and $\sum_{j\neq a} \Delta_j \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} = L_0[\eta] - L_{-1}[\eta] = 0$. Therefore, Eq. (6.80) is simplified to

$$\sum_{j\neq a} \Delta_j^2 \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} = 0\,. \tag{6.81}$$

With the characteristic curves from Eq. (6.79), define $\rho_j = \Delta_j/\Delta_b$ and the new coordinates $z_a, \Delta_b, (\rho_j)_{j\neq a,b}$. The partial derivatives $\partial/\partial\Delta_j$ for $j \neq a, b$ become $\Delta_b^{-1}\partial/\partial\rho_j$ and making the change of coordinates for Eq. (6.81), one obtains

$$\Delta_b \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_b} + \sum_{j\neq a,b} \rho_j^2 \frac{\partial \eta}{\partial \rho_j} = 0\,.$$

Adding $0 = \sum_{j\neq a,b} \Delta_j \partial\eta/\partial\Delta_j - \sum_{j\neq a,b} \Delta_j \partial\eta/\partial\Delta_j$ yields

$$\sum_{j\neq a} \Delta_j \frac{\partial \eta}{\partial \Delta_j} - \sum_{j\neq a,b} (\Delta_b \rho_j) \left(\frac{1}{\Delta_b}\frac{\partial \eta}{\partial \rho_j}\right) + \sum_{j\neq a,b} \rho_j^2 \frac{\partial \eta}{\partial \rho_j} = 0\,,$$

but Eq. (6.79) implies that the first term vanishes, which gives

$$\sum_{j\neq a,b} \rho_j(\rho_j - 1)\frac{\partial \eta}{\partial \rho_j} = 0\,.$$

For all $c, d \neq a, b$, the method of characteristics leads to

$$\frac{\mathrm{d}\rho_c}{\rho_c(\rho_c - 1)} = \frac{\mathrm{d}\rho_d}{\rho_d(\rho_d - 1)}\,,$$

and the characteristic curves

$$\frac{\rho_c(1-\rho_d)}{\rho_d(1-\rho_c)} = C''_{cd}\,. \tag{6.82}$$

Altogether, by returning to the original variables, the joint invariants of $L_{-1}$, $L_0$ and $L_1$ are such that

$$\eta(\boldsymbol{z}) = \frac{\rho_c(1-\rho_d)}{\rho_d(1-\rho_c)} = \frac{\frac{z_c-z_a}{z_b-z_a}\left(1-\frac{z_d-z_a}{z_b-z_a}\right)}{\frac{z_d-z_a}{z_b-z_a}\left(1-\frac{z_c-z_a}{z_b-z_a}\right)} = \frac{(z_c-z_a)(z_d-z_b)}{(z_c-z_b)(z_d-z_a)} = c_{abcd}(\boldsymbol{z})\,, \tag{6.83}$$

that is, the joint invariants are cross-ratios.

### 6.13.3 *Functional independence of cross-ratios

In this subsection, to make the presentation more self-contained, we demonstrate a known result (e.g., Ref. [451, Example 2.35] or Appendix of Ref. [388]) about the functional independence of cross-ratios using the classical criterion on the rank of a Jacobian matrix [450, p.85]. We will use the result not only for globally coupled oscillators ($n = N$), but for any subgraph of $4 \leq n < N$ vertices with a certain number of functionally independent cross-ratios.

Each cross-ratio $c_{abcd}$ depends on four indices $\{a, b, c, d\}$ with $a, b, c, d \in \{1, ..., n\}$, where the order of the indices $a$, $b$, $c$, and $d$ may change the cross-ratio. Since there are $n!/(n-4)!$ (falling factorial $(n)_4$) ways to select an ordered list of 4 distinct elements from a set of $n$ items (number of 4-permutations in a set of size $n$), there are $n!/(n-4)!$ cross-ratios. Yet, only some of them are independent as stated in the next lemma.

**Lemma 6.24.** *Among the* $n!/(n-4)!$ *cross-ratios* $c_{abcd}$ *such that* $a,b,c,d \in \{1,...,n\}$ *with* $a \neq b \neq c \neq d$*, only* $n-3$ *cross-ratios form a functionally independent set, such as*

$$\{c_{1234}, c_{2345}, ..., c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}\}\,. \tag{6.84}$$

*Proof.* A large portion of the proof is taken from Ref. [388]. First, it is straightforward to show that all cross-ratios with permutations of the same 4 indices are functionally dependent. For a given cross-ratio $c_{abcd}$,

$$c_{badc}(\boldsymbol{z}) = c_{abcd}(\boldsymbol{z})\,; \tag{6.85}$$

$$c_{cdab}(\boldsymbol{z}) = c_{abcd}(\boldsymbol{z})\,; \tag{6.86}$$

$$c_{dcba}(\boldsymbol{z}) = c_{abcd}(\boldsymbol{z})\,; \tag{6.87}$$

$$c_{abdc}(\boldsymbol{z}) = \frac{1}{c_{abcd}(\boldsymbol{z})}\,; \tag{6.88}$$

$$c_{acbd}(\boldsymbol{z}) = 1 - c_{abcd}(\boldsymbol{z})\,; \tag{6.89}$$

$$c_{acdb}(\boldsymbol{z}) = \frac{1}{c_{acbd}(\boldsymbol{z})} = \frac{1}{1-c_{abcd}(\boldsymbol{z})} \quad \text{by Eqs. (6.88-6.89)}\,; \tag{6.90}$$

$$c_{adcb}(\boldsymbol{z}) = 1 - c_{acdb}(\boldsymbol{z}) = 1 - \frac{1}{1-c_{abcd}(\boldsymbol{z})} = \frac{c_{abcd}(\boldsymbol{z})}{c_{abcd}(\boldsymbol{z})-1} \quad \text{by Eqs. (6.89-6.90)}\,; \tag{6.91}$$

$$c_{adbc}(\boldsymbol{z}) = \frac{1}{c_{adcb}(\boldsymbol{z})} = \frac{c_{abcd}(\boldsymbol{z})-1}{c_{abcd}(\boldsymbol{z})} \quad \text{by Eqs. (6.88-6.91)}\,. \tag{6.92}$$

The 15 other permutations can be obtained by permuting the indices of the cross-ratios in Eqs. (6.88-6.92) according to Eqs. (6.85-6.87). Thus, cross-ratios with all 24 permutations of the same 4 indices are functionally dependent upon a single cross-ratio. For the rest of the proof, permutations can therefore be omitted without loss of generality.

Next, we demonstrate the functional independence of the $n-3$ cross-ratios

$$\{c_{1234}, c_{2345}, ..., c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}\}\,.$$

Consider the function $\boldsymbol{\zeta} : \mathbb{T}^n \mapsto \mathbb{R}^{n-3}$ defined as

$$\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{z}) = (c_{1234}(\boldsymbol{z}), c_{2345}(\boldsymbol{z}), ..., c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}(\boldsymbol{z}))\,.$$

Its $(n-3)\times n$ Jacobian matrix is

$$D\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{z}) = \begin{bmatrix} \partial_1 c_{1234}(\boldsymbol{z}) & \partial_2 c_{1234}(\boldsymbol{z}) & \cdots & \partial_n c_{1234}(\boldsymbol{z}) \\ \partial_1 c_{2345}(\boldsymbol{z}) & \partial_2 c_{2345}(\boldsymbol{z}) & \cdots & \partial_n c_{2345}(\boldsymbol{z}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_1 c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}(\boldsymbol{z}) & \partial_2 c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}(\boldsymbol{z}) & \cdots & \partial_n c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}(\boldsymbol{z}) \end{bmatrix},$$

where $\partial_i = \frac{\partial}{\partial z_i}$. On one hand, the cross-ratios only depend on the variables given by their four indices, leading to $\partial_i c_{abcd}(\boldsymbol{z}) = 0$ for all $i \notin \{a,b,c,d\}$ and all $\boldsymbol{z} \in \mathbb{T}^n$. On the other hand, the

derivatives of the cross-ratios with respect to each index are

$$\begin{aligned}
\partial_a c_{abcd}(\boldsymbol{z}) &= \frac{(z_d - z_b)(z_c - z_d)}{(z_c - z_b)(z_d - z_a)^2}\,, \qquad & \partial_c c_{abcd}(\boldsymbol{z}) &= \frac{(z_a - z_b)(z_d - z_b)}{(z_c - z_b)^2(z_d - z_a)}\,, \\
\partial_b c_{abcd}(\boldsymbol{z}) &= \frac{(z_c - z_a)(z_d - z_c)}{(z_c - z_b)^2(z_d - z_a)}\,, \qquad & \partial_d c_{abcd}(\boldsymbol{z}) &= \frac{(z_c - z_a)(z_b - z_a)}{(z_c - z_b)(z_d - z_a)^2}\,.
\end{aligned} \tag{6.93}$$

Hence, the Jacobian matrix becomes

$$D\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{z}) = \begin{bmatrix}
\partial_1 c_{1234}(\boldsymbol{z}) & \partial_2 c_{1234}(\boldsymbol{z}) & \partial_3 c_{1234}(\boldsymbol{z}) & \partial_4 c_{1234}(\boldsymbol{z}) & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
0 & \partial_2 c_{2345}(\boldsymbol{z}) & \partial_3 c_{2345}(\boldsymbol{z}) & \partial_4 c_{2345}(\boldsymbol{z}) & \partial_5 c_{2345}(\boldsymbol{z}) & 0 & 0 & \cdots \\
0 & 0 & \partial_3 c_{3456}(\boldsymbol{z}) & \partial_4 c_{3456}(\boldsymbol{z}) & \partial_5 c_{3456}(\boldsymbol{z}) & \partial_6 c_{3456}(\boldsymbol{z}) & 0 & \cdots \\
0 & 0 & 0 & \partial_4 c_{4567}(\boldsymbol{z}) & \partial_5 c_{4567}(\boldsymbol{z}) & \partial_6 c_{4567}(\boldsymbol{z}) & \partial_7 c_{4567}(\boldsymbol{z}) & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{bmatrix}.$$

From there, the cross-ratios are functionally independent if $D\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{z})$ has full rank $n-3$ for all $\boldsymbol{z} \in \mathbb{T}^n$ such that $z_j \neq z_k$ for all $j, k \in \{1, ..., n\}$ [450, p.85]. Taking only the $n-3$ first columns yields an upper triangular submatrix $T(\boldsymbol{z})$. The determinant of the matrix is then simply the product of the diagonal elements, i.e.

$$\det(T(\boldsymbol{z})) = \partial_1 c_{1234}(\boldsymbol{z})\ \partial_2 c_{2345}(\boldsymbol{z})\ \partial_3 c_{3456}(\boldsymbol{z})\ ...\ \partial_{n-3} c_{(n-3)(n-2)(n-1)n}(\boldsymbol{z})\,. \tag{6.94}$$

For any distinct $\boldsymbol{z}$ (no superimposed oscillators), the derivatives of the cross-ratios in Eq. (6.94) cannot vanish by the form of Eqs. (6.93). Thus, the determinant of the submatrix $T(\boldsymbol{z})$ cannot be null, implying that $T(\boldsymbol{z})$ is invertible and has full rank, that is, $\text{rank}(T(\boldsymbol{z})) = n-3$. Moreover, $T(\boldsymbol{z})$ is the largest invertible square submatrix of $D\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{z})$. Recalling that the rank of a matrix is the size of the largest invertible square submatrix, one obtains that $\text{rank}(D\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{z})) = n-3$ for any distinct $\boldsymbol{z} \in \mathbb{T}^n$. We thus conclude by Ref. [450, Theorem 2.16] that the $n-3$ cross-ratios are functionally independent.

Finally, the $n-3$ independent cross-ratios of Eq. (6.84) can be combined to obtain every possible cross-ratio $c_{pqrs}$ where $p < q < r < s \leq n$. To alleviate the notation, define $\gamma_{pqrs} = c_{pqrs}(\boldsymbol{z})$. First, two cross-ratios can be multiplied to obtain a third one as

$$\gamma_{abcd}\gamma_{becd} = \gamma_{aecd} \tag{6.95}$$

Using this property combined with the permutation relations of Eqs. (6.85-6.92), we can define three functions $F$, $G$ and $H$ which take two cross-ratios with the indices ordered from lowest to highest and generate a new cross-ratio which also has indices ordered from lowest to highest. Explicitly, these functions are

$$F(\gamma_{abcd}, \gamma_{bcde}) = \frac{1}{1 - \gamma_{abcd}(\gamma_{bcde} - 1)/\gamma_{bcde}} = \gamma_{acde}\,, \tag{6.96}$$

$$G(\gamma_{abcd}, \gamma_{bcde}) = \frac{1}{1 - (1 - \gamma_{abcd})(1 - \gamma_{bcde})} = \gamma_{abde}\,, \tag{6.97}$$

$$H(\gamma_{abcd}, \gamma_{bcde}) = \frac{1}{1 - (\gamma_{abcd} - 1)\gamma_{bcde}/\gamma_{abcd}} = \gamma_{abce}\,. \tag{6.98}$$

Every cross-ratio with growing indices can be generated by applying those three functions on the $n-3$ independent cross-ratios with 4 consecutive indices. First, cross-ratios where there is a gap between the first and the second indices can be expressed by applying $F$ iteratively on cross-ratios with consecutive indices from the lower bound of the gap to the higher bound. The same can be said for gaps between the second and the third indices by applying $G$ and for gaps between the third and the fourth indices by applying $H$. Any cross-ratio with four indices in growing order $\gamma_{pqrs}$ can thus be expressed by applying the $F$ function $q-p-1$ times, then the $G$ function $r-q-1$ times, then the $H$ function $s-r-1$ times on the $n-3$ functionally independent ones. Since all cross-ratios are functionally dependent on the $n-3$ independent ones with growing, consecutive indices, we conclude that $n-3$ is the maximum number of functionally independent cross-ratios. □

### 6.13.4 Proof of Theorem 3: Cross-ratios as constants of motion

We now recall the third theorem and proceed with its proof. Some elementary—but lengthy—steps of the proof relied on symbolic calculations that were performed in Matlab (*symbolic_calculations_theorem_generalized.m*). Remember that we use the convention that $A_{jk}$ is the (complex) weight of the interaction from $k$ to $j$. Note also that conditions 1, 2, 3 respectively correspond to conditions 3.1, 3.2, 3.3 of the main text.

**Theorem 6.25** (Thm. 6.3 of the paper)**.** *Consider the $N$-dimensional Kuramoto model on a graph described by a $N\times N$ real matrix $W$, a $N\times N$ phase-lag matrix $\alpha$, and a natural frequency vector $\boldsymbol{\omega}=(\omega_j)_{j=1}^N$ [Definition 6.5]. The cross-ratio $c_{abcd}$ (6.74) is a constant of motion in the model if and only if the vertices $a$, $b$, $c$, and $d$ of the graph described by the complex matrix*

$$A=\frac{1}{2}\left(W\circ e^{-i\alpha}+i\,\mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega})\right)\quad \textit{with}\quad e^{-i\alpha}=(e^{-i\alpha_{jk}})_{j,k\in\{1,\dots,N\}} \tag{6.99}$$

*have the same:*

1. *outgoing interactions within $\{a,b,c,d\}$, i.e.,*

$$\begin{aligned} A_{ba}=A_{ca}=A_{da}=:\mathcal{A}_a\,, \qquad A_{ac}=A_{bc}=A_{dc}=:\mathcal{A}_c\,,\\ A_{ab}=A_{cb}=A_{db}=:\mathcal{A}_b\,, \qquad A_{ad}=A_{bd}=A_{cd}=:\mathcal{A}_d\,; \end{aligned} \tag{6.100}$$

2. *incoming interactions from the vertices outside $\{a,b,c,d\}$, i.e.,*

$$A_{ak}=A_{bk}=A_{ck}=A_{dk},\quad \forall\, k\in\{1,\dots,N\}\setminus\{a,b,c,d\}\,; \tag{6.101}$$

3. *shifted natural frequencies*

$$\omega_a-2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a)=\omega_b-2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_b)=\omega_c-2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_c)=\omega_d-2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_d)\,. \tag{6.102}$$

*Proof.* By Lem. 6.10, the Kuramoto model can be described by

$$\dot{z}_j = \sum_k A_{jk} z_k - \left( \sum_k \bar{A}_{jk} \bar{z}_k \right) z_j^2 \tag{6.103}$$

with $z_j = e^{i\theta_j}$ and the complex matrix of interactions

$$A = \frac{1}{2} \left( W \circ e^{-i\alpha} + i \, \mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega}) \right) , \tag{6.104}$$

where $e^{-i\alpha} = (e^{-i\alpha_{jk}})_{j,k}$, $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, ..., \omega_N)$, $\circ$ is the element-wise product, and we recall that without loss of generality one can assume that the diagonal elements of $W$ and $\alpha$ are zero. The Koopman generator is thus

$$\mathcal{K} = \boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{L}_{-1} - \bar{\boldsymbol{p}}^\top \boldsymbol{L}_1 \, ,$$

where we have introduced $\boldsymbol{p} = A\boldsymbol{z}$ to simplify the expressions. Saying that the cross-ratio $c_{abcd}$ is a constant of motion in the model is equivalent to the condition

$$\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = 0 \, , \tag{6.105}$$

i.e., the cross-ratio is an eigenfunction with eigenvalue 0 of the Koopman generator. The property

$$\frac{\partial c_{abcd}(\boldsymbol{z})}{\partial z_j} = c_{abcd}(\boldsymbol{z}) \, \frac{\partial \ln(c_{abcd}(\boldsymbol{z}))}{\partial z_j}$$

together with the properties of the logarithm imply that

$$\mathcal{K}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = c_{abcd}(\boldsymbol{z}) \, \mathcal{K}[\ln(z_c - z_a) + \ln(z_d - z_b) - \ln(z_c - z_b) - \ln(z_d - z_a)].$$

Using the relations

$$\ell_j^n [\ln(z_x - z_y)] = z_j^{n+1} \, \frac{\delta_{jx} - \delta_{jy}}{z_x - z_y} \, , \qquad \forall \, n \in \mathbb{Z} \, ,$$

where $\ell_j^n$ is the $j$-th element of the $n$-th Euler's operator defined in Eq. (6.48) for all $j \in \{1, ..., N\}$, leads to

$$\sum_{j=1}^N \beta_j \ell_j^n [\ln(z_x - z_y)] = \frac{\beta_x z_x^{n+1} - \beta_y z_y^{n+1}}{z_x - z_y}$$

for all $n \in \mathbb{Z}$ and some arbitrary constants $\beta_1, ..., \beta_N$. The above identity applied to each term of the generator yields

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{L}_{-1} [c_{abcd}(\boldsymbol{z})] &= c_{abcd}(\boldsymbol{z}) \left( \frac{p_c - p_a}{z_c - z_a} + \frac{p_d - p_b}{z_d - z_b} - \frac{p_c - p_b}{z_c - z_b} - \frac{p_d - p_a}{z_d - z_a} \right) \\
\bar{\boldsymbol{p}}^\top \boldsymbol{L}_1 [c_{abcd}(\boldsymbol{z})] &= c_{abcd}(\boldsymbol{z}) \left( \frac{\bar{p}_c z_c^2 - \bar{p}_a z_a^2}{z_c - z_a} + \frac{\bar{p}_d z_d^2 - \bar{p}_b z_b^2}{z_d - z_b} - \frac{\bar{p}_c z_c^2 - \bar{p}_b z_b^2}{z_c - z_b} - \frac{\bar{p}_d z_d^2 - \bar{p}_a z_a^2}{z_d - z_a} \right) .
\end{aligned}$$

The factorization of $1/[(z_c - z_a)(z_d - z_b)(z_c - z_b)(z_d - z_a)]$ in the last three equations, the simplification

$$\gamma_{abcd}(\boldsymbol{z}) := \frac{c_{abcd}(\boldsymbol{z})}{(z_c - z_a)(z_d - z_b)(z_c - z_b)(z_d - z_a)} = \frac{1}{(z_c - z_b)^2 (z_d - z_a)^2} ,$$

and elementary algebraic manipulations give

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{L}_{-1}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = \gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\textstyle\sum_{k=1}^{N}\Big[&(A_{ck}-A_{ak})(z_d-z_b)(z_c-z_b)(z_d-z_a)\\ &+(A_{dk}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_c-z_b)(z_d-z_a)\\ &-(A_{ck}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_d-z_a)\\ &-(A_{dk}-A_{ak})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_c-z_b)\Big]\, z_k \end{aligned} \tag{6.106}$$

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{p}}^\top \boldsymbol{L}_{1}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = \gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\textstyle\sum_{k=1}^{N}\Big[&(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2 z_b^2(z_c-z_d)+(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2 z_c^2(z_b-z_d)\\ &+(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2 z_d^2(z_b-z_c)+(\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2 z_c^2(z_a-z_d)\\ &+(\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2 z_d^2(z_a-z_c)+(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_c^2 z_d^2(z_a-z_b)\Big]\bar{z}_k\,. \end{aligned} \tag{6.107}$$

Regrouping Eqs. (6.106-6.107) gives the expression for $\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z})$, i.e,

$$\begin{aligned}&\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) =\\ &\gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\Big[\textstyle\sum_{k\in\{a,b,c,d\}}\Big((A_{ck}-A_{ak})(z_d-z_b)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k+(A_{dk}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k\\ &+(A_{bk}-A_{ck})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_d-z_a)z_k+(A_{ak}-A_{dk})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_c-z_b)z_k\\ &-(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2z_b^2(z_c-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2z_c^2(z_b-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2z_d^2(z_b-z_c)\bar{z}_k\\ &-(\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2z_c^2(z_a-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2z_d^2(z_a-z_c)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_c^2z_d^2(z_a-z_b)\bar{z}_k\Big)\\ &+\textstyle\sum_{k\notin\{a,b,c,d\}}\Big((A_{ck}-A_{ak})(z_d-z_b)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k+(A_{dk}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k\\ &+(A_{bk}-A_{ck})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_d-z_a)z_k+(A_{ak}-A_{dk})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_c-z_b)z_k\\ &-(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2z_b^2(z_c-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2z_c^2(z_b-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2z_d^2(z_b-z_c)\bar{z}_k\\ &-(\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2z_c^2(z_a-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2z_d^2(z_a-z_c)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_c^2z_d^2(z_a-z_b)\bar{z}_k\Big)\Big]\,, \end{aligned} \tag{6.108}$$

where we have separated the sum over $k\in\{1,...,N\}$ into $k\in\{a,b,c,d\}$ and $k\notin\{a,b,c,d\}$.

($\Leftarrow$) In Eq. (6.108), only differences between the complex matrix elements $A_{ak}$, $A_{bk}$, $A_{ck}$, $A_{dk}$ and their conjugate appear. One can readily apply equation (6.101) (condition 2) to cancel each term in the summation on $k\notin\{a,b,c,d\}$ :

$$\begin{aligned}&\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) =\\ &\gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\Big[\textstyle\sum_{k\in\{a,b,c,d\}}\Big((A_{ck}-A_{ak})(z_d-z_b)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k+(A_{dk}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k\\ &+(A_{bk}-A_{ck})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_d-z_a)z_k+(A_{ak}-A_{dk})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_c-z_b)z_k\\ &-(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2z_b^2(z_c-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2z_c^2(z_b-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2z_d^2(z_b-z_c)\bar{z}_k\\ &-(\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2z_c^2(z_a-z_d)\bar{z}_k-(\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2z_d^2(z_a-z_c)\bar{z}_k-(\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_c^2z_d^2(z_a-z_b)\bar{z}_k\Big)\Big]\,. \end{aligned}$$

Performing the summation explicitly and using Eq. (6.100) (condition 1) give

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = \\
&\gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\Big[(\mathcal{A}_a - A_{aa})(z_d - z_b)(z_c - z_b)(z_d - z_a)z_a + (A_{aa} - \mathcal{A}_a)(z_c - z_a)(z_d - z_b)(z_c - z_b)z_a \\
&- (\bar{A}_{aa} - \bar{\mathcal{A}}_a)z_a^2 z_b^2 (z_c - z_d)\bar{z}_a - (\bar{\mathcal{A}}_a - \bar{A}_{aa})z_a^2 z_c^2 (z_b - z_d)\bar{z}_a - (\bar{A}_{aa} - \bar{\mathcal{A}}_a)z_a^2 z_d^2 (z_b - z_c)\bar{z}_a \\
&+ (\mathcal{A}_b - A_{bb})(z_c - z_a)(z_c - z_b)(z_d - z_a)z_b + (A_{bb} - \mathcal{A}_b)(z_c - z_a)(z_d - z_b)(z_d - z_a)z_b \\
&- (\bar{\mathcal{A}}_b - \bar{A}_{bb})z_a^2 z_b^2 (z_c - z_d)\bar{z}_b - (\bar{A}_{bb} - \bar{\mathcal{A}}_b)z_b^2 z_c^2 (z_a - z_d)\bar{z}_b - (\bar{\mathcal{A}}_b - \bar{A}_{bb})z_b^2 z_d^2 (z_a - z_c)\bar{z}_b \\
&+ (A_{cc} - \mathcal{A}_c)(z_d - z_b)(z_c - z_b)(z_d - z_a)z_c + (\mathcal{A}_c - A_{cc})(z_c - z_a)(z_d - z_b)(z_d - z_a)z_c \\
&- (\bar{A}_{cc} - \bar{\mathcal{A}}_c)z_a^2 z_c^2 (z_b - z_d)\bar{z}_c - (\bar{\mathcal{A}}_c - \bar{A}_{cc})z_b^2 z_c^2 (z_a - z_d)\bar{z}_c - (\bar{A}_{cc} - \bar{\mathcal{A}}_c)z_c^2 z_d^2 (z_a - z_b)\bar{z}_c \\
&+ (A_{dd} - \mathcal{A}_d)(z_c - z_a)(z_c - z_b)(z_d - z_a)z_d + (\mathcal{A}_d - A_{dd})(z_c - z_a)(z_d - z_b)(z_c - z_b)z_d \\
&- (\bar{\mathcal{A}}_d - \bar{A}_{dd})z_a^2 z_d^2 (z_b - z_c)\bar{z}_d - (\bar{A}_{dd} - \bar{\mathcal{A}}_d)z_b^2 z_d^2 (z_a - z_c)\bar{z}_d - (\bar{\mathcal{A}}_d - \bar{A}_{dd})z_c^2 z_d^2 (z_a - z_b)\bar{z}_d\Big] .
\end{aligned}
$$

The expansion and the simplification of the latter equation enable regrouping the monomials and writing

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = \gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\Big[&(A_{cc} - \bar{A}_{cc} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \mathcal{A}_c + \bar{\mathcal{A}}_c + \mathcal{A}_b - \bar{\mathcal{A}}_b)z_a^2 z_b z_c \\
&+ (A_{bb} - \bar{A}_{bb} - A_{dd} + \bar{A}_{dd} - \mathcal{A}_b + \bar{\mathcal{A}}_b + \mathcal{A}_d - \bar{\mathcal{A}}_d)z_a^2 z_b z_d \\
&+ (A_{dd} - \bar{A}_{dd} - A_{cc} + \bar{A}_{cc} - \mathcal{A}_d + \bar{\mathcal{A}}_d + \mathcal{A}_c - \bar{\mathcal{A}}_c)z_a^2 z_c z_d \\
&+ (A_{aa} - \bar{A}_{aa} - A_{cc} + \bar{A}_{cc} - \mathcal{A}_a + \bar{\mathcal{A}}_a + \mathcal{A}_c - \bar{\mathcal{A}}_c)z_a z_b^2 z_c \\
&+ (A_{dd} - \bar{A}_{dd} - A_{aa} + \bar{A}_{aa} - \mathcal{A}_d + \bar{\mathcal{A}}_d + \mathcal{A}_a - \bar{\mathcal{A}}_a)z_a z_b^2 z_d \\
&+ (A_{bb} - \bar{A}_{bb} - A_{aa} + \bar{A}_{aa} - \mathcal{A}_b + \bar{\mathcal{A}}_b + \mathcal{A}_a - \bar{\mathcal{A}}_a)z_a z_b z_c^2 \\
&+ (A_{aa} - \bar{A}_{aa} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \mathcal{A}_a + \bar{\mathcal{A}}_a + \mathcal{A}_b - \bar{\mathcal{A}}_b)z_a z_b z_d^2 \\
&+ (A_{aa} - \bar{A}_{aa} - A_{dd} + \bar{A}_{dd} - \mathcal{A}_a + \bar{\mathcal{A}}_a + \mathcal{A}_d - \bar{\mathcal{A}}_d)z_a z_c^2 z_d \\
&+ (A_{cc} - \bar{A}_{cc} - A_{aa} + \bar{A}_{aa} - \mathcal{A}_c + \bar{\mathcal{A}}_c + \mathcal{A}_a - \bar{\mathcal{A}}_a)z_a z_c z_d^2 \\
&+ (A_{cc} - \bar{A}_{cc} - A_{dd} + \bar{A}_{dd} - \mathcal{A}_c + \bar{\mathcal{A}}_c + \mathcal{A}_d - \bar{\mathcal{A}}_d)z_b^2 z_c z_d \\
&+ (A_{dd} - \bar{A}_{dd} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \mathcal{A}_d + \bar{\mathcal{A}}_d + \mathcal{A}_b - \bar{\mathcal{A}}_b)z_b z_c^2 z_d \\
&+ (A_{bb} - \bar{A}_{bb} - A_{cc} + \bar{A}_{cc} - \mathcal{A}_b + \bar{\mathcal{A}}_b + \mathcal{A}_c - \bar{\mathcal{A}}_c)z_b z_c z_d^2\Big] ,
\end{aligned}
$$

which is equivalent to

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = 2i\gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\Big[&(\mathrm{Im}(A_{cc} - A_{bb}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_c - \mathcal{A}_b))z_a^2 z_b z_c + (\mathrm{Im}(A_{bb} - A_{dd}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_d))z_a^2 z_b z_d \\
&+ (\mathrm{Im}(A_{dd} - A_{cc}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_c))z_a^2 z_c z_d + (\mathrm{Im}(A_{aa} - A_{cc}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_a - \mathcal{A}_c))z_a z_b^2 z_c \\
&+ (\mathrm{Im}(A_{dd} - A_{aa}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_a))z_a z_b^2 z_d + (\mathrm{Im}(A_{bb} - A_{aa}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_a))z_a z_b z_c^2 \\
&+ (\mathrm{Im}(A_{aa} - A_{bb}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_a - \mathcal{A}_b))z_a z_b z_d^2 + (\mathrm{Im}(A_{aa} - A_{dd}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_a - \mathcal{A}_d))z_a z_c^2 z_d \\
&+ (\mathrm{Im}(A_{cc} - A_{aa}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_c - \mathcal{A}_a))z_a z_c z_d^2 + (\mathrm{Im}(A_{cc} - A_{dd}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_c - \mathcal{A}_d))z_b^2 z_c z_d \\
&+ (\mathrm{Im}(A_{dd} - A_{bb}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_b))z_b z_c^2 z_d + (\mathrm{Im}(A_{bb} - A_{cc}) - \mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_c))z_b z_c z_d^2\Big] .
\end{aligned}
$$

Since $\mathrm{Im}(A_{jj}) = \omega_j/2$, one gets

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = i\gamma_{abcd}(\boldsymbol{z})\Big[&((\omega_c-\omega_b) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_c-\mathcal{A}_b))z_a^2 z_b z_c + ((\omega_b-\omega_d) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_b-\mathcal{A}_d))z_a^2 z_b z_d\\ &+ ((\omega_d-\omega_c) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_d-\mathcal{A}_c))z_a^2 z_c z_d + ((\omega_a-\omega_c) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a-\mathcal{A}_c))z_a z_b^2 z_c\\ &+ ((\omega_d-\omega_a) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_d-\mathcal{A}_a))z_a z_b^2 z_d + ((\omega_b-\omega_a) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_b-\mathcal{A}_a))z_a z_b z_c^2\\ &+ ((\omega_a-\omega_b) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a-\mathcal{A}_b))z_a z_b z_d^2 + ((\omega_a-\omega_d) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a-\mathcal{A}_d))z_a z_c^2 z_d\\ &+ ((\omega_c-\omega_a) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_c-\mathcal{A}_a))z_a z_c z_d^2 + ((\omega_c-\omega_d) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_c-\mathcal{A}_d))z_b^2 z_c z_d\\ &+ ((\omega_d-\omega_b) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_d-\mathcal{A}_b))z_b z_c^2 z_d + ((\omega_b-\omega_c) - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_b-\mathcal{A}_c))z_b z_c z_d^2\Big]\,.\end{aligned}$$

Using Eq. (6.102) (condition 3) makes each term fall, yielding $\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = 0$ and the sufficiency of the three conditions of the theorem.

($\Rightarrow$) For the necessary conditions, we have to solve $\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = 0$ in terms of $A_{ak}, A_{bk}, A_{ck}, A_{dk}$ for all $k \in \{1, ..., N\}$. The monomials resulting from the last summation on $k \notin \{a, b, c, d\}$ in Eq. (6.108) are all independent from the other terms of the expression, which only depend on $z_a, z_b, z_c, z_d$. They can thus be treated separately, i.e., such that

$$\begin{aligned}&\textstyle\sum_{k\in\{a,b,c,d\}}\Big[(A_{ck}-A_{ak})(z_d-z_b)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k + (A_{dk}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k\\ &+ (A_{bk}-A_{ck})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_d-z_a)z_k + (A_{ak}-A_{dk})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_c-z_b)z_k\\ &- (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2 z_b^2(z_c-z_d)\bar{z}_k - (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2 z_c^2(z_b-z_d)\bar{z}_k - (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2 z_d^2(z_b-z_c)\bar{z}_k\\ &- (\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2 z_c^2(z_a-z_d)\bar{z}_k - (\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2 z_d^2(z_a-z_c)\bar{z}_k - (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_c^2 z_d^2(z_a-z_b)\bar{z}_k\Big] = 0\end{aligned} \tag{6.109}$$

$$\begin{aligned}&\textstyle\sum_{k\notin\{a,b,c,d\}}\Big[(A_{ck}-A_{ak})(z_d-z_b)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k + (A_{dk}-A_{bk})(z_c-z_a)(z_c-z_b)(z_d-z_a)z_k\\ &+ (A_{bk}-A_{ck})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_d-z_a)z_k + (A_{ak}-A_{dk})(z_c-z_a)(z_d-z_b)(z_c-z_b)z_k\\ &- (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2 z_b^2(z_c-z_d)\bar{z}_k - (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2 z_c^2(z_b-z_d)\bar{z}_k - (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2 z_d^2(z_b-z_c)\bar{z}_k\\ &- (\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2 z_c^2(z_a-z_d)\bar{z}_k - (\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2 z_d^2(z_a-z_c)\bar{z}_k - (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_c^2 z_d^2(z_a-z_b)\bar{z}_k\Big] = 0\,,\end{aligned} \tag{6.110}$$

where we have multiplied each equation by $\gamma^{-1}_{abcd}(\boldsymbol{z}) = (z_c - z_b)^2(z_d - z_a)^2$.

On the one hand, the expanded form of the summand in Eq. (6.110) for a given $k$ contains 24 independent monomials:

$$\begin{aligned}&((A_{dk}-A_{ak})z_b z_c^2 z_k^2 + (A_{ak}-A_{ck})z_b z_d^2 z_k^2 + (A_{ak}-A_{bk})z_c^2 z_d z_k^2 + (A_{bk}-A_{ak})z_c z_d^2 z_k^2\\ &+ (A_{ck}-A_{dk})z_a^2 z_b z_k^2 + (A_{dk}-A_{bk})z_a^2 z_c z_k^2 + (A_{bk}-A_{ck})z_a^2 z_d z_k^2 + (A_{dk}-A_{ck})z_a z_b^2 z_k^2\\ &+ (A_{bk}-A_{dk})z_a z_c^2 z_k^2 + (A_{ak}-A_{dk})z_b^2 z_c z_k^2 + (A_{ck}-A_{ak})z_b^2 z_d z_k^2 + (A_{ck}-A_{bk})z_a z_d^2 z_k^2\\ &+ (\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{bk})z_b^2 z_c z_d^2 + (\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{ck})z_a z_c^2 z_d^2 + (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{dk})z_b z_c^2 z_d^2 + (\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ck})z_b^2 z_c^2 z_d\\ &+ (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{ak})z_a^2 z_c^2 z_d + (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{dk})z_a^2 z_c z_d^2 + (\bar{A}_{ck}-\bar{A}_{bk})z_a z_b^2 z_c^2 + (\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{dk})z_a z_b^2 z_d^2\\ &+ (\bar{A}_{bk}-\bar{A}_{ak})z_a^2 z_b^2 z_c + (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{bk})z_a^2 z_b^2 z_d + (\bar{A}_{ak}-\bar{A}_{ck})z_a^2 z_b z_c^2 + (\bar{A}_{dk}-\bar{A}_{ak})z_a^2 z_b z_d^2)/z_k\,.\end{aligned}$$

Since $k \notin \{a, b, c, d\}$, there are thus $N - 4$ groups of 24 monomials. The groups are all independent from one to another, because every group has a unique monomial depending on

the group index $k \notin \{a,b,c,d\}$. The $24(N-4)$ coefficients in front of the monomials must thus be zero to satisfy Eq. (6.110) since $z_x^u z_y^v z_z^w$ with $u,v,w \in \{1,2\}$ and $1/z_k$ are not zero. There are 12 coefficients having the form $A_{xk} - A_{yk}$ and they must vanish (i.e., $A_{xk} = A_{yk}$) for all pairs of indices $(x,y)$ with $x,y \in \{a,b,c,d\}$ and $k \notin \{a,b,c,d\}$. This readily implies $\bar{A}_{xk} = \bar{A}_{yk}$, meaning that the 12 other conditions with the form $\bar{A}_{xk} - \bar{A}_{yk} = 0$ are redundant. Therefore, the condition

$$A_{ak} = A_{bk} = A_{ck} = A_{dk}, \quad \forall k \in \{1,...,N\} \setminus \{a,b,c,d\}\,,$$

i.e., Eq. (6.101) of the second condition is necessary.

On the other hand, expanding Eq. (6.109) yields 42 independent monomials:

$$\begin{aligned}
0 = {} & ((A_{ca} - A_{da}) z_a^4 z_b^2 z_c z_d + (A_{da} - A_{ba}) z_a^4 z_b z_c^2 z_d + (A_{ba} - A_{ca}) z_a^4 z_b z_c z_d^2 + (\bar{A}_{bd} - \bar{A}_{ad}) z_a^3 z_b^3 z_c^2 \\
& + (A_{cb} - A_{ca} + A_{da} - A_{db} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{bd}) z_a^3 z_b^3 z_c z_d + (\bar{A}_{ac} - \bar{A}_{bc}) z_a^3 z_b^3 z_d^2 \\
& + (\bar{A}_{ad} - \bar{A}_{cd}) z_a^3 z_b^2 z_c^3 + (A_{cc} - A_{bb} + A_{db} - A_{dc} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{cc}) z_a^3 z_b^2 z_c^2 z_d \\
& + (A_{bb} - A_{cb} + A_{cd} - A_{dd} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ad} + \bar{A}_{dd}) z_a^3 z_b^2 z_c z_d^2 + (\bar{A}_{dc} - \bar{A}_{ac}) z_a^3 z_b^2 z_d^3 \\
& + (A_{ba} - A_{bc} - A_{da} + A_{dc} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd}) z_a^3 z_b z_c^3 z_d + (A_{db} - A_{cb}) z_a^2 z_b^4 z_c z_d \\
& + (A_{bc} - A_{bd} - A_{cc} + A_{dd} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{dd}) z_a^3 z_b z_c^2 z_d^2 + (\bar{A}_{cb} - \bar{A}_{ab}) z_a^3 z_c^3 z_d^2 \\
& + (A_{bd} - A_{ba} + A_{ca} - A_{cd} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{dc}) z_a^3 z_b z_c z_d^3 + (\bar{A}_{ab} - \bar{A}_{db}) z_a^3 z_c^2 z_d^3 \\
& + (\bar{A}_{cd} - \bar{A}_{bd}) z_a^2 z_b^3 z_c^3 + (A_{aa} - A_{cc} - A_{da} + A_{dc} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{bc} + \bar{A}_{cc}) z_a^2 z_b^3 z_c^2 z_d \\
& + (A_{ca} - A_{aa} - A_{cd} + A_{dd} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{dd}) z_a^2 z_b^3 z_c z_d^2 + (\bar{A}_{bc} - \bar{A}_{dc}) z_a^2 z_b^3 z_d^3 \\
& + (A_{bb} - A_{aa} + A_{da} - A_{db} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb}) z_a^2 z_b^2 z_c^3 z_d + (A_{ab} - A_{db}) z_a z_b^4 z_c^2 z_d \\
& + (A_{aa} - A_{bb} - A_{ca} + A_{cb} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{db}) z_a^2 z_b^2 z_c z_d^3 + (A_{bc} - A_{dc}) z_a^2 z_b z_c^4 z_d \\
& + (A_{aa} - A_{ba} + A_{bd} - A_{dd} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{ca} - \bar{A}_{cd} + \bar{A}_{dd} + i\omega_a - i\omega_d) z_a^2 z_b z_c^3 z_d^2 \\
& + (A_{ba} - A_{aa} - A_{bc} + A_{cc} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{da} - \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{dc}) z_a^2 z_b z_c^2 z_d^3 + (A_{cd} - A_{bd}) z_a^2 z_b z_c z_d^4 \\
& + (A_{cb} - A_{ab}) z_a z_b^4 z_c z_d^2 + (A_{ac} - A_{ab} + A_{db} - A_{dc} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{cd}) z_a z_b^3 z_c^3 z_d \\
& + (A_{ad} - A_{ac} + A_{cc} - A_{dd} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{dd}) z_a z_b^3 z_c^2 z_d^2 + (A_{ac} - A_{bc}) z_a z_b z_c^4 z_d^2 \\
& + (A_{ab} - A_{ad} - A_{cb} + A_{cd} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{da} + \bar{A}_{dc}) z_a z_b^3 z_c z_d^3 + (A_{dc} - A_{ac}) z_a z_b^2 z_c^4 z_d \\
& + (A_{ab} - A_{ad} - A_{bb} + A_{dd} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd} - \bar{A}_{dd}) z_a z_b^2 z_c^3 z_d^2 + (A_{ad} - A_{cd}) z_a z_b^2 z_c z_d^4 \\
& + (A_{ac} - A_{ab} + A_{bb} - A_{cc} - \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{dc}) z_a z_b^2 z_c^2 z_d^3 + (A_{bd} - A_{ad}) z_a z_b z_c^2 z_d^4 \\
& + (A_{ad} - A_{ac} + A_{bc} - A_{bd} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{db}) z_a z_b z_c^3 z_d^3 + (\bar{A}_{ba} - \bar{A}_{ca}) z_b^3 z_c^3 z_d^2 \\
& + (\bar{A}_{da} - \bar{A}_{ba}) z_b^3 z_c^2 z_d^3 + (\bar{A}_{ca} - \bar{A}_{da}) z_b^2 z_c^3 z_d^3 + (\bar{A}_{db} - \bar{A}_{cb}) z_a^2 z_c^3 z_d^3) / (z_a z_b z_c z_d)\,,
\end{aligned}$$

where $1/z_a z_b z_c z_d$ is not zero. The monomials $z_a^{u_1} z_b^{u_2} z_c^{u_3} z_d^{u_4}$ (with $u_1,u_2,u_3,u_4 \in \{0,1,2,3,4\}$ such that $u_1+u_2+u_3+u_4 = 8$) are independent and therefore, all the coefficients must be

zero, yielding a linear system of 42 complex equations:

$$
\begin{array}{lll}
 & & A_{cb} - A_{ca} + A_{da} - A_{db} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{bd} = 0 \\
 & & A_{cc} - A_{bb} + A_{db} - A_{dc} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{cc} = 0 \\
 & & A_{bb} - A_{cb} + A_{cd} - A_{dd} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ad} + \bar{A}_{dd} = 0 \\
A_{ca} - A_{da} = 0 & \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{ca} = 0 & A_{ba} - A_{bc} - A_{da} + A_{dc} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd} = 0 \\
A_{da} - A_{ba} = 0 & \bar{A}_{da} - \bar{A}_{ba} = 0 & A_{bc} - A_{bd} - A_{cc} + A_{dd} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{dd} = 0 \\
A_{ba} - A_{ca} = 0 & \bar{A}_{ca} - \bar{A}_{da} = 0 & A_{bd} - A_{ba} + A_{ca} - A_{cd} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{dc} = 0 \\
A_{db} - A_{cb} = 0 & \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{db} = 0 & A_{aa} - A_{cc} - A_{da} + A_{dc} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{bc} + \bar{A}_{cc} = 0 \\
A_{ab} - A_{db} = 0 & \bar{A}_{cb} - \bar{A}_{ab} = 0 & A_{ca} - A_{aa} - A_{cd} + A_{dd} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{dd} = 0 \\
A_{cb} - A_{ab} = 0 & \bar{A}_{db} - \bar{A}_{cb} = 0 & A_{bb} - A_{aa} + A_{da} - A_{db} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} = 0 \\
A_{bc} - A_{dc} = 0 & \bar{A}_{dc} - \bar{A}_{ac} = 0 & A_{aa} - A_{bb} - A_{ca} + A_{cb} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{db} = 0 \\
A_{dc} - A_{ac} = 0 & \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{dc} = 0 & A_{aa} - A_{ba} + A_{bd} - A_{dd} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{ca} - \bar{A}_{cd} + \bar{A}_{dd} = 0 \\
A_{ac} - A_{bc} = 0 & \bar{A}_{ac} - \bar{A}_{bc} = 0 & A_{ba} - A_{aa} - A_{bc} + A_{cc} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{da} - \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{dc} = 0 \\
A_{cd} - A_{bd} = 0 & \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{cd} = 0 & A_{ac} - A_{ab} + A_{db} - A_{dc} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{cd} = 0 \\
A_{ad} - A_{cd} = 0 & \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{ad} = 0 & A_{ad} - A_{ac} + A_{cc} - A_{dd} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{dd} = 0 \\
A_{bd} - A_{ad} = 0 & \bar{A}_{cd} - \bar{A}_{bd} = 0 & A_{ab} - A_{ad} - A_{cb} + A_{cd} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{da} + \bar{A}_{dc} = 0 \\
 & & A_{ab} - A_{ad} - A_{bb} + A_{dd} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd} - \bar{A}_{dd} = 0 \\
 & & A_{ac} - A_{ab} + A_{bb} - A_{cc} - \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{dc} = 0 \\
 & & A_{ad} - A_{ac} + A_{bc} - A_{bd} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{db} = 0.
\end{array}
$$

Half of the equations with two terms are complex conjugate of the other half and are thus redundant. This readily leads to the necessity of the first condition:

$$
\begin{aligned}
A_{ba} = A_{ca} = A_{da} &=: \mathcal{A}_a \\
A_{ab} = A_{cb} = A_{db} &=: \mathcal{A}_b \\
A_{ac} = A_{bc} = A_{dc} &=: \mathcal{A}_c \\
A_{ad} = A_{bd} = A_{cd} &=: \mathcal{A}_d.
\end{aligned}
\tag{6.111}
$$

The equations with more than two terms can be rearranged as

$$
\begin{array}{ll}
A_{cb} - A_{db} + A_{da} - A_{ca} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{bd} = 0 & A_{aa} - A_{ca} + A_{cb} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{db} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{aa} = 0 \\
A_{cc} - A_{bb} + A_{db} - A_{dc} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} - \bar{A}_{cc} = 0 & A_{aa} - A_{ba} + A_{bd} - A_{dd} + \bar{A}_{ca} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{cd} = 0 \\
A_{bb} - A_{cb} + A_{cd} - A_{dd} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{ad} = 0 & A_{ba} - A_{aa} + A_{cc} - A_{bc} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{da} + \bar{A}_{dc} - \bar{A}_{cc} = 0 \\
A_{ba} - A_{da} + A_{dc} - A_{bc} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd} - \bar{A}_{ad} = 0 & A_{ac} - A_{dc} + A_{db} - A_{ab} + \bar{A}_{ca} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{cd} = 0 \\
A_{bc} - A_{cc} + A_{dd} - A_{bd} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{dd} = 0 & A_{ad} - A_{dd} + A_{cc} - A_{ac} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{bd} = 0 \\
A_{bd} - A_{cd} + A_{ca} - A_{ba} + \bar{A}_{ac} - \bar{A}_{dc} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{ab} = 0 & A_{ab} - A_{cb} + A_{cd} - A_{ad} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{da} + \bar{A}_{dc} - \bar{A}_{bc} = 0 \\
A_{aa} - A_{da} + A_{dc} - A_{cc} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{bc} = 0 & A_{ab} - A_{bb} + A_{dd} - A_{ad} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd} - \bar{A}_{dd} = 0 \\
A_{ca} - A_{aa} + A_{dd} - A_{cd} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{dd} = 0 & A_{ac} - A_{cc} + A_{bb} - A_{ab} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{dc} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{bb} = 0 \\
A_{bb} - A_{db} + A_{da} - A_{aa} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} - \bar{A}_{bb} = 0 & A_{ad} - A_{bd} + A_{bc} - A_{ac} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} - \bar{A}_{db} = 0\,.
\end{array}
$$

Using Eqs. (6.111) cancels every equation from the latter system that does not involve a self-interaction term $A_{jj}$ for some $j \in \{a,b,c,d\}$. This leads to

$$
\begin{aligned}
&A_{cc} - A_{dc} + A_{db} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} - \bar{A}_{cc} = 0 \quad && A_{aa} - A_{ca} + A_{cb} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{db} + \bar{A}_{da} - \bar{A}_{aa} = 0 \\
&A_{bb} - A_{cb} + A_{cd} - A_{dd} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{ad} = 0 \quad && A_{aa} - A_{ba} + A_{bd} - A_{dd} + \bar{A}_{ca} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{cd} = 0 \\
&A_{bc} - A_{cc} + A_{dd} - A_{bd} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{dd} = 0 \quad && A_{ba} - A_{aa} + A_{cc} - A_{bc} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{da} + \bar{A}_{dc} - \bar{A}_{cc} = 0 \\
&A_{aa} - A_{da} + A_{dc} - A_{cc} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{bc} = 0 \quad && A_{ad} - A_{dd} + A_{cc} - A_{ac} + \bar{A}_{bc} - \bar{A}_{cc} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{bd} = 0 \\
&A_{ca} - A_{aa} + A_{dd} - A_{cd} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{dd} = 0 \quad && A_{ab} - A_{bb} + A_{dd} - A_{ad} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{cb} + \bar{A}_{cd} - \bar{A}_{dd} = 0 \\
&A_{bb} - A_{db} + A_{da} - A_{aa} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} - \bar{A}_{bb} = 0 \quad && A_{ac} - A_{cc} + A_{bb} - A_{ab} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{dc} + \bar{A}_{db} - \bar{A}_{bb} = 0\,.
\end{aligned}
$$

Half of these equations are the complex conjugate of the other half and are thus redundant:

$$
\begin{aligned}
A_{cc} - A_{dc} + A_{db} - A_{bb} + \bar{A}_{bb} - \bar{A}_{ab} + \bar{A}_{ac} - \bar{A}_{cc} &= 0 \\
A_{bb} - A_{cb} + A_{cd} - A_{dd} + \bar{A}_{ab} - \bar{A}_{bb} + \bar{A}_{dd} - \bar{A}_{ad} &= 0 \\
A_{bc} - A_{cc} + A_{dd} - A_{bd} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{ac} + \bar{A}_{ad} - \bar{A}_{dd} &= 0 \\
A_{aa} - A_{da} + A_{dc} - A_{cc} + \bar{A}_{ba} - \bar{A}_{aa} + \bar{A}_{cc} - \bar{A}_{bc} &= 0 \\
A_{ca} - A_{aa} + A_{dd} - A_{cd} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ba} + \bar{A}_{bd} - \bar{A}_{dd} &= 0 \\
A_{bb} - A_{db} + A_{da} - A_{aa} + \bar{A}_{aa} - \bar{A}_{ca} + \bar{A}_{cb} - \bar{A}_{bb} &= 0\,.
\end{aligned}
$$

Using Eqs. (6.111) once again to express the latter equations in terms of $\mathcal{A}_a, \mathcal{A}_b, \mathcal{A}_c, \mathcal{A}_d$ makes it evident that they are constraints for the self-interaction parameters:

$$
\begin{aligned}
(A_{cc} - \bar{A}_{cc}) - (A_{bb} - \bar{A}_{bb}) &= (\mathcal{A}_c - \bar{\mathcal{A}}_c) - (\mathcal{A}_b - \bar{\mathcal{A}}_b) \\
(A_{bb} - \bar{A}_{bb}) - (A_{dd} - \bar{A}_{dd}) &= (\mathcal{A}_b - \bar{\mathcal{A}}_b) - (\mathcal{A}_d - \bar{\mathcal{A}}_d) \\
(A_{dd} - \bar{A}_{dd}) - (A_{cc} - \bar{A}_{cc}) &= (\mathcal{A}_d - \bar{\mathcal{A}}_d) - (\mathcal{A}_c - \bar{\mathcal{A}}_c) \\
(A_{aa} - \bar{A}_{aa}) - (A_{cc} - \bar{A}_{cc}) &= (\mathcal{A}_a - \bar{\mathcal{A}}_a) - (\mathcal{A}_c - \bar{\mathcal{A}}_c) \\
(A_{dd} - \bar{A}_{dd}) - (A_{aa} - \bar{A}_{aa}) &= (\mathcal{A}_d - \bar{\mathcal{A}}_d) - (\mathcal{A}_a - \bar{\mathcal{A}}_a) \\
(A_{bb} - \bar{A}_{bb}) - (A_{aa} - \bar{A}_{aa}) &= (\mathcal{A}_b - \bar{\mathcal{A}}_b) - (\mathcal{A}_a - \bar{\mathcal{A}}_a)\,.
\end{aligned}
$$

The equations can be written in real form as

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Im}(A_{cc} - A_{bb}) &= \mathrm{Im}(\mathcal{A}_c - \mathcal{A}_b) \\
\mathrm{Im}(A_{bb} - A_{dd}) &= \mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_d) \\
\mathrm{Im}(A_{dd} - A_{cc}) &= \mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_c) \\
\mathrm{Im}(A_{aa} - A_{cc}) &= \mathrm{Im}(\mathcal{A}_a - \mathcal{A}_c) \\
\mathrm{Im}(A_{dd} - A_{aa}) &= \mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_a) \\
\mathrm{Im}(A_{bb} - A_{aa}) &= \mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_a)\,.
\end{aligned}
$$

One observes that only three of them are independent, which leads to $\mathrm{Im}(A_{bb} - A_{aa}) = \mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_a)$, $\mathrm{Im}(A_{cc} - A_{aa}) = \mathrm{Im}(\mathcal{A}_c - \mathcal{A}_a)$, $\mathrm{Im}(A_{dd} - A_{aa}) = \mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_a)$ and

$$
\omega_b - \omega_a = 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_b - \mathcal{A}_a)\,, \qquad \omega_c - \omega_a = 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_c - \mathcal{A}_a)\,, \qquad \omega_d - \omega_a = 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_d - \mathcal{A}_a)\,.
$$

Combining these finally provides the third condition

$$\omega_a - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a) = \omega_b - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_b) = \omega_c - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_c) = \omega_d - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_d)\,.$$

Altogether, the three conditions are necessary and sufficient to have $\mathcal{K}[c_{abcd}](\boldsymbol{z}) = 0$ and the proof of the theorem is complete. □

**Remark 6.26.** It may be surprising to observe that the natural frequencies do not have to be identical when nontrivial phase lags are present. Yet, as shown in subsection 6.13.5, the third condition in fact guarantees that the oscillators whose positions on the unit circle participate in a conserved cross-ratio have the same effective frequency. Also, in terms of the original parameters, the third condition is equivalent to

$$\omega_a - W_{k_a a}\sin\alpha_{k_a a} = \omega_b - W_{k_b b}\sin\alpha_{k_b b} = \omega_c - W_{k_c c}\sin\alpha_{k_c c} = \omega_d - W_{k_d d}\sin\alpha_{k_d d}\,,$$

where $k_j$ takes any value within $\{a,b,c,d\}\setminus\{j\}$ for $j \in \{a,b,c,d\}$. ■

**Remark 6.27.** Note that there is no restriction on the outgoing edges from the vertices involved in conserved cross-ratios to the vertices not involved in a conserved cross-ratio. Indeed, although the conditions of the theorem make the equations for the oscillators admitting a conserved cross-ratio identical, their initial conditions typically differ and their contributions within the whole network are generally heterogeneous. ■

**Remark 6.28.** If the phases are not equal at time $t = 0$ and are involved in a conserved cross-ratio, the cross-ratio is not zero. Since it is conserved, the cross-ratio remains non-zero throughout time and the phases cannot cross (become equal) for all finite values of $t$ [363]. ■

### 6.13.5 Basic examples for Theorem 3

One of the simplest, but instructive, examples with a conserved cross-ratio is the following.

**Example 6.29.** Consider a graph of $N = 5$ vertices with complex weight matrix

$$A = \begin{pmatrix} i\omega_1/2 & \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_3 & \mathcal{A}_4 & \mathcal{A}_5 \\ \mathcal{A}_1 & i\omega_2/2 & \mathcal{A}_3 & \mathcal{A}_4 & \mathcal{A}_5 \\ \mathcal{A}_1 & \mathcal{A}_2 & i\omega_3/2 & \mathcal{A}_4 & \mathcal{A}_5 \\ \mathcal{A}_1 & \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_3 & i\omega_4/2 & \mathcal{A}_5 \\ A_{51} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & i\omega/2 \end{pmatrix},$$

where $\omega$ and $\omega_1$ are fixed to arbitrary real values while

$$\omega_j = \omega_1 + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_j - \mathcal{A}_1)\,, \quad j \in \{2,3,4\}\,.$$

By construction, the effective natural frequency of oscillators 2, 3, 4 is $\Omega = \omega_1 - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$. In fact, one can readily verify that this yields identical equations for oscillators 1,2,3,4 (although

they have different contributions to oscillator 5): $\dot{z}_j = \rho(\boldsymbol{z}) + i\Omega z_j - \overline{\rho(\boldsymbol{z})} z_j^2$ where $j \in \{1,2,3,4\}$ and $\rho(\boldsymbol{z}) = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{A}_k z_k$. In such a case, from Thm. 6.25 and Lem. 6.24, there is only one functionally independent cross-ratio, say

$$c_{1234}(z) = \frac{(z_3 - z_1)(z_4 - z_2)}{(z_3 - z_2)(z_4 - z_1)},$$

that is conserved. ∎

Let's now present a more general example in terms of network structure.

**Example 6.30.** Consider a graph with $N = 13$ vertices with complex weight matrix $A$ given by

$$\left(\begin{array}{ccccccccccccc}
i\omega_1/2 & \mathcal{A}_{1,2} & \mathcal{A}_{1,3} & \mathcal{A}_{1,4} & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\mathcal{A}_{1,1} & i\omega_2/2 & \mathcal{A}_{1,3} & \mathcal{A}_{1,4} & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\mathcal{A}_{1,1} & \mathcal{A}_{1,2} & i\omega_3/2 & \mathcal{A}_{1,4} & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\mathcal{A}_{1,1} & \mathcal{A}_{1,2} & \mathcal{A}_{1,3} & i\omega_4/2 & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\hline
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & i\omega_5/2 & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & i\omega_6/2 & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & i\omega_7/2 & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & i\omega_8/2 & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & i\omega_9/2 & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & i\omega_{10}/2 & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\hline
A_{11,1} & A_{11,2} & A_{11,3} & A_{11,4} & A_{11,5} & A_{11,6} & A_{11,7} & A_{11,8} & A_{11,9} & A_{11,10} & i\omega_{11}/2 & A_{11,12} & A_{11,13} \\
A_{12,1} & A_{12,2} & A_{12,3} & A_{12,4} & A_{12,5} & A_{12,6} & A_{12,7} & A_{12,8} & A_{12,9} & A_{12,10} & A_{12,11} & i\omega_{12}/2 & A_{12,13} \\
A_{13,1} & A_{13,2} & A_{13,3} & A_{13,4} & A_{13,5} & A_{13,6} & A_{13,7} & A_{13,8} & A_{13,9} & A_{13,10} & A_{13,11} & A_{13,12} & i\omega_{13}/2
\end{array}\right),$$

where

$$\omega_j = \begin{cases} \text{arbitrary real number} & \text{if } j \in \{1,5,11,12,13\}, \\ \omega_1 + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{1,j} - \mathcal{A}_{1,1}) & \text{if } j \in \{2,3,4\}, \\ \omega_5 + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{2,j} - \mathcal{A}_{2,5}) & \text{if } j \in \{6,7,8,9,10\}. \end{cases}$$

The effective natural frequencies within each partially integrable part are $\Omega_1 = \omega_1 - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{1,1})$ and $\Omega_2 = \omega_5 - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{2,5})$. Following Thm. 6.25 and Lem. 6.24, the following cross-ratios are functionally independent constants of motion:

$$c_{1,2,3,4}(z) = \frac{(z_3 - z_1)(z_4 - z_2)}{(z_3 - z_2)(z_4 - z_1)}$$

related to the first four oscillators and

$$c_{5,6,7,8}(z) = \frac{(z_7 - z_5)(z_8 - z_6)}{(z_7 - z_6)(z_8 - z_5)},$$
$$c_{6,7,8,9}(z) = \frac{(z_8 - z_6)(z_9 - z_7)}{(z_8 - z_7)(z_9 - z_6)},$$
$$c_{7,8,9,10}(z) = \frac{(z_9 - z_7)(z_{10} - z_8)}{(z_9 - z_8)(z_{10} - z_7)}$$

for oscillators 5 to 10. ∎

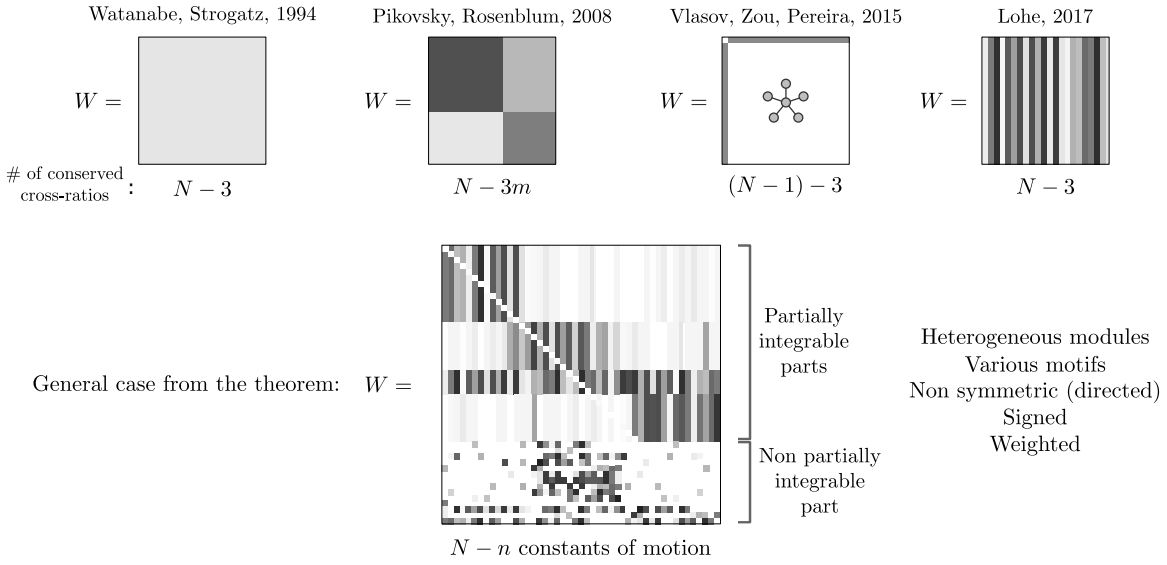



Figure 6.6 – **Simplified history of weight matrices in WS theory**. Previous results on the possible forms of weight matrices allowing conserved cross-ratios and a generic example of weight matrix satisfying the conditions of Thm. 6.25, without considering natural frequencies and phase lags for simplicity.

In Fig. 6.6, we illustrate the weight matrix of a more general network of Kuramoto oscillators with conserved cross-ratios.

### 6.13.6 Corollaries of Theorem 3

In this subsection, we provide some consequences of Thm. 6.25. First, the theorem readily gives the necessary and sufficient conditions to have $N-3$ constants of motion having the form of cross-ratios. The sufficiency is known from the excellent work of Lohe [363, 365]. The following corollary formalizes this result while adding the necessity of the conditions.

**Corollary 6.31.** *The $N$-dimensional Kuramoto model on a graph with complex weight matrix $A$ admits the maximum number of functionally independent cross-ratios as constants of motion, namely $N-3$, if and only if the following two conditions are satisfied:*

1. $A_{j\ell} = A_{k\ell} =: \mathcal{A}_\ell \;\forall\; \ell \in \{1,...,N\}$ *and* $\forall$ *pairs* $(j,k)$ *with* $j,k \in \{1,...,N\}$ *and* $k,\ell \neq j$ ;
2. $\omega_j - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_j) = \omega_k - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_k) \;\forall$ *pairs* $(j,k)$ *with* $j,k \in \{1,...,N\}$ *and* $k \neq j$ .

*Proof.* ($\Leftarrow$) Assume that the first condition of the corollary holds. Then, conditions 1 and 2 of Thm. 6.25 are automatically satisfied. Moreover, if the second condition of the corollary also holds, then condition 3 of Thm. 6.25 is satisfied as well. Therefore, a Kuramoto system that satisfies the two conditions of the corollary admits each cross-ratio $c_{abcd}$ as a constant of motion. Now, according to Lem. 6.24, only $N-3$ of them can be functionally independent, meaning that $N-3$ is the maximal number of functionally independent cross-ratios being constants of motion.

($\Rightarrow$) We will prove the contrapositive. Let $(j,k)$, where $j,k \in \{1,\cdots,N\}$ and $k \neq j$, be a pair for which condition 1 or condition 2 of the corollary is not satisfied. Without loss of generality, relabel the oscillators in such a way that $j = N-1$ and $k = N$. Consider the cross-ratio $c_{(N-3)(N-2)(N-1)N}$. This cross-ratio cannot be conserved, because condition 1 of the corollary not being satisfied implies that condition 1 of Thm. 6.25 is not satisfied, and 2 of the corollary not being satisfied implies that condition 3 of Thm. 6.25 is not satisfied. Moreover, by the same reasoning, any cross-ratio involving $N-1$ and $N$ cannot be conserved. Consider the $N-4$ cross-ratios in

$$\{c_{1234}, c_{2345}, ..., c_{(N-4)(N-3)(N-2)(N-1)}\}. \tag{6.112}$$

According to Lem. 6.24, any $c_{abcd}$ with $a,b,c,d \in \{1,\cdots,N-1\}$ is functionally dependent on those $N-4$ cross-ratios, so any additional independent cross-ratio must involve oscillator $N$. Since all permutations of the indices of a cross-ratio are functionally dependent, consider without loss of generality that this new independent cross-ratio is $c_{aNbc}$, where $a,b,c \in \{1,\cdots,N-1\}$. However, the $N-3$ cross-ratios in

$$\{c_{1234}, c_{2345}, ..., c_{(N-4)(N-3)(N-2)(N-1)}, c_{aNbc}\} \tag{6.113}$$

cannot all be conserved. Indeed, consider the cross-ratio $c_{(N-1)abc}$, which is dependent on the $N-4$ first cross-ratios. Then, by Eq. (6.95),

$$c_{(N-1)abc}\, c_{aNbc} = c_{(N-1)Nbc}\,, \tag{6.114}$$

but recall that any cross-ratio involving oscillators $N-1$ and $N$ cannot be conserved. Therefore, if either condition 1 or condition 2 is not satisfied, then the model cannot admit $N-3$ conserved cross-ratios. □

From a graph-theoretical perspective, the latter corollary implies that graphs other than the complete graph or the star graph also admit $N-3$ conserved cross-ratios. Consider the following simple example.

**Example 6.32.** Consider binary matrices $A$ satisfying the first condition of Corollary 6.31, disregarding the diagonal. There are $2^N$ such matrices, corresponding to all possible binary choices for each of the $N$ columns. Each of these matrices defines a graph. Between them, there are many graph isomorphisms. Starting from the complete graph, for which all matrix elements are equal to 1: if one changes no column, there is 1 possible graph; if one changes a column of ones into a column of zeros, there are $N$ isomorphic graphs; if one changes two such columns, there are $\binom{N}{2}$ isomorphic graphs, etc. Generally, if one changes $k$ columns of ones into columns of zeros, there are $\binom{N}{k}$ isomorphic graphs. Summing over all the isomorphic graphs yields the total number of possibilities from the binomial theorem $\sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k} = 2^N$. There are thus $N$ non-isomorphic, weakly connected, binary graphs leading to $N-3$ conserved cross-ratios in the Kuramoto dynamics. The 16 four-vertex graphs and the 32 five-vertex graphs

including isomorphisms, all supporting the maximal number of conserved cross-ratios, are presented in Fig. 6.7 and Fig. 6.8. ■

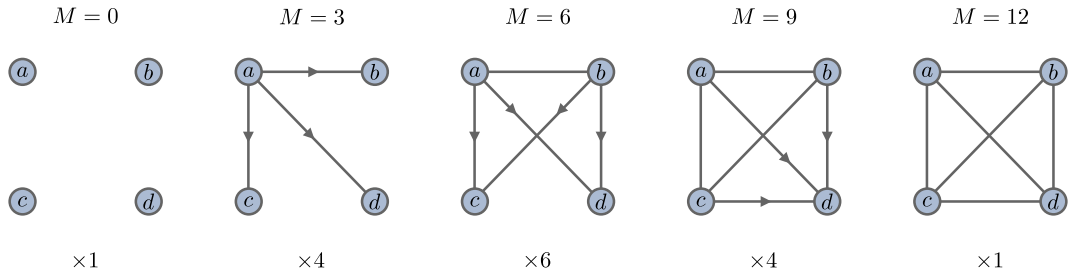



Figure 6.7 – **4-vertices motifs admitting a conserved cross-ratio** (considering that the conditions on the frequencies and the phase lags are satisfied). The number of arcs (oriented edges) $M$ is specified above the graph while the number of isomorphic graphs is specified below the graphs. Note that there are 0, 1, 2, 3, 0 vertices in a "source subgraph" respectively for $M = 0, 3, 6, 9, 12$, allowing the possibility of having monomial eigenfunctions if all the conditions of Thm. 6.13 are satisfied.

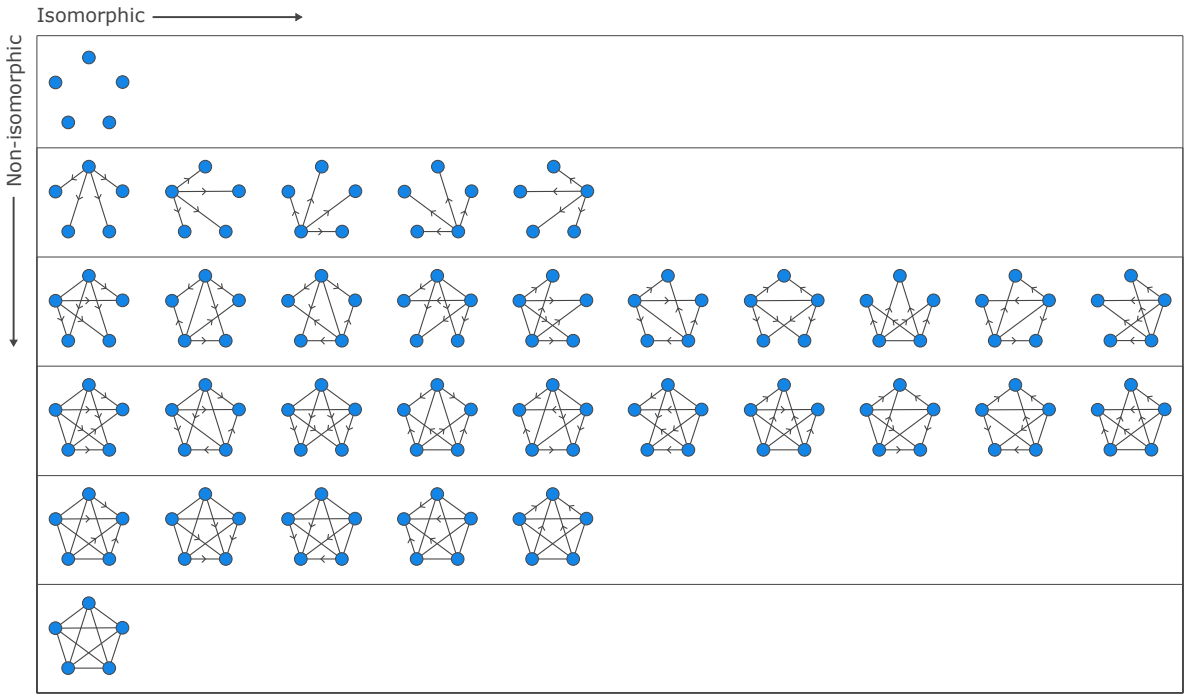



Figure 6.8 – **5-vertices motifs admitting two conserved cross-ratios**. All 32 possible binary graphs with 5 vertices admitting the maximal number of 2 functionally independent conserved cross-ratios in the corresponding Kuramoto model (considering that the conditions on the frequencies and the phase lags are satisfied). The 6 non-isomorphic graphs are displayed vertically and the corresponding isomorphisms are displayed horizontally.

The next corollary is the equivalent of the theorem when there is no phase lag between the oscillators.

**Corollary 6.33.** *Consider the $N$-dimensional Kuramoto model (6.36) on a graph described by some $N \times N$ real matrix $W$, with natural frequencies $(\omega_j)_{j=1}^N$ and zero phase lags. The*

*cross-ratio* $c_{abcd}$ (6.74) *is a constant of motion in the model if and only if the vertices* $a$*,* $b$*,* $c$*, and* $d$ *have the same:*

1. *outgoing edges within* $\{a, b, c, d\}$*, i.e.,*

$$W_{ba} = W_{ca} = W_{da}\,, \quad W_{ab} = W_{cb} = W_{db}\,, \quad W_{ac} = W_{bc} = W_{dc}\,, \quad W_{ad} = W_{bd} = W_{cd}\,; \tag{6.115}$$

2. *incoming edges from the vertices outside* $\{a, b, c, d\}$ *in the graph, i.e.,*

$$W_{ak} = W_{bk} = W_{ck} = W_{dk}, \quad \forall\, k \in \{1, ..., N\} \setminus \{a, b, c, d\}\,; \tag{6.116}$$

3. *natural frequencies, i.e.,*

$$\omega_a = \omega_b = \omega_c = \omega_d\,; \tag{6.117}$$

*Proof.* When the phase lags are zero, $A = \frac{1}{2}(W + i\,\mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega}))$. In this case, the first two conditions of Thm. 6.25, which only involve non-diagonal terms of $A$, coincide with the first two conditions stated in the corollary. Using the explicit form of the third condition in Thm. 6.25, that is,

$$\omega_a - W_{k_a a}\sin\alpha_{k_a a} = \omega_b - W_{k_b b}\sin\alpha_{k_b b} = \omega_c - W_{k_c c}\sin\alpha_{k_c c} = \omega_d - W_{k_d d}\sin\alpha_{k_d d}\,,$$

where $k_j$ takes any value within $\{a, b, c, d\} \setminus \{j\}$ for $j \in \{a, b, c, d\}$, the sine terms vanish due to the zero phase lags. This directly yields $\omega_a = \omega_b = \omega_c = \omega_d$, as stated in the third condition of the corollary. □

**Remark 6.34.** The latter corollary was also verified with symbolic calculations in Matlab (*symbolic_ calculations_ theorem.m*) and Mathematica (*KMK_ constants_ of_ motion.nb*) [582]. ■

In the following corollary, we only focus on the weight matrix conditions to admit a conserved cross-ratio when there is a star $S_N$ with $N$ vertices in an undirected graph.

**Corollary 6.35.** *Consider the Kuramoto model* (6.1) *on an undirected graph where the phase lags are zero and the graph contains a star* $S_n$ *of* $n$ *vertices with peripheral oscillators having identical frequencies and only a connection to the core. Then,* $n$ *must be at least 5 for the star to admit a conserved cross-ratio.*

*Proof.* The cross-ratio involves 4 vertices and the stars $S_1$ (trivial graph), $S_2$ (path), or $S_3$ (path) are readily excluded. For $n = 4$, denote the core by $a$ and the periphery by $\{b, c, d\}$ without loss of generality. The core is connected to all vertices in the periphery, so in particular, $W_{ab} = 1$. However, $W_{cb} = 0 \neq W_{ab}$ and thus the first condition in Corollary 6.33 is not satisfied.

For $n = 5$, let the core be labeled $e$ and the periphery $\{a, b, c, d\}$. The first condition is readily satisfied since there is no edge between the peripheral vertices in Corollary 6.33. The second condition in Corollary 6.33 is also satisfied since $W_{ae} = W_{be} = W_{ce} = W_{de} = 1$. Setting the natural frequencies of the vertices $a, b, c, d$ to be identical, the Kuramoto model on the star $S_5$ admits the cross-ratio $c_{abcd}$ as a constant of motion by Corollary 6.33. □

**Remark 6.36.** In the directed case, the smallest star that admits a conserved cross-ratio is composed of 4 vertices, as shown in Fig. 6.7. ■

### 6.13.7 WS integrals to Darboux functions

For $\omega_j = 0$, $\alpha_{jk} = \delta - \pi/2$ with $\sin\delta = 0$, and $W_{jk} = 1/N$ for all $j, k \in \mathcal{V}$, the model admits $N - 2$ functionally independent constants of motion of the form

$$C^{\mathrm{ws}}_{j_1 \ldots j_N} = S_{j_1 j_2} S_{j_2 j_3} \ldots S_{j_{N-1} j_N} S_{j_N j_1} \,, \tag{6.118}$$

where $S_{jk} = \sin\left((\theta_j - \theta_k)/2\right)$. J.W. Swift found these integrals for $N = 3$, 4 and conjectured the general case, which was then proved by Watanabe and Strogatz [227, 619, 620]. They are now often called "WS integrals". As noted in Ref. [620], these constants of motion are Hénon-type integrals: they are indexed by cyclic labels and are built as products of sine factors, reminiscent of the product-type integrals in Toda lattices [190, 284, 587].

Cross-ratios are directly linked to WS integrals [388] :

$$c_{abcd} = -\frac{C^{\mathrm{ws}}_{acdb\, j_5 \ldots j_N}}{C^{\mathrm{ws}}_{adcb\, j_5 \ldots j_N}} = \frac{S_{ca} S_{db}}{S_{cb} S_{da}} \,. \tag{6.119}$$

Although Eq. (6.119) was established in Ref. [388] in the context where $\omega_j = 0$, $\alpha_{jk} = \delta - \pi/2$, $\sin\delta = 0$, and $W_{jk} = 1/N$ for all $j, k$, the relation is always valid. Therefore, one might ask what happens when the conditions of Thm. 6.3 are satisfied or, more generally, for any dynamics whose Koopman generator has the form

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta\gamma} = \alpha(t, \boldsymbol{z}) L_{-1} + \beta(t, \boldsymbol{z}) L_0 + \gamma(t, \boldsymbol{z}) L_1 \,. \tag{6.120}$$

Are the WS quantities in Eq. (6.118) first integrals under these conditions ?

Theorem 6.3 and Eq. (6.120) do not imply that the WS integrals are conserved even if the relation $c_{abcd} = -C^{\mathrm{ws}}_{acdb\, j_5 \ldots j_\ell} / C^{\mathrm{ws}}_{adcb\, j_5 \ldots j_\ell}$ for $4 \leq \ell \leq N$ still holds. They do suggest that $C^{\mathrm{ws}}_{acdb\, j_5 \ldots j_\ell}$ and $C^{\mathrm{ws}}_{adcb\, j_5 \ldots j_\ell}$ may be eigenfunctions of the Koopman generator $\mathcal{K}$ such that the ratio of these eigenfunctions yields another eigenfunction of null eigenvalue—i.e., a constant of motion—similarly to the cancellation of the eigenvalues using monomial and Vandermonde-ratio eigenfunctions. In fact, WS quantities in Eq. (6.118) are, however, more general Darboux functions [243, 655] of the form

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta\gamma}[C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})] = \Lambda_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})\, C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z}) \,,$$

where $\Lambda_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})$ is called a cofactor, $C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z}) = \prod_{u=1}^{\ell}(1 - z_{j_u}\bar{z}_{j_{u+1}})$ is the complex form of the WS function, and $\boldsymbol{j} = (j_1, ..., j_\ell)$ with $j_{\ell+1} = j_1$. Unlike Koopman eigenfunctions, having two Darboux functions $\psi_1, \psi_2$ with (non constant) cofactors $\Lambda_1, \Lambda_2$ does not imply a conserved quantity, since $\mathcal{K}[\psi_1^{a_1}(\boldsymbol{z})\psi_2^{a_2}(\boldsymbol{z})] = (a_1\Lambda_1(\boldsymbol{z}) + a_2\Lambda_2(\boldsymbol{z}))\psi_1^{a_1}(\boldsymbol{z})\psi_2^{a_2}(\boldsymbol{z})$ and the real constants $a_1, a_2$ cannot necessarily be chosen to cancel the contributions of $\Lambda_1(\boldsymbol{z})$ and $\Lambda_2(\boldsymbol{z})$.

The particularity of WS functions is that they share the same cofactor whenever the Koopman generator has the form in Eq. (6.120). Indeed,

$$L_{-1}[\ln C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})] = -\textstyle\sum_{u=1}^{\ell}\bar{z}_{j_u}\,, \qquad L_0[\ln C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})] = 0\,, \qquad L_1[\ln C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})] = \textstyle\sum_{u=1}^{\ell} z_{j_u}\,.$$

Thus, for all $t \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{z} \in \mathbb{T}^N$, and for a fixed set of labels $j_1, \ldots, j_\ell$, the cofactor is

$$\Lambda(\boldsymbol{z}) := \Lambda_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z}) = \gamma(t, \boldsymbol{z}) \sum_{u=1}^{\ell} z_{j_u} - \alpha(t, \boldsymbol{z}) \sum_{u=1}^{\ell} \bar{z}_{j_u} \tag{6.121}$$

for any given ordering of the labels $j_1, \ldots, j_\ell$, which is a consequence of the fact that $\Lambda_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})$ depends on symmetric polynomials and functions $\alpha, \gamma$ do not depend on the indices $j_1, ..., j_\ell$. Therefore, it suffices to take the ratio of two WS (Darboux) functions to get the conserved cross-ratio.

In the specific case of the Kuramoto model, the conditions of Thm. 6.3 are satisfied and the cofactor becomes

$$\Lambda(\boldsymbol{z}) = -2\,\mathrm{Re}\left[\left(\sum_{u=1}^{\ell}\bar{z}_{j_u}\right)\left(\sum_{k=1}^{N}\mathcal{A}_k z_k\right)\right], \tag{6.122}$$

where $\mathcal{A}_1, ..., \mathcal{A}_N \in \mathbb{C}$. If $\mathcal{A}_k = \frac{w_k}{2}e^{-i\alpha_k}$ with $w_k, \alpha_k \in \mathbb{R}$, the real form of the cofactor is

$$\tilde{\Lambda}(\boldsymbol{\theta}) = -\sum_{u=1}^{\ell}\sum_{k=1}^{N} w_k \cos(\theta_k - \theta_{j_u} - \alpha_k)\,.$$

From the cofactor in Eq. (6.121), the general condition to have a WS eigenfunction or integral ($\lambda = 0$ [Lem. 6.53]) is therefore

$$\gamma(t, \boldsymbol{z}) \sum_{u=1}^{\ell} z_{j_u} - \alpha(t, \boldsymbol{z}) \sum_{u=1}^{\ell} \bar{z}_{j_u} = \lambda \in \mathbb{C}\,. \tag{6.123}$$

Since $L_0[\ln C^{\mathrm{ws}}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{z})] = 0$ (i.e., the WS function is an invariant of $L_0$), there is no restriction on $\beta(t, \boldsymbol{z})$ to conserve the WS function. Hence, any dynamics $\dot{z}_j = \alpha(t, \boldsymbol{z}) + \beta(t, \boldsymbol{z})z_j + \gamma(t, \boldsymbol{z})z_j^2$ satisfying Eq. (6.123) with $\lambda = 0$ will admit WS integrals. More explicitly, with $\alpha'(t, \boldsymbol{z}) := \alpha(t, \boldsymbol{z})/(\sum_{u=1}^{\ell} z_{j_u})$ and $L' := (\sum_{u=1}^{\ell} z_{j_u})L_{-1} + (\sum_{u=1}^{\ell} \bar{z}_{j_u})L_1$, one gets $\mathcal{K}_{\alpha',\beta} = \alpha'(t, \boldsymbol{z})L' + \beta(t, \boldsymbol{z})L_0$, the WS quantity is a joint invariant of $L'$ and $L_0$, and it is thus conserved.

## 6.14 Appendix: Lie symmetries and the generation of new constants of motion

The concept of symmetry for differential equations has a long history that has flourished from the work of Sophus Lie to the work of Emmy Noether. Below, we only briefly present the theory for ordinary differential equations in order to present the symmetry criterion under Koopman's perspective and dive quickly into its application to the Kuramoto model. For more details, the reader is invited to visit Refs. [31, 68, 204, 283, 285, 450, 523, 559] and in particular, the great book by Peter Olver [450] that includes pertinent historical remarks, reproducible examples, and crucial theorems for general differential equations. The theorem of interest for us is based on the concept of prolongation of a vector field and gives us the necessary and sufficient conditions to have a symmetry group. Without giving the details, it is stated as follows.

**Theorem 6.37** (Theorem 2.71 [450]). *Let $\Delta(x, u^{(n)}) = 0$ be a nondegenerate system of $\ell$ differential equations. A connected local group of transformations $G$ acting on an open subset $M \subset X \times U$ is a symmetry group of the system if and only if*

$$\mathrm{pr}^{(n)} v[\Delta_\nu(x, u^{(n)})] = 0\,, \quad \nu \in \{1, ..., \ell\}\,, \quad \textit{whenever} \quad \Delta(x, u^{(n)}) = 0\,, \tag{6.124}$$

*for every infinitesimal generator $v$ of $G$.*

**Remark 6.38.** The function $\Delta$ from the $n$-jet space $X \times U^{(n)}$ to $\mathbb{R}^\ell$ is considered to be smooth in its arguments [450, p.96]. Moreover, it is also assumed that the infinitesimal generator $v$ and its prolongations act on the space of smooth functions, a fact that we will use later. Finally, we refer to p.20-22 of Ref. [450] for the definition of a connected local group of transformations. ■

In the next subsection, we use this general result for first-order ordinary differential equations and show that the infinitesimal criterion (6.124) is elegantly written in terms of the Koopman generator.

### 6.14.1 Proof of the Lemma: Symmetry criterion under Koopman's perspective

To use Thm. 6.37 in our context, we first adapt Defs. 2.30 and 2.70 of Ref. [450] for systems of first-order ODEs.

**Definition 6.39.** Let $\Delta_i(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = 0$ for $i \in \{1, ..., N\}$ be a system of first-order ordinary differential equations. The system is of maximal rank if the $N \times (2N + 1)$ Jacobian matrix of

$\boldsymbol{\Delta} = (\Delta_1, ..., \Delta_N)$,

$$J_{\boldsymbol{\Delta}}(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Delta_1(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial t} & \frac{\partial \Delta_1(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial \Delta_1(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial u_N} & \frac{\partial \Delta_1(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial \dot{u}_1} & \cdots & \frac{\partial \Delta_1(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial \dot{u}_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \Delta_N(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial t} & \frac{\partial \Delta_N(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial \Delta_N(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial u_N} & \frac{\partial \Delta_N(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial \dot{u}_1} & \cdots & \frac{\partial \Delta_N(t,\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})}{\partial \dot{u}_N} \end{pmatrix},$$

is of rank $N$ for all $(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}})$ such that $\boldsymbol{\Delta}(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = \boldsymbol{0}$.

**Definition 6.40.** A system of $N$ first-order differential equations, $\boldsymbol{\Delta}(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = 0$ is *locally solvable at the point* $(t_0, \boldsymbol{u}_0, \dot{\boldsymbol{u}}_0) \in \mathscr{G}_{\boldsymbol{\Delta}} = \{(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) \,|\, \boldsymbol{\Delta}(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = 0\}$ if there exists a smooth solution $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{y}(t)$ of the system, defined for $t$ in a neighborhood of $t_0$, which has the prescribed "initial condition" $\mathrm{pr}^{(1)}\boldsymbol{y}(t_0) = (\boldsymbol{u}_0, \dot{\boldsymbol{u}}_0)$. The system is *locally solvable* if it is locally solvable at every point of $\mathscr{G}_{\boldsymbol{\Delta}}$. A system is *nondegenerate* if at every point $(t_0, \boldsymbol{u}_0, \dot{\boldsymbol{u}}_0) \in \mathscr{G}_{\boldsymbol{\Delta}}$ it is both locally solvable and of maximal rank.

Consider the system of first-order ordinary differential equations (henceforth, called the "dynamics")

$$\frac{\mathrm{d}y_i}{\mathrm{d}t} = F_i(t, y_1, ..., y_N)\,, \quad i \in \{1, ..., N\}\,, \tag{6.125}$$

with initial condition $y_i(t_0) = (\boldsymbol{u}_0)_i$ for all $i$, $t_0 < t$, and $F_1, ..., F_N$ are smooth ($\mathscr{C}^\infty$) in their arguments. Note that we could relax the differentiability requirements in principle, but we use smooth functions for simplicity and to be coherent with the approach and the results in Ref. [450, see p.4 and p.96]. Let us define the smooth functions $\Delta_i$ for all $i \in \{1, ..., N\}$ on the 1-jet space related to the $i$-th equation in the dynamics such that

$$\Delta_i(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = \dot{u}_i - F_i(t, \boldsymbol{u})\,, \tag{6.126}$$

where $\boldsymbol{u} = (u_1, ..., u_N) \in \mathbb{R}^N$ and $\dot{\boldsymbol{u}} = (\dot{u}_1, ..., \dot{u}_N) \in \mathbb{R}^N$ are coordinates with $t \in \mathscr{T}$ for the jet space. In such case, the next lemma shows that there is no problem with the system regarding the condition of maximal rank and local solvability.

**Lemma 6.41.** *The dynamics in Eq. (6.125) is nondegenerate.*

*Proof.* The $N \times (2N+1)$ Jacobian matrix of $\boldsymbol{\Delta} = (\Delta_1, ..., \Delta_N)$ where $\Delta_i$ is given in Eq. (6.126) is

$$J_{\boldsymbol{\Delta}}(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial F_1(t,\boldsymbol{u})}{\partial t} & -\frac{\partial F_1(t,\boldsymbol{u})}{\partial u_1} & ... & -\frac{\partial F_1(t,\boldsymbol{u})}{\partial u_N} & 1 & ... & 0 \\ \vdots & \vdots & ... & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{\partial F_N(t,\boldsymbol{u})}{\partial t} & -\frac{\partial F_N(t,\boldsymbol{u})}{\partial u_1} & ... & -\frac{\partial F_N(t,\boldsymbol{u})}{\partial u_N} & 0 & ... & 1 \end{pmatrix}$$

and is of rank $N$ with respect to all $(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}})$, because of the $N \times N$ identity submatrix in the last columns of $J_{\boldsymbol{\Delta}}(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}})$. The dynamics is thus of maximal rank.

Moreover, by assumption, the vector field in Eq. (6.125) is smooth. Thus, there exists a unique smooth solution $\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{u}$ starting at $\boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{u}_0$ by Lem. 2.3 of Ref. [579]. The existence of the solution and the form of the differential equations imply that $\dot{\boldsymbol{y}}(t_0) = \boldsymbol{F}(t_0, \boldsymbol{y}(t_0)) = \boldsymbol{F}(t_0, \boldsymbol{u}_0) =: \dot{\boldsymbol{u}}_0$. Such solution exists for any initial condition $(\boldsymbol{u}_0, \dot{\boldsymbol{u}}_0) = \mathrm{pr}^{(1)}\boldsymbol{y}(t_0) \in \mathscr{G}_\Delta$ and the system is therefore locally solvable and altogether, nondegenerate. □

Consider the set $\mathscr{O}$ of time-dependent smooth observables $f : S \subset \mathscr{T} \times U \to \mathbb{R}$. The Koopman operator for a non-autonomous dynamical system described by Eq. (6.125) is $U_\varphi : \mathscr{T} \times \mathscr{T} \times \mathscr{O} \to \mathscr{O}$ with $U_{\varphi_{t_0,t}}[f] := U_\varphi(t_0, t, f)$ and it acts on an observable $f$ such that

$$U_{\varphi_{t_0,t}}[f] = f \circ \varphi_{t_0,t}$$

with the properties $U_{\varphi_{t_0,t_0}} = \mathrm{id}$ and $U_{\varphi_{a,t+a}} \circ U_{\varphi_{t_0,a}} = U_{\varphi_{t_0,t+a}}$ [378]. There is a family $(\mathcal{U}_{t_0})_{t_0 \in \mathscr{T}}$ of Koopman generators

$$\mathcal{U}_{t_0}[f](\boldsymbol{u}_0) = \left.\frac{\mathrm{d}f(t, \boldsymbol{y}(t))}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t_0},$$

recalling that $\boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{u}_0$ and that $\mathcal{U}_t$ is also locally defined at some point $\boldsymbol{u} \in U$. Performing the total derivative gives the explicit form

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_{t_0}[f](\boldsymbol{u}_0) &= \left[\frac{\partial f}{\partial t}(t, \boldsymbol{y}(t)) + \boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{y}(t)) \cdot \nabla f(t, \boldsymbol{y}(t))\right]\Big|_{t=t_0} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t}(t_0, \boldsymbol{u}_0) + \boldsymbol{F}(t_0, \boldsymbol{u}_0) \cdot \nabla f(t_0, \boldsymbol{u}_0)\,.\end{aligned}$$

Therefore, the Koopman generator is

$$\mathcal{U} = \partial_t + \sum_{j=1}^{N} F_j(t, \boldsymbol{u})\partial_j\,, \tag{6.127}$$

where $(t, \boldsymbol{u}) \in S$, $\partial_t := \partial/\partial t$, $\partial_j := \partial/\partial u_j$ and where we have removed the time index of the generator for simplicity. Under these considerations, the Koopman generator $\mathcal{U}$ and the infinitesimal generator $v$ both act on smooth functions [Remark 6.38] and can be manipulated together. The next lemma is the equivalent of Thm. 6.37 for systems of first-order ODEs and provides the infinitesimal criterion of symmetry in terms of the Koopman generator.

**Lemma 6.42** (Lemma of the paper)**.** *A connected local group of transformations $G$ acting on an open subset $S \subset \mathscr{T} \times U$ is a symmetry group of the dynamics in Eq. (6.125) if and only if*

$$[\mathcal{U}, v] - \mathcal{U}[\xi(t, \boldsymbol{u})]\mathcal{U} = 0 \tag{6.128}$$

*for every infinitesimal generator $v = \xi(t, \boldsymbol{u})\partial_t + \sum_{j=1}^{N} \phi_j(t, \boldsymbol{u})\partial_j$ of $G$.*

*Proof.* To begin with, Lem. 6.41 ensures that the dynamics (6.125) is nondegenerate, which guarantees that Thm. 6.37 can be applied. Now, since the dynamics is a first-order system of

ODEs, only the first prolongation of the infinitesimal generator $v$ is needed. By the general prolongation formula in Ref. [450, Theorem 2.36], the first prolongation of $v$ is

$$\mathrm{pr}^{(1)}v = v + \sum_{j=1}^{N} \phi_j^t(t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}) \frac{\partial}{\partial \dot{u}_j} ,$$

with

$$\phi_j^t = D_t(\phi_j - \xi \dot{u}_j) + \xi \ddot{u}_j = \dot{\phi}_j + \sum_{k=1}^{N} (\partial_k \phi_j - \dot{\xi}\delta_{jk}) F_k - \sum_{k=1}^{N} \partial_k \xi \, F_k F_j , \tag{6.129}$$

where the superscript $t$ in $\phi_j^t$ is a label used to denote the component of the prolongation associated with $\partial/\partial \dot{u}_j$ and $D_t = d/dt$ is the total derivative. The dependencies on $t, \boldsymbol{u}, \dot{\boldsymbol{u}}$ are omitted in Eq. (6.129) to simplify the notation, as will be done from now on. The infinitesimal condition for $G$ to be a symmetry group is then

$$\mathrm{pr}^{(1)}v[\Delta_i] = \xi \dot{\Delta}_i + \sum_{j=1}^{N} \phi_j \partial_j \Delta_i + \sum_{j=1}^{N} \phi_j^t \frac{\partial \Delta_i}{\partial \dot{u}_j} = 0 ,$$

for all $i \in \{1, ..., N\}$. Inserting Eq. (6.129), performing the derivatives and rearranging leads to the infinitesimal criterion

$$\dot{\phi}_i + \sum_{j=1}^{N} (\partial_j \phi_i - \dot{\xi}\delta_{ij}) F_j - \sum_{j=1}^{N} \partial_j \xi F_j F_i = \xi \dot{F}_i + \sum_{j=1}^{N} \phi_j \partial_j F_i , \quad \forall i \in \{1, ..., N\} . \tag{6.130}$$

Applying Thm. 6.37 to our particular case, a connected local group of transformations $G$ is a symmetry group if and only if Eqs. (6.130) are satisfied. It now remains to show that Eqs. (6.130) are equivalent to condition (6.128). The commutator of $\mathcal{U}$ and $v$ is

$$[\mathcal{U}, v] = [\partial_t + \sum_j F_j \partial_j, \xi \partial_t + \sum_i \phi_i \partial_i] = [\partial_t, \xi \partial_t] + \sum_i [\partial_t, \phi_i \partial_i] + \sum_j [F_j \partial_j, \xi \partial_t] + \sum_{i,j} [F_j \partial_j, \phi_i \partial_i] ,$$

where we have used the bilinearity of the commutator. More explicitly, the last equation is

$$[\mathcal{U}, v] = (\partial_t \xi)\partial_t + \sum_i (\partial_t \phi_i)\partial_i + \sum_j (F_j(\partial_j \xi)\partial_t - \xi(\partial_t F_j)\partial_j) + \sum_{i,j} (F_j(\partial_j \phi_i)\partial_i - \phi_i(\partial_i F_j)\partial_j) ,$$

henceforth considering that all sums run from 1 to $N$. Given some observable $f \in \mathscr{O}$, the expression can be rearranged to yield

$$[\mathcal{U}, v]f = \mathcal{U}[\xi]\partial_t f + \sum_i (\dot{\phi}_i + \sum_j \partial_j \phi_i \, F_j - \xi \dot{F}_i - \sum_j \phi_j \partial_j F_i)\partial_i f .$$

From the definition of the Koopman generator (6.127), the relation $\partial_t f = \mathcal{U}[f] - \sum_i F_i \partial_i f$ holds and implies

$$[\mathcal{U}, v]f = \mathcal{U}[\xi]\mathcal{U}[f] + \sum_i (\dot{\phi}_i - \partial_t \xi \, F_i + \sum_j \partial_j \phi_i F_j - \sum_j F_i F_j \partial_j \xi - \xi \dot{F}_i - \sum_j \phi_j \partial_j F_i)\partial_i f .$$

Writing $\partial_t \xi\, F_i$ as $\sum_j (\dot{\xi}\delta_{ij})F_j$ explicitly gives a sum over the $N$ equations of the infinitesimal symmetry condition:

$$[\mathcal{U}, v] = \mathcal{U}[\xi]\mathcal{U} + \sum_i (\dot{\phi}_i + \sum_j (\partial_j \phi_i - \dot{\xi}\delta_{ij})F_j - \sum_j \partial_j \xi F_j F_i - \xi \dot{F}_i - \sum_j \phi_j \partial_j F_i)\partial_i \,.$$

On the one hand, if the $N$ infinitesimal conditions of symmetry in Eqs. (6.130) are satisfied, then

$$[\mathcal{U}, v] - \mathcal{U}[\xi]\mathcal{U} = 0 \,.$$

On the other hand, if $[\mathcal{U}, v] - \mathcal{U}[\xi]\mathcal{U} = 0$, then

$$\sum_i (\dot{\phi}_i + \sum_j (\partial_j \phi_i - \dot{\xi}\delta_{ij})F_j - \sum_j \partial_j \xi F_j F_i - \xi \dot{F}_i - \sum_j \phi_j \partial_j F_i)\partial_i = 0 \,.$$

But each term of the sum over $i$ is independent, meaning that Eqs. (6.130) are satisfied and thus completing the proof. □

### 6.14.2 Basic symmetries of the Kuramoto model

The Koopman generator of the Kuramoto dynamics on functions of time and $\boldsymbol{z} \in \mathbb{T}^N$ is

$$\mathcal{U} = \partial_t + \sum_{j,k=1}^{N} (A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2)\partial_j = \partial_t + \mathcal{K} \,.$$

The most general infinitesimal generator of (potential) symmetries is

$$\mathcal{S} = \xi(t, z)\partial_t + \sum_{\ell=1}^{N} \phi_\ell(t, z)\partial_\ell \,. \tag{6.131}$$

Adapting Lem. 6.42 for coordinates of time and the $N$-torus, it is necessary and sufficient that the generator $\mathcal{S}$ satisfies

$$[\mathcal{U}, \mathcal{S}] - \mathcal{U}[\xi(t, z)]\,\mathcal{U} = 0 \,. \tag{6.132}$$

It is easy to verify that

$$\mathcal{S}_1 = iL_0 \,, \qquad \mathcal{S}_2 = \mathcal{K} \,, \qquad \mathcal{S}_3 = f(t)\mathcal{U}$$

are Lie symmetries of the Kuramoto dynamics. Note that the time translation generator $\partial_t$ is obtained with $\mathcal{U} - \mathcal{K}$ and is a symmetry generator, as expected of any autonomous dynamical system. In fact, denoting $\mathcal{S} = \mathcal{S}_\xi + \mathcal{S}_\phi$ with $\mathcal{S}_\xi = \xi(t, \boldsymbol{z})\partial_t$ and $\mathcal{S}_\phi = \sum_{\ell=1}^{N} \phi_\ell(t, \boldsymbol{z})\partial_\ell$, the infinitesimal criterion for the Kuramoto model becomes $[\mathcal{U}, \mathcal{S}_\phi] - \mathcal{U}[\xi(t, \boldsymbol{z})]\,\mathcal{K} = 0$, that is, the form of the condition for autonomous dynamical systems.

On the one hand, if $\phi_1(t, \boldsymbol{z}), ..., \phi_N(t, \boldsymbol{z})$ are zero, the condition becomes $\mathcal{U}[\xi(t, \boldsymbol{z})] = 0$, meaning that $\xi(t, \boldsymbol{z})$ must be a constant of motion if $\xi(t, z)\partial_t$ is to be a generator of symmetry (also highlighted in Ref. [535]). Yet, such symmetries simply act as time translations. Indeed, considering that the conditions of Thm. 6.25 are satisfied for some quadruples of vertices, one can set $\xi(t, z)$ to be any of the conserved functionally independent cross-ratios, leading to the infinitesimal symmetry generators $\mathcal{S}_{abcd} = c_{abcd}(\boldsymbol{z})\partial_t$ for all $a, b, c, d$ such that $\mathcal{U}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = \mathcal{K}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] = 0$. The action of the symmetry group on the coordinates is thus $e^{\epsilon \mathcal{S}_{abcd}} t = t + \epsilon\, c_{abcd}(\boldsymbol{z})$ and $e^{\epsilon \mathcal{S}_{abcd}} z_j = z_j$. Considering that $a, b, c, d$ belong to some partially integrable part $P$, using $z_j(t) = M_t(w_j)$ (notation of Ref. [388]) and the fact that cross-ratios are invariant under Möbius transformations $M_t$ leads to

$$c_{abcd}(\boldsymbol{z}(t)) = (M_t(w_a), M_t(w_b); M_t(w_c), M_t(w_d)) = (w_a, w_b\,;\, w_c, w_d) = c_{abcd}(\boldsymbol{w})$$

and the action of the related symmetry group on a solution $\boldsymbol{z}(t)$ of the Kuramoto model is such that

$$\tilde{\boldsymbol{z}}(t) := e^{\epsilon \mathcal{S}_{abcd}} \boldsymbol{z}(t) = \boldsymbol{z}(t + \epsilon\, c_{abcd}(\boldsymbol{w}))\,,$$

where $\tilde{\boldsymbol{z}}(t)$ is an analogous time-translated solution of the Kuramoto model.

On the other hand, if $\xi(t, \boldsymbol{z}) = 0$, then the infinitesimal criterion (6.128) is $[\mathcal{U}, \mathcal{S}] = 0$. For $\mathcal{S} = \psi(t, \boldsymbol{z})\tilde{\mathcal{S}}$ with some smooth function $\psi$ and $\tilde{\mathcal{S}} = \sum_{j=1}^{N} \tilde{\phi}_j(t, \boldsymbol{z})\partial_j$, $[\mathcal{U}, \mathcal{S}] = \mathcal{U}[\psi(t, \boldsymbol{z})]\tilde{\mathcal{S}} + \psi(t, \boldsymbol{z})[\mathcal{U}, \tilde{\mathcal{S}}]$. Therefore, if $\psi(\boldsymbol{z})$ is a constant of motion and $\tilde{\mathcal{S}}$ is a symmetry generator, then $\psi(\boldsymbol{z})\tilde{\mathcal{S}}$ is also a symmetry generator, but its action remains the one of $\tilde{\mathcal{S}}$ or is not an automorphism of the $N$-torus, making it of little use.

We will need more than naive inspection to uncover additional symmetries. Therefore, the next two subsections are dedicated to deriving the determining equations and developing a method for obtaining particular solutions.

### 6.14.3 General determining equations for the Kuramoto model

To obtain the determining equations, it is useful to introduce basic commutation relations. This is the purpose of the next lemma.

**Lemma 6.43.** *Consider the elements of the vectorial Euler differential operators defined in Eq. (6.48) and let $\mathcal{K}$ be defined by Eq. (6.49). Then, the following commutation relations hold for all $j, k \in \{1, ..., N\}$ and $m, n \in \mathbb{Z}$:*

$$[\,\ell_j^m,\, \ell_k^n\,] = \delta_{jk}(n - m)\,\ell_j^{m+n}\,, \qquad [\,z_j^m,\, z_k^n\,] = 0\,, \qquad [\,\ell_j^m,\, z_k^n\,] = \delta_{jk}\, n\, z_k^{m+n} \tag{6.133}$$

*and*

$$[\,\mathcal{K},\, z_j^n\,] = n z_j^n \sum_{k=1}^{N} \Big( A_{jk} z_k z_j^{-1} - \bar{A}_{jk} z_k^{-1} z_j^1 \Big) = 2in z_j^n \,\mathrm{Im}\left( \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k z_j^{-1} \right) , \tag{6.134}$$

$$\begin{aligned}[\,\mathcal{K},\, \ell_j^n\,] &= (n+1)\Big( \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k \Big) \ell_j^{n-1} - (n-1)\Big( \sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk} z_k^{-1} \Big) \ell_j^{n+1} \\ &\quad - z_j^{n+1}\Big( \sum_{k=1}^{N} A_{kj} \ell_k^{-1} \Big) - z_j^{n-1}\Big( \sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{kj} \ell_k^1 \Big) . \end{aligned} \tag{6.135}$$

*Proof.* The commutation relations in Eq. (6.133) are obtained easily from the definition in Eq. (6.48). Then,

$$\begin{aligned}[\,\mathcal{K},\, z_j^n\,] &= \sum_{q,k} A_{qk} [z_k \ell_q^{-1}, z_j^n] - \sum_{q,k} \bar{A}_{qk} [z_k^{-1} \ell_q^1, z_j^n] \\ [\,\mathcal{K},\, \ell_j^n\,] &= \sum_{q,k} A_{qk} [z_k \ell_q^{-1}, \ell_j^n] - \sum_{q,k} \bar{A}_{qk} [z_k^{-1} \ell_q^1, \ell_j^n] . \end{aligned}$$

Using the linearity of the commutator, the general formula $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ and Eq. (6.133) readily provides

$$\begin{aligned} [z_k \ell_q^{-1}, z_j^n] &= \delta_{qj} n z_k z_j^{n-1} & \qquad [z_k \ell_q^{-1}, \ell_j^n] &= \delta_{qj}(n+1) z_k \ell_q^{n-1} - \delta_{jk} z_k^{n+1} \ell_q^{-1} \\ [z_k^{-1} \ell_q^1, z_j^n] &= \delta_{qj} n z_k^{-1} z_j^{n+1} & \qquad [z_k^{-1} \ell_q^1, \ell_j^n] &= \delta_{qj}(n-1) z_k^{-1} \ell_q^{n+1} + \delta_{jk} z_k^{n-1} \ell_q^1 \end{aligned}$$

and their substitution yields the desired results

$$\begin{aligned}[\,\mathcal{K},\, z_j^n\,] &= \sum_{q,k} A_{qk} \delta_{qj} n z_k z_j^{n-1} - \sum_{q,k} \bar{A}_{qk} \delta_{qj} n z_k^{-1} z_j^{n+1} = n \sum_k A_{jk} z_k z_j^{n-1} - n \sum_k \bar{A}_{jk} z_k^{-1} z_j^{n+1} \\ [\,\mathcal{K},\, \ell_j^n\,] &= \sum_{q,k} A_{qk} (\delta_{qj}(n+1) z_k \ell_q^{n-1} - \delta_{jk} z_k^{n+1} \ell_q^{-1}) - \sum_{q,k} \bar{A}_{qk} (\delta_{qj}(n-1) z_k^{-1} \ell_q^{n+1} + \delta_{jk} z_k^{n-1} \ell_q^1) \\ &= (n+1)\Big( \sum_k A_{jk} z_k \Big) \ell_j^{n-1} - z_j^{n+1}\Big( \sum_q A_{qj} \ell_q^{-1} \Big) - (n-1)\Big( \sum_k \bar{A}_{jk} z_k^{-1} \Big) \ell_j^{n+1} - z_j^{n-1}\Big( \sum_q \bar{A}_{qj} \ell_q^1 \Big) \\ &= (n+1)\Big( \sum_k A_{jk} z_k \Big) \ell_j^{n-1} - (n-1)\Big( \sum_k \bar{A}_{jk} z_k^{-1} \Big) \ell_j^{n+1} - z_j^{n+1}\Big( \sum_k A_{kj} \ell_k^{-1} \Big) - z_j^{n-1}\Big( \sum_k \bar{A}_{kj} \ell_k^1 \Big) . \end{aligned}$$

□

As mentioned in the main text, it is also useful to simplify calculations to restrict the general symmetry generator $\mathcal{S}$ to one where $\xi$ and $\phi_1, ..., \phi_N$ are periodic functions, allowing us to expand them in Fourier series:

$$\xi(t,z) = \sum_{\boldsymbol{p} \in \mathbb{Z}^N} \varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t) z^{\boldsymbol{p}} , \qquad \phi_\ell(t,z) = \sum_{\boldsymbol{p} \in \mathbb{Z}^N} \varphi_{\ell \boldsymbol{p}}(t) z^{\boldsymbol{p}} , \qquad \text{with} \quad z^{\boldsymbol{p}} = \prod_{j=1}^{N} z_j^{p_j} .$$

This assumption and some notation simplifications lead to

$$[\mathcal{U}, \mathcal{S}] - \mathcal{U}[\xi(t,z)]\mathcal{U} = \sum_{\boldsymbol{p}} \Big[ \mathcal{U}, \varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t) z^{\boldsymbol{p}} \partial_t \Big] + \sum_{\ell, \boldsymbol{p}} \Big[ \mathcal{U}, \varphi_{\ell \boldsymbol{p}}(t) z^{\boldsymbol{p}} \partial_\ell \Big] - \Big( \sum_{\boldsymbol{p}} \mathcal{U}\Big[ \varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t) z^{\boldsymbol{p}} \Big] \Big) \mathcal{U} .$$

After some manipulations using Lem. 6.43 and simplifications, one finds

$$[\mathcal{U},\mathcal{S}]-\mathcal{U}[\xi(t,z)]\mathcal{U}=\sum_{\ell,\boldsymbol{p}}\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)(A_{jk}[z_k\partial_j,z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell]-\bar{A}_{jk}[z_k^{-1}z_j^2\partial_j,z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell])$$
$$-\sum_{\boldsymbol{p}}\left(\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}}(t)+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t)\sum_{r,s}p_r(A_{rs}z_r^{-1}z_s-\bar{A}_{rs}z_rz_s^{-1})\right)z^{\boldsymbol{p}}\sum_{j,k}(A_{jk}z_k-\bar{A}_{jk}\bar{z}_kz_j^2)\partial_j\,.$$

The commutation relations are explicitly given by

$$[z_k\partial_j,z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell]=p_jz^{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell-\delta_{k\ell}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$[z_k^{-1}z_j^2\partial_j,z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell]=p_jz^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell+\delta_{k\ell}z^{\boldsymbol{p}+2\boldsymbol{e}_j-2\boldsymbol{e}_k}\partial_j-2z^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\delta_{j\ell}\partial_j\,.$$

Substituting these commutation relations into the infinitesimal condition yields, after simplifications,

$$[\mathcal{U},\mathcal{S}]-\mathcal{U}[\xi(t,z)]\mathcal{U}=\sum_{\ell,\boldsymbol{p}}\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)A_{jk}p_jz^{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)A_{j\ell}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{jk}p_jz^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{j\ell}z^{\boldsymbol{p}+2\boldsymbol{e}_j-2\boldsymbol{e}_\ell}\partial_j+2\sum_{\ell,\boldsymbol{p},k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_\ell-\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell$$
$$-\sum_{\boldsymbol{p}}\left(\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}}(t)+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t)\sum_{r,s}p_r(A_{rs}z_r^{-1}z_s-\bar{A}_{rs}z_rz_s^{-1})\right)z^{\boldsymbol{p}}\sum_{j,k}(A_{jk}z_k-\bar{A}_{jk}\bar{z}_kz_j^2)\partial_j\,.$$

From there, let's simplify again the equations to extract the determining equations. First,

$$[\mathcal{U},\mathcal{S}]-\mathcal{U}[\xi(t,z)]\mathcal{U}=\sum_{\ell,\boldsymbol{p}}\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)A_{jk}p_jz^{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)A_{j\ell}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{jk}p_jz^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{j\ell}z^{\boldsymbol{p}+2\boldsymbol{e}_j-2\boldsymbol{e}_\ell}\partial_j+2\sum_{\ell,\boldsymbol{p},k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_\ell-\boldsymbol{e}_k}\partial_\ell$$
$$-\sum_{\boldsymbol{p},j,k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}}(t)A_{jk}z^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_k}\partial_j+\sum_{\boldsymbol{p},j,k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}+2\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}\partial_j$$
$$-\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}p_r\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t)A_{rs}A_{jk}z^{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k}\partial_j+\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}p_r\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t)A_{rs}\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k+2\boldsymbol{e}_j}\partial_j$$
$$+\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}p_r\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{rs}A_{jk}z^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k}\partial_j+\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}p_r\varepsilon_{\boldsymbol{p}}(t)\bar{A}_{rs}\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k+2\boldsymbol{e}_j}\partial_j\,.$$

Making the change of indices to yield $z^{\boldsymbol{p}}$ in every term leads to

$$[\mathcal{U},\mathcal{S}]-\mathcal{U}[\xi(t,z)]\mathcal{U}=\sum_{\ell,\boldsymbol{p}}\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}(p_j+1-\delta_{jk})\varphi_{\ell\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}(t)A_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}}(t)A_{j\ell}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}(p_j-1+\delta_{jk})\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_j+2\boldsymbol{e}_\ell}(t)\bar{A}_{j\ell}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j+2\sum_{\ell,\boldsymbol{p},k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell$$
$$-\sum_{\boldsymbol{p},j,k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_k}(t)A_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j+\sum_{\boldsymbol{p},j,k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$-\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}-\delta_{rk})\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)A_{rs}A_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$+\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{rj})\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_j}(t)A_{rs}\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$+\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}-\delta_{rk})\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{rs}A_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j$$
$$+\sum_{\boldsymbol{p},j,k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{rj})\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_j}(t)\bar{A}_{rs}\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_j\,.$$

The change of indices from $j$ to $\ell$ to get a factor $\partial_\ell$ in every sum implies

$$
\begin{aligned}
&[\mathcal{U},\mathcal{S}]-\mathcal{U}[\xi(t,z)]\,\mathcal{U}=\sum_{\ell,\boldsymbol{p}}\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}(p_j+1-\delta_{jk})\varphi_{\ell\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}(t)A_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell-\sum_{j,\boldsymbol{p},\ell}\varphi_{j\boldsymbol{p}}(t)A_{\ell j}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell\\
&-\sum_{\ell,\boldsymbol{p},j,k}(p_j-1+\delta_{jk})\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{jk}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell-\sum_{j,\boldsymbol{p},\ell}\varphi_{j\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+2\boldsymbol{e}_j}(t)\bar{A}_{\ell j}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+2\sum_{\ell,\boldsymbol{p},k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell\\
&-\sum_{\boldsymbol{p},\ell,k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_k}(t)A_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell+\sum_{\boldsymbol{p},\ell,k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell-\sum_{\boldsymbol{p},\ell,k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}-\delta_{rk})\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)A_{rs}A_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell\\
&+\sum_{\boldsymbol{p},\ell,k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{r\ell})\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_\ell}(t)A_{rs}\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell\\
&+\sum_{\boldsymbol{p},\ell,k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}-\delta_{rk})\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)\bar{A}_{rs}A_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell\\
&+\sum_{\boldsymbol{p},\ell,k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{r\ell})\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_\ell}(t)\bar{A}_{rs}\bar{A}_{\ell k}z^{\boldsymbol{p}}\partial_\ell\,.
\end{aligned}
$$

The infinitesimal condition of symmetry then yields

$$
\begin{aligned}
0=&\,\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)+\sum_{j,k}(p_j+1-\delta_{jk})A_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}(t)-\sum_j A_{\ell j}\varphi_{j\boldsymbol{p}}(t)-\sum_{j,k}(p_j-1+\delta_{jk})\bar{A}_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}(t)\\
&-\sum_j\bar{A}_{\ell j}\varphi_{j\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+2\boldsymbol{e}_j}(t)+2\sum_k\bar{A}_{\ell k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)-\sum_k A_{\ell k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_k}(t)+\sum_k\bar{A}_{\ell k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)\\
&-\sum_{k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}-\delta_{rk})A_{rs}A_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)+\sum_{k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{r\ell})A_{rs}\bar{A}_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_\ell}(t)\\
&+\sum_{k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}-\delta_{rk})\bar{A}_{rs}A_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)+\sum_{k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{r\ell})\bar{A}_{rs}\bar{A}_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_\ell}(t)
\end{aligned}
$$

for all $\ell\in\{1,...,N\}$, $\boldsymbol{p}\in\mathbb{Z}^N$. By rearranging, one finds the general determining equations

$$
\begin{aligned}
&\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)-\sum_k A_{\ell k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_k}(t)+\sum_k\bar{A}_{\ell k}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)=\sum_k[A_{\ell k}\varphi_{k\boldsymbol{p}}(t)+\bar{A}_{\ell k}\varphi_{k\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+2\boldsymbol{e}_k}(t)-2\bar{A}_{\ell k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)]\\
&+\sum_{j,k}(p_j-1+\delta_{jk})\bar{A}_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}(t)-\sum_{j,k}(p_j+1-\delta_{jk})A_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}(t)\\
&+\sum_{k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}-\delta_{rk})A_{rs}A_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)-\sum_{k,r,s}(p_r+1-\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{r\ell})A_{rs}\bar{A}_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_\ell}(t)\\
&-\sum_{k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}-\delta_{rk})\bar{A}_{rs}A_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s-\boldsymbol{e}_k}(t)-\sum_{k,r,s}(p_r-1+\delta_{rs}+\delta_{rk}-2\delta_{r\ell})\bar{A}_{rs}\bar{A}_{\ell k}\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_s+\boldsymbol{e}_k-2\boldsymbol{e}_\ell}(t)\,,
\end{aligned}
$$

for all $\ell\in\{1,...,N\}$, $\boldsymbol{p}\in\mathbb{Z}^N$, which represent an infinite-dimensional differential-algebraic system of equations.

### 6.14.4 Symmetry generators from determining-matrix singular vectors

Let's search for state-space symmetries, i.e., those where $\xi(t,z)=0$. In this context, the determining equations become an infinite-dimensional system of ordinary differential equations

$$
\begin{aligned}
\dot{\varphi}_{\ell\boldsymbol{p}}(t)=&\sum_k[A_{\ell k}\varphi_{k\boldsymbol{p}}(t)+\bar{A}_{\ell k}\varphi_{k\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+2\boldsymbol{e}_k}(t)-2\bar{A}_{\ell k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k}(t)]\\
&+\sum_{j,k}(p_j-1+\delta_{jk})\bar{A}_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k}(t)-\sum_{j,k}(p_j+1-\delta_{jk})A_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k}(t)\,,
\end{aligned}
$$

where $\ell\in\{1,...,N\}$ and $\boldsymbol{p}\in\mathbb{Z}^N$. One notices that it forms an infinite-dimensional *linear* system of equations and that only the coefficients related to the monomials of the same total

degree are dependent over one another. We can thus treat the different total degrees separately. However, we can seek a specific symmetry generator that has a finite number of nonzero coefficients $(\varphi_{\ell \boldsymbol{p}}(t))_{\ell,\boldsymbol{p}}$. Consider that the nonzero coefficients are such that $\boldsymbol{p}$ is in a finite subset $\mathbb{P} \subset \mathbb{Z}^N$ including $d := N \cdot \#\mathbb{P}$ coefficients. For some ordering of $(\ell, \boldsymbol{p})$, the determining equations become an overdetermined linear system of differential-algebraic equations described by

$$\dot{\boldsymbol{\varphi}} = \mathcal{M}\,\boldsymbol{\varphi}\,, \tag{6.136}$$

$$\mathbf{0} = \mathcal{N}\,\boldsymbol{\varphi}\,, \tag{6.137}$$

where we name $\mathcal{M}$ the differential determining matrix and $\mathcal{N}$ the algebraic determining matrix, as they entirely determine the possibility of having a generator of symmetry or not. As one should expect, $\mathcal{M}$ and $\mathcal{N}$ solely depend upon the elements of the complex weight matrix $A$. The differential determining matrix $\mathcal{M}$ is a $d \times d$ matrix, while $\mathcal{N}$ is a $r \times d$ matrix where $r$ is the number of equations such that $\dot{\varphi}_{\ell \boldsymbol{p}}(t) = 0$ for $\boldsymbol{p} \notin \mathbb{P}$. The algebraic equations appear since there are shifts of coefficients in these determining equations that yield nonzero coefficients.

The solvability of Eqs (6.136-6.137) is questionable since it is generally strongly overdetermined. Yet, we know that for a set $\mathbb{P}$ containing sufficient $\boldsymbol{p}$'s of total degree one, there are at least two solutions ($L_0$ and $\mathcal{K}$). In fact, if $\dot{\boldsymbol{\varphi}} = \mathbf{0}$, then the following recurrence relations hold:

$$\begin{aligned} 0 = \sum_k \Big[ & A_{\ell k}\varphi_{k\boldsymbol{p}} + \bar{A}_{\ell k}\varphi_{k\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{e}_\ell+2\boldsymbol{e}_k} - 2\bar{A}_{\ell k}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\ell+\boldsymbol{e}_k} \\ & + \sum_j (p_j - 1 + \delta_{jk})\bar{A}_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k} - \sum_j (p_j + 1 - \delta_{jk})A_{jk}\varphi_{\ell\boldsymbol{p}+\boldsymbol{e}_j-\boldsymbol{e}_k} \Big]\,. \end{aligned} \tag{6.138}$$

In matrix form,

$$D(A)\,\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{0} \tag{6.139}$$

where $D(A)$ is a $m \times d$ ($m > d$) complex rectangular matrix depending on the elements of a complex square matrix $A$ with imaginary diagonal and $\boldsymbol{\varphi}$ is a complex vector of dimension $d \times 1$. Under what conditions on $A$ does the overdetermined system $D(A)\,\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{0}$ admit nontrivial solutions? The last equation means that the nullspace of $D(A)$ must have a dimension greater than or equal to one (the nullspace always contains the null vector, but if it only contains $\mathbf{0}$, its dimension is 0). By the rank-nullity theorem [279],

$$\dim(\text{nullspace}(D(A))) = N \cdot \#\mathbb{P} - \text{rank}(D(A))\,,$$

and thus, in order to have a symmetry, the following inequality must be satisfied:

$$\text{rank}(D(A)) < N \cdot \#\mathbb{P}\,.$$

In other words, the multiplicity of the zero singular value for $D(A)$ must be greater or equal to 1. The right singular vectors with singular value 0 are the coefficients of the time-independent symmetry generator.

### 6.14.5 Proof of Theorem 4: Peripheral constants of motion

Using diverse matrices $A$ for $N = 4$ and $N = 5$, we performed symbolic and numerical calculations (see Ref. [582], koopman-kuramoto/symbolic/symmetries) to obtain the associated determining matrices $D(A)$, their singular value decomposition and from the singular vectors with zero singular value, symmetry generators. In this way, we inferred a class of symmetry generators that enable the creation of new constants of motion in the Kuramoto model on graph. This subsection is devoted to the proof of Thm. 6.4 (Thm. 6.46) on these symmetry-generated constants of motion. To that end, we first introduce a lemma that specifies the conditions (see Fig. 6.9) under which the Kuramoto model admits such symmetry generators, along with their explicit form.

**Lemma 6.44** (Time evolution of peripheral oscillators in the frame of their source is a symmetry)**.** *If there is a source oscillator with natural frequency $\omega_s$ and it has outgoing edges toward $r > 1$ disjoint subgraphs whose vertex sets are denoted by $\mathcal{W}_1, ..., \mathcal{W}_r$, then the Koopman generators of the subgraphs in the rotating frame of the source,*

$$\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_s L_0^\eta\,, \quad \eta \in \{1, ..., r\}\,, \tag{6.140}$$

*are generators of Lie symmetries, where $\mathcal{K}_\eta = \sum_{j\in\mathcal{W}_\eta}\sum_{k\in\mathcal{W}_\eta\cup\{s\}}(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2)\partial_j$ and $L_0^\eta = \sum_{j\in\mathcal{W}_\eta} z_j\partial_j$.*

*Proof.* The existence of a source connected to disjoint subsets implies that the Koopman generator splits as

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_s + \sum_{\tau=1}^{r}\mathcal{K}_\tau = i\omega_s z_s\partial_s + \sum_{\tau=1}^{r}\sum_{j\in\mathcal{W}_\tau}\sum_{k\in\mathcal{W}_\tau\cup\{s\}}(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2)\partial_j\,. \tag{6.141}$$

Lemma 6.42, stated in $\boldsymbol{z}$-coordinates on the $N$-torus, implies that satisfying the commutation relations $[\mathcal{K}, \mathcal{S}_\eta] = 0$ for all $\eta$ is a sufficient condition for the present lemma to hold. Now, as illustrated in Fig. 6.9, each subgraph $\mathcal{W}_1, \ldots, \mathcal{W}_r$ has a certain fraction of vertices contained in $\mathcal{R}_1, \ldots, \mathcal{R}_r$ that receive from the source. The generator of the source $\mathcal{K}_s$ only acts on the phase of these oscillators and it is convenient to split the generators related to the subgraphs as

$$\mathcal{K}_\tau = \mathcal{K}_{\mathcal{R}_\tau} + \mathcal{K}_{\mathcal{W}_\tau}, \quad \tau \in \{1, ..., r\}\,,$$

where $\mathcal{K}_{\mathcal{R}_\tau} = \sum_{j\in\mathcal{R}_\tau}(A_{js}z_s - \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j$ and $\mathcal{K}_{\mathcal{W}_\tau} = \sum_{j,k\in\mathcal{W}_\tau}(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2)\partial_j$. Hence,

$$[\mathcal{K}, \mathcal{S}_\eta] = [\, i\omega_s z_s\partial_s + \textstyle\sum_{\tau=1}^{r}(\mathcal{K}_{\mathcal{R}_\tau} + \mathcal{K}_{\mathcal{W}_\tau})\ ,\ \mathcal{K}_{\mathcal{R}_\eta} + \mathcal{K}_{\mathcal{W}_\eta} - i\omega_s L_0^\eta\,]\,.$$

Using bilinearity and keeping only the nontrivial commutators yields

$$[\mathcal{K}, \mathcal{S}_\eta] = i\omega_s[z_s\partial_s, \mathcal{K}_{\mathcal{R}_\eta}] - i\omega_s[\mathcal{K}_{\mathcal{R}_\eta} + \mathcal{K}_{\mathcal{W}_\eta}, L_0^\eta]\,.$$

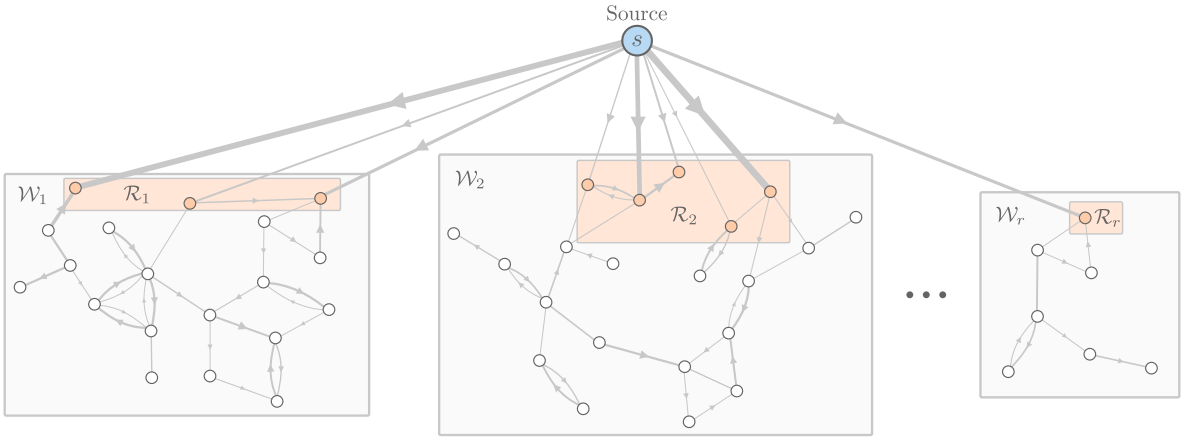



Figure 6.9 – **Illustration of a graph with symmetry generators $\mathcal{S}_1, ..., \mathcal{S}_r$** [Lem. 6.44]. A source $s$ is connected to $r$ subsets $\mathcal{R}_1, ..., \mathcal{R}_r$ of peripheral parts $\mathcal{W}_1, ..., \mathcal{W}_r$. Each of these parts is related to a symmetry generator $\mathcal{S}_1, ..., \mathcal{S}_r$ that makes the oscillators of the peripheral parts evolve in time in the frame of the source.

But clearly, one also finds $[\mathcal{K}_{\mathcal{W}_\eta}, L_0^\eta] = 0$ with the commutation relations of Lem. 6.43 (or the intuition that $L_0^\eta$ is the dilatation symmetry generator for $\mathcal{W}_\eta$ and thus commutes with $\mathcal{K}_{\mathcal{W}_\eta}$) and $[\mathcal{K}_{\mathcal{R}_\eta}, L_0^\eta] = \sum_{k\in\mathcal{R}_\eta}[\mathcal{K}_{\mathcal{R}_\eta}, z_k\partial_k]$. Hence,

$$[\mathcal{K}, \mathcal{S}_\eta] = i\omega_s\big(\sum_{j\in\mathcal{R}_\eta}[z_s\partial_s\,,\,(A_{js}z_s - \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j] - \sum_{j,k\in\mathcal{R}_\eta}[(A_{js}z_s - \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j, z_k\partial_k]\big)\,.$$

On the one hand, the first term is

$$\sum_{j\in\mathcal{R}_\eta}[z_s\partial_s\,,\,(A_{js}z_s - \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j] = \sum_{j\in\mathcal{R}_\eta}(A_{js}z_s + \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j\,.$$

On the other hand, the commutation relation $[\,\ell_j^m,\,\ell_k^n\,] = \delta_{jk}(n-m)\,\ell_j^{m+n}$ of Lem. 6.43 implies that the second term is

$$\sum_{j,k\in\mathcal{R}_\eta}[(A_{js}z_s - \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j, z_k\partial_k] = \sum_{j,k\in\mathcal{R}_\eta}(A_{js}z_s[\ell_j^{-1},\ell_k^0] - \bar{A}_{js}\bar{z}_s[\ell_j^1,\ell_k^0]) = \sum_{j\in\mathcal{R}_\eta}(A_{js}z_s + \bar{A}_{js}\bar{z}_s z_j^2)\partial_j\,.$$

Consequently, $[\mathcal{K}, \mathcal{S}_\eta] = 0$ for all $\eta \in \{1, ..., r\}$, so each $\mathcal{S}_\eta$ is indeed a Lie symmetry generator of the Kuramoto dynamics. □

**Remark 6.45.** For $r = 1$, the symmetry generator is $\mathcal{S} = \mathcal{K} - i\omega_s L_0$ and hence, $\mathcal{S}$ is linearly dependent on $\mathcal{K}$ and $L_0$. This means that the symmetry generator does not enable the creation of a new constant of motion in the way we do in Thm. 6.4 of the main text. ■

In the next theorem, we use the possible coexistence of the symmetry generators in the last lemma and the conserved cross-ratios (Thm. 6.25) to generate new functionally independent constants of motion.

**Theorem 6.46** (Thm. 6.4 of the paper)**.** *Consider that the Kuramoto model in Def.* (6.5) *has a symmetry generator $\mathcal{S}_\eta$ as defined in Eq.* (6.140) *related to the subgraph $\mathcal{W}_\eta$ and the source oscillator $s$.*

*A. If four vertices $a, b, c, d \in \mathcal{V} \setminus \{s\}$ have*
*(A1) a unique incoming edge with weight $\mathcal{A}_s$ from $s$;*
*(A2) identical natural frequencies $\omega$;*
*(A3) and one, two or three of them belong to $\mathcal{W}_\eta$,*
*then both the cross-ratio $c_{abcd}$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ are conserved and functionally independent.*

*B. If three vertices $u, v, w \in \mathcal{V} \setminus \{s\}$ have*
*(B1) a unique incoming edge with weight $\mathcal{A}_s$ from $s$;*
*(B2) identical natural frequencies $\omega = \omega_s - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_s)$;*
*(B3) and one or two of them belong to $\mathcal{W}_\eta$*
*then both the cross-ratio $c_{suvw}$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ are conserved and functionally independent.*

*Proof.* A. Condition (A1) implies that the four vertices are mutually disconnected ($A_{jk} = 0$ for all $j, k \in \{a, b, c, d\}$ with $j \neq k$) as they can only have an incoming edge from the source. Therefore, condition (1) from Thm. 6.25 is satisfied. Condition (A1) also highlights that the weights of these incoming edges are all equal to $\mathcal{A}_s$, meaning that condition 2 of Thm. 6.25 holds. Then, condition 3 of Thm. 6.25 is also fulfilled from condition (A2) and the fact that $A_{jk} = 0$ for all $j, k \in \{a, b, c, d\}$ with $j \neq k$. Altogether, Thm. 6.25 guarantees that $\mathcal{K}[c_{abcd}] = 0$, that is, $c_{abcd}$ is a constant of motion. Lemma 6.44 shows that $\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_s L_0^\eta$ is a symmetry generator and condition (A3) ensures that $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ is not zero. Therefore, $\mathcal{K}\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}] = \mathcal{S}_\eta\mathcal{K}[c_{abcd}] = 0$, i.e., $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ is another constant of motion. Since $\mathcal{K}_\eta$ depends on the source's state $z_s$, $\mathcal{S}_\eta$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ also do. Therefore, $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ is functionally independent of $c_{abcd}$, which only depends on $z_a, z_b, z_c, z_d$.

B. Conditions (B1) and (B2) imply that all the conditions of Thm. 6.25 are fulfilled and hence, $c_{suvw}$ is conserved. Then, condition (B3) guarantees that $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ is not zero and as in part A of the proof, $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ is conserved. If there are vertices other than $u$, $v$ or $w$ belonging to $\mathcal{W}_\eta$, then $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ is functionally independent of $c_{suvw}$. If only one or two vertices among $u$, $v$ or $w$ are in $\mathcal{W}_\eta$, the symmetry generator $\mathcal{S}_\eta$ can take the 6 different forms

$$\mathcal{S}_\eta^x = (i(\omega_x - \omega_s)z_x + A_{xs}z_s - \bar{A}_{xs}\bar{z}_s z_x^2)\partial_x\,,$$
$$\mathcal{S}_\eta^{xy} = (i(\omega_x - \omega_s)z_x + A_{xs}z_s - \bar{A}_{xs}\bar{z}_s z_x^2)\partial_x + (i(\omega_y - \omega_s)z_y + A_{ys}z_s - \bar{A}_{ys}\bar{z}_s z_y^2)\partial_y\,,$$

where $x, y \in \mathcal{W}_\eta$, $x, y \in \{u, v, w\}$, $\mathcal{S}_\eta^{xy} = \mathcal{S}_\eta^{yx}$, and $x \neq y$. The constants of motion $c_{suvw}$ and $\mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]$ are functionally independent if the rank of the Jacobian matrix

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial c_{suvw}}{\partial z_s} & \frac{\partial c_{suvw}}{\partial z_u} & \frac{\partial c_{suvw}}{\partial z_v} & \frac{\partial c_{suvw}}{\partial z_w} \\ \frac{\partial \mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]}{\partial z_s} & \frac{\partial \mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]}{\partial z_u} & \frac{\partial \mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]}{\partial z_v} & \frac{\partial \mathcal{S}_\eta[c_{suvw}]}{\partial z_w} \end{pmatrix}$$

is 2, where $\mathcal{S}_\eta$ is either $\mathcal{S}_\eta^u$, $\mathcal{S}_\eta^v$, $\mathcal{S}_\eta^w$, $\mathcal{S}_\eta^{uv}$, $\mathcal{S}_\eta^{uw}$, or $\mathcal{S}_\eta^{vw}$. For the six Jacobian matrices, lengthy but straightforward calculations enable showing that their rank is 2 (see *proof_thm4_partB.wls* in Ref. [582] for symbolic calculations). □

**Remark 6.47.** *A priori*, one could hope to generate new constants of motion from the class of symmetry generators in Lem. 6.44 and monomial eigenfunctions. However, if there is a subgraph with vertex set $\mathcal{M}$ supporting a monomial eigenfunction, it must be a source and there is no way to make $\mathcal{S}_\eta$ act on only a subset of $\mathcal{M}$. More precisely, $\mathcal{M}$ can only be a source (first condition of Thm. 6.13) to another vertex $v$ that also receives from the source $s$. The vertex set for the subgraph admitting the symmetry generator $\mathcal{S}_\eta$ is thus $\mathcal{W}_\eta = \{v\} \cup \mathcal{M}$. Using conditions 2,3,4 of Thm. 6.13, $\mathcal{S}_\eta[z^{\boldsymbol{\nu}}] = \left(i \sum_{j\in\mathcal{M}} \nu_j(\omega_j - \omega_1)\right) z^{\boldsymbol{\nu}}$, i.e., the monomial is an eigenfunction of the symmetry, $\mathcal{S}_\eta[z^{\boldsymbol{\nu}}]$ is functionally dependent on $z^{\boldsymbol{\nu}}$ and $\mathcal{S}_\eta[z^{\boldsymbol{\nu}}]$ is not a new constant of motion. ■

### 6.14.6 Basic examples for Theorem 4

The example that helped us obtain Thm. 6.4 through the singular vectors of the determining matrix is the following one.

**Example 6.48.** Consider a directed star of 5 nodes with weight matrix

$$A = \begin{pmatrix} i\omega_1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & i\omega/2 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & 0 & i\omega/2 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & 0 & 0 & i\omega/2 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & 0 & 0 & 0 & i\omega/2 \end{pmatrix},$$

where $\mathcal{A}_1$ is any complex number, $\omega \in \mathbb{R}$ and we assume for now that $\omega_1 \neq \omega + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$. The Koopman generator of the dynamics is $\mathcal{K} = i\omega_1 z_1 \partial_1 + \mathcal{K}_2 + \mathcal{K}_3 + \mathcal{K}_4 + \mathcal{K}_5$, where $\mathcal{K}_\eta = \left(i\omega z_\eta + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_\eta^2\right) \partial_\eta$ for $\eta \in \{2,3,4,5\}$. The most straightforward approach is to write the solution $z_1(t) = z_1(0) e^{i\omega_1 t}$ and then substitute it in the four independent equations for $z_2$ to $z_5$. From there, the solutions for $z_2(t)$ to $z_5(t)$ are found by quadrature. Yet, using the results of the paper leads to conserved observables and we can avoid computing the latter quadratures. Indeed, Thm. 6.25 readily guarantees that there is one conserved cross-ratio

$$C_1(\boldsymbol{z}) := c_{2345}(\boldsymbol{z}) = \frac{(z_4 - z_2)(z_5 - z_3)}{(z_4 - z_3)(z_5 - z_2)}$$

and four symmetries $\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_1 z_\eta \partial_\eta$. Using the derivatives of cross-ratios computed in Eq. (6.93), we thus find the four constants of motion

$$\begin{aligned}
C_2(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_2[C_1(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_2 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_2^2] \frac{(z_5 - z_3)(z_4 - z_5)}{(z_4 - z_3)(z_5 - z_2)^2} \\
C_3(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_3[C_1(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_3 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_3^2] \frac{(z_4 - z_2)(z_5 - z_4)}{(z_4 - z_3)^2(z_5 - z_2)} \\
C_4(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_4[C_1(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_4 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_4^2] \frac{(z_2 - z_3)(z_5 - z_3)}{(z_4 - z_3)^2(z_5 - z_2)} \\
C_5(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_5[C_1(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_5 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_5^2] \frac{(z_4 - z_2)(z_3 - z_2)}{(z_4 - z_3)(z_5 - z_2)^2},
\end{aligned}$$

which can be verified analytically with $\mathcal{K}[C_\eta] = 0$ or with symbolic calculations. Note also that $C_2 + C_3 + C_4 + C_5 = 0$, meaning that there is at least one functional dependency. In fact, it is easily verified symbolically that the rank of the Jacobian matrix of $(C_1, C_2, ..., C_5)$ is 3, so we have three functionally independent constants of motion. Note that there is also one more. Indeed, since there is a source, we have a monomial eigenfunction $z_1$ with eigenvalue $i\omega_1$ and $C_0(t, \boldsymbol{z}) = z_1 e^{-i\omega_1 t}$ is a constant of motion. The dynamics can thus be reduced to two autonomous equations and three constants of motion (e.g., $C_1, C_2, C_3$) or one non-autonomous equation and four constants of motion (e.g., $C_0, C_1, C_2, C_3$).

If, moreover, $\omega_1 = \omega + 2\ \mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$, then the cross-ratio

$$C_6(\boldsymbol{z}) := c_{1234}(\boldsymbol{z}) = \frac{(z_3 - z_1)(z_4 - z_2)}{(z_3 - z_2)(z_4 - z_1)}$$

is also a constant of motion ($c_{1345}$ and others are functionally dependent with $c_{1234}, c_{2345}$ as shown in subsection 6.13.3), along with

$$\begin{aligned}
C_7(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_2[C_6(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_2 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_2^2] \frac{(z_3 - z_1)(z_3 - z_4)}{(z_2 - z_3)^2(z_1 - z_4)} \\
C_8(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_3[C_6(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_3 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_3^2] \frac{(z_1 - z_2)(z_2 - z_4)}{(z_2 - z_3)^2(z_1 - z_4)} \\
C_9(\boldsymbol{z}) &:= \mathcal{S}_4[C_6(\boldsymbol{z})] = [i(\omega - \omega_1)z_4 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_4^2] \frac{(z_1 - z_2)(z_3 - z_1)}{(z_2 - z_3)(z_4 - z_1)^2}\,.
\end{aligned}$$

In this case, there are 5 functionally independent constants of motion, say $C_0, C_1, C_2, C_3, C_6$. This completely integrates the system without having to perform quadratures. See also the symbolic calculations for this example in the Mathematica script *example_ cte_ mvt_ from_ symmetry_ 1.wls* for symbolic validation and Fig. 6.10 for numerical validation. ■

**Remark 6.49.** By applying the symmetry generators to the logarithm of the cross-ratios, the form of the new constants of motion is simplified in the above example. For instance, assuming that $c_{2345}$ is positive,

$$\mathcal{S}_2[\ln c_{2345}] = [i(\omega - \omega_1)z_2 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_2^2] \frac{(z_4 - z_5)}{(z_4 - z_2)(z_5 - z_2)}\,.$$

If $\mathcal{A}_1 = (\sigma/4)e^{-i\alpha} \in \mathbb{C}$ with $\sigma \in \mathbb{R}$ and $|\alpha| \leq \pi/2$, the real form for the constant of motion is

$$\mathcal{S}_2[2\ln c_{2345}] = (\omega - \omega_1 + (\sigma/2)\sin(\theta_1 - \theta_2 - \alpha)) \frac{\sin\left(\frac{\theta_4 - \theta_5}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\theta_4 - \theta_2}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta_5 - \theta_2}{2}\right)}\,.$$

Additionally, if $\alpha = 0$, $\omega_1 = \omega$ and the constant of motion is simplified to

$$\mathcal{S}_2[(2/\sigma)\ln c_{2345}] = \frac{C_{12}S_{12}S_{45}}{S_{42}S_{52}}\,,$$

where $S_{jk} := \sin\left(\frac{\theta_j - \theta_k}{2}\right)$ and $C_{jk} := \cos\left(\frac{\theta_j - \theta_k}{2}\right)$. ■

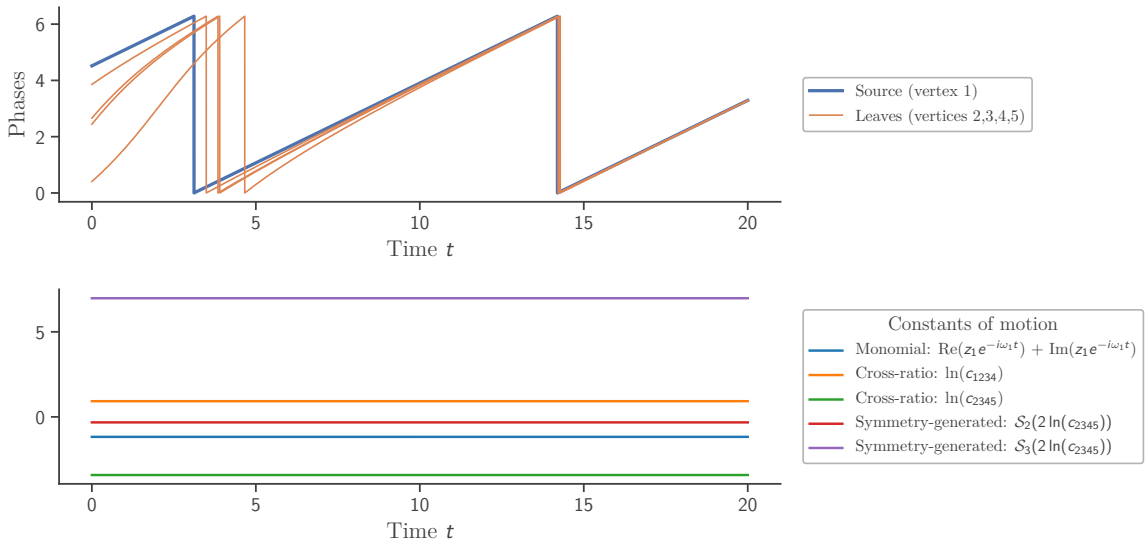



Figure 6.10 – **Basic example with coexisting conserved quantities of different types.** The figure is related to Example 6.48. We evaluate the constants of motion at the phases for each time point to verify their conservation. The initial conditions $\boldsymbol{\theta}(0) \approx (4.51756368\ 3.85865453\ 2.66025984\ 0.4049007\ 2.44481427)^\top$ are drawn from a uniform distribution. Parameters: $\alpha = \pi/3$, $\sigma = 1$, $\mathcal{A}_1 = (\sigma/4)\exp(-i\alpha)$, $\omega = 1$, $\omega_1 = \omega + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$.

The leaves of the star can be sources within arbitrary subgraphs. One of the simplest cases is presented in the next example.

**Example 6.50.** Consider the star from the previous example, but connect vertices 2 and 3 to a sixth vertex and vertices 4 and 5 to a seventh vertex. The weight matrix is thus

$$A = \begin{pmatrix} i\omega_1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & i\omega/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & 0 & i\omega/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & 0 & 0 & i\omega/2 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & 0 & 0 & 0 & i\omega/2 & 0 & 0 \\ A_{61} & A_{62} & A_{63} & 0 & 0 & i\omega_6/2 & 0 \\ A_{71} & 0 & 0 & A_{74} & A_{75} & 0 & i\omega_7/2 \end{pmatrix}$$

with $\omega_1 \neq \omega + 2\ \mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$ and the Koopman generator is $\mathcal{K} = i\omega_1 z_1 \partial_1 + \sum_{\eta=2}^{5} \mathcal{K}_\eta + \mathcal{K}_6 + \mathcal{K}_7$, where $\mathcal{K}_2$ to $\mathcal{K}_5$ are defined as in the previous example and $\mathcal{K}_6 = \sum_{k=1}^{3}(A_{6k} z_k - \bar{A}_{6k}\bar{z}_k z_6^2)\partial_6$, $\mathcal{K}_7 = \sum_{k\in\{1,4,5\}}(A_{7k} z_k - \bar{A}_{7k}\bar{z}_k z_7^2)\partial_7$. The monomial $z_1 e^{-i\omega_1 t}$ and $c_{2345}$ are still conserved, but there remain only two symmetries:

$$\mathcal{S}_1 = \mathcal{K}_2 + \mathcal{K}_3 + \mathcal{K}_6 - i\omega_1 \sum_{j\in\{2,3,6\}} z_j \partial_j \qquad \text{and} \qquad \mathcal{S}_2 = \mathcal{K}_4 + \mathcal{K}_5 + \mathcal{K}_7 - i\omega_1 \sum_{j\in\{4,5,7\}} z_j \partial_j\,.$$

We find that

$$\mathcal{S}_1[c_{2345}(\boldsymbol{z})] = -\mathcal{S}_2[c_{2345}(\boldsymbol{z})] = [2i\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)(z_2z_3 - z_4z_5) + \mathcal{A}_1 z_1(z_4 + z_5 - z_2 - z_3) \\ - \bar{\mathcal{A}}_1\bar{z}_1(z_4z_5(z_2 + z_3) - z_2z_3(z_4 + z_5))]\frac{(z_2 - z_3)(z_4 - z_5)}{(z_3 - z_4)^2(z_2 - z_5)^2}$$

is another functionally independent constant of motion (see the symbolic calculations in the Mathematica scripts *example_ cte_ mvt_ from_ symmetry_ 2.wls* and *example_ cte_ mvt_ from _ symmetry_ 3.wls* when $\omega_1 = \omega + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$). ■

### 6.14.7 Explicit form for the symmetry transformation related to $\mathcal{S}_\eta$

We have shown in Lemma 6.44 that

$$\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_s L_0^\eta\,, \quad \eta \in \{1, ..., r\}\,,$$

are symmetry generators representing the time evolution of peripheral oscillators in the frame of their source. Finding the explicit action of the symmetry $\exp(\varepsilon\mathcal{S}_\eta)$ thus implies having an explicit form for the flow of the peripheral oscillators, which is generally not available when there are more than three oscillators.

There are however special cases where we are able to find the symmetry transformation more explicitly. For instance, consider the symmetry generator

$$\mathcal{S}_\eta = \rho_\eta(\boldsymbol{z})L_{-1}^\eta + i(\Omega_\eta - \omega_s)L_0^\eta - \overline{\rho_\eta(\boldsymbol{z})}L_1^\eta$$

for a group of peripheral oscillators $\mathcal{W}_\eta$ with $\#\mathcal{W}_\eta \geq 3$ and

$$L_n^\eta = \sum_{j\in\mathcal{W}_\eta} z_j^{n+1}\partial_j\,, \qquad \rho_\eta(\boldsymbol{z}) = \sum_{k\in\mathcal{W}_\eta\cup\{s\}} \mathcal{A}_{\eta k}z_k\,, \qquad \Omega_\eta = \omega_{\ell_\eta} - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\eta\ell_\eta})\,,$$

where $\ell_\eta$ is the index of any oscillator within $\mathcal{W}_\eta$ and $\mathcal{A}_{\eta k} \in \mathbb{C}$. Note that the generator takes this form when the vertices in $\mathcal{W}_\eta$ with $\#\mathcal{W}_\eta \geq 4$ satisfy the conditions from Thm. 6.25. Without loss of generality, we can set $\omega_s = 0$ (frame of the source) and $\theta_s(0) = 0$ ($z_s(0) = 1$) to obtain

$$\mathcal{S}_\eta = \rho_\eta(\boldsymbol{z})L_{-1}^\eta + i\Omega_\eta L_0^\eta - \overline{\rho_\eta(\boldsymbol{z})}L_1^\eta\,, \quad \text{with} \quad \rho_\eta(\boldsymbol{z}) = \sum_{k\in\mathcal{W}_\eta} \mathcal{A}_{\eta k}z_k + \mathcal{A}_s \tag{6.142}$$

From there, Watanabe-Strogatz theory (following Ref. [388]) almost tells us directly, up to minor modifications, the form of $\exp(\varepsilon\mathcal{S}_\eta)$. Indeed, given a solution $z_j(t) \in \mathbb{T}$ for all time $t$ and $j \in \mathcal{V}$, the symmetry acts as a Möbius transformation to generate the new solution

$$\tilde{z}_j(t) = \exp(\varepsilon\mathcal{S}_\eta)z_j(t) = \begin{cases} \dfrac{e^{i\phi_\eta(\varepsilon)}z_j(t) + Z_\eta(\varepsilon)}{1 + e^{i\phi_\eta(\varepsilon)}\overline{Z_\eta(\varepsilon)}z_j(t)}\,, & j \in \mathcal{W}_\eta\,, \\ z_j(t)\,, & j \in \mathcal{V}\setminus\mathcal{W}_\eta\,, \end{cases} \tag{6.143}$$

where $Z_\eta(\varepsilon)$ and $\phi_\eta(\varepsilon)$ satisfy

$$\frac{\mathrm{d}Z_\eta}{\mathrm{d}\varepsilon} = F_\eta(Z_\eta,\phi_\eta,t) + i\Omega_\eta Z_\eta - \overline{F_\eta(Z_\eta,\phi_\eta,t)}Z_\eta^2\,, \tag{6.144}$$

$$\frac{\mathrm{d}\phi_\eta}{\mathrm{d}\varepsilon} = \Omega_\eta + i(\overline{F_\eta(Z_\eta,\phi_\eta,t)}Z_\eta - F_\eta(Z_\eta,\phi_\eta,t)\bar{Z}_\eta)\,, \tag{6.145}$$

$$(Z_\eta(0),\phi_\eta(0)) = (0,0)\,, \tag{6.146}$$

$$F_\eta(Z_\eta,\phi_\eta,t) = \mathcal{A}_s + \sum_{k\in\mathcal{W}_\eta}\mathcal{A}_{\eta k}\frac{e^{i\phi_\eta(\varepsilon)}z_k(t)+Z_\eta(\varepsilon)}{1+e^{i\phi_\eta(\varepsilon)}\overline{Z_\eta(\varepsilon)}z_k(t)}\,, \tag{6.147}$$

which is an autonomous dynamics (note the derivative over $\varepsilon$ and not $t$). To apply the symmetry transformation and get $\tilde{z}_j(t)$ numerically, one proceeds as follows:

1. Obtain a solution $z_1(t),...,z_N(t)$ for $t$ in a discrete time-interval $t_0,...,t_{T-1}$ by integrating the equations of the Kuramoto model satisfying the conditions to have a symmetry from Lemma 6.44;
2. For $t=t_0$, integrate Eqs. (6.144-6.145) with initial conditions (6.146) from 0 to $\varepsilon\in\mathbb{R}_{>0}$;
3. For $t=t_0$, apply the Möbius transformation such as in Eq. (6.143) to obtain $\tilde{z}_j(t_0)$ for $j\in\mathcal{W}_\eta$ while $\tilde{z}_j(t_0)=z_j(t_0)$ for $j\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{W}_\eta$;
4. Repeat step 2 and step 3 for all $t\in\{t_1,...,t_{T-1}\}$ to obtain the new solution $\tilde{z}_1(t),...,\tilde{z}_N(t)$;

One can always verify the validity of the transformed solution by integrating the related Kuramoto model at the new initial conditions generated by the symmetry transformation, provided in step 3.

If there are more than one part of peripheral oscillators satisfying the conditions of Thm. 6.25 (say, $r'\leq r$ parts), then the procedure is essentially the same. Indeed, in such case, one has a $r'$-parameter abelian symmetry group containing transformations of the form $\exp(\varepsilon_1\mathcal{S}_1+...+\varepsilon_{r'}\mathcal{S}_{r'}) = \exp(\varepsilon_1\mathcal{S}_1)...\exp(\varepsilon_{r'}\mathcal{S}_{r'})$. Again, each transformation $\exp(\varepsilon_\eta\mathcal{S}_\eta)$ is a different Möbius transformation and one has to integrate the equations such as Eqs. (6.144-6.145) from $\varepsilon_\eta=0$ to $\varepsilon_\eta=\epsilon_\eta\in\mathbb{R}_{>0}$ for all $\eta\in\{1,...,r'\}$.

Examples where a solution is transformed to another using the above formalism are provided in Ref. [582] under the name "*symmetry_action_kooku1_one_param_step0.py*", "*symmetry_action_kooku1_two_params.py*", "*symmetry_action_kooku1_two_params_step1.py*" (step 2 and 3). Moreover, the scripts "*symmetry_changes_invariant_sets.py*" and "*fig3_plot_invariant_sets.py*" allow reproducing Fig. 6.3 B,C,D.

As a final remark, taken altogether, the symmetry generators $i\,L_0$ (global dilatation or rotation of all the oscillators), $\mathcal{K}=\sum_{j,k\in\mathcal{V}}\left(A_{jk}z_k-\bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2\right)\partial_j$ (evolution of time-independent observables), the trivial generator $f(t)\,\mathcal{U}$ along with the time evolution of peripheral oscillators in the frame of the source $\mathcal{S}_1,...,\mathcal{S}_r$ form an abelian Lie algebra.

### 6.14.8 Parametrized families of conserved quantities

By considering the parameters $\Theta_1, ..., \Theta_n$ of a dynamical system as state variables that do not evolve over time, there are other possibilities of symmetry generators. Indeed, one can always write a symmetry generator as

$$v = \xi(t, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{\Theta})\partial_t + \sum_{j=1}^{N} \phi_j(t, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{\Theta})\partial_{u_j} + \sum_{k=1}^{n} \eta_k(t, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{\Theta})\partial_{\Theta_k} .$$

In such context, one finds the following symmetry generator of the parameter-extended Kuramoto model.

**Lemma 6.51** (Heterogeneous translation of the phases and the phase lags is a symmetry)**.** *Let $\alpha_1, ..., \alpha_N$ be real numbers. The infinitesimal generator*

$$\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}} = i\sum_{j=1}^{N} \alpha_j z_j \partial_j - \sum_{p,q=1}^{N} (\alpha_p - \alpha_q)\, \partial_{\alpha_{pq}}$$

*generates a symmetry of the parameter-extended Kuramoto model acting such as*

$$e^{\varepsilon \mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}} f(\boldsymbol{z}, A, \bar{A}) = f(D_\varepsilon \boldsymbol{z}, D_\varepsilon A D_{-\varepsilon}, D_{-\varepsilon}\bar{A}D_\varepsilon) ,$$

*where $D_\varepsilon = \mathrm{diag}(e^{i\varepsilon\alpha_1}, ..., e^{i\varepsilon\alpha_N})$. In real form, $\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \partial_{\theta_j} - \sum_{p,q=1}^{N} (\alpha_p - \alpha_q)\, \partial_{\alpha_{pq}}$ and*

$$e^{\varepsilon \mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}} g(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\alpha}) = g(\boldsymbol{\theta} + \varepsilon\boldsymbol{\alpha} ,\ \alpha + \varepsilon(\mathbf{1}\boldsymbol{\alpha}^\top - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{1}^\top)) ,$$

*where $\alpha = (\alpha_{jk})_{j,k=1}^{N}$ and $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, ..., \alpha_N)$.*

*Proof.* Using the bilinearity of the commutator yields

$$[\mathcal{K}, \mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}] = i\sum_{j=1}^{N} \alpha_j [\mathcal{K}, \ell_j^0] - \sum_{p,q=1}^{N} (\alpha_p - \alpha_q)\, [\mathcal{K}, \partial_{\alpha_{pq}}]. \tag{6.148}$$

Lemma 6.43 directly gives

$$[\mathcal{K}, \ell_j^0] = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k \ell_j^{-1} + \sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk}\, \bar{z}_k \ell_j^1 - z_j \sum_{k=1}^{N} A_{kj} \ell_k^{-1} - \bar{z}_j \sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{kj}\, \ell_k^1 ,$$

where we recall that $A_{jk} = (1/2)(W_{jk}e^{-i\alpha_{jk}} + i\omega_j\delta_{jk})$ for all $j, k$. Hence, the first term in Eq. (6.148) becomes

$$\begin{aligned} i\sum_{j=1}^{N} \alpha_j [\mathcal{K}, \ell_j^0] &= i \sum_{j,k=1}^{N} (\alpha_j - \alpha_k) \left(A_{jk} z_k + \bar{A}_{jk}\, \bar{z}_k\, z_j^2\right) \partial_j \\ &= \frac{i}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j\neq k}}^{N} (\alpha_j - \alpha_k) W_{jk} \left(e^{-i\alpha_{jk}} z_k + e^{i\alpha_{jk}}\, \bar{z}_k\, z_j^2\right) \partial_j \end{aligned}$$

after reindexing two of the four double sums. Then, for the second term in Eq. (6.148) and some function $\psi(\boldsymbol{z}, A)$,

$$\begin{aligned}
[\mathcal{K}, \partial_{\alpha_{pq}}]\psi(\boldsymbol{z}, A) &= \mathcal{K}\big[\partial_{\alpha_{pq}}\psi(\boldsymbol{z}, A)\big] - \partial_{\alpha_{pq}}\Big[\sum_{j,k=1}^{N}\big(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\,\bar{z}_k\,z_j^2\big)\,\partial_j\psi(\boldsymbol{z}, A)\Big] \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N}\partial_{\alpha_{pq}}\left((W_{jk}e^{-i\alpha_{jk}} + i\omega_j\delta_{jk})z_k - (W_{jk}e^{i\alpha_{jk}} - i\omega_j\delta_{jk})\bar{z}_k\,z_j^2\right)\partial_j\psi(\boldsymbol{z}, A) \\
&= \frac{i}{2}W_{pq}\left(e^{-i\alpha_{pq}}z_q + e^{i\alpha_{pq}}\,\bar{z}_q\,z_p^2\right)\partial_p\psi(\boldsymbol{z}, A)
\end{aligned}$$

and

$$\sum_{p,q=1}^{N}(\alpha_p - \alpha_q)\,[\mathcal{K}, \partial_{\alpha_{pq}}] = \frac{i}{2}\sum_{\substack{p,q=1\\ p\neq q}}^{N}(\alpha_p - \alpha_q)W_{pq}\left(e^{-i\alpha_{pq}}z_q + e^{i\alpha_{pq}}\,\bar{z}_q\,z_p^2\right)\partial_p\,.$$

Altogether, one gets $[\mathcal{K}, \mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}] = 0$ which means that, by Lemma 6.42, $\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}$ generates a Lie symmetry. Let $\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}} = iL_0^{\boldsymbol{\alpha}} + T^{\boldsymbol{\alpha}}$ such that

$$L_0^{\boldsymbol{\alpha}} := \sum_{j=1}^{N}\alpha_j z_j\partial_j, \qquad T^{\boldsymbol{\alpha}} := -\sum_{p,q=1}^{N}(\alpha_p - \alpha_q)\,\partial_{\alpha_{pq}}\,.$$

The flow generated by the operators $iL_0^{\boldsymbol{\alpha}}$ and $T^{\boldsymbol{\alpha}}$ is respectively determined by the differential equations

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{z}_j(\varepsilon)}{\mathrm{d}\varepsilon} = i\alpha_j\tilde{z}_j(\varepsilon)\,, \qquad \frac{\mathrm{d}\tilde{\alpha}_{jk}(\varepsilon)}{\mathrm{d}\varepsilon} = -(\alpha_j - \alpha_k)$$

with $\tilde{z}_j(0) = z_j$ and $\tilde{\alpha}_{jk}(0) = \alpha_{jk}$ for all $j, k \in \{1, ..., N\}$. The solutions are respectively given by

$$\tilde{z}_j(\varepsilon) = e^{i\varepsilon\alpha_j}z_j, \qquad \tilde{\alpha}_{jk}(\varepsilon) = -(\alpha_j - \alpha_k)\varepsilon + \alpha_{jk}\,.$$

The real form is straightforward from there, noting that $\theta_j + \varepsilon\alpha_j$ for all $j$ and that the transformation of the phase lags in matrix form is $\alpha + \varepsilon(\mathbf{1}\boldsymbol{\alpha}^\top - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{1}^\top)$. Moreover, one finds

$$\frac{1}{2}(W_{jk}e^{-i\tilde{\alpha}_{jk}(\varepsilon)} + i\omega_j\delta_{jk}) = \frac{1}{2}(W_{jk}e^{i\varepsilon(\alpha_j - \alpha_k)}e^{-i\alpha_{jk}} + i\omega_j\delta_{jk})\,,$$

or in matrix form, $\tilde{A}_\varepsilon = D_\varepsilon A D_{-\varepsilon}$ with $D_\varepsilon = \mathrm{diag}(e^{i\varepsilon\alpha_1}, ..., e^{i\varepsilon\alpha_N})$. Similar calculations give $\tilde{\bar{A}}_\varepsilon = D_{-\varepsilon}\bar{A}D_\varepsilon$. Since $[L_0^{\boldsymbol{\alpha}}, T^{\boldsymbol{\alpha}}] = 0$, $e^{\varepsilon\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}} = e^{i\varepsilon L_0^{\boldsymbol{\alpha}}}e^{\varepsilon T^{\boldsymbol{\alpha}}}$ and

$$e^{\varepsilon\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}f(z_1, ..., z_N, A) = f(e^{i\varepsilon\alpha_1}z_1, ..., e^{i\varepsilon\alpha_N}z_N, D_\varepsilon A D_{-\varepsilon}, D_{-\varepsilon}\bar{A}D_\varepsilon) = f(D_\varepsilon\boldsymbol{z}, D_\varepsilon A D_{-\varepsilon}, D_{-\varepsilon}\bar{A}D_\varepsilon)\,.$$

□

The last lemma implies that we can generate families of Koopman eigenfunctions $\psi$.

1. *Monomials.* If $z^{\boldsymbol{\mu}}$ is an eigenfunction of $\mathcal{K}$ (Thm 6.1), then $\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}[z^{\boldsymbol{\mu}}] = i\left(\sum_{j=1}^{N}\mu_j\alpha_j\right)z^{\boldsymbol{\mu}}$. In this case, there is no new functionally independent eigenfunction generated by the transformation.

2. *Vandermonde-ratio.* If $V_{IJ}^{\boldsymbol{\sigma\tau}}(\boldsymbol{z}) := (\prod_{p<q\in I}(\bar{z}_p-\bar{z}_q)^{\sigma_{pq}})/(\prod_{r<s\in J}(z_r-z_s)^{\tau_{rs}})$ is an eigenfunction of $\mathcal{K}$, then

$$\begin{aligned} e^{-\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}[V_{IJ}^{\boldsymbol{\sigma\tau}}(\boldsymbol{z})] &= \frac{\prod_{p<q\in I}(e^{i\alpha_p}\bar{z}_p - e^{i\alpha_q}\bar{z}_q)^{\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s\in J}(e^{-i\alpha_r}z_r - e^{-i\alpha_s}z_s)^{\tau_{rs}}} \\ &= \frac{\prod_{p<q\in I}e^{i\alpha_p\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s\in J}e^{-i\alpha_r\tau_{rs}}}\left(\frac{\prod_{p<q\in I}(\bar{z}_p - e^{-i(\alpha_p-\alpha_q)}\bar{z}_q)^{\frac{\sigma_{pq}}{\sigma_{p'q'}}}}{\prod_{r<s\in J}(z_r - e^{i(\alpha_r-\alpha_s)}z_s)^{\frac{\tau_{rs}}{\sigma_{p'q'}}}}\right)^{\sigma_{p'q'}} \end{aligned}$$

   for some $p'<q'\in I$. Let $m := \#I$ and $n := \#J$. Extracting the factor in the parenthesis and absorbing $\sigma_{p'q'}$ into $\sigma_{pq}$ and $\tau_{rs}$ yields

$$V_{IJ}^{\boldsymbol{\sigma\tau\alpha}}(\boldsymbol{z}) := \frac{\prod_{p<q\in I}(\bar{z}_p - e^{-i(\alpha_p-\alpha_q)}\bar{z}_q)^{\sigma_{pq}}}{\prod_{r<s\in J}(z_r - e^{i(\alpha_r-\alpha_s)}z_s)^{\tau_{rs}}}$$

   for all $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\tau}$, $\boldsymbol{\alpha}$, a family of Koopman eigenfunctions with $\binom{m+1}{2}+\binom{n+1}{2}-3$ parameters ($\binom{m}{2}+\binom{n}{2}-1$ for the $\sigma$'s and $\tau$'s and $m+n-2$ for the $\alpha$'s) for the Kuramoto model satisfying the same first, second and fourth conditions of Thm. 6.19, but the third condition becomes

$$A_{pr} = e^{i\alpha_p}\mathcal{A}\,T_r e^{-i\alpha_r}\,, \qquad A_{rp} = e^{i\alpha_r}\bar{\mathcal{A}}\,S_p e^{-i\alpha_p}$$

   for all $p\in I$, $r\in J$ and $\mathcal{A}\in\mathbb{C}$. Validations were done for $N=5$ and $N=9$ vertices in Mathematica notebooks called "example_N5_extendedform.nb" and "example_N9.nb" in the folder "symbolic/eigenfunctions/vandermonde_eigenfunction" in Ref. [582].

3. *Cross-ratios.* If $c_{abcd}(\boldsymbol{z})$ is a constant of motion (Thm 6.25), then

$$\begin{aligned} e^{-\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}[c_{abcd}(\boldsymbol{z})] &= \frac{(e^{-i\alpha_c}z_c - e^{-i\alpha_a}z_a)(e^{-i\alpha_d}z_d - e^{-i\alpha_b}z_b)}{(e^{-i\alpha_c}z_c - e^{-i\alpha_b}z_b)(e^{-i\alpha_d}z_d - e^{-i\alpha_a}z_a)} = \frac{(e^{i\gamma}z_c - z_a)(e^{i\delta}z_d - e^{i\beta}z_b)}{(e^{i\gamma}z_c - e^{i\beta}z_b)(e^{i\delta}z_d - z_a)} \\ &=: c_{abcd}^{\beta\gamma\delta}(\boldsymbol{z})\,, \end{aligned}$$

   for all $\beta=\alpha_a-\alpha_b, \gamma=\alpha_a-\alpha_c, \delta=\alpha_a-\alpha_d$ form a three-parameter family of constants of motion for the Kuramoto model satisfying

   a)

$$\begin{aligned} e^{i\beta}A_{ba} = e^{i\gamma}A_{ca} = e^{i\delta}A_{da} =: \mathcal{A}_a\,, \qquad A_{ac} = e^{i\beta}A_{bc} = e^{i\delta}A_{dc} =: \mathcal{A}_c\,, \\ A_{ab} = e^{i\gamma}A_{cb} = e^{i\delta}A_{db} =: \mathcal{A}_b\,, \qquad A_{ad} = e^{i\beta}A_{bd} = e^{i\gamma}A_{cd} =: \mathcal{A}_d\,; \end{aligned} \tag{6.149}$$

   b)

$$A_{ak} = e^{i\beta}A_{bk} = e^{i\gamma}A_{ck} = e^{i\delta}A_{dk}, \quad \forall\, k\in\{1,...,N\}\setminus\{a,b,c,d\}\,; \tag{6.150}$$

c)

$$\omega_a - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_a) = \omega_b - 2\,\mathrm{Im}(e^{-i\beta}\mathcal{A}_b) = \omega_c - 2\,\mathrm{Im}(e^{-i\gamma}\mathcal{A}_c) = \omega_d - 2\,\mathrm{Im}(e^{-i\delta}\mathcal{A}_d)\,. \tag{6.151}$$

These conditions were verified for $N = 5$ vertices in a Mathematica notebook called "symbolic/eigenfunctions/cross_ratio_cte_motion/example_N5_extended_crossratio.nb" in Ref. [582].

The extension for the cross-ratios can be generalized for the complex dynamics

$$\dot{Z}_j = f(t, \boldsymbol{Z})e^{-i\alpha_j} + g(t, \boldsymbol{Z})Z_j + h(t, \boldsymbol{Z})e^{i\alpha_j}Z_j^2 \tag{6.152}$$

where $Z_j(t) \in \mathbb{C}$, $\alpha_j \in \mathbb{R}$ for all $j \in \{1, ..., N\}$, and $f, g, h$ are some complex-valued functions. This is a phase-shifted version of the dynamics considered recently by Cestnik and Martens [105]. Its Koopman generator is

$$\mathcal{K}_{fgh} = f(t, \boldsymbol{Z})\mathcal{L}^{\boldsymbol{\alpha}}_{-1} + g(t, \boldsymbol{Z})\mathcal{L}_0 + h(t, \boldsymbol{Z})\mathcal{L}^{\boldsymbol{\alpha}}_1$$

where $\mathcal{L}^{\boldsymbol{\alpha}}_{-1} = \sum_{j=1}^N e^{-i\alpha_j}\partial_j$, $\mathcal{L}_0 = \sum_{j=1}^N Z_j\partial_j$, and $\mathcal{L}^{\boldsymbol{\alpha}}_1 = \sum_{j=1}^N e^{i\alpha_j}Z_j^2\partial_j$ with $\partial_j = \partial/\partial Z_j$. Making the change of variables $x_j = e^{i\alpha_j}Z_j$ implies that $\mathcal{L}^{\boldsymbol{\alpha}}_{-1} = \sum_{j=1}^N \partial/\partial x_j$, $\mathcal{L}_0 = \sum_{j=1}^N x_j\partial/\partial x_j$, $\mathcal{L}^{\boldsymbol{\alpha}}_1 = \sum_{j=1}^N x_j^2\partial/\partial x_j$, and it is clear that the complex-valued cross-ratios $(x_c - x_a)(x_d - x_b)/((x_c - x_b)(x_d - x_a))$ are the joint invariants for these operators [recall Sec. 6.13.2], and thus, conserved quantities of Eq. (6.152). In the original variables, one gets

$$C_{abcd}(\boldsymbol{Z}) = \frac{(e^{i\beta_c}Z_c - Z_a)(e^{i\beta_d}Z_d - e^{i\beta_b}Z_b)}{(e^{i\beta_c}Z_c - e^{i\beta_b}Z_b)(e^{i\beta_d}Z_d - Z_a)} \in \mathbb{C}\,.$$

4. *WS integrals.* Consider the WS integral $C^{\mathrm{ws}}_{p_1\dots p_\ell}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{u=1}^\ell \sin\left(\frac{\theta_{p_u} - \theta_{p_{u+1}}}{2}\right)$ with $p_0 = p_\ell$ and $p_{\ell+1} = p_1$. In complex form, this integral is $I(\boldsymbol{z}) = \prod_{u=1}^\ell (1 - z_{p_u}\bar{z}_{p_{u+1}})$. Therefore,

$$I_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{z}) = e^{-\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}[I(\boldsymbol{z})] = \prod_{u=1}^\ell (1 - e^{i(\alpha_{p_{u+1}} - \alpha_{p_u})}z_{p_u}\bar{z}_{p_{u+1}})$$

for all $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^\ell$ form a family of constants of motion with $\ell - 1$ degrees of freedom (all the differences between $\alpha$'s). Sufficient conditions to conserve the quantities of this family are stated in Lemma 6.53 for the sake of completeness.

5. *Peripheral constants of motion.* Consider the symmetry generator $\mathcal{S}_\eta = \mathcal{K}_\eta - i\omega_s L_0^\eta$. The commutator $[\mathcal{K}_\eta, \mathcal{S}_\alpha]$ is zero since $\mathcal{K}_\eta$ for all $\eta$ are independent Koopman generators. It is also easily shown that $[L_0^\eta, \mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}] = 0$. Hence, $[\mathcal{S}_\eta, \mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}] = 0$,

$$\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}[\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]] = \mathcal{S}_\eta[\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}[c_{abcd}]] = \mathcal{S}_\eta[c^{\beta\gamma\delta}_{abcd}]\,,$$

and the symmetry generator $\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}$ also extends $\mathcal{S}_\eta[c_{abcd}]$ to a family of constants of motion. Let us consider one concrete example.

**Example 6.52.** Recall Example 6.48 where a star of 5 vertices admitting conserved cross-ratios and peripheral constants of motion is considered. The system admitting these conserved quantities is extended to

$$A = \begin{pmatrix} i\omega_1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}_1 & i\omega/2 & 0 & 0 & 0 \\ e^{-i\beta}\mathcal{A}_1 & 0 & i\omega/2 & 0 & 0 \\ e^{-i\gamma}\mathcal{A}_1 & 0 & 0 & i\omega/2 & 0 \\ e^{-i\delta}\mathcal{A}_1 & 0 & 0 & 0 & i\omega/2 \end{pmatrix},$$

where $\beta = \alpha_2 - \alpha_3$, $\gamma = \alpha_2 - \alpha_4$, $\delta = \alpha_2 - \alpha_5$. Then, the extended conserved cross-ratio is

$$e^{-\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}} c_{2345}(\boldsymbol{z}) = \frac{(e^{i\gamma}z_4 - z_2)(e^{i\delta}z_5 - e^{i\beta}z_3)}{(e^{i\gamma}z_4 - e^{i\beta}z_3)(e^{i\delta}z_5 - z_2)},$$

and an example of extended peripheral constants of motion is

$$e^{-\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}}\mathcal{S}_2[c_{2345}(\boldsymbol{z})] = [i(\omega-\omega_1)z_2 + \mathcal{A}_1 z_1 - \bar{\mathcal{A}}_1 \bar{z}_1 z_2^2]\frac{(e^{i\delta}z_5 - e^{i\beta}z_3)(e^{i\gamma}z_4 - e^{i\delta}z_5)}{(e^{i\gamma}z_4 - e^{i\beta}z_3)(e^{i\delta}z_5 - z_2)^2}.$$

A symbolic verification is provided in Ref. [582] (*example_N5_star_extended.nb* in the folder symbolic/eigenfunctions/peripheral). ∎

The following lemma states sufficient conditions to conserve a WS integral in the family generated by the symmetry $\mathcal{S}_{\boldsymbol{\alpha}}$. We present it for the sake of completeness : it only corresponds to a slight adaptation of the conditions provided in Ref. [620].

**Lemma 6.53.** *Let $\mathcal{W} \subset \mathcal{V}$ be a subset of vertices $\{p_1, \dots, p_\ell\}$ with $2 \leq \ell \leq N$ and $p_0 := p_\ell$, $p_{\ell+1} := p_1$. If the Kuramoto model (6.1) satisfies*

1. *$\omega_{p_u} = \omega \in \mathbb{R}$ for all $u \in \{1, \dots, \ell\}$;*
2. *$W_{p_u k} = 0$ for all $u \in \{1, \dots, \ell\}$ and $k \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{W}$;*
3. *$W_{p_u p_v} = w \in \mathbb{R}$ for all $u, v \in \{1, \dots, \ell\}$;*
4. *$\alpha_{p_u p_v} = \phi_{p_v} - \phi_{p_u} - \frac{\pi}{2}$ with $\phi_{p_u} \in \mathbb{R}$ for all $u, v \in \{1, \dots, \ell\}$,*

*then*

$$I = \prod_{u=1}^{\ell} \sin\left(\frac{\vartheta_{p_u} - \vartheta_{p_{u+1}}}{2}\right) \quad \text{with} \quad \vartheta_{p_u} = \theta_{p_u} - \phi_{p_u}$$

*is a constant of motion.*

*Proof.* The equations are arbitrary for $j \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{W}$ in Eq. (6.1). For $j \in \mathcal{W}$, applying the conditions to Eq. (6.1) yields

$$\dot{\theta}_{p_u} = \dot{\vartheta}_{p_u} = \omega + w \sum_{v=1}^{\ell} C_{p_v p_u}, \qquad \forall\, u \in \{1, ..., \ell\},$$

where $C_{jk} = \cos(\vartheta_j - \vartheta_k)$, that is, the dynamics considered in Ref. [620]. The Koopman generator is $\mathcal{K} = \sum_{u=1}^{\ell} \dot{\theta}_{p_u} \partial_{p_u} + \mathcal{K}'$, where $\mathcal{K}'$ is the part acting on the oscillators labelled by indices in $\mathcal{V} \setminus \mathcal{W}$. Thus, $\mathcal{K}'[I] = 0$ and $\mathcal{K}[I] = \sum_{u=1}^{\ell} \dot{\theta}_{p_u} \partial_{p_u} I$. From there, the argument of Watanabe and Strogatz [620, Appendix B.2] applies directly and yields $\mathcal{K}[I] = 0$. □

**Remark 6.54.** Following the subsection 6.13.7, the dynamics and the first condition of the last lemma is directly generalized by replacing $\omega$ by an arbitrary function $\beta$ of time and $\boldsymbol{z}$. This is because the WS function is an invariant of $L_0$. Note also that the diagonal elements of $W$ in the third condition could be chosen to be zero without loss of generality. ■

**Remark 6.55.** In complex form the constant of motion takes the form

$$\psi = \prod_{r=1}^{\ell} (1 - x_r \bar{x}_{r+1}) = (-2i)^{\ell} I,$$

where $x_r = e^{-i\phi_{p_r}} z_{p_r} = e^{i(\theta_{p_r} - \phi_{p_r})} =: e^{i\vartheta_{p_r}}$. Indeed, the latter relation is obtained by noting that

$$\psi = \prod_{r=1}^{\ell} \left(1 - e^{i(\vartheta_{p_r} - \vartheta_{p_{r+1}})}\right) = (-1)^{\ell} \prod_{s=1}^{\ell} e^{i(\vartheta_{p_s} - \vartheta_{p_{s+1}})/2} \prod_{r=1}^{\ell} \left(e^{i(\vartheta_{p_r} - \vartheta_{p_{r+1}})/2} - e^{-i(\vartheta_{p_r} - \vartheta_{p_{r+1}})/2}\right),$$

where $\prod_{s=1}^{\ell} e^{i(\vartheta_{p_s} - \vartheta_{p_{s+1}})/2} = 1$ because of the periodic condition. ■

# Chapitre 7

# Intégration partielle du modèle de Kuramoto

### Operator-theoretic approach to the partial integration of randomly coupled phase oscillators

Vincent Thibeault[1,2], Benjamin Claveau[1,2], Antoine Allard,[1,2] et Patrick Desrosiers[1,2,3]

[1] Département de physique, de génie physique et d'optique,
Université Laval, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

[2] Centre interdisciplinaire en modélisation mathématique,
Université Laval, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

[3] Centre de recherche CERVO, Québec (Québec), Canada G1J 2G3

Article invité et soumis pour le « Focus on the Kuramoto Model » dans J. Phys. Complex.

Référence arXiv : 2607.02617

## 7.1 Avant-propos

Les résultats de ce chapitre ont été obtenus durant la même période que ceux du chapitre 6. Ils ont néanmoins été séparés, puisque le temps a montré que l'obtention des constantes du mouvement et l'intégration partielle sont deux sujets qui méritaient d'être approfondis dans des articles distincts. Le chapitre 7 demeure la suite naturelle du chapitre 6 et apporte des réponses à certaines questions laissées ouvertes dans ce dernier. Par exemple, en présence de groupes d'oscillateurs admettant des monômes conservés, comment procéder à leur intégration partielle et à quoi ressemblent les équations résultantes ? De plus, comment intégrer partiellement la dynamique lorsque celle-ci admet à la fois des monômes conservés et des birapports conservés ?

L'une des motivations principales d'examiner l'intégrabilité partielle a été de clarifier l'origine de la transformation de Watanabe-Strogatz. Cette transformation est bien connue pour l'intégration partielle des groupes d'oscillateurs admettant des birapports conservés, mais l'origine du succès de cette transformation est moins étudiée mathématiquement. Pendant longtemps, nous avons pensé que la transformation, voire la possibilité même d'intégrer partiellement, provenait de la présence de symétries dans le modèle de Kuramoto. Plus précisément, nous soupçonnions que des générateurs de symétries nous permettraient d'effectuer un changement de variables astucieux pour l'intégration, comme à la section D.4. C'est d'ailleurs ce qui a initialement motivé l'excursion dans les symétries de Lie au chapitre 5 de même que les groupes d'automorphismes à l'annexe C. Cependant, l'analyse des symétries, bien qu'elle fût fructueuse au chapitre 6, n'a pas donné les résultats attendus : la présence de constantes de mouvement n'implique pas nécessairement la présence de symétries associées en général [section 6.6]. Elle a toutefois révélé une manière de déduire la transformation de Watanabe-Strogatz à l'aide d'outils provenant de la théorie des opérateurs et donc, d'effectuer l'intégration partielle systématiquement, sans avoir recourt à la transformation comme un Ansatz.

## 7.2 Résumé

Dans le chapitre précédent, la théorie de Koopman a été utilisée afin d'établir un lien entre l'existence de différentes constantes du mouvement et la présence de motifs spécifiques dans des réseaux d'oscillateurs de Kuramoto. Dans le présent chapitre, il reste toutefois à montrer comment réaliser cette intégration partielle à l'aide du générateur de Koopman et de ses fonctions propres. Dans le présent chapitre, nous construisons un graphe aléatoire à partir de motifs de réseau admettant des fonctions propres de Koopman et des quantités conservées, puis l'utilisons pour définir un modèle de Kuramoto partiellement intégrable. Nous effectuons ensuite l'intégration partielle du modèle dans les cas où il admet des fonctions propres monomiales et des birapports conservés, tout en fournissant une construction systématique, fondée sur la théorie des opérateurs, de la transformation de Watanabe-Strogatz à partir d'un développement de Magnus et d'un résultat récent sur les formes fermées de la formule BCH [392].

## 7.3 Abstract

In the previous chapter, we adopted Koopman theory to link the existence of different constants of motion to the presence of specific network motifs of Kuramoto oscillators. Yet, it remains to be shown how the partial integration can be carried out using the Koopman generator and its eigenfunctions. In this paper, we construct a random graph from network motifs that admit Koopman eigenfunctions and conserved quantities, and use it to define a partially integrable Kuramoto model. We perform the partial integration of the introduced model when there are monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios, while providing an operator-theoretic derivation of the Watanabe-Strogatz transformation based on Magnus expansion and a recent result on closed forms of the Baker-Campbell-Hausdorff formula [392].

## 7.4 Introduction

From pacemaker cells and neurons to fireflies and orchestras, nature's constituents often tend to synchronize over some period of time [69,286,479,566,639]. The construction of mathematical models has been an important step in finding rigorous insights on synchronization over the years, notably with the work of Winfree [638], Kuramoto [332], Ermentrout and Kopell [170]. These models are nonlinear, and synchronization emerges as one of the most remarkable collective phenomena they can describe. They exhibit a great richness of oscillatory behaviors and attempts to find analytical solutions for the differential equations describing the models are generally in vain. But there are exceptions.

In 1993 and 1994, Watanabe and Strogatz made pioneering developments in the (partial) integrability of identical phase oscillators with the form $\dot{\theta}_j = f(\boldsymbol{\theta}) + g(\boldsymbol{\theta})\cos\theta_j + h(\boldsymbol{\theta})\sin\theta_j$, where $j \in \{1,...,N\}$, $\theta_j(t)$ is the $j$-th oscillator phase at time $t$, $\dot{\theta}_j$ is its derivative with respect to the time $t$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1,...,\theta_N)$, and $f, g, h$ are $2\pi$-periodic functions in each of their argument [619, 620]. They found an astute transformation—generally called the Watanabe-Strogatz (WS) transformation—that allows reducing the number of equations to 3 with $N-3$ constants of motion, along with conditions leading to complete integrability. The transformation is defined as

$$\tan[\tfrac{1}{2}(\theta_j - \Theta)] = \sqrt{\frac{1+\gamma}{1-\gamma}}\,\tan[\tfrac{1}{2}(\psi_j - \Psi)]\,, \tag{7.1}$$

where $\psi_1,...,\psi_N$ are constants and the functions of time $\gamma, \Theta, \Psi$ are determined by solving their differential equations, obtained by applying the coordinate change (7.1) to the phase dynamics.

In response to these findings, Goebel observed that the introduced class of identical oscillators is in fact linked to a particular kind of coupled "Riccati equations" and that the WS transformation is ultimately related to a Möbius transformation [227]. It was then clarified that the constants of motion are cross-ratios and that the WS transformation is equivalent to a

disk automorphism [388]. This inspired researchers to use projective geometry to perform the partial integration [561], to make connections with hyperbolic geometry [111, 112, 356], and to broaden the applicability of WS theory (e.g., the work of Pikovsky & colleagues [477, 478, 606] and Lohe [363–368]). However, open questions remain regarding the partial integrability of phase oscillator dynamics, which is still an active research area [105, 111, 356, 584].

For phase dynamics with non-identical frequencies, noise, and on heterogeneous graphs, exact partial integration is generally not possible. This has motivated the development of a wide range of approximate dimension-reduction methods. In the infinite-size limit, the dominant approach is to use the Ott-Antonsen Ansatz or its variants [3, 63, 106, 107, 113, 167, 453]. For noisy oscillators, methods include the use of cumulants [106, 228–231, 592] and the recent mesoscopic theory of Buendía [92]. Collective coordinates [244, 245] and different spectral methods [219, 220, 298, 583, 586] have also been developed in the finite-size limit.

Less attention has been devoted to the partial integrability of phase oscillators with heterogeneous connections. It is known that WS transformations can be applied to all-to-all coupled communities [275, 477] and to peripheries of star graphs [114, 604, 605, 607, 645, 646], but other connectivity patterns can also enable partial integrability.

As we showed in Chapter 6 through Koopman theory [88, 91, 102, 294, 317, 318, 394, 395, 406–408, 612], various motifs allow constants of motion to exist for the Kuramoto model and these motifs occur in different empirical complex networks. From this perspective, different network motifs can not only exhibit distinct stability and synchronizability properties, as extensively shown in the literature [7, 22, 34, 145, 235–238, 359, 382, 409, 417, 419, 420, 526], but can also possess distinct "integrability properties".

Yet, we did not show how to partially integrate the Kuramoto model within this Koopman framework. In this paper, we introduce a random graph based on motifs admitting different constants of motion, thereby obtaining a partially integrable Kuramoto model. We then show how to deduce the transformations (including WS transformations (7.1)) to perform the partial integration of the introduced model. To this end, we use operator-theoretic tools, from monomial (Koopman) eigenfunctions to Magnus expansion and a closed-form Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) formula recently introduced by Matone [392].

In Sec. 7.5, we present different descriptions of the Kuramoto model, especially to introduce its operator-theoretic description with the Koopman generator. Then, we construct the partially integrable model, as summarized in Table 7.1, by imposing the constraints that guarantee the presence of monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios. Finally, we partially integrate the model by first treating the parts that admit monomial eigenfunctions [Sec. 7.7] and then those that support conserved cross-ratios [Sec. 7.7]. The reduced model is finally presented in Table 7.2.

## 7.5 Operator-theoretic description of the Kuramoto model

The typical description of the (generalized) Kuramoto model is

$$\dot{\theta}_j = \omega_j + \sum_{k\in\mathcal{V}} W_{jk}\sin(\theta_k - \theta_j - \alpha_{jk})\,, \quad j \in \mathcal{V}\,, \tag{7.2}$$

where $\mathcal{V} = \{1, ..., N\}$, $\omega_j \in \mathbb{R}$ is the $j$-th natural frequency, $W$ is a weight matrix where $W_{jk} \in \mathbb{R}$ is the weight of the connection from $k$ to $j$, and $-\pi/2 < \alpha_{jk} \leq \pi/2$ is the $(j,k)$-th element of the phase-lag matrix $\alpha$ [332, 502, 515]. Without loss of generality, we set $W_{jj} = 0$ and $\alpha_{jj} = 0$ for all $j \in \{1, ..., N\}$.

Setting $z_j = e^{i\theta_j}$ for all $j$ yields a more compact description of the above Kuramoto model, that is,

$$\dot{z}_j = p_j(\boldsymbol{z}) - \overline{p_j(\boldsymbol{z})}z_j^2\,, \quad p_j(\boldsymbol{z}) = \sum_{k\in\mathcal{V}} A_{jk}z_k\,, \tag{7.3}$$

where, given $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, ..., \omega_N)$ and $e^{-i\alpha} = (e^{-i\alpha_{jk}})_{j,k\in\mathcal{V}}$,

$$A = \frac{1}{2}\left(W \circ e^{-i\alpha} + i\,\mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega})\right) \tag{7.4}$$

describes the interactions of a complex-weighted graph [76].

The level of synchrony between oscillators is measured through functions of the state variables, i.e., order parameters or observables (e.g., Kuramoto order parameter). For this reason, the time evolution of these observables is central to describing such collective phenomenon rather than the individual state of each oscillator. This approach is naturally aligned with Koopman theory, developed in the 1930s to formulate classical dynamics using linear operators on spaces of observables—mirroring the structure of quantum mechanics [88, 91, 102, 294, 317, 318, 612]. Under this perspective, a linear operator of interest is the Koopman generator

$$\mathcal{K} = \boldsymbol{p}(\boldsymbol{z})^\top \boldsymbol{L}_{-1} - \overline{\boldsymbol{p}(\boldsymbol{z})}^\top \boldsymbol{L}_1\,, \tag{7.5}$$

where $\boldsymbol{p} = (p_1 \ \cdots \ p_N)$ with $p_j$ as in Eq. (7.3) and

$$\boldsymbol{L}_n = (z_1^{n-1}\partial_1 \ \cdots \ z_N^{n-1}\partial_N)^\top\,,$$

while $\partial_j$ is the partial derivative with respect to $z_j$. The Koopman generator is a total time derivative and generates the time-evolution operator, that is, the Koopman operator [88, 91, 294].

The linearity of such generator allows us to leverage spectral theory, i.e., find Koopman eigenvalues $\lambda$ and eigenfunctions $\psi$ satisfying $\mathcal{K}\psi = \lambda\psi$ [1]. In Chapter 6, we have shown how to

1. The spectral theory of such operators is a rich subject that draws on a range of tools from functional analysis. In this paper, however, we work only at a formal level : we do not address the regularity of the eigenfunctions, the convergence of the expansions, or the functional spaces on which the operator acts and in which the eigenfunctions are defined.

find network motifs admitting constants of motion, through (1) eigenfunctions of $\mathcal{K}$, (2) the Lie-algebraic structure of $\mathcal{K}$, and (3) the Lie continuous symmetries, established through a commutation relation with $\mathcal{K}$. Indeed, for (1), recall that an eigenfunction $C(\boldsymbol{z})$ of $\mathcal{K}$ with eigenvalue zero is a constant of motion of the dynamics.

Moreover, if one finds two eigenfunctions $\psi_1, \psi_2$ of $\mathcal{K}$ with respective eigenvalues $\lambda_1, \lambda_2$, then $\psi_1^a \psi_2^b$ with $a, b \in \mathbb{C}$ is also an eigenfunction with eigenvalue $a\lambda_1 + b\lambda_2$. Thus, one can choose the vector $(a\ b)$ to be orthogonal to $(\lambda_1\ \lambda_2)$ to make $\psi_1^a \psi_2^b$ a constant of motion. We will use this classical approach [137,243,655] in Sec. 7.7 to get monomial conserved quantities. Before that, we construct the partially integrable Kuramoto model admitting monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios

## 7.6 Construction of the partially integrable model

In Chapter 6, we have obtained the necessary and sufficient conditions to have monomial eigenfunctions of $\mathcal{K}$

$$\psi(\boldsymbol{z}) = z_1^{\mu_1} ... z_N^{\mu_N} =: z^{\boldsymbol{\mu}}, \quad \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^N, \tag{7.6}$$

with eigenvalue $i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\omega}$ and conserved cross-ratios

$$c_{abcd}(\boldsymbol{z}) = \frac{(z_c - z_a)(z_d - z_b)}{(z_c - z_b)(z_d - z_a)} \tag{7.7}$$

for non-identical indices $a, b, c, d \in \mathcal{V}$ (an eigenfunction of $\mathcal{K}$ with null eigenvalue) for the Kuramoto model described in Sec. 7.5.

Using these conditions, which we will recall and adapt in the following subsections, we aim to construct a modular random graph of Kuramoto oscillators where each instance admits a fixed number of monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios.

More explicitly, we introduce the partition $P = \{\mathcal{M}_1, ..., \mathcal{M}_m, \mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c, \mathcal{P}\}$ of the vertex set $\mathcal{V}$ related to the graph with complex weight matrix $A$ [Eq. (7.4)]. In the partition, a subset $\mathcal{M}_\tau$ of size $d_\tau$ admits one monomial eigenfunction, a subset $\mathcal{C}_\gamma$ of size $n_\gamma \geq 4$ admits $n_\gamma - 3$ conserved cross-ratios and the subset $\mathcal{P}$ of size $p$ does not admit any considered conserved quantities or eigenfunctions. The dimensions associated to the partition are summarized in Table 7.1.

The parts $\mathcal{M}_1, ..., \mathcal{M}_m$ satisfy the conditions from the first theorem of Chapter 6 while the parts $\mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c$ satisfy the third theorem of Chapter 6. For the sake of completeness, let us recall the conditions and apply them to the respective parts.

### Monomial eigenfunctions

A monomial eigenfunction $\psi(\boldsymbol{z}) = z^{\boldsymbol{\mu}}$ corresponds to an observable that evolves according to the linear equation $\dot{\psi} = i\tilde{\omega}\,\psi$, where $\tilde{\omega} = \boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\omega}$ defines a new frequency. Thus, the time evolution of the monomial eigenfunction is $\psi(\boldsymbol{z}(t)) = \exp(i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\theta}(0)) \exp(i\tilde{\omega}\, t)$. Intuitively, this means that the observable just rotates independently at a frequency $\tilde{\omega}$ on the unit circle starting from $\exp(i\boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\theta}(0))$. The real form of this observable also gives another concrete perspective. Indeed, $\phi(t) := \mathrm{Arg}(\psi(\boldsymbol{z}(t))) = \boldsymbol{\mu}^\top \tilde{\boldsymbol{\theta}}(t)$, where $\tilde{\boldsymbol{\theta}}(t) = \boldsymbol{\omega} t + \boldsymbol{\theta}(0)$ is the solution of the non-interacting system (Eq. (7.2) with $W = 0$). Therefore, when there is a monomial eigenfunction, there is a reference frame rotating at frequency $\tilde{\omega}$ that freezes $\phi(t)$ in time.

In fact, having a monomial eigenfunction for each part implies the existence of constants of motion. We do not need to dive into this subject for the construction of the partially integrable model, so we provide the details later in Sec. 7.7. Let us focus on the conditions to have such monomial eigenfunctions.

Let the part $\mathcal{M}_\tau \subset \mathcal{V}$ be such that $|\alpha_{jk}| < \pi/2$ for all $j, k \in \mathcal{M}_\tau$ and for all $\tau \in \{1, ..., m\}$. Let $\boldsymbol{\mu}_\tau = (\mu_{\tau 1} \ \cdots \ \mu_{\tau N})^\top \in \mathbb{R}^N$ satisfy $\mu_{\tau j} \neq 0$ if and only if $j \in \mathcal{M}_\tau$. The first theorem, reformulated from Chapter 6, states that there exists a $\boldsymbol{\mu}_\tau$ such that $z^{\boldsymbol{\mu}_\tau}$ is an eigenfunction of $\mathcal{K}$ in Eq. (7.5) if and only if :

1.1. $W_{jk} = 0$ for all $j \in \mathcal{M}_\tau$ and $k \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{M}_\tau$ ;

1.2. $W_{jk} \neq 0$ whenever $W_{kj} \neq 0$ for all $j, k \in \mathcal{M}_\tau$ ;

1.3. $W_{i_1 i_2} ... W_{i_{\eta-1} i_\eta} W_{i_\eta i_1} = W_{i_1 i_\eta} W_{i_\eta i_{\eta-1}} ... W_{i_2 i_1}$
for all sequences $i_1, i_2, ..., i_\eta$ of elements of $\mathcal{M}_\tau$ ;

1.4. $\alpha_{jk} = -\alpha_{kj}$ whenever $j, k \in \mathcal{M}_\tau$, $j \neq k$, $W_{jk} \neq 0$.

If $z^{\boldsymbol{\mu}_\tau}$ is an eigenfunction, then its eigenvalue is $i\boldsymbol{\mu}_\tau^\top \boldsymbol{\omega}$.

The first condition implies that the subgraph with vertex set $\mathcal{M}_\tau$ is a source within the whole graph. In matrix terms, the second and third conditions are equivalent to the condition that the submatrix related to $\mathcal{M}_\tau$ is symmetrizable, i.e., the submatrix can be made symmetric by multiplying each of its rows by a respective constant. The fourth condition ensures that the phase-lag submatrix related to $\mathcal{M}_\tau$ is skew-symmetric.

When a weight matrix $W$ of a connected graph is given, the exponents of the monomials are easily constructed. By starting from some $\ell \in \mathcal{M}_\tau$, choose an initial nonzero $\mu_{\tau\ell}$ and walk through the subgraph induced by $\mathcal{M}_\tau$, setting iteratively $\mu_j = (W_{kj}/W_{jk})\mu_k$. Yet, in this paper, we shall rather construct $W$ given the exponents and a symmetric matrix, thus making symmetrizable blocks in $W$ (Table 7.1 and Fig. 7.1(b)).

### Conserved cross-ratios

A cross-ratio $c_{abcd}$ with $a, b, c, d \in \mathcal{C}_\gamma$ is conserved if and only if the vertices $a$, $b$, $c$, $d$ of the graph described by the complex matrix in Eq. (7.4) have the same :

2.1. outgoing interactions within $\{a, b, c, d\}$, i.e.,

$$A_{ba} = A_{ca} = A_{da} =: \mathcal{A}_{\gamma a}\,, \qquad A_{ac} = A_{bc} = A_{dc} =: \mathcal{A}_{\gamma c}\,,$$
$$A_{ab} = A_{cb} = A_{db} =: \mathcal{A}_{\gamma b}\,, \qquad A_{ad} = A_{bd} = A_{cd} =: \mathcal{A}_{\gamma d}\,,$$

2.2. incoming interactions from $\mathcal{V} \setminus \{a, b, c, d\}$, i.e.,

$$A_{ak} = A_{bk} = A_{ck} = A_{dk}\,, \quad \forall k \in \mathcal{V} \setminus \{a, b, c, d\}\,,$$

2.3. shifted natural frequencies

$$\omega_j - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma j}) = \omega_k - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma k}), \quad \forall j, k \in \{a, b, c, d\}\,.$$

These three conditions are satisfied for $\mathcal{C}_\gamma$, for all $\gamma \in \{1, ..., c\}$, leading to $n_\gamma - 3$ conserved cross-ratios for each part.

Considering the partition $P$ along with the conditions 1.1-1.4 and the conditions 2.1-2.3 leads to the random matrix model described in Table 7.1. The probability density functions for the random variables are arbitrary. For the matrix $C$, we have only added a Bernoulli matrix $Q$ to have the freedom to tune the graph density.

Numerically, we choose to make the model a specific type of weighted stochastic block model, such that we can define the probabilities of connections between the parts $\mathcal{M}_1, ..., \mathcal{M}_m$, $\mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c, \mathcal{P}$ [582].

### Partially integrable model

The partition and the random model for $A$ of Table 7.1 imply a separation of the dynamics such that the equations for the oscillators in the non-integrable part $\mathcal{P}$ remain unchanged, the equations admitting monomial eigenfunctions are

$$\dot{z}_j = i\omega_j z_j + \frac{1}{2\mu_{\tau j}} \sum_{k \in \mathcal{M}_\tau} S_{jk}(z_k e^{-i\kappa_{jk}} - \bar{z}_k z_j^2 e^{i\kappa_{jk}})\,, \tag{7.8}$$

for all $j \in \mathcal{M}_\tau$ and $\tau \in \{1, ..., m\}$, and the equations admitting conserved cross-ratios are

$$\dot{z}_j = i\Omega_\gamma z_j + \sum_{k=1}^{N} (\mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k} \bar{z}_k z_j^2)\,, \tag{7.9}$$

for all $j \in \mathcal{C}_\gamma$ and $\gamma \in \{1, ..., c\}$, where condition 2.3 has induced a new frequency $\Omega_\gamma = \omega_{\ell_\gamma} - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma \ell_\gamma})$. The role of the natural frequency shifts in condition 2.3 is now evident : they

ensure that the oscillators in $\mathcal{C}_\gamma$ share a common effective natural frequency $\Omega_\gamma$ that depends on the original natural frequencies, the phase lags, and the weight matrix. This comes as no surprise : conditions 2.1-2.3 imply that the dynamical equations in $\mathcal{C}_\gamma$ are identical, although the contribution of each oscillator $\mathcal{C}_\gamma$ can vary through the heterogeneity of their out degrees and their initial conditions [Chapter 6].

TABLE 7.1 – Random matrix admitting $m$ monomial eigenfunctions and $\sum_{\gamma=1}^{c}(n_\gamma - 3)$ conserved cross-ratios in the Kuramoto model (7.2). An illustration of the matrix $W$ is given in Fig. 7.1 and the code to generate instances of the random matrix is available in Ref. [582].

**Model**

$$A = \frac{1}{2}\left(W \circ e^{-i\alpha} + i\ \mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega})\right), \quad W = \begin{pmatrix} D^{-1}S \\ MC^\top \\ * \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \kappa \\ M\chi^\top \\ * \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega} = (\omega_j)_{j\in\mathcal{V}}.$$

**Dimension**

| | |
|---|---|
| $m$ | Number of motifs admitting a monomial eigenfunction. |
| $c$ | Number of motifs admitting conserved cross-ratios. |
| $p$ | Number of vertices in the non-integrable part $\mathcal{P}$. |
| $d_\tau$ | Number of vertices in the $\tau$-th motif $\mathcal{M}_\tau$ admitting a monomial eigenfunction, $\tau \in \{1,\dots,m\}$. |
| $n_\gamma \geq 4$ | Number of vertices in the $\gamma$-th motif $\mathcal{C}_\gamma$ admitting conserved cross-ratios, $\gamma \in \{1,\dots,c\}$. |
| $N$ | Total number of vertices in $\mathcal{V} = \bigcup_\tau \mathcal{M}_\tau \cup \bigcup_\gamma \mathcal{C}_\gamma \cup \mathcal{P}$, equal to $\sum_\tau d_\tau + \sum_\gamma n_\gamma + p$. |

**Matrix**

| | |
|---|---|
| $D$ | $\sum_\tau d_\tau \times \sum_\tau d_\tau$ invertible diagonal random matrix $\mathrm{diag}(\mu_{1,1},\dots,\mu_{m,\sum_\tau d_\tau})$. |
| $S$ | $\sum_\tau d_\tau \times N$ matrix $(B + B^\top \ \ 0)$ formed by concatenation of (1) a $\sum_\tau d_\tau \times \sum_\tau d_\tau$ block diagonal symmetric matrix $B + B^\top$ (with blocks of sizes $d_1,\dots,d_m$), and (2) a $\sum_\tau d_\tau \times (\sum_\gamma n_\gamma + p)$ zero block. |
| $\kappa$ | $\sum_\tau d_\tau \times N$ matrix $(\beta - \beta^\top \ \ 0)$ formed by concatenation of (1) a $\sum_\tau d_\tau \times \sum_\tau d_\tau$ block diagonal skew-symmetric matrix $\beta - \beta^\top$ (blocks of sizes $d_1,\dots,d_m$) with $\lvert\beta_{jk} - \beta_{kj}\rvert < \pi/2$, and (2) a $\sum_\tau d_\tau \times (\sum_\gamma n_\gamma + p)$ zero block. |
| $M$ | $\sum_\gamma n_\gamma \times c$ membership matrix (binary, nonrandom, column-orthogonal) for groups $\mathcal{C}_1,\dots,\mathcal{C}_c$, with single-membership assignment. |
| $C$ | $N \times c$ real random matrix, e.g. $C = Q \circ R$ where $Q$ is Bernoulli and $R$ is a real random weight matrix. |
| $\chi$ | $N \times c$ real random matrix with $\lvert\chi_{j\gamma}\rvert < \pi/2$ for all $j \in \mathcal{V}$, $\gamma \in \{1,\dots,c\}$. |
| $\mathcal{A}$ | $c \times N$ complex random matrix equal to $\frac{1}{2}C^\top \circ e^{-i\chi^\top}$. |
| $*$ | Arbitrary block of size $p \times N$ related to the non-integrable part $\mathcal{P}$. |

**Frequency**

| | |
|---|---|
| $\omega_j$ | If $j \in \mathcal{M}_\tau$ ($\tau \in \{1,\dots,m\}$) or $j \in \mathcal{P}$, $\omega_j$ is chosen at random with no restriction. If $j \in \mathcal{C}_\gamma$ ($\gamma \in \{1,\dots,c\}$), $\omega_j = \omega_{\ell_\gamma} + 2\ \mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma j} - \mathcal{A}_{\gamma\ell_\gamma})$, where $\ell_\gamma$ is any index within $\mathcal{C}_\gamma$ and $\omega_{\ell_\gamma}$ is random. |

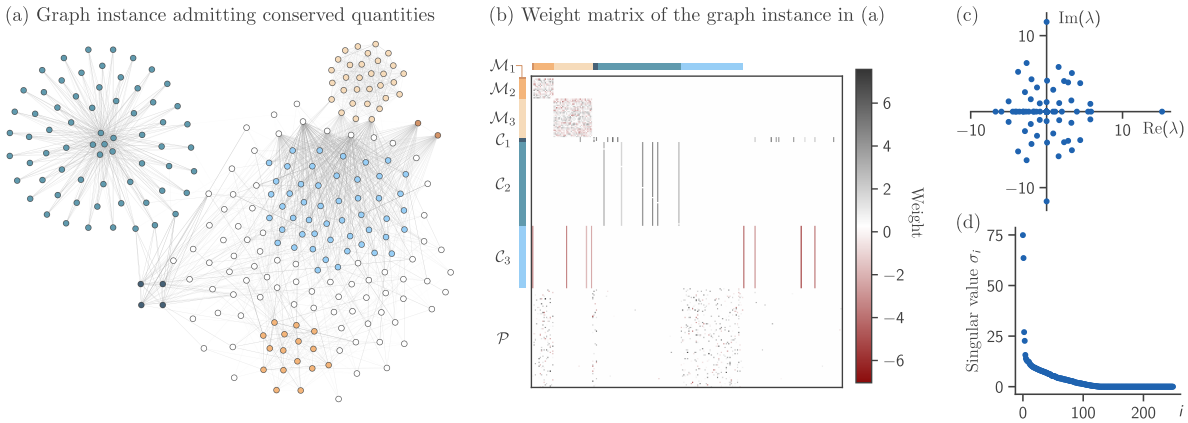



FIGURE 7.1 – Illustration of (a) a modular, directed, weighted, and signed graph of $N = 250$ vertices admitting 2 time-independent monomial constants of motion and 112 conserved cross-ratios. Its weight matrix $W$ in (b) is an instance of the random matrix model of Table 7.1 ($A$, $\alpha$, and $\boldsymbol{\omega}$ not shown in the figure). (c) The eigenvalues and (d) the singular values of the matrix (b).

The Koopman generator for the oscillators in $\mathcal{C}_\gamma$ is

$$\mathcal{K}_\gamma = \rho_\gamma(\boldsymbol{z}) L^\gamma_{-1} + i\Omega_\gamma L^\gamma_0 - \overline{\rho_\gamma(\boldsymbol{z})} L^\gamma_1 \,, \tag{7.10}$$

where $L^\gamma_n = \sum_{j\in\mathcal{C}_\gamma} z_j^{n+1}\partial_j$ and

$$\rho_\gamma(\boldsymbol{z}) = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k \,. \tag{7.11}$$

Through Eq. (7.10), it is clear that the cross-ratios related to each partially integrable part $\mathcal{C}_\gamma$ are constants of motion, since they are the joint invariants of $L^\gamma_{-1}, L^\gamma_0, L^\gamma_1$ for each $\gamma$ [Chapter 6].

The partition thus ultimately leads to the separation of the Koopman generator as

$$\mathcal{K} = \sum_{\tau=1}^{m} \mathcal{J}_\tau + \sum_{\gamma=1}^{c} \mathcal{K}_\gamma + \mathcal{K}_{\mathrm{NI}} \,, \tag{7.12}$$

where $\mathcal{J}_\tau$ is the Koopman generator of Eq. (7.8) admitting monomial eigenfunctions, $\mathcal{K}_\gamma$ is the Koopman generator of Eq. (7.9) admitting conserved cross-ratios, while $\mathcal{K}_{\mathrm{NI}}$ is the Koopman generator of the non-integrable part $\mathcal{P}$. This completes the definition of the partially integrable model and we now perform its partial integration.

## 7.7 Partial integration

Having now constructed a family of partially integrable Kuramoto models, let us proceed with their partial integration. We first begin by partially integrating the parts admitting a monomial eigenfunction, then we provide an operator-theoretic derivation of WS transformation to finally perform the partial integration of the parts with conserved cross-ratios.

### Partial integration of monomial parts

The existence of a monomial eigenfunction $z^{\boldsymbol{\mu}_\tau}$ implies that $z^{\boldsymbol{\mu}_\tau} e^{-i(\boldsymbol{\mu}_\tau^\top \boldsymbol{\omega})t}$ is conserved, where $i\boldsymbol{\mu}_\tau^\top \boldsymbol{\omega}$ is the related eigenvalue. If $\boldsymbol{\mu}_\tau^\top \boldsymbol{\omega} = 0$, the time dependence disappears and it is convenient to make a change of variables for the partial integration in such a way that no explicit time dependence is introduced in the vector field, that is, the dynamics remains autonomous. But this is a specific case, there is no reason for the orthogonality condition $\boldsymbol{\mu}_\tau^\top \boldsymbol{\omega} = 0$ to hold in general.

Yet, it is always possible to make products of different monomial eigenfunctions to obtain monomial constants of motion with no time dependence (as explained in Sec. 7.5) [2]. Indeed, suppose that $\mathcal{K}$ admits $m \in \{1, ..., N\}$ functionally independent monomial eigenfunctions $z^{\boldsymbol{\mu}_1}, ..., z^{\boldsymbol{\mu}_m}$, where $\boldsymbol{\mu}_\tau \in \mathbb{R}^N$ for each $\tau \in \{1, ..., m\}$, whose corresponding eigenvalues are $\boldsymbol{\lambda} = (i\boldsymbol{\mu}_1^\top \boldsymbol{\omega} \ \cdots \ i\boldsymbol{\mu}_m^\top \boldsymbol{\omega})^\top$. If $\boldsymbol{\lambda} \neq \mathbf{0}$, then the imaginary part of $\boldsymbol{\lambda}$ lies in $\mathbb{R}^m$ and has a $(m-1)$-dimensional orthogonal complement $\mathscr{A}^\perp \subset \mathbb{R}^m$. One can thus choose $m-1$ linearly independent vectors $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{m-1} \in \mathscr{A}^\perp$ and get new exponents $\boldsymbol{\nu}_1, ..., \boldsymbol{\nu}_{m-1}$ defined by

$$(\boldsymbol{\nu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\nu}_{m-1}) = (\boldsymbol{\mu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\mu}_m)(\boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_{m-1}) \,, \tag{7.13}$$

such that the corresponding monomials $z^{\boldsymbol{\nu}_1}$, ..., $z^{\boldsymbol{\nu}_{m-1}}$ are eigenfunctions with zero eigenvalues. In other words, they are $m-1$ functionally independent monomial constants of motion.

On the one hand, from the construction summarized in Table 7.1, $(\boldsymbol{\mu}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{\mu}_m)$ is a block diagonal matrix with diagonal blocks $(\mu_{1,1} \ \cdots \ \mu_{1,d_1})^\top$, $(\mu_{2,d_1+1} \ \cdots \ \mu_{2,d_1+d_2})^\top$, and so on. On the other hand, there are several ways to choose $\boldsymbol{a}_1, ..., \boldsymbol{a}_{m-1}$ in Eq. (7.13). One of them is to define $\tilde{\omega}_\tau := \boldsymbol{\mu}_\tau^\top \boldsymbol{\omega}$ for all $\tau \in \{1, ..., m\}$ and set

$$\boldsymbol{a}_\eta = \tilde{\omega}_{\eta+1} \boldsymbol{e}_\eta - \tilde{\omega}_\eta \boldsymbol{e}_{\eta+1} \,, \quad \forall \eta \in \{1, ..., m-1\} \,, \tag{7.14}$$

where $\boldsymbol{e}_\iota$ is a $m$-dimensional unit vector with a 1 at the $\iota$-th component. Equations (7.13-7.14) thus imply that

$$\boldsymbol{\nu}_\eta = \tilde{\omega}_{\eta+1} \boldsymbol{\mu}_\eta - \tilde{\omega}_\eta \boldsymbol{\mu}_{\eta+1} \,, \quad \forall \eta \in \{1, ..., m-1\} \,, \tag{7.15}$$

are the exponents of the conserved monomials $z^{\boldsymbol{\nu}_1}$,...,$z^{\boldsymbol{\nu}_{m-1}}$.

The choice of $\boldsymbol{a}_1, ..., \boldsymbol{a}_{m-1}$ directly affects the monomial exponents $\boldsymbol{\nu}_1, ..., \boldsymbol{\nu}_{m-1}$ and, consequently, the change of variables for the partial integration. To define such a change of variables, it is convenient to work with the real equations in terms of the phases and to set $m-1$ of the new variables to be functions of the conserved monomials. Indeed, since a function of a

2. Another possibility to obtain $m$ constants of motion with no time dependence is that the oscillators in $\mathcal{M}_1, ..., \mathcal{M}_m$ also satisfy the conditions of Theorem 2 in Chapter 6. In this case, there is a Vandermonde-ratio eigenfunction for each part and one can form a different type of constant of motion, which we do not discuss further in this paper.

constant of motion is again a constant of motion, $-i\ln(z^{\boldsymbol{\nu}_\eta})$ is also conserved for all $\eta$. Recalling that $z_j = e^{i\theta_j}$, we have $-i\ln(z^{\boldsymbol{\nu}_\eta}) = \boldsymbol{\nu}_\eta^\top \boldsymbol{\theta}$, that is, a conserved linear observable in terms of the phases.

Consider the new variables $\phi_{j_\eta} := \boldsymbol{\nu}_\eta^\top \boldsymbol{\theta}$ for all $\eta \in \{1, ..., m-1\}$ and for some index $j_\eta \in \mathcal{M}_\eta \cup \mathcal{M}_{\eta+1}$, say $j_\eta = \max \mathcal{M}_\eta$ (i.e., $j_\eta$ is the highest index in $\mathcal{M}_\eta$). From there, set $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \cup ... \cup \mathcal{M}_m$, $\mathcal{I} = \{j_1, ..., j_{m-1}\}$ and define the coordinate vector $\hat{\boldsymbol{\phi}} = ((\phi_j)_{j\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}}, (\phi_j)_{j\in\mathcal{I}})^\top$, where $\phi_j = \theta_j$ for $j \in \mathcal{M} \setminus \mathcal{I}$ and the hat $\hat{}$ is meant to denote the reordering of the elements of $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, ..., \phi_{\sum_\tau d_\tau})^\top$. This reordering is meant to separate the time-evolving variables $(\phi_j)_{j\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}}$ from the constants of motion $(\phi_j)_{j\in\mathcal{I}}$.

In matrix form, one has a linear change of coordinates

$$\hat{\boldsymbol{\phi}} = V\hat{\boldsymbol{\theta}}\,, \tag{7.16}$$

where $\hat{\boldsymbol{\theta}} = ((\theta_j)_{j\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}}, (\theta_j)_{j\in\mathcal{I}})^\top$. The $\sum_{\tau=1}^m d_\tau \times \sum_{\tau=1}^m d_\tau$ matrix $V$ is defined as

$$V = \begin{pmatrix} \hat{I} \\ \hat{V} \end{pmatrix}\,, \tag{7.17}$$

where $\hat{I} = (I \quad 0)$ is the concatenation of a $(\sum_{\tau=1}^m d_\tau - m + 1) \times (\sum_{\tau=1}^m d_\tau - m + 1)$ identity matrix $I$ and a zero block matrix of size $(\sum_{\tau=1}^m d_\tau - m + 1) \times (m-1)$, while $\hat{V} = (\hat{\boldsymbol{\nu}}_1 \cdots \hat{\boldsymbol{\nu}}_{m-1})^\top$ contains the vectors $\hat{\boldsymbol{\nu}}_\eta = ((\nu_{\eta j})_{j\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}}, (\nu_{\eta j})_{j\in\mathcal{I}})^\top$ obtained from reordering the first $\sum_{\tau=1}^m d_\tau$ elements of $\boldsymbol{\nu}_\eta = (\nu_{\eta j})_{j\in\mathcal{V}}$ in Eq. (7.15).

In real form, Eq. (7.8) becomes

$$\dot{\theta}_j = \omega_j + \frac{1}{\mu_{\tau j}} \sum_{k\in\mathcal{M}_\tau} S_{jk} \sin(\theta_k - \theta_j - \kappa_{jk})\,, \tag{7.18}$$

for all $j \in \mathcal{M}_\tau$ and $\tau \in \{1, ..., m\}$. Applying the change of variables in Eq. (7.16) yields $\dot{\phi}_j = 0$ for $j \in \mathcal{I}$,

$$\dot{\phi}_j = \omega_j + \frac{1}{\mu_{mj}} \sum_{k\in\mathcal{M}_m} S_{jk} \sin(\phi_k - \phi_j - \kappa_{jk})\,, \tag{7.19}$$

for $j \in \mathcal{M}_m$, and

$$\dot{\phi}_j = \omega_j + \frac{1}{\mu_{\eta j}} \sum_{k\in\mathcal{M}_\eta\setminus\{j_\eta\}} S_{jk} \sin(\phi_k - \phi_j - \kappa_{jk}) + \frac{1}{\mu_{\eta j}} S_{jj_\eta} \sin(\sum_{\ell\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}} V^{-1}_{j_\eta,\ell}\phi_\ell - \phi_j - \kappa_{jj_\eta} + \kappa_\eta)\,, \tag{7.20}$$

for $j \in \mathcal{M}_\eta \setminus \{j_\eta\}$, $\eta \in \{1, ..., m-1\}$, where

$$\kappa_\eta = \sum_{\varepsilon=1}^{m-1} V^{-1}_{j_\eta, j_\varepsilon} \phi_{j_\varepsilon}(0)\,, \quad \phi_{j_\varepsilon}(0) = \boldsymbol{\nu}_\varepsilon^\top \boldsymbol{\theta}(0)\,. \tag{7.21}$$

Hence, there is a reduction from $\sum_{\tau=1}^{m} d_\tau$ equations to $\sum_{\tau=1}^{m} d_\tau - m + 1$ equations for the monomial parts.

The monomial constants of motion thus act as phase lags $\kappa_1, ..., \kappa_{m-1}$ in the coordinates $(\phi_j)_{j\in\mathcal{M}_\eta\setminus\mathcal{I}}$ for all $\eta \in \{1, ..., m-1\}$. Moreover, there is a special type of higher-order interactions that connect the monomial parts originally disconnected from each other. The above procedure is summarized in Fig. 7.2(b).

Let us now turn our focus to the partial integration of the conserved cross-ratio parts $\mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c$. In contrast to the monomial parts, the coordinate transformation required for partial integration is not linear and more refined mathematical tools are therefore needed to construct it. We thus devote the next subsection to the derivation of this transformation.

### Operator-theoretic derivation of WS transformation

Knowing that some cross-ratios are conserved, the simplest way to achieve the integration is to choose the coordinates of three oscillators within each partially integrable part and use the $n_\gamma - 3$ independent cross-ratios as the other coordinates, similar to our treatment of the conserved monomials. Yet, since there are generally more conserved quantities in a part $\mathcal{C}_\gamma$ than in a part $\mathcal{M}_\tau$, one can hope to find a coordinate change to mesoscopic observables, i.e., observables depending on all the oscillators within a part $\mathcal{C}_\gamma$. Ideally, one would also like to have coordinates that help characterizing synchronization within the part.

WS theory is known to yield a natural coordinate system to quantify phase synchronization and it retains a clear interpretation in the infinite-size limit $N \to \infty$, owing to its connection with the Ott-Antonsen Ansatz [388, 453, 477, 478]. Also, for $N \to \infty$, traveling wave analysis and time of travel coordinates clarify the origin of WS transformation (7.1), as explained in the original papers (Ref. [619, p.2392] and Ref. [620, Sec. 5.3]). However, the transformation is often used without detailed justification in the literature and explicit derivations of the transformation itself remain scarce. We thus suggest an operator-theoretic derivation, as summarized in Fig. 7.2(c).

To begin with, note that the dynamics of any observable $f : \mathbb{T}^N \to \mathbb{C}$ satisfies a linear equation $\dot{f} = \mathcal{K}[f]$. The solution is readily given by $f(\boldsymbol{z}(t)) = \exp(t\mathcal{K})f(\boldsymbol{z}(0))$, but we would like to have a closed form for $\exp(t\mathcal{K})$ to obtain the desired change of coordinates. For that, we first take advantage of the Koopman generator's decomposition in Eq. (7.12) to define specific observables depending only on the phases of the oscillators in $\mathcal{C}_\gamma$. More precisely, consider the observable $g_\gamma : \mathbb{T}^N \to \mathbb{C}$ for each $\gamma$ such that $g_\gamma = f_\gamma \circ r_\gamma$ with the projection $r_\gamma : (z_j)_{j\in\mathcal{V}} \mapsto (z_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ of the state on the subspace spanned by $(z_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$, and $f_\gamma$ sends $(z_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ to a complex number. Then, $\dot{g}_\gamma = \mathcal{K}_\gamma[g_\gamma]$ and $g_\gamma(\boldsymbol{z}(t)) = \exp(t\mathcal{K}_\gamma)g_\gamma(\boldsymbol{z}(0))$, but the closed form of $\exp(t\mathcal{K}_\gamma)$ remains unknown.

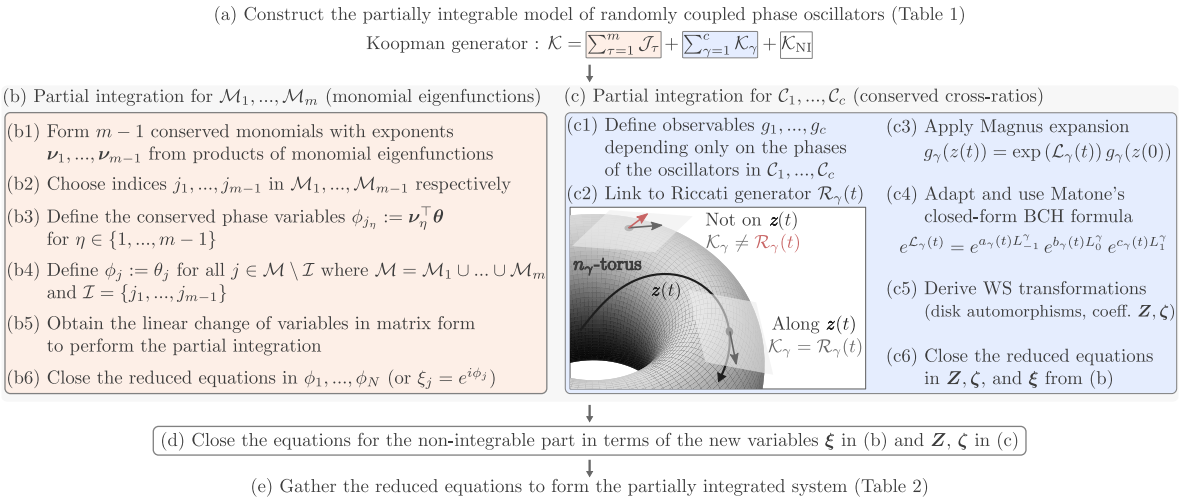



FIGURE 7.2 – Summary of the procedure to get the partially integrated system from the model admitting monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios. (a) We construct the partially integrable model supporting monomial eigenfunctions and conserved cross-ratios, which leads to a separation of the Koopman generator as explained in Sec. 7.6. (b) Procedure to partially integrate the parts admitting monomial eigenfunctions. (c) Procedure to partially integrate the parts admitting conserved monomials. In (c2), the link between the Koopman generators $\mathcal{K}_1, ..., \mathcal{K}_c$ related to the parts $\mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c$ and the Koopman generator of Riccati equations $\mathcal{R}_1(t), ..., \mathcal{R}_c(t)$ is illustrated. The generator $\mathcal{K}_\gamma$ is only aligned to $\mathcal{R}_\gamma(t)$ along a specific trajectory on the $n_\gamma$-torus.

To move forward, we use an insight from WS theory on a class of identical phase dynamics [619, 620], soon recognized to be related to identical Riccati equations [227]. Strictly speaking, the differential equations for the Kuramoto model are not Riccati equations, but they do have a correspondence. To establish such a correspondence, given a solution curve $\boldsymbol{z}$ generated by Eq. (7.5) and a function of time $q_\gamma$ such that $q_\gamma(t) := \rho_\gamma(\boldsymbol{z}(t))$, define a new time-dependent Koopman generator for each $\gamma$ such that

$$\mathcal{R}_\gamma(t) = q_\gamma(t) L_{-1}^\gamma + i\Omega_\gamma L_0^\gamma - \overline{q_\gamma(t)} L_1^\gamma \,. \tag{7.22}$$

Then, $\mathcal{R}_\gamma$ is the generator of a non-autonomous system of identical Riccati equations and generates the same solution as $\mathcal{K}_\gamma$ if the initial conditions coincide and $q_\gamma(t) = \rho_\gamma(\boldsymbol{z}(t))$ (Lemma 7.2). In other terms, $\mathcal{R}_\gamma(t)$ is only aligned with $\mathcal{K}_\gamma$ on the solution curve [Fig. 7.2 (c1)], but this alignment is just enough to pursue partial integration.

Under the correspondence $\mathcal{K}_\gamma = \mathcal{R}_\gamma(t)$, the dynamics of the observable $g_\gamma$ becomes $\dot{g}_\gamma = \mathcal{R}_\gamma(t)[g_\gamma]$ for $\gamma \in \{1, ..., c\}$, which are non-autonomous, linear, and uncoupled differential equations. Leveraging Magnus expansion [65, 380], we obtain the solution

$$g_\gamma(z(t)) = \exp(\mathcal{L}_\gamma(t))\, g_\gamma(z(0)) \,, \tag{7.23}$$

where

$$\mathcal{L}_\gamma(t) = B_\gamma(t) L_{-1}^\gamma + 2iY_\gamma(t) L_0^\gamma - \overline{B_\gamma(t)} L_1^\gamma \,, \tag{7.24}$$

$$B_\gamma(t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n^\gamma(t) \,, \quad Y_\gamma(t) = \sum_{n=1}^{\infty} y_n^\gamma(t) \,, \tag{7.25}$$

while $b_n^\gamma(t)$ and $y_n^\gamma(t)$ have integral forms and depend on $\Omega_\gamma$ and $q_\gamma(t)$ (Sec. 7.11).

The problem in deriving the explicit action of $\exp(\mathcal{L}_\gamma(t))$ is that $L_{-1}^\gamma$, $L_0^\gamma$, and $L_1^\gamma$ do not commute, i.e., $[L_n^\gamma, L_m^\gamma] = (n-m)L_{n+m}^\gamma$, so the exponential cannot be directly expressed as a product of three exponentials for each operator. Moreover, a closed-form equation for $\exp(\mathcal{L}_\gamma(t))$ with the BCH formula does not necessarily exist.

Fortunately, in 2015, Matone found the closed-form equation for the exponential of different elements in the Virasoro algebra, including $\mathfrak{sl}_2(\mathbb{C})$ as a subalgebra [392]. For our needs, we derived the specific form of Matone's formula for the projective special unitary group $\mathrm{PSU}(1,1)$ (Sec. 7.10) :

$$\exp\left\{\nu(u)\left[VL_{-1} + (U-\bar{U})L_0 - \bar{V}L_1\right]\right\} = \exp(-(V/\bar{U})L_{-1})\exp(2\ln\bar{U}L_0)\exp((\bar{V}/\bar{U})L_1)\,, \tag{7.26}$$

where $u = (U+\bar{U})/2$, $|U|^2 - |V|^2 = 1$, and

$$\nu(x) = \frac{1}{2\sqrt{x^2-1}}\ln\left(\frac{x+\sqrt{x^2-1}}{x-\sqrt{x^2-1}}\right)\,.$$

To use the formula for $\exp(\mathcal{L}_\gamma(t))$, define

$$U_\gamma(t) := X_\gamma + \frac{iY_\gamma(t)}{\nu(X_\gamma)} \quad \text{and} \quad V_\gamma(t) := \frac{B_\gamma(t)}{\nu(X_\gamma)}\,,$$

where $X_\gamma$ is constrained to satisfy $|U_\gamma(t)|^2 - |V_\gamma(t)|^2 = 1$ for all $\gamma$ and $t$. Despite the apparent complexity of the constraint, we can explicitly solve for $X_\gamma$ and obtain the simple relation $X_\gamma = \pm\cosh(\sqrt{|B_\gamma(t)|^2 - Y_\gamma(t)^2})$. One thus gets the desired form

$$\mathcal{L}_\gamma = \nu(X_\gamma)(V_\gamma L_{-1}^\gamma + (U_\gamma - \overline{U}_\gamma)L_0^\gamma - \overline{V}_\gamma L_1^\gamma)\,.$$

Equation (7.26) allows splitting the exponential and finally provides the action of $\exp(\mathcal{L}_\gamma(t))$ on the observables :

$$g_\gamma(z(t)) = \frac{U_\gamma(t)g_\gamma(z(0)) + V_\gamma(t)}{\overline{V_\gamma(t)}g_\gamma(z(0)) + \overline{U_\gamma(t)}}\,, \tag{7.27}$$

that is, a time-dependent disk automorphism in $\mathrm{Aut}(\mathbb{D}) \simeq \mathrm{PSU}(1,1)$. In particular, the choice of observable $g_\gamma(z_1, ..., z_N) = z_j$ for $j \in \mathcal{C}_\gamma$ implies that the solutions of the Kuramoto model for $\mathcal{C}_1$, ..., $\mathcal{C}_c$ have the form of disk automorphisms, as expected from WS theory.

There are infinitely many integrals to be solved to get $U_\gamma(t)$ and $V_\gamma(t)$, but there is an alternative : interpreting them as variables having their own equations of motion. Under this perspective, every solution $(U_\gamma(t), V_\gamma(t))$ of the yet-to-be-determined differential equations is constrained to start at $(U_\gamma(0), V_\gamma(0)) = (\pm 1, 0)$ for any initial conditions $(z_j(0))_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ in order for Eq. (7.27) to be satisfied. Considering that different initial conditions $(\xi_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma} \in \mathbb{T}^{n_\gamma}$ of the

Kuramoto model lead to different trajectories, it is more informative to have different initial conditions leading to different trajectories for the disk automorphism coefficients. To do so, we express the initial conditions as $\xi_j = (a_\gamma w_j + b_\gamma)/(\overline{b}_\gamma w_j + \overline{a}_\gamma)$, where $|a_\gamma|^2 - |b_\gamma|^2 = 1$, $w_j \in \mathbb{T}^1$ for all $j \in \mathcal{C}_\gamma$, and $\gamma \in \{1, ..., c\}$. Consequently,

$$z_j(t) = \frac{u_\gamma(t) w_j + v_\gamma(t)}{\overline{v_\gamma(t)} w_j + \overline{u_\gamma(t)}}, \quad \forall\, j \in \mathcal{C}_\gamma\,, \tag{7.28}$$

where $u_\gamma(t) := a_\gamma U_\gamma(t) + \overline{b}_\gamma V_\gamma(t)$ and $v_\gamma(t) := b_\gamma U_\gamma(t) + \overline{a}_\gamma V_\gamma(t)$ satisfy $|u_\gamma(t)|^2 - |v_\gamma(t)|^2 = 1$.

Moreover, since $u_\gamma(t)$ and $v_\gamma(t)$ are not bounded, we make the change of coordinates $u_\gamma^2 = \zeta_\gamma/(1-|Z_\gamma|^2)$, $v_\gamma^2 = \overline{\zeta}_\gamma Z_\gamma^2/(1-|Z_\gamma|^2)$ where $\zeta_\gamma = e^{i\varphi_\gamma}$ and $Z_\gamma(t) \in \mathbb{D}$. The change of coordinates applied to Eq. (7.28) finally leads to

$$z_j(t) = M_{Z_\gamma(t),\zeta_\gamma(t)}(w_j) = \frac{\zeta_\gamma(t) w_j + Z_\gamma(t)}{1 + \zeta_\gamma(t)\,\overline{Z_\gamma(t)} w_j}\,, \tag{7.29}$$

i.e., the complex version of the Watanabe-Strogatz transformation (7.1). The transformation that leads to the real, original, form in Eq. (7.1) is obtained by using trigonometric identities as in Ref. [388, IV, A]. Our approach thus provides an explicit derivation of the transformation, but also highlights the complex relation between $Z_\gamma$, $\zeta_\gamma$, and the original coordinates $z_1, ..., z_N$.

### Partial integration of cross-ratio parts

In the last section, we showed that there are infinitely many integrals to solve to obtain $U_\gamma(t)$, $V_\gamma(t)$ or equivalently, through a change of variables, $Z_\gamma(t)$, $\zeta_\gamma(t)$ for all $\gamma \in \{1, ..., c\}$. Yet, as mentioned before, we can interpret them as variables having their own equations of motion : if we find their differential equations in closed form (in terms of $(Z_\gamma)_{\gamma\in\{1,...,c\}}$, $(\zeta_\gamma)_{\gamma\in\{1,...,c\}}$, the variables $(\phi_j)_{j\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}}$ introduced in Sec. 7.7, and $\boldsymbol{z}_\mathcal{P} := (z_j)_{j\in\mathcal{P}}$), then the partial integration will be complete.

To perform the partial integration, we adopt the "algebraic approach" from Ref. [388] to each part admitting conserved cross-ratios. For the next few steps, we drop the time dependencies to simplify the notation. First, the time derivative of $z_j$ in Eq. (7.29) for $j \in \mathcal{C}_\gamma$ and for all $\gamma \in \{1, ..., c\}$ is

$$\dot{z}_j = \frac{\dot{Z}_\gamma + \dot{Z}_\gamma \bar{Z}_\gamma - Z_\gamma \dot{\bar{Z}}_\gamma + i(1-|Z_\gamma|^2)\dot{\varphi}_\gamma e^{i\varphi_\gamma} w_j - \dot{\bar{Z}}_\gamma e^{2i\varphi_\gamma} w_j^2}{1 + 2\bar{Z}_\gamma e^{i\varphi_\gamma} w_j + \bar{Z}_\gamma^2 e^{2i\varphi_\gamma} w_j^2}. \tag{7.30}$$

Second, taking the inverse of Eq. (7.29), i.e.,

$$w_j = e^{i\varphi_\gamma} \frac{z_j - Z_\gamma}{1 - \bar{Z}_\gamma z_j}\,, \tag{7.31}$$

and substituting into Eq. (7.30) yields

$$\dot{z}_j = \left(\frac{\dot{Z}_\gamma - iZ_\gamma\,\dot{\varphi}_\gamma}{1-|Z_\gamma|^2}\right) - \left(\frac{\dot{\bar{Z}}_\gamma + i\bar{Z}_\gamma\,\dot{\varphi}_\gamma}{1-|Z_\gamma|^2}\right) z_j^2 + i\left(\frac{i(\bar{Z}_\gamma \dot{Z}_\gamma - \dot{\bar{Z}}_\gamma Z_\gamma) + (1+|Z_\gamma|^2)\dot{\varphi}_\gamma}{1-|Z_\gamma|^2}\right) z_j$$

for all $j \in \{1, ..., N\}$.

Third, for these differential equations to be equivalent to the Riccati equations related to Eq. (7.22), the system of differential-algebraic equations must satisfy

$$q_\gamma(t) = \frac{\dot{Z}_\gamma(t) - iZ_\gamma(t)\,\dot{\varphi}_\gamma(t)}{1 - |Z_\gamma(t)|^2}\,,$$
$$\Omega_\gamma = \frac{i(\bar{Z}_\gamma(t)\dot{Z}_\gamma(t) - \dot{\bar{Z}}_\gamma(t)Z_\gamma(t)) + (1 + |Z_\gamma(t)|^2)\dot{\varphi}_\gamma(t)}{1 - |Z_\gamma(t)|^2}$$

for all $t$. Solving for $\dot{Z}_\gamma$ and $\dot{\varphi}_\gamma$ gives

$$\dot{Z}_\gamma(t) = q_\gamma(t) + i\Omega_\gamma Z_\gamma(t) - \overline{q_\gamma(t)}Z_\gamma(t)^2\,,$$
$$\dot{\zeta}_\gamma(t) = (i\Omega_\gamma + q_\gamma(t)\overline{Z_\gamma(t)} - \overline{q_\gamma(t)}\,Z_\gamma(t))\zeta_\gamma(t)\,.$$

Finally, the relation $q_\gamma(t) = \rho_\gamma(\boldsymbol{z}(t))$ allows going back to the Kuramoto model. Now, one needs to close $\rho_\gamma(\boldsymbol{z})$ in terms of $(Z_\gamma)_{\gamma\in\{1,...,c\}}$, $(\zeta_\gamma)_{\gamma\in\{1,...,c\}}$, $(\phi_j)_{j\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}}$, and $\boldsymbol{z}_\mathcal{P}$. The partition $P$ splits the sum in Eq. (7.11) as

$$\rho_\gamma(\boldsymbol{z}) = \sum_{k\in\mathcal{M}} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k + \sum_{\delta=1}^{c}\sum_{k\in\mathcal{C}_\delta} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k + \sum_{k\in\mathcal{P}} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k\,.$$

For the first term, by setting $\xi_\ell = e^{i\phi_\ell}$ for $\ell \in \mathcal{M}\setminus\mathcal{I}$, the change of coordinates (7.16) yields

$$\sum_{k\in\mathcal{M}} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k = \sum_{k\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}} \mathcal{A}_{\gamma k}\xi_k + \sum_{\varepsilon=1}^{m-1} \mathcal{A}_{\gamma j_\varepsilon} e^{i\kappa_\varepsilon}\xi^{\boldsymbol{v}_\varepsilon}\,,$$

where

$$\xi^{\boldsymbol{v}_\varepsilon} = \prod_{\ell\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}} \xi_\ell^{V^{-1}_{j_\varepsilon \ell}} \tag{7.32}$$

and $\kappa_\varepsilon$ is given by Eq. (7.21). Equation (7.29) closes the second term in terms of $(Z_\gamma)_{\gamma\in\{1,...,c\}}$, $(\zeta_\gamma)_{\gamma\in\{1,...,c\}}$ and the third term for the nonintegrable part is already closed. Altogether, the closed dynamics for the oscillators in the part $\mathcal{C}_\gamma$ is

$$\dot{Z}_\gamma = F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) + i\Omega_\gamma Z_\gamma - \overline{F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P})}Z_\gamma^2\,,$$
$$\dot{\zeta}_\gamma = (i\Omega_\gamma + F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P})\overline{Z}_\gamma - \overline{F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P})}\,Z_\gamma)\,\zeta_\gamma\,,$$

for all $\gamma \in \{1, ..., c\}$, where

$$F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) = \sum_{k\in\mathcal{M}\setminus\mathcal{I}} \mathcal{A}_{\gamma k}\xi_k + \sum_{\varepsilon=1}^{m-1} \mathcal{A}_{\gamma j_\varepsilon} e^{i\kappa_\varepsilon}\xi^{\boldsymbol{v}_\varepsilon} \sum_{\delta=1}^{c}\sum_{k\in\mathcal{C}_\delta} \mathcal{A}_{\gamma k} M_{Z_\delta,\zeta_\delta}(w_k) + \sum_{k\in\mathcal{P}} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k\,.$$

The closure of the equations related to the oscillators in the non-integrable part $\mathcal{P}$ is similar to the above procedure, which completes the partial integration. The partially integrated system is presented in Table 7.2.

TABLE 7.2 – Summary of the partially integrated Kuramoto dynamics on the random graph defined in Table 7.1.

**Monomial part**, $\eta = \{1, \dots, m-1\}$

$$\dot{\xi}_j = i\omega_j \xi_j + \frac{1}{2\mu_{\eta j}} \sum_{k \in \mathcal{M}_\eta \setminus \{j_\eta\}} S_{jk} (\xi_k e^{-i\kappa_{jk}} - \bar{\xi}_k \xi_j^2 e^{i\kappa_{jk}})$$
$$+ \frac{1}{2\mu_{\eta j}} S_{jj_\eta} (\xi^{\boldsymbol{v}_\eta} e^{i(\kappa_\eta - \kappa_{jj_\eta})} - \bar{\xi}^{\boldsymbol{v}_\eta} \xi_j^2 e^{-i(\kappa_\eta - \kappa_{jj_\eta})}), \ j \in \mathcal{M}_\eta \setminus \{j_\eta\}$$
$$\dot{\xi}_j = i\omega_j \xi_j + \frac{1}{2\mu_{mj}} \sum_{k \in \mathcal{M}_m} S_{jk} (\xi_k e^{-i\kappa_{jk}} - \bar{\xi}_k \xi_j^2 e^{i\kappa_{jk}}), \ j \in \mathcal{M}_m$$

**Cross-ratio part**, $\gamma \in \{1, \dots, c\}$

$$\dot{Z}_\gamma = F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) + i\Omega_\gamma Z_\gamma - \overline{F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P})} Z_\gamma^2$$
$$\dot{\zeta}_\gamma = (i\Omega_\gamma + F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) \overline{Z}_\gamma - \overline{F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P})}\, Z_\gamma)\, \zeta_\gamma$$

**Non-integrable part**

$$\dot{z}_j = G_j(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) - \overline{G_j(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P})} z_j^2, \qquad j \in \mathcal{P}$$

**Related functions**

$$\kappa_\eta = \sum_{\varepsilon=1}^{m-1} V^{-1}_{j_\eta, j_\varepsilon} \phi_{j_\varepsilon}(0), \quad \phi_{j_\varepsilon}(0) = \boldsymbol{\nu}_\varepsilon^\top \boldsymbol{\theta}(0)$$

$$\Omega_\gamma = \omega_{\ell_\gamma} - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma \ell_\gamma})$$

$$F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) = \sum_{k \in \mathcal{M} \setminus \mathcal{I}} \mathcal{A}_{\gamma k} \xi_k + \sum_{\varepsilon=1}^{m-1} \mathcal{A}_{\gamma j_\varepsilon} e^{i\kappa_\varepsilon} \xi^{\boldsymbol{v}_\varepsilon}$$
$$+ \sum_{\delta=1}^{c} \sum_{k \in \mathcal{C}_\delta} \mathcal{A}_{\gamma k} M_{Z_\delta, \zeta_\delta}(w_k) + \sum_{k \in \mathcal{P}} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k$$

$$G_j(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{z}_\mathcal{P}) = \sum_{k \in \mathcal{M} \setminus \mathcal{I}} A_{jk} \xi_k + \sum_{\varepsilon=1}^{m-1} A_{j j_\varepsilon} e^{i\kappa_\varepsilon} \xi^{\boldsymbol{v}_\varepsilon}$$
$$+ \sum_{\delta=1}^{c} \sum_{k \in \mathcal{C}_\delta} A_{jk} M_{Z_\delta, \zeta_\delta}(w_k) + \sum_{k \in \mathcal{P}} A_{jk} z_k$$

Two examples (without monomial parts) are provided in SI (sec. 7.12). All in all, we started with

$$N = \sum_{\tau=1}^{m} d_\tau + \sum_{\gamma=1}^{c} n_\gamma + p$$

equations and we obtained a reduced system of dimension

$$n = \sum_{\tau=1}^{m-1} (d_\tau - 1) + d_m + 3c + p\,.$$

Hence, there are

$$q = N - n = (m-1) + \sum_{\gamma=1}^{c} (n_\gamma - 3)$$

functionally independent constants of motion.

## 7.8 Conclusion

We introduced a modular random network of Kuramoto oscillators admitting different conserved quantities and demonstrated how to perform the partial integration of the model with operator-theoretic tools. For the latter, we used monomial eigenfunctions of the Koopman generator and we provided a derivation of the Watanabe–Strogatz transformation, based on Magnus expansion and a closed form of the BCH formula introduced by Matone [392].

Although we have applied our framework only to the Kuramoto model, it extends to a broader class of phase dynamics, including the Winfree model [638] and the theta model [170], and we expect it to be useful for other general oscillator dynamics as well [85, 105, 108, 240, 356, 361, 362, 364, 572]. In particular, considering Riccati-type dynamics with Koopman generator

$$\mathcal{K}_{t,\mathbf{Z}} = a(t,\mathbf{Z})\, L_{-1} + b(t,\mathbf{Z})\, L_0 + c(t,\mathbf{Z})\, L_1\,, \tag{7.33}$$

where $\mathbf{Z} = (Z_1, ..., Z_N) \in \mathbb{C}^N$ and $L_n$ defined with $Z_1, ..., Z_N$, one can at least formally apply the procedure suggested in Fig. 7.2(c). Indeed, one can still relate the generator to the one of a Riccati equation ($\mathcal{R}_{t,\mathbf{Z}} = \alpha(t)\, L_{-1} + \beta(t)\, L_0 + \gamma(t)\, L_1$), apply Magnus expansion, and use Matone's formula for $\mathfrak{sl}_2(\mathbb{C})$ instead of $\mathfrak{psu}(1,1)$.

Yet, further study needs to be done to turn the suggested procedure into a rigorous mathematical derivation by controlling the convergence of the series arising in the Magnus expansion, establishing the formal proof for Matone's formula, and specifying the functional spaces in which $a$, $b$, $c$ in Eq. (7.33) must belong for the procedure to apply. Since Matone's formula is available for Virasoro algebra [392] (see also Ref. [393]), it is not excluded that one could find other relevant applications to oscillator dynamics.

Future work could also investigate the spectrum of the introduced random matrix and its potential connections to conserved quantities and specific synchronization phenomena. The framework may also be generalized to address the partial integration of phase-oscillator networks with motifs that admit Vandermonde-ratio eigenfunctions and symmetry-generated constants of motion [Chapter 6]. In addition, we have not yet carried out a systematic analysis of the persistence of these constants of motion when the underlying random graph is perturbed. More broadly, even when a system is not exactly partially integrable, it may remain approximately partially integrable, allowing for a substantial reduction of the governing ODEs through an appropriate choice of observables.

## 7.9 Appendix : From the Kuramoto model to Riccati equations

In Chapter 6, we have shown the following lemma.

**Lemma 7.1.** *With $z_j(t) = e^{i\theta_j(t)}$, the initial value problem of the Kuramoto model is equivalent to*

$$\dot{z}_j(t) = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k(t) - \left( \sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk} \bar{z}_k(t) \right) z_j(t)^2 \tag{7.34}$$

$$z_j(0) = e^{i\vartheta_j} \in \mathbb{T}\,, \tag{7.35}$$

*where $A$ is a complex matrix of interactions satisfying*

$$A = \frac{1}{2} \left( W \circ e^{-i\alpha} + i \operatorname{diag}(\boldsymbol{\omega}) \right)\,, \tag{7.36}$$

*where $e^{-i\alpha} = (e^{-i\alpha_{jk}})_{j,k}$, $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, ..., \omega_N)$, $\circ$ is the element-wise product and $\operatorname{diag}(W) = \operatorname{diag}(\alpha) = \mathbf{0}$. There exists a constant $a > 0$ such that the problem (7.34-7.35) possesses a unique solution $z_1(t), ..., z_N(t)$ on $t \in [-a, a]$.*

To perform the partial integration of the Kuramoto model, it is useful to establish a correspondence with one solution of the model (thus, for a given initial condition) and one solution of a set of Riccati equations representing a non-autonomous dynamical system.

**Lemma 7.2.** *Let the initial value problem of Riccati be*

$$\dot{u}_j(t) = q_j(t) - \overline{q_j(t)} u_j(t)^2\,, \qquad j \in \{1, ..., N\} \tag{7.37}$$

$$u_j(0) = d_j \in \mathbb{T} \tag{7.38}$$

*such that $u_j(t) \in \mathbb{T}$ for all $t \in [-a, a]$ with $a > 0$ and the arbitrary complex function $q_j$ defines the problem. Moreover, consider some solution of the Kuramoto model [Lemma 7.1] $z_1(t), ..., z_N(t)$ for $t \in [-a, a]$ with $z_1(0) = \exp(i\vartheta_1), ..., z_N(0) = \exp(i\vartheta_N)$ and a complex*

*matrix of interactions A. If the Riccati problem in Eqs. (7.37-7.38) satisfies* $d_j = \exp(i\vartheta_j)$ *and is defined with*

$$q_j(t) = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k(t)\,, \qquad j \in \{1, ..., N\}\,, \tag{7.39}$$

*then its unique solution coincides with the one for the Kuramoto model, i.e.,*

$$u_j(t) = z_j(t)\,, \qquad j \in \{1, ..., N\}\,,$$

*on* $t \in [-a, a]$.

*Démonstration.* Substituting $d_j$, $q_j$ and $\bar{q}_j$ in Eqs. (7.37-7.38) gives

$$\dot{u}_j(t) = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k(t) - \sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk} \bar{z}_k(t) u_j(t)^2\,, \qquad j \in \{1, ..., N\} \tag{7.40}$$

$$u_j(0) = \exp(i\vartheta_j) = z_j(0)\,. \tag{7.41}$$

Clearly, $u_j(t) = z_j(t)$ for all $j$ and $t$, because $(u_j(t))_j$ is a solution of Eqs. (7.40-7.41), which are equivalent to Eqs. (7.34-7.35) [Lemma 7.1]. Since $f_j(x_j, t) = q_j(t) - \overline{q_j(t)} x_j^2$ for each $j \in \{1, ..., N\}$ is continuous in $t$ and continuously differentiable in $x_j$ for all $x_j \in \mathbb{T}$, then the fundamental existence-uniqueness theorem for non-autonomous systems [471, p.77] guarantees the uniqueness of the solution (recall from Lemma 7.1 that $z_1(t)$,...,$z_N(t)$ is also unique). □

**Remark 7.3.** One must notice that if either $d_j = \exp(i\vartheta_j)$ or $q_j(t) = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k(t)$ is not satisfied, then no correspondence exists between the Riccati problem and the Kuramoto model. In perhaps more intuitive terms, different trajectories of the Kuramoto dynamics are related to different Riccati equations (i.e., $q_1(t)$,...,$q_N(t)$ are different for each Kuramoto solution) under the condition that the initial conditions coincide. ■

## 7.10 Appendix : Matone's formula for the projective special unitary group

In 2015, based on recent developments on the Baker-Campbell-Hausdorff equation, Matone found the closed-form equation [392, (3.12) with (3.9)] for the exponential of an element of the Virasoro algebra. Notably, his fundamental result includes the closed-form equation for the exponential of an element of $\mathfrak{sl}_2(\mathbb{C})$, that is, an element of the special linear group $\mathrm{SL}_2(\mathbb{C})$. In the paper, we need a particular case of his result for the automorphisms of the disk, which we present in this subsection. For an arbitrary element of $\mathrm{SL}_2(\mathbb{C})$

$$\gamma = \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{C} & \mathcal{D} \end{pmatrix}\,, \quad \mathcal{A}\mathcal{D} - \mathcal{B}\mathcal{C} = 1\,,$$

where $\nu_\pm = s \pm \sqrt{s^2-1}$ with $s = \frac{1}{2}\operatorname{tr}\gamma$, Matone's formula is

$$\exp(aL_{-1})\exp(bL_0)\exp(cL_1) = \exp\left\{\frac{\ln(\nu_+/\nu_-)}{\nu_+-\nu_-}\left[\mathcal{B}L_{-1} + (\mathcal{A}-\mathcal{D})L_0 - \mathcal{C}L_1\right]\right\},$$

where $\mathcal{A} = e^{b/2}(e^{-b}-ac)$, $\mathcal{B} = -ae^{b/2}$, $\mathcal{C} = ce^{b/2}$, $\mathcal{D} = e^{b/2}$ and their inverse is, $a = -\mathcal{B}/\mathcal{D}$, $b = 2\ln\mathcal{D}$, $c = \mathcal{C}/\mathcal{D}$. In that last equation, one also understands $L_{-1}, L_0, L_1$ in their matrix form (abusing notation)

$$L_{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_0 = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

The automorphism group of the disk is isomorphic to a subgroup of $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{C})$. Indeed, $\mathrm{Aut}(\mathbb{D})$ is isomorphic to the projective special unitary group

$$\mathrm{PSU}(1,1) = \mathrm{SU}(1,1)/\{\pm I\} = \{M\{\pm I\} \,|\, M \in \mathrm{SU}(1,1)\},$$

where $\mathrm{SU}(1,1)$ is the special unitary group, containing $2\times 2$ complex matrices $M$ with unit determinant satisfying (rather than unitary matrices such that $MM^\dagger = I$)

$$MJM^\dagger = J, \tag{7.42}$$

where $\dagger$ stands for Hermitian conjugation and

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

A disk automorphism can be written as [3]

$$f_{U,V}(z) = \frac{Uz+V}{\overline{V}z+\overline{U}}, \quad |U|^2 - |V|^2 = 1, \tag{7.43}$$

which is related to a matrix (equivalent to its negative counterpart) of $\mathrm{PSU}(1,1)$

$$\begin{pmatrix} U & V \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix}.$$

From a hyperbolic geometry perspective, these transformations are the orientation-preserving isometries of the Poincaré disk model. The matrix group acts on the homogenous coordinates $[z_1 : z_2]$ of the complex projective line such that

$$\begin{pmatrix} U & V \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Uz_1 + Vz_2 \\ \bar{V}z_1 + \bar{U}z_2 \end{pmatrix}.$$

3. Note that this parametrization for the disk automorphism radically simplifies the use of Matone's formula in our experience.

Since the homogeneous coordinates $[z_1 : z_2]$ are equivalent to a point $z = z_1/z_2$, then

$$[Uz_1 + Vz_2 : \bar{V}z_1 + \bar{U}z_2] \sim \frac{Uz_1 + Vz_2}{\bar{V}z_1 + \bar{U}z_2} = \frac{U\frac{z_1}{z_2} + V}{\bar{V}\frac{z_1}{z_2} + \bar{U}} = \frac{Uz + V}{\overline{V}z + \overline{U}} = f_{U,V}(z)$$

as expected. That being said, Matone's formula for $\mathrm{PSU}(1,1)$ is

$$\exp(aL_{-1})\exp(bL_0)\exp(cL_1) = \exp\left\{\nu\left[VL_{-1} + (U-\bar{U})L_0 - \bar{V}L_1\right]\right\} \text{ with } \nu = \frac{\ln(\nu_+/\nu_-)}{\nu_+ - \nu_-}, \tag{7.44}$$

where $\nu_\pm = s \pm \sqrt{s^2-1}$, $s = \frac{1}{2}(U + \bar{U})$ and $a = -V/\bar{U}$, $b = 2\ln\bar{U}$, $c = \bar{V}/\bar{U}$.

**Remark 7.4.** Note that Eq. (4.7) of Ref. [392] and the above equation differ by a sign, which seems to be a minor error in the original reference. ■

## 7.11 *Appendix : Details on the partial integration of the cross-ratio parts

Below, we provide some additional details about the construction of the partially integrable Kuramoto dynamics on a graph and the operator-theoretic derivation of the Watanabe-Strogatz transformation using Koopman's perspective [317, 318], Magnus expansion [65, 380], Matone's formula [392] and Watanabe-Strogatz theory itself [365, 388, 477, 619, 620].

First, by Lemma 7.1, the Kuramoto dynamics can be formulated as

$$\dot{z}_j = \sum_{k=1}^{N} A_{jk} z_k - \left(\sum_{k=1}^{N} \bar{A}_{jk}\bar{z}_k\right) z_j^2 \quad \text{with} \quad A = \frac{1}{2}\left(W \circ e^{-i\alpha} + i\,\mathrm{diag}(\boldsymbol{\omega})\right)$$

and its Koopman generator is thus

$$\mathcal{K} = \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\left(A_{jk}z_k - \bar{A}_{jk}\bar{z}_k z_j^2\right)\frac{\partial}{\partial z_j} = \boldsymbol{p}^\top \boldsymbol{L}_{-1} - \bar{\boldsymbol{p}}^\top \boldsymbol{L}_1\,.$$

Consider the partition $P = \{\mathcal{M}_1, ..., \mathcal{M}_m, \mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c, \mathcal{P}\}$ for the $N$ vertices of a graph $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ with $\mathcal{V} = \{1, ..., N\}$ and a (complex) weight matrix $A$, where $\mathcal{P}$ is a set of $p$ vertices that are not part of a conserved motif while the parts $\mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c$ admit conserved cross-ratios and the parts $\mathcal{M}_1, ..., \mathcal{M}_m$ admit monomial eigenfunctions. The number of vertices in $\mathcal{C}_\gamma$ is $n_\gamma = \#\mathcal{C}_\gamma \geq 4$ for all $\gamma \in \{1, ..., c\}$. In such a way, the system is divided into a non-integrable part $\mathcal{P}$ and a partially integrable part $\mathcal{P}_\mathrm{I} = \mathcal{M}_1 \cup ... \cup \mathcal{M}_m \cup \mathcal{C}_1 \cup ... \cup \mathcal{C}_c$. Let us define $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \cup ... \cup \mathcal{M}_m$ and $\mathcal{C} = \mathcal{C}_1 \cup ... \cup \mathcal{C}_c$. We will denote $s$ the surjection that maps a vertex with index $j \in \mathcal{C}$ to the index $\gamma = s(j)$ of its related part $\mathcal{C}_\gamma$. From the latter partition, let's define the coarser partitions of the set $\mathcal{V}$, $\mathcal{Q}_\gamma = \{\mathcal{C}_\gamma, Q_\gamma\}$ with $Q_\gamma = \mathcal{V} \setminus \mathcal{C}_\gamma$ and $P' = \{\mathcal{M}, \mathcal{C}, \mathcal{P}\}$.

Each partially integrable part $\mathcal{C}_1, ..., \mathcal{C}_c$ satisfies the three conditions 2.1-2.3. First, using $P'$, we split the Koopman generator such as

$$\mathcal{K} = \sum_{\tau=1}^{m} \mathcal{J}_\tau + \sum_{\gamma=1}^{c} \mathcal{K}_\gamma + \mathcal{K}_{\text{NI}} \tag{7.45}$$

where

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_\tau &= \sum_{\tau=1}^{m} \sum_{j \in \mathcal{M}_\tau} \left( i\omega_j z_j + \frac{1}{2\mu_{\tau j}} \sum_{k \in \mathcal{M}_\tau} S_{jk} (z_k e^{-i\kappa_{jk}} - \bar{z}_k z_j^2 e^{i\kappa_{jk}}) \right) \frac{\partial}{\partial z_j} \\
\mathcal{K}_\gamma &= \sum_{j \in \mathcal{C}_\gamma} \sum_{k \in \mathcal{V}} \left( A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2 \right) \frac{\partial}{\partial z_j} \\
\mathcal{K}_{\text{NI}} &= \sum_{j \in \mathcal{P}} \sum_{k \in \mathcal{V}} \left( A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2 \right) \frac{\partial}{\partial z_j} .
\end{aligned}$$

**Explicit application of the conditions to admit conserved cross-ratios**

We can work only with $\mathcal{K}_\gamma$ for now. Using the partition $\mathcal{Q}_\gamma$ for the sum over $k$ yields

$$\mathcal{K}_\gamma = \sum_{j \in \mathcal{C}_\gamma} \left( \sum_{k \in \mathcal{C}_\gamma} \left( A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2 \right) + \sum_{k \in Q_\gamma} \left( A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2 \right) \right) \frac{\partial}{\partial z_j} .$$

By condition 2.1, $A_{jk} = A_{s(j)k} =: \mathcal{A}_{\gamma k}$ for all $j \in \mathcal{C}_\gamma$ and $k \in Q_\gamma$, where only the elements in the $\gamma$-th row and all columns $k \in Q_\gamma$ of the $m \times N$ matrix $\mathcal{A}$ are filled for all $\gamma$, leaving the rest of the elements undefined for now. This leads to

$$\mathcal{K}_\gamma = \sum_{j \in \mathcal{C}_\gamma} \left( \sum_{k \in \mathcal{C}_\gamma} \left( A_{jk} z_k - \bar{A}_{jk} \bar{z}_k z_j^2 \right) + \sum_{k \in Q_\gamma} \left( \mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k} \bar{z}_k z_j^2 \right) \right) \frac{\partial}{\partial z_j} .$$

Similarly, condition 2.2 gives $A_{jk} =: \mathcal{A}_{\gamma k}$ for all $k \in \mathcal{C}_\gamma \setminus \{j\}$, which fills the elements in the $\gamma$-th row and column $k \in \mathcal{C}_\gamma \setminus \{j\}$ of $\mathcal{A}$ for all $\gamma$. The generator becomes

$$\mathcal{K}_\gamma = \sum_{j \in \mathcal{C}_\gamma} \left( (A_{jj} - \bar{A}_{jj}) z_j + \sum_{k \in \mathcal{C}_\gamma \setminus \{j\}} \left( \mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k} \bar{z}_k z_j^2 \right) + \sum_{k \in Q_\gamma} \left( \mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k} \bar{z}_k z_j^2 \right) \right) \frac{\partial}{\partial z_j} ,$$

and it can be simplified to

$$\mathcal{K}_\gamma = \sum_{j \in \mathcal{C}_\gamma} \left( i\omega_j z_j + \sum_{k \in \mathcal{V} \setminus \{j\}} \left( \mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k} \bar{z}_k z_j^2 \right) \right) \frac{\partial}{\partial z_j} .$$

Finally, condition 2.3 is equivalent to

$$\omega_j = \omega_{\ell_\gamma} + 2 \operatorname{Im}(\mathcal{A}_{\gamma j} - \mathcal{A}_{\gamma \ell_\gamma}) ,$$

where $\ell_\gamma \in \mathcal{C}_\gamma$ labels an arbitrary "reference oscillator" within $\mathcal{C}_\gamma$. Consequently,

$$A_{jj} = \frac{i\omega_j}{2} = \frac{i}{2}(\omega_{\ell_\gamma} + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma j} - \mathcal{A}_{\gamma \ell_\gamma}))$$

for some $\mathcal{A}_{\gamma j} \in \mathbb{C}$ (but only its imaginary part contributes), thus completely fixing $\mathcal{A}$. Applying the condition for any $j \in \mathcal{C}_\gamma$ leads to

$$\mathcal{K}_\gamma = \sum_{j\in\mathcal{C}_\gamma} \left( i(\omega_{\ell_\gamma} + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma j} - \mathcal{A}_{\gamma \ell_\gamma}))z_j + \sum_{k\in\mathcal{V}\setminus\{j\}} \left(\mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k}\bar{z}_k z_j^2\right) \right) \frac{\partial}{\partial z_j}\,.$$

Yet, $2i\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma j})z_j = \mathcal{A}_{\gamma j} z_j - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma j} z_j = \mathcal{A}_{\gamma j} z_j - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma j}\bar{z}_j z_j^2$ and therefore

$$\mathcal{K}_\gamma = \sum_{j\in\mathcal{C}_\gamma} \left( i(\omega_{\ell_\gamma} - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma \ell_\gamma}))z_j + \sum_{k\in\mathcal{V}} \left(\mathcal{A}_{\gamma k} z_k - \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k}\bar{z}_k z_j^2\right) \right) \frac{\partial}{\partial z_j}\,.$$

This finally leads to the more elegant form

$$\mathcal{K}_\gamma = \rho_\gamma(z) L_{-1}^\gamma + i\Omega_\gamma L_0^\gamma - \overline{\rho_\gamma(z)} L_1^\gamma \tag{7.46}$$

with

$$\Omega_\gamma = \omega_{\ell_\gamma} - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{\gamma\ell_\gamma})\,, \qquad \rho_\gamma(z) = \sum_{k=1}^N \mathcal{A}_{\gamma k} z_k\,, \qquad L_n^\gamma = \sum_{j\in\mathcal{C}_\gamma} z_j^{n+1} \frac{\partial}{\partial z_j}\,.$$

Note that under this form, we observe that $\Omega_\gamma$ acts as a new effective natural frequency for the oscillators in $\mathcal{C}_\gamma$ that depends on the original natural frequencies, the phase lags and the weight matrix. One can now clearly notice that the cross-ratios related to each partially integrable parts are conserved quantities, since they are the joint invariants of $L_{-1}^\gamma, L_0^\gamma, L_1^\gamma$ for each $\gamma$. Also, $\mathcal{K}$ in Eq. (7.46) thus corresponds to the Koopman generator of

$$\dot{z}_j(t) = \sum_{k=1}^N \mathcal{A}_{\gamma k} z_k(t) + i\Omega_\gamma z_j(t) - \left( \sum_{k=1}^N \bar{\mathcal{A}}_{\gamma k}\bar{z}_k(t) \right) z_j(t)^2\,, \quad \forall j \in \mathcal{C}_\gamma\,, \tag{7.47}$$

with initial conditions

$$z_1(0) = \exp(i\vartheta_1)\,, \quad \ldots \quad , \quad z_N(0) = \exp(i\vartheta_N) \tag{7.48}$$

for $\vartheta_1, \ldots, \vartheta_N \in \mathbb{R}$.

**Transforming the partially integrable equations to Riccati equations**

For the given initial condition (7.48), one can proceed as in Lemma 7.2 and relate the solution $(z_j(t))_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ of Eq. (7.46) for each $\gamma \in \{1, \ldots, c\}$ to the solution of the Riccati equations

$$\dot{u}_j(t) = q_\gamma(t) + i\Omega_\gamma u_j(t) - \overline{q_\gamma(t)} u_j(t)^2\,, \quad u_j(0) = z_j(0)\,, \quad j \in \mathcal{C}_\gamma\,,$$

with

$$q_\gamma(t) = \rho_\gamma(z(t)) = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k(t)\,.$$

Note that there are *different* sets (since, generally, $q_\gamma(t) \neq q_\nu(t)$, $\gamma \neq \nu$) of *identical* Riccati equations (although the initial condition for each of these identical Riccati equations varies in general). The Koopman generator of the above Riccati equations, for all $\gamma$, is

$$\mathcal{R}_\gamma(t,z) = q_\gamma(t) L_{-1}^\gamma + i\Omega_\gamma L_0^\gamma - \overline{q_\gamma(t)} L_1^\gamma\,, \tag{7.49}$$

which is a tangent vector at $(t,z) := (t, z_1, ..., z_N)$ with null component $\frac{\partial}{\partial t}$ or more simply, a tangent vector at $(z_1, ..., z_N)$ with time-varying coefficients. For the sake of the next argument, let's write the Koopman generator $\mathcal{K}$ as $\mathcal{K}(z)$ (a tangent vector at $z_1, ..., z_N$) to be more precise. From a differential geometry perspective, the vector field $w_\mathcal{K}$ along the solution curve $(z_j(t))_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ is the same as the vector field $w_\mathcal{R}$ along this curve, meaning that locally $\mathcal{K}_\gamma(z(t)) = \mathcal{R}_\gamma(t, z(t))$. In the following, we will write $\mathcal{R}_\gamma(t)$ rather than $\mathcal{R}_\gamma(t, z(t))$ to simplify the notation while insisting on the time dependence.

### Observables dynamics

Under Koopman's perspective and a complexity science perspective (as argued in the paper, both are aligned), the natural approach is to consider the dynamics of the observables depending on the position of the oscillators, which include synchronization observables. The generator of the time evolution for these quantities is precisely the Koopman generator. In our case, the Koopman generators act on a space of functions on the $N$-torus, i.e.,

$$f : \mathbb{T}^N \to \mathbb{C}\,.$$

Among all the possible functions, we will be interested in the observables $\{g_\gamma\}_{\gamma=\{1,...,c\}}$ defined such that

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{T}^N & & \\ {\scriptstyle r_\gamma}\downarrow & \searrow^{g_\gamma} & \\ \mathbb{T}^{n_\gamma} & \xrightarrow[f_\gamma]{} & \mathbb{C} \end{array} \qquad\qquad \begin{array}{ccc} (z_j)_{j\in\mathcal{V}} & & \\ {\scriptstyle r_\gamma}\downarrow & \searrow^{g_\gamma} & \\ (z_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma} & \xmapsto[f_\gamma]{} & c \end{array}$$

The dynamics of these observables is

$$\dot{g}_\gamma(z(t)) = \mathcal{R}_\gamma(t) g_\gamma(z(t))\,, \qquad \forall\gamma \in \{1, ..., c\}\,, \tag{7.50}$$

which are *non-autonomous, linear, and uncoupled* differential equations. There at least two ways to approach such equations, but one turns out to be particularly useful.

**Magnus expansion**

To solve Eq. (7.50) for a given $\gamma$, we use the Magnus expansion [65,380]. Using Theorem 4 in Ref. [65] yields

$$g_\gamma(z(t)) = \exp\left(\mathcal{L}_\gamma(t)\right) g_\gamma(z(0)) \quad \text{with} \quad \mathcal{L}_\gamma(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{L}_n^\gamma(t)\,,$$

where the first three terms of the expansion are

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_1^\gamma(t) &= \int_0^t \mathcal{R}_\gamma(t_1)\ \mathrm{d}t_1 \\
\mathcal{L}_2^\gamma(t) &= \frac{1}{2}\int_0^t \int_0^{t_1} [\mathcal{R}_\gamma(t_1), \mathcal{R}_\gamma(t_2)]\ \mathrm{d}t_2\ \mathrm{d}t_1 \\
\mathcal{L}_3^\gamma(t) &= \frac{1}{6}\int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} ([\mathcal{R}_\gamma(t_1), [\mathcal{R}_\gamma(t_2), \mathcal{R}_\gamma(t_3)]] + [\mathcal{R}_\gamma(t_3), [\mathcal{R}_\gamma(t_2), \mathcal{R}_\gamma(t_1)]])\,\mathrm{d}t_3\ \mathrm{d}t_2\ \mathrm{d}t_1\,.
\end{aligned}$$

With Eq. (7.49), the first term becomes

$$\mathcal{L}_1^\gamma(t) = b_1^\gamma(t) L_{-1}^\gamma + 2i y_1^\gamma(t) L_0^\gamma - \overline{b_1^\gamma(t)} L_1^\gamma\,,$$

where

$$b_1^\gamma(t) = \int_0^t q_\gamma(t_1)\ \mathrm{d}t_1 \qquad \text{and} \qquad y_1^\gamma(t) = \frac{1}{2}\Omega_\gamma t\,.$$

Then, the second term is

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_2^\gamma(t) &= \frac{1}{2}\int_0^t \int_0^{t_1} [q_\gamma(t_1) L_{-1}^\gamma + i\Omega_\gamma L_0^\gamma - \overline{q_\gamma(t_1)} L_1^\gamma\ ,\ q_\gamma(t_2) L_{-1}^\gamma + i\Omega_\gamma L_0^\gamma - \overline{q_\gamma(t_2)} L_1^\gamma]\ \mathrm{d}t_2\ \mathrm{d}t_1 \\
&= \frac{1}{2}\int_0^t \int_0^{t_1} [i\Omega_\gamma (q_\gamma(t_1) - q_\gamma(t_2)) L_{-1} + 2(\overline{q_\gamma(t_1)} q_\gamma(t_2) - q_\gamma(t_1)\overline{q_\gamma(t_2)}) L_0^\gamma \\
&\qquad\qquad - (-i\Omega_\gamma(\overline{q_\gamma(t_1)} - \overline{q_\gamma(t_2)})) L_1^\gamma]\ \mathrm{d}t_2\ \mathrm{d}t_1 \\
&= b_2^\gamma(t) L_{-1}^\gamma + 2i y_2^\gamma(t) L_0^\gamma - \overline{b_2^\gamma(t)} L_1^\gamma
\end{aligned}$$

with

$$\begin{aligned}
b_2^\gamma(t) &= \frac{i\Omega_\gamma}{2}\int_0^t \int_0^{t_1} (q_\gamma(t_1) - q_\gamma(t_2))\ \mathrm{d}t_2\ \mathrm{d}t_1 \\
y_2^\gamma(t) &= \frac{1}{2i}\int_0^t \int_0^{t_1} (\overline{q_\gamma(t_1)} q_\gamma(t_2) - q_\gamma(t_1)\overline{q_\gamma(t_2)})\ \mathrm{d}t_2\ \mathrm{d}t_1\,.
\end{aligned}$$

Ultimately, since the integrals only act on the coefficients of the operators, we have

$$\mathcal{L}_n^\gamma(t) = b_n^\gamma(t) L_{-1}^\gamma + 2i y_n^\gamma(t) L_0^\gamma - \overline{b_n^\gamma(t)} L_1^\gamma\,,$$

which means that $\mathcal{L}(t)$ also has the expected form (see Ref. [65, p.162]) of an element of the Lie algebra of $\mathrm{Aut}(\mathbb{D})$ :

$$\mathcal{L}_\gamma(t) = B_\gamma(t)L_{-1} + 2iY_\gamma(t)L_0 - \overline{B_\gamma(t)}L_1 \quad \text{with} \quad B_\gamma(t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n^\gamma(t)\,,\ Y_\gamma(t) = \sum_{n=1}^{\infty} y_n^\gamma(t)\,,$$

and hence

$$g_\gamma(z(t)) = \exp(B_\gamma(t)L_{-1} + 2iY_\gamma(t)L_0 - \overline{B_\gamma(t)}L_1)g_\gamma(z(0))\,. \tag{7.51}$$

We now aim to find the explicit form of the exponential map of the operator $B_\gamma(t)L_{-1} + 2iY_\gamma(t)L_0 - \overline{B_\gamma(t)}L_1$.

**Matone's formula**

On this subject, a breakthrough was made by Matone in 2015 [392]. As presented in subsection 7.10, one can adapt his result for $\mathrm{PSU}(1,1)$ (Eq. (7.44)), and the exponential map in Eq. (7.51) is only a few steps away from a direct application of Matone's formula.

To use the formula in our context, first define

$$U_\gamma(t) := X_\gamma + \frac{iY_\gamma(t)}{\nu(X_\gamma)}\,, \quad V_\gamma(t) := \frac{B_\gamma(t)}{\nu(X_\gamma)} \quad \text{with} \quad \nu(x) := \frac{\ln\left(\frac{x+\sqrt{x^2-1}}{x-\sqrt{x^2-1}}\right)}{2\sqrt{x^2-1}} \in \mathbb{R}\,,$$

where $X_\gamma$ is constrained by the hyperbolic condition

$$|U_\gamma(t)|^2 - |V_\gamma(t)|^2 = 1 \tag{7.52}$$

for all $t$. The latter constraint has the more explicit form

$$X_\gamma^2 + \frac{Y_\gamma(t)^2}{\nu(X_\gamma)^2} - \frac{R_\gamma(t)^2}{\nu(X_\gamma)^2} - 1 = 0\,,$$

considering that $V_\gamma(t) = (R_\gamma(t)/\nu(X_\gamma))\exp(i\Phi_\gamma(t))$ where $R_\gamma(t) = |B_\gamma(t)|$. Since $\nu(X_\gamma) \neq 0$ for all $X_\gamma$ (see Fig. 7.3), the constraint becomes

$$(X_\gamma^2 - 1)\nu(X_\gamma)^2 + Y_\gamma(t)^2 - R_\gamma(t)^2 = 0\,.$$

A priori, it is not clear if there exists a $X_\gamma$ that satisfies this equation. However,

$$(X_\gamma^2 - 1)\nu(X_\gamma)^2 = (X_\gamma^2 - 1)\frac{\ln^2\left(\frac{X_\gamma+\sqrt{X_\gamma^2-1}}{X_\gamma-\sqrt{X_\gamma^2-1}}\right)}{4(X_\gamma^2-1)} = \frac{1}{4}\ln^2\left(\frac{X_\gamma + \sqrt{X_\gamma^2-1}}{X_\gamma - \sqrt{X_\gamma^2-1}}\right)$$

and therefore,

$$\frac{1}{4}\ln^2\left(\frac{X_\gamma + \sqrt{X_\gamma^2-1}}{X_\gamma - \sqrt{X_\gamma^2-1}}\right) + Y_\gamma(t)^2 - R_\gamma(t)^2 = 0\,.$$

The inversion of the last equation gives a much more elegant relation, i.e.,

$$X_\gamma = \pm\cosh(\sqrt{R_\gamma(t)^2 - Y_\gamma(t)^2}) = \begin{cases} \pm\cosh(\sqrt{|R_\gamma(t)^2 - Y_\gamma(t)^2|}) & \text{if } R_\gamma(t)^2 - Y_\gamma(t)^2 \geq 0 \\ \pm\cos(\sqrt{|R_\gamma(t)^2 - Y_\gamma(t)^2|}) & \text{if } R_\gamma(t)^2 - Y_\gamma(t)^2 < 0 \end{cases}.$$

This demonstrates that for all $R_\gamma(t), Y_\gamma(t)$, there exists at least one real value $X_\gamma$ that satisfies the constraints. Altogether, one gets

$$g_\gamma(z(t)) = \exp[\nu(X_\gamma)(V_\gamma(t)L_{-1} + (U_\gamma(t) - \overline{U_\gamma(t)})L_0 - \overline{V_\gamma(t)}L_1)]g_\gamma(z(0))$$

and from Matone's formula, the time evolution of $g_\gamma$ is given by the disk automorphism with time-varying coefficients

$$g_\gamma(z(t)) = K^{\text{Ric}}_{\phi_{0,t}}[f](z(0)) = \frac{U_\gamma(t)g_\gamma(z(0)) + V_\gamma(t)}{\overline{V_\gamma(t)}g_\gamma(z(0)) + \overline{U_\gamma(t)}},$$

where $K^{\text{Ric}}$ is the Koopman operator of the Riccati dynamics. In particular, the choice of observable $g_\gamma(z_1, ..., z_N) = z_j$ for $j \in \mathcal{C}_\gamma$ implies that the solution for the Riccati dynamics (the one related to the Kuramoto model at the coinciding initial condition) is

$$z_j(t) = \phi^{\text{Ric}}_{0,t}(z_j(0)) = \frac{U_\gamma(t)z_j(0) + V_\gamma(t)}{\overline{V_\gamma(t)}z_j(0) + \overline{U_\gamma(t)}}, \quad \forall j \in \mathcal{C}_\gamma, \tag{7.53}$$

where $U_\gamma(t), V_\gamma(t)$ satisfy Eq. (7.52) for all $t$ and $\gamma$.

There are infinitely many integrals to be solved to get $U_\gamma(t)$ and $V_\gamma(t)$, but the good news is that there is an alternative : interpreting them as a solution to a set of fewer differential equations than the original system. In such a way, instead of computing the integrals, one aims to find these reduced differential equations. This idea essentially goes back to the original theory presented by Watanabe and Strogatz in 1994 [620], but one can already observe that we did not (and will not) make any Ansatz whatsoever.

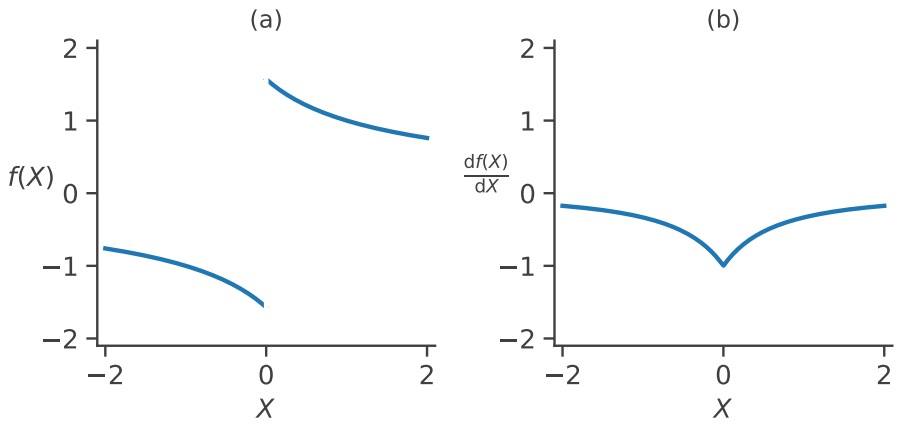



FIGURE 7.3 – (a) Principal branch ($k = 0$) of $\nu(X) = f(X)$ with respect to $X$ and (b) its derivative.

**Deducing Watanabe-Strogatz transformation**

Under this perspective, at $t = 0$, every solution $(U_\gamma(t), V_\gamma(t))$ of the yet-to-be-determined differential equations is constrained to start at $(U_\gamma(0), V_\gamma(0)) = (\pm 1, 0)$ *for any initial conditions* $(z_j(0))_{j\in\mathcal{C}_\gamma} =: (\xi_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma} \in \mathbb{T}^{n_\gamma}$ in order for Eq. (7.53) to be satisfied. It would however be more informative to set things in such a way that different initial conditions $(\xi_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ of the Kuramoto model [4] leading to different trajectories are associated to different initial conditions of the disk automorphism coefficients (a consideration in this regard is presented in Ref. [620, section 4.2.1]). To do so, one can express the initial conditions as

$$\xi_j = \frac{a_\gamma w_j + b_\gamma}{\overline{b_\gamma} w_j + \overline{a_\gamma}}\,, \quad |a_\gamma|^2 - |b_\gamma|^2 = 1\,,$$

where $w_j = e^{i\psi_j}$ ($\psi$ is not to be confused with others in the paper) for all $j \in \mathcal{C}_\gamma$, for all $\gamma \in \{1, ..., c\}$ [5]. Consequently,

$$z_j(t) = \frac{u_\gamma(t) w_j + v_\gamma(t)}{\overline{v_\gamma(t)} w_j + \overline{u_\gamma(t)}}\,, \quad \forall j \in \mathcal{C}_\gamma\,, \tag{7.54}$$

with

$$u_\gamma(t) = a_\gamma U_\gamma(t) + \bar{b}_\gamma V_\gamma(t) \quad \text{and} \quad v_\gamma(t) = b_\gamma U_\gamma(t) + \overline{a}_\gamma V_\gamma(t)\,,$$

where it is easy to demonstrate that $|u_\gamma(t)|^2 - |v_\gamma(t)|^2 = 1$.

Moreover, $u_\gamma(t)$ and $v_\gamma(t)$ are not bounded and since we aim to find differential equations, it is convenient to make the change of coordinates

$$u_\gamma(t) = \frac{\zeta_\gamma(t)^{1/2}}{\sqrt{1 - |Z_\gamma(t)|^2}}\,, \qquad v_\gamma(t) = \frac{\zeta_\gamma(t)^{-1/2} Z_\gamma(t)}{\sqrt{1 - |Z_\gamma(t)|^2}}\,,$$

for the disk and the unit circle, where $\zeta_\gamma(t) = e^{i\varphi_\gamma(t)}$ and $Z_\gamma(t) \in \mathbb{D}$. This change of coordinates applied to Eq. (7.54) leads to

$$z_j(t) = M_{Z_\gamma(t),\zeta_\gamma(t)}(w_j) = \frac{\zeta_\gamma(t) w_j + Z_\gamma(t)}{1 + \zeta_\gamma(t)\,\overline{Z_\gamma(t)} w_j} \quad \text{with} \quad \zeta_\gamma(t) = e^{i\varphi_\gamma(t)},\, |Z_\gamma(t)| < 1\,, j \in \mathcal{C}_\gamma \tag{7.55}$$

for all $t$ and we have therefore deduced the Watanabe-Strogatz transformation (the transformation that leads to the real, original form [620] is straightforward to obtain by using trigonometric identities [388, IV, A]).

4. For different initial conditions, it is the trajectories in different Riccati dynamics that are related to the trajectories of the Kuramoto model. Also, one must remember that the goal is to come back to the Kuramoto model at some point.

5. We let $w_j$ for $j \in \mathcal{P}$ undefined (they are not used).

From there, we observe that the introduction of $(w_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma} = (e^{i\psi_j})_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ gives the desired freedom, because Eq. (7.55) for all $j \in \mathcal{C}_\gamma$ gives a set of $n_\gamma$ constraints and there are $n_\gamma + 3$ real parameters :

$$(\psi_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma}\,, \quad |Z_\gamma(0)|\,, \quad \arg(Z_\gamma(0))\,, \quad \varphi_\gamma(0)\,.$$

To set the values of all these parameters, three other conditions can be added on the phases $(\psi_j)_{j\in\mathcal{C}_\gamma}$ in such a way that the initial conditions $z_j(0) = \xi_j$ for all $j \in \mathcal{C}_\gamma$ are associated to initial conditions $Z_\gamma(0), \varphi_\gamma(0)$. We refer the reader to the original work of Watanabe-Stroatz [620] and to the code in Ref. [582] for more details on how to fix the initial conditions. The rest of derivation is done in the main text. We shall now provide two concrete examples for the partial integration of the cross-ratio parts.

## 7.12 *Appendix : Partial integration of basic dynamics with conserved cross-ratios

To begin with, we address the case of one partially integrable part of 4 vertices and one non-integrable part of one vertex.

**Example 7.5.** Consider a graph of $N = 5$ vertices partitioned into $\{\mathcal{C}_1, \mathcal{P}\}$ with $\mathcal{C}_1 = \{1, 2, 3, 4\}$, $\mathcal{P} = \{5\}$, and with complex weight matrix

$$A = \begin{pmatrix} i\omega_1/2 & \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_3 & \mathcal{A}_4 & \mathcal{A}_5 \\ \mathcal{A}_1 & i\omega_2/2 & \mathcal{A}_3 & \mathcal{A}_4 & \mathcal{A}_5 \\ \mathcal{A}_1 & \mathcal{A}_2 & i\omega_3/2 & \mathcal{A}_4 & \mathcal{A}_5 \\ \mathcal{A}_1 & \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_3 & i\omega_4/2 & \mathcal{A}_5 \\ A_{51} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & i\omega/2 \end{pmatrix},$$

where $\omega_1$ is fixed to some real value (the first oscillator is the reference oscillator) and

$$\omega_j = \omega_1 + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_j - \mathcal{A}_1)\,, \quad j \in \{2, 3, 4\}\,.$$

By construction, the effective natural frequency of each oscillator in $\mathcal{C}_1$ is $\Omega = \omega_1 - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_1)$ while the natural frequency of the fifth oscillator in $\mathcal{P}$ is $\omega$. In such a case, $c = 1$ and $p = 1$, implying that the Kuramoto dynamics can be reduced to $n = 3c + p = 4$ real differential equations. These equations are, in complex form,

$$\begin{aligned} \dot{Z} &= i\Omega Z + F(Z, \zeta, z_5) - \overline{F(Z, \zeta, z_5)} Z^2\,, \\ \dot{\zeta} &= (i\Omega + F(Z, \zeta, z_5)\overline{Z} - \overline{F(Z, \zeta, z_5)}\, Z)\,\zeta\,, \\ \dot{z}_5 &= i\omega z_5 + G(Z, \zeta; \boldsymbol{w}) - \overline{G(Z, \zeta; \boldsymbol{w})} z_5^2\,, \end{aligned}$$

where we have used $\sum_{k\in\mathcal{P}}(A_{5k}z_k - \bar{A}_{5k}\overline{z_k}z_5^2) = (A_{55} - \bar{A}_{55})z_5 = i\omega z_5$ and

$$M_{Z,\zeta}(w_j) = \frac{\zeta w_j + Z}{1 + \zeta\,\overline{Z}w_j}\,,$$
$$G(Z,\zeta;\boldsymbol{w}) = \sum_{k=1}^{4} A_{5k}M_{Z,\zeta}(w_k)\,,$$
$$F(Z,\zeta,\boldsymbol{z}_{\mathcal{P}}) = \mathcal{A}_5 z_5 + \sum_{k=1}^{4}\mathcal{A}_k M_{Z,\zeta}(w_k)\,.$$

We also have $n_1 = 4$ and there is $q = N - n = n_1 - 3 = 1$ constant of motion in the system : there is only one functionally independent conserved cross-ratio, say

$$c_{1234}(z) = \frac{(z_3 - z_1)(z_4 - z_2)}{(z_3 - z_2)(z_4 - z_1)}\,.$$

■

Let's now present a more general example in terms of network structure.

**Example 7.6.** Consider a graph with $N = 13$ vertices partitioned into the parts $\mathcal{P} = \{11, 12, 13\}$ and $\mathcal{C}_1 = \{1, 2, 3, 4\}$, $\mathcal{C}_2 = \{5, 6, 7, 8, 9, 10\}$. Then, we can construct the general complex weight matrix $A$ as

$$\left(\begin{array}{cccccccccccc|c}
i\omega_1/2 & \mathcal{A}_{1,2} & \mathcal{A}_{1,3} & \mathcal{A}_{1,4} & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\mathcal{A}_{1,1} & i\omega_2/2 & \mathcal{A}_{1,3} & \mathcal{A}_{1,4} & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\mathcal{A}_{1,1} & \mathcal{A}_{1,2} & i\omega_3/2 & \mathcal{A}_{1,4} & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\mathcal{A}_{1,1} & \mathcal{A}_{1,2} & \mathcal{A}_{1,3} & i\omega_4/2 & \mathcal{A}_{1,5} & \mathcal{A}_{1,6} & \mathcal{A}_{1,7} & \mathcal{A}_{1,8} & \mathcal{A}_{1,9} & \mathcal{A}_{1,10} & \mathcal{A}_{1,11} & \mathcal{A}_{1,12} & \mathcal{A}_{1,13} \\
\hline
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & i\omega_5/2 & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & i\omega_6/2 & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & i\omega_7/2 & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & i\omega_8/2 & \mathcal{A}_{2,9} & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & i\omega_9/2 & \mathcal{A}_{2,10} & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\mathcal{A}_{2,1} & \mathcal{A}_{2,2} & \mathcal{A}_{2,3} & \mathcal{A}_{2,4} & \mathcal{A}_{2,5} & \mathcal{A}_{2,6} & \mathcal{A}_{2,7} & \mathcal{A}_{2,8} & \mathcal{A}_{2,9} & i\omega_{10}/2 & \mathcal{A}_{2,11} & \mathcal{A}_{2,12} & \mathcal{A}_{2,13} \\
\hline
\mathcal{A}_{11,1} & \mathcal{A}_{11,2} & \mathcal{A}_{11,3} & \mathcal{A}_{11,4} & \mathcal{A}_{11,5} & \mathcal{A}_{11,6} & \mathcal{A}_{11,7} & \mathcal{A}_{11,8} & \mathcal{A}_{11,9} & \mathcal{A}_{11,10} & i\omega_{11}/2 & \mathcal{A}_{11,12} & \mathcal{A}_{11,13} \\
\mathcal{A}_{12,1} & \mathcal{A}_{12,2} & \mathcal{A}_{12,3} & \mathcal{A}_{12,4} & \mathcal{A}_{12,5} & \mathcal{A}_{12,6} & \mathcal{A}_{12,7} & \mathcal{A}_{12,8} & \mathcal{A}_{12,9} & \mathcal{A}_{12,10} & \mathcal{A}_{12,11} & i\omega_{12}/2 & \mathcal{A}_{12,13} \\
\mathcal{A}_{13,1} & \mathcal{A}_{13,2} & \mathcal{A}_{13,3} & \mathcal{A}_{13,4} & \mathcal{A}_{13,5} & \mathcal{A}_{13,6} & \mathcal{A}_{13,7} & \mathcal{A}_{13,8} & \mathcal{A}_{13,9} & \mathcal{A}_{13,10} & \mathcal{A}_{13,11} & \mathcal{A}_{13,12} & i\omega_{13}/2
\end{array}\right),$$

where

$$\omega_j = \begin{cases} \text{arbitrary real number} & \text{if } j \in \{1, 5, 11, 12, 13\} \\ \omega_1 + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{1,j} - \mathcal{A}_{1,1}) & \text{if } j \in \{2, 3, 4\}, \\ \omega_5 + 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{2,j} - \mathcal{A}_{2,5}) & \text{if } j \in \{6, 7, 8, 9, 10\}. \end{cases}$$

The effective natural frequencies within each partially integrable part are $\Omega_1 = \omega_1 - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{1,1})$ and $\Omega_2 = \omega_5 - 2\,\mathrm{Im}(\mathcal{A}_{2,5})$. Therefore, $c = 2$, $p = 3$ meaning that the Kuramoto dynamics can

be reduced to $n = 3c + p = 9$ real differential equations. In complex form, they are

$$\begin{aligned}
\dot{Z}_1 &= F_1(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}}) + i\Omega_1 Z_1 - \overline{F_1(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}})} Z_1^2 \,, \\
\dot{\zeta}_1 &= (i\Omega_1 + F_1(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}}) \overline{Z}_1 - \overline{F_1(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}})}\, Z_1)\, \zeta_1 \,, \\
\dot{Z}_2 &= F_2(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}}) + i\Omega_2 Z_2 - \overline{F_2(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}})} Z_2^2 \,, \\
\dot{\zeta}_2 &= (i\Omega_2 + F_2(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}}) \overline{Z}_2 - \overline{F_2(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}})}\, Z_2)\, \zeta_2 \,, \\
\dot{z}_\ell &= \sum_{k \in \mathcal{P}} (A_{\ell k} z_k - \bar{A}_{\ell k} \overline{z_k} z_\ell^2) + G_\ell(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}; \boldsymbol{w}) - \overline{G_\ell(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}; \boldsymbol{w})} z_\ell^2 \,,
\end{aligned}$$

where $M_{Z_\gamma, \zeta_\gamma}(w_j) = \frac{\zeta_\gamma w_j + Z_\gamma}{1 + \zeta_\gamma \overline{Z}_\gamma w_j}$ and

$$\begin{aligned}
G_\ell(\boldsymbol{Z}(t), \boldsymbol{\zeta}(t); \boldsymbol{w}) &= \sum_{\delta=1}^{2} \sum_{k \in \mathcal{C}_\delta} A_{\ell k} M_{Z_\delta(t), \zeta_\delta(t)}(w_k) \,, \\
F_\gamma(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{z}_{\mathcal{P}}) &= \sum_{k=11}^{13} \mathcal{A}_{\gamma k} z_k + \sum_{\delta=1}^{2} \sum_{k \in \mathcal{C}_\delta} \mathcal{A}_{\gamma k} M_{Z_\delta, \zeta_\delta}(w_k) \,.
\end{aligned}$$

Since $n_1 = 4$ and $n_2 = 6$, there are $q = (n_1 - 3) + (n_2 - 3) = 4$ constants of motion. The following cross-ratios are functionally independent constants of motion :

$$c_{1,2,3,4}(z) = \frac{(z_3 - z_1)(z_4 - z_2)}{(z_3 - z_2)(z_4 - z_1)}$$

for the part $\mathcal{C}_1$ (i.e., $\mathcal{C}_1$ admits $n_1 - 3 = 1$ constant of motion) and

$$\begin{aligned}
c_{5,6,7,8}(z) &= \frac{(z_7 - z_5)(z_8 - z_6)}{(z_7 - z_6)(z_8 - z_5)} \,, \\
c_{6,7,8,9}(z) &= \frac{(z_8 - z_6)(z_9 - z_7)}{(z_8 - z_7)(z_9 - z_6)} \,, \\
c_{7,8,9,10}(z) &= \frac{(z_9 - z_7)(z_{10} - z_8)}{(z_9 - z_8)(z_{10} - z_7)}
\end{aligned}$$

for the part $\mathcal{C}_2$ (i.e., $\mathcal{C}_2$ admits $n_2 - 3 = 3$ constants of motion).

■

# Conclusion et perspectives

Une théorie effective féconde repose sur un choix d'observables adapté au phénomène d'intérêt. Dans un système complexe, choisir ces observables demande d'identifier les combinaisons de facteurs qui gouvernent principalement les phénomènes collectifs en question. Même sur le plan théorique, cette démarche implique généralement une perte d'information substantielle : elle requiert des hypothèses et des approximations fortes pour extraire des mécanismes responsables du comportement émergent. Ce jeu est subtil, parce que les observations expérimentales sur les systèmes complexes sont souvent partielles, bruitées ou indirectes. Il devient alors difficile d'appuyer les hypothèses sur des arguments empiriques robustes.

Heureusement, les avancées scientifiques et technologiques des dernières décennies ont mené à la création de grandes bases de données de réseaux, comprenant plusieurs connectomes, des réseaux écologiques, des réseaux sociaux, etc. Il en découle une opportunité précieuse de vérifier des hypothèses relatives aux dynamiques sur ces réseaux et d'identifier des conditions structurelles pour lesquelles leur réduction dimensionnelle est possible. Cette thèse s'articule autour de deux hypothèses identifiées dans la littérature et en examine la validité aux chapitres 4 et 6 par des approches spectrales.

D'une part, au chapitre 4, l'hypothèse de bas rang des systèmes complexes a été introduite et formulée comme suit : elle suppose que les valeurs singulières des matrices de poids des réseaux complexes décroissent rapidement, impliquant de bas rangs effectifs. L'hypothèse se manifeste et s'évalue à travers trois indicateurs : (1) la matrice moyenne d'un graphe aléatoire est décrite par une fonction d'une matrice de bas rang, (2) la décroissance des valeurs singulières est rapide et (3) les rangs effectifs sont faibles. Les deux derniers indicateurs sont utilisés pour montrer que c'est la norme pour les réseaux empiriques d'avoir une décroissance rapide de leurs valeurs singulières. Les résultats soulignent néanmoins les limites d'une hypothèse de bas rang mal appuyée sur ces observations. Il est ensuite montré comment exploiter ces décroissances rapides pour réduire la dimension de dynamiques non linéaires sur ces réseaux, parfois de manière exacte. Finalement, la réduction dimensionnelle a permis d'identifier des mécanismes mathématiques concrets menant à des interactions d'ordre supérieur dans les dynamiques de dimension réduite décrivant les systèmes complexes.

D'autre part, le chapitre 6 remet en question l'hypothèse, héritée du cadre classique de

Watanabe-Strogatz, selon laquelle l'intégration partielle du modèle de Kuramoto est limitée aux oscillateurs identiquement couplés. Des conditions structurelles sur les réseaux d'oscillateurs de Kuramoto permettant d'intégrer partiellement la dynamique y sont alors recherchées. Pour ce faire, la théorie de Koopman est adoptée comme un langage unificateur à l'intersection des systèmes dynamiques, de la théorie spectrale et des systèmes intégrables. Cette approche a mené à la formulation de quatre théorèmes portant sur différentes quantités conservées. Plus spécifiquement, des fonctions propres de Koopman et des symétries de Lie continues engendrant diverses familles de constantes du mouvement sont obtenues. Le lien entre ces constantes et des motifs d'interaction dans les réseaux est mis en évidence, de même que la présence de ces motifs au sein de réseaux empiriques. Le chapitre 7 montre ensuite comment utiliser ces motifs pour construire un réseau aléatoire d'oscillateurs de Kuramoto admettant des fonctions propres de Koopman et des quantités conservées. L'intégration partielle du modèle est enfin effectuée, ce qui révèle notamment une approche en termes d'opérateurs permettant de déduire la transformation de Watanabe-Strogatz.

Ainsi, des conditions structurelles permettant de réduire la dimension d'un système complexe ont été identifiées dans la thèse à l'aide d'approches spectrales, de la SVD à la théorie de Koopman. Ces conditions ont mené à l'obtention de dynamiques effectives décrivant l'émergence de phénomènes collectifs dans divers modèles de systèmes complexes. Cependant, une caractérisation rigoureuse de ces phénomènes collectifs à partir des approches spectrales proposées reste encore à approfondir.

Parmi les questions laissées ouvertes au chapitre 4, les mécanismes menant à l'émergence de réseaux empiriques avec des décroissances rapides de valeurs singulières sont à établir. En neurosciences, ce phénomène est ultimement relié au développement des connexions neuronales, dépendant de la génétique, de la maturation et de la plasticité synaptique. Il demeure toutefois à comprendre comment ces mécanismes biologiques produisent de telles décroissances des valeurs singulières pour les connectomes. Par ailleurs, durant le doctorat, la réduction dimensionnelle de dynamiques neuronales avec de la plasticité synaptique, de la forme $\dot{x} = f(x, W) \in \mathbb{R}^N$ et $\dot{W} = g(x, W) \in \mathbb{R}^{N\times N}$ où $W$ est la matrice de poids évoluant dans le temps, a pris une place importante dans le développement des idées de la thèse. En effet, un progrès méthodologique significatif (non publié) a été fait à ce niveau à l'aide des travaux de la maîtrise [583], des Réfs. [346, 599] et du chapitre 4. Bien qu'une telle progression méthodologique présente un intérêt scientifique, ces méthodes générales de réduction ont été introduites sans objectif de modélisation ancré dans un phénomène collectif observé expérimentalement ou défini théoriquement. Or, puisque différents phénomènes émergents possèdent leurs caractéristiques propres, il serait souhaitable de préciser d'abord un tel objectif, puis d'établir une méthode de réduction dimensionnelle spécifiquement adaptée pour caractériser le phénomène donné. Les résultats de la thèse trouveraient alors des applications plus directes en neurosciences et en intelligence artificielle, deux domaines confrontés à la grande quantité de données et au

nombre élevé de paramètres impliqués dans les modèles.

Au chapitre 6, une étude des symétries adjointes [17,18] et de leur lien potentiel avec les quantités conservées dans le modèle de Kuramoto mériterait d'être approfondie. Il reste également à développer l'intégration partielle du modèle de Kuramoto lorsque coexistent des monômes conservés, des ratios de Vandermonde, des birapports et des constantes du mouvement générées par des symétries. La dynamique partiellement intégrée qui en découle permettrait aussi de mieux caractériser les régimes de synchronisation et pourrait même révéler de nouveaux comportements oscillatoires. De plus, la recherche de nouvelles conditions sous lesquelles apparaissent d'autres fonctions propres de Koopman, constantes du mouvement et symétries de Lie (tant continues que discrètes) est encore largement ouverte pour le modèle de Kuramoto et, plus généralement, les dynamiques sur les réseaux. Comme établi au chapitre 4, il n'est pas attendu qu'une réduction dimensionnelle exacte de ces dynamiques soit possible pour des réseaux empiriques, mais une réduction approximative est tout à fait plausible. Ainsi, il serait pertinent d'établir dans quelle mesure les motifs admettant des fonctions propres, incluant les quantités conservées, persistent sous des perturbations structurelles et donnent lieu à des fonctions propres approximatives.

Enfin, les résultats de la thèse plaident en faveur d'un traitement plus approfondi de la théorie de Koopman appliquée aux systèmes complexes. Comme mentionné au chapitre 6, l'une des raisons principales est que la théorie de Koopman est naturellement orientée vers la recherche d'observables, essentielle à l'étude des systèmes complexes. Cette perspective est le sujet d'un projet collaboratif en cours avec B. Claveau, A. Allard et P. Desrosiers, inspiré des chapitres 4 et 6. Ce projet offre une vision unifiée de ces chapitres où les méthodes de bas rang et la théorie de Koopman jouent toutes deux un rôle central. Il en résulte une approche spectrale des dynamiques sur les réseaux qui prend la forme d'un problème spectral inverse : en imposant l'existence de fonctions propres de Koopman spécifiques, des classes bien connues de dynamiques non linéaires sur les réseaux, dont ceux de bas rang, émergent.

Les résultats de la thèse appuient ainsi l'idée qu'en combinant des outils théoriques avancés, des données expérimentales de qualité et la connaissance des experts pour un système donné, il est possible d'identifier des observables qui caractérisent avec suffisamment de précision l'émergence de phénomènes collectifs dans les systèmes complexes.

# Annexes

# Annexe A

# Complément d'algèbre linéaire et d'analyse fonctionnelle

## A.1 Inégalités sur le rang

L'inégalité la plus simple sur le rang est probablement celle qui indique que le rang d'une matrice $A$ de taille $m \times n$ est plus petit ou égal à sa plus petite dimension, c'est-à-dire que $\text{rang}(A) \leq \min(m, n)$. Une autre inégalité moins évidente est celle de Sylvester : si $B$ est une matrice de dimension $n \times p$, alors $\text{rang}(A) + \text{rang}(B) - n \leq \text{rang}(AB)$. Le rang d'un produit de matrices se borne aussi supérieurement.

**Lemme A.1.** *Soient $A$ et $B$, deux matrices de dimension $(m, n)$ et $(n, p)$, respectivement. Alors,*

$$\text{rang}(AB) \leq \min\{\text{rang}(A), \text{rang}(B)\}\,.$$

*Démonstration.* D'une part, si $w = (AB)x \in \text{image}(AB)$, alors $w = A(Bx) := Au \in \text{image}(A)$. Ainsi, tout vecteur $w$ de $\text{image}(AB)$ est dans $\text{image}(A)$ : $\text{image}(AB) \subseteq \text{image}(A)$. On en conclut que $\dim(\text{image}(AB)) \leq \dim(\text{image}(A))$, soit $\text{rang}(AB) \leq \text{rang}(A)$.

D'autre part, si $w = (B^\top A^\top)x \in \text{image}(B^\top A^\top)$, alors $w = B^\top(A^\top x) := B^\top v \in \text{image}(B^\top)$, $\text{image}(B^\top A^\top) \subseteq \text{image}(B^\top)$, $\dim(\text{image}(B^\top A^\top)) \leq \dim(\text{image}(B^\top))$ et $\text{rang}(B^\top A^\top) \leq \text{rang}(B^\top)$. Puisque pour une matrice $X$ quelconque, $\text{rang}(X^\top) = \text{rang}(X)$, alors $\text{rang}(AB) \leq \text{rang}(B)$. Il s'ensuit directement que $\text{rang}(AB) \leq \min\{\text{rang}(A), \text{rang}(B)\}$. □

Pour des matrices $A$ et $B$ de même taille, le rang satisfait aussi $\text{rang}(A + B) \leq \text{rang}(A) + \text{rang}(B)$ et $\text{rang}(A \circ B) \leq \text{rang}(A)\,\text{rang}(B)$. Cette dernière inégalité est utile au chapitre 4 pour déterminer le rang des matrices moyennes de graphes aléatoires.

## A.2 Théorème de Gershgorin et ses conséquences

Les valeurs propres d'une matrice sont confinées à une certaine région du plan complexe et le théorème de Gershgorin fournit une estimation de cette région basée sur des disques.

**Théorème A.2** (Gershgorin, 1931)**.** *Soit une matrice complexe $A = (A_{ij})_{i,j=1}^{N}$, les disques*

$$D_i = \Big\{ z \in \mathbb{C} \;\Big|\; |z - A_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |A_{ij}| \Big\}, \qquad i \in \{1, \ldots, N\},$$

*et leur union*

$$D = D_1 \cup \cdots \cup D_N \,.$$

*Alors, chaque valeur propre $\lambda$ de $A$ appartient à $D$, c'est-à-dire,*

$$\operatorname{spec}(A) \subseteq D. \tag{A.1}$$

*Démonstration.* Sans perte de généralité, on considère un vecteur propre $v$ de $A$ choisi tel que l'élément $v_i$ égal 1 et $|v_j| \leq 1$ pour tout $j \in \{1, ..., N\} \setminus \{i\}$. Pour tout $i$, l'équation aux valeurs propres nous permet d'écrire

$$\sum_{j=1}^{N} A_{ij} v_j = \lambda v_i = \lambda \,.$$

En séparant $A_{ii}v_i = A_{ii}$ de la somme, en réarrangeant et en prenant la valeur absolue de chaque côté, nous avons

$$|\lambda - A_{ii}| = \left| \sum_{j \neq i} A_{ij} v_j \right| .$$

L'inégalité du triangle implique que

$$|\lambda - A_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |A_{ij}| \, |v_j| \leq \sum_{j \neq i} |A_{ij}| \,,$$

où nous avons utilisé $|A_{ij}v_j| = |A_{ij}| \, |v_j|$ et $|v_j| \leq 1$ pour tout $i, j$. Ainsi, chaque valeur propre $\lambda$ de $A$ appartient à au moins un disque $D_i$ et par extension, à l'union des disques $D$. Par conséquent, $\operatorname{spec}(A) \subseteq D$. □

Les disques $D_i$ sont nommés les disques de Gershgorin. Il est possible de raffiner la région où se situent les valeurs propres de $A$ en utilisant la matrice transposée $A^\top$.

**Corollaire A.3.** *Soit une matrice complexe $A = (A_{ij})_{i,j=1}^{N}$, les disques*

$$\tilde{D}_i = \Big\{ z \in \mathbb{C} \;\Big|\; |z - A_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |A_{ji}| \Big\}, \qquad i \in \{1, \ldots, N\},$$

*et leur union $\tilde{D} = \tilde{D}_1 \cup \cdots \cup \tilde{D}_n$. Alors,* $\operatorname{spec}(A) \subseteq D$ *et* $\operatorname{spec}(A) \subseteq D \cap \tilde{D}$.

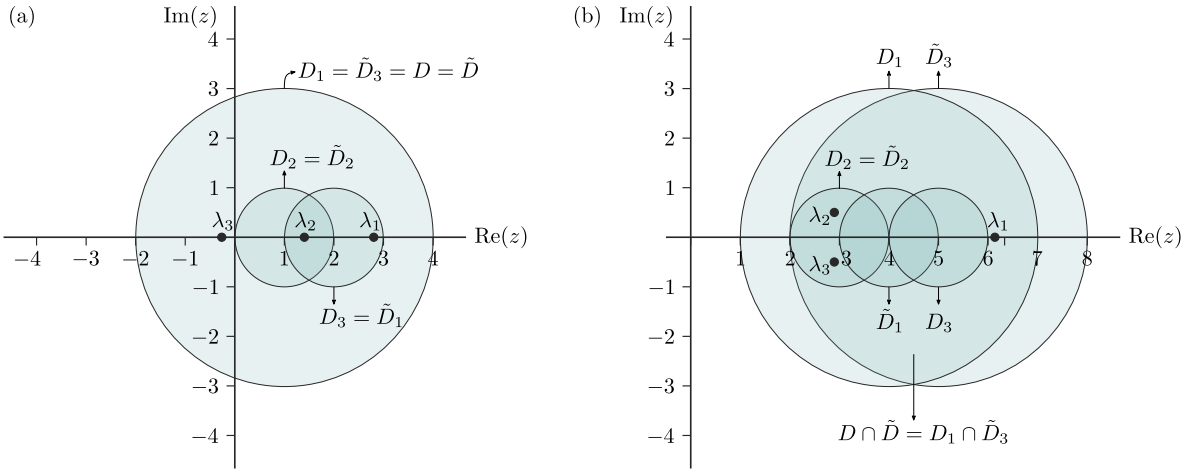



FIGURE A.1 – Illustration du théorème de Gershgorin pour la matrice $A$ en (a) et la matrice $B$ en (b).

*Démonstration.* Par le théorème de Gershgorin, $\text{spec}(A^\top) \subseteq \tilde{D}$. De plus, $A$ et $A^\top$ partage le même polynôme caractéristique, $\det(A^\top - \lambda I) = \det((A - \lambda I)^\top) = \det(A - \lambda I)$, de sorte que $\text{spec}(A^\top) = \text{spec}(A) \subseteq \tilde{D}$. De nouveau par le théorème de Gershgorin, $\text{spec}(A) \subseteq D$. On en conclut que $\text{spec}(A) \subseteq D \cap \tilde{D}$. □

Illustrons les résultats ci-dessus avec l'exemple suivant.

**Exemple A.4.** Soient les matrices

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 5 \end{pmatrix}.$$

Pour mieux comprendre le théorème de Gershgorin, une illustration est particulièrement efficace. Celui-ci est représenté pour les matrices $A$ et $B$ à la figure A.1. Nous observons en (b) que le corollaire A.3 permet effectivement de raffiner la région dans laquelle les valeurs propres se retrouvent. ■

**Définition A.5.** Une matrice $A$ est dite à *diagonale strictement dominante* si, pour tout $i$,

$$|A_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} |A_{ij}| .$$

**Exemple A.6.** La matrice $B$ de l'exemple A.4 est une matrice diagonale dominante. ■

**Théorème A.7** (Lévy, 1881, Desplanques, 1886)**.** *Une matrice à diagonale strictement dominante est inversible.*

*Démonstration.* Une matrice inversible n'admet pas la valeur propre 0. Supposons qu'une matrice diagonale strictement dominante $A$ admette la valeur propre 0. D'une part, par le

théorème de Gershgorin, $\lambda = 0 \in D$. Il existe donc un disque $D_i$ qui contient la valeur propre nulle de sorte que $|A_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |A_{ij}|$. D'autre part, par définition d'une matrice strictement dominante, $|A_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} |A_{ij}|$, ce qui contredit l'inégalité précédente. Ainsi, la valeur propre nulle n'appartient pas à spec$(A)$ et $A$ est inversible. □

Le théorème de Gershgorin permet aussi de borner supérieurement le rayon spectral, noté $\rho(A) = \max\{|\lambda_1|, ..., |\lambda_N|\}$.

**Corollaire A.8.** *Le rayon spectral est borné supérieurement tel que*

$$\rho(A) \leq \max\left\{ R_1, \tilde{R}_1, \ldots, R_N, \tilde{R}_N \right\}, \tag{A.2}$$

*où*

$$R_i = \sum_{j=1}^{N} |A_{ij}|, \qquad \tilde{R}_i = \sum_{j=1}^{N} |A_{ji}|, \qquad i \in \{1, \ldots, N\}.$$

*Démonstration.* Soit $\lambda$ la valeur propre de plus grand module. Alors, $\rho(A) = |\lambda|$. En procédant comme pour le théorème de Gershgorin et son corollaire A.3, on trouve les inégalités

$$|\lambda| \leq \sum_{j=1}^{N} |A_{ij}| \quad \text{et} \quad |\lambda| \leq \sum_{j=1}^{N} |A_{ji}|,$$

qui peuvent être réécrites comme

$$\rho(A) \leq R_i \leq \max\{R_1, ..., R_N\} \quad \text{et} \quad \rho(A) \leq \tilde{R}_i \leq \max\{\tilde{R}_1, ..., \tilde{R}_N\}.$$

où l'on a ajouté les inégalités évidentes $R_i \leq \max\{R_1, ..., R_N\}$ et $\tilde{R}_i \leq \max\{\tilde{R}_1, ..., \tilde{R}_N\}$ pour tout $i$. L'inégalité de l'équation (A.2) en découle directement. □

## A.3 Résultats préliminaires au théorème de Hoffman

Le théorème de Hoffman A.13 donne une borne spectrale sur le nombre chromatique. Pour prouver le résultat, une conséquence du théorème suivant, soit une version finie du théorème I d'Aronszajn [32] [438, Exercice 10.10], est utilisée.

**Théorème A.9.** *Soit une matrice symétrique $M$ de taille $m \times m$, de valeurs propres $\lambda_1(M) \leq ... \leq \lambda_m(M)$ et telle que*

$$M = \begin{pmatrix} M_1 & \star \\ \star & M_2 \end{pmatrix}, \tag{A.3}$$

*où $M_1$ et $M_2$ sont des matrices symétriques de taille $m_1 \times m_1$ et $m_2 \times m_2$ avec $m_1 + m_2 = m$ et de valeurs propres $\lambda_1(M_1) \leq ... \leq \lambda_{m_1}(M_1)$ et $\lambda_1(M_2) \leq ... \leq \lambda_{m_2}(M_2)$, respectivement. Alors,*

$$\lambda_1(M) + \lambda_{i+j}(M) \leq \lambda_i(M_1) + \lambda_j(M_2) \quad \textit{avec} \quad \begin{matrix} 1 \leq i \leq m_1 \\ 1 \leq j \leq m_2 \end{matrix}. \tag{A.4}$$

Ce théorème, combiné avec celui de Cauchy, permet de borner supérieurement les valeurs propres extrêmes d'une matrice symétrique avec les valeurs propres maximales de ses sous-matrices diagonales.

**Corollaire A.10.** *Soit une matrice symétrique $M$ de taille $m \times m$, de valeurs propres $\lambda_1(M) \leq ... \leq \lambda_m(M)$ et telle que*

$$M = \begin{pmatrix} M_1 & & & \star \\ & M_2 & & \\ & & \ddots & \\ \star & & & M_k \end{pmatrix}, \tag{A.5}$$

*où $M_\ell$ est la $\ell$-ième matrice symétrique de taille $m_\ell \times m_\ell$ avec $\sum_{\ell=1}^{k} m_\ell = m$ et de valeurs propres $\lambda_1(M_\ell) \leq ... \leq \lambda_{m_\ell}(M_\ell)$. Alors,*

$$(k-1)\lambda_1(M) + \lambda_m(M) \leq \sum_{\ell=1}^{k} \lambda_{m_\ell}(M_\ell)\,. \tag{A.6}$$

*Démonstration.* Nous effectuons la preuve par induction. Pour $k = 1$, nous avons l'égalité triviale $\lambda_m(M) = \lambda_{m_1}(M_1)$. L'équation A.4 du théorème A.9 avec $i = m_1$, $j = m_2$ et $m_1+m_2 = m$ implique que

$$\lambda_1(M) + \lambda_m(M) \leq \lambda_{m_1}(M_1) + \lambda_{m_2}(M_2)\,,$$

ce qui démontre le cas $k = 2$. Si $k = 3$, un peu plus de travail est nécessaire. Dans ce cas, sachant que $m_1 + m_2 + m_3 = m$, le théorème A.9 donne

$$\lambda_1(M) + \lambda_1(M) + \lambda_{(m_1+m_2)+m_3}(M) \;\leq\; \lambda_1(M) + \lambda_{m_1+m_2}(M_{12}) + \lambda_{m_3}(M_3)\,,$$

où la matrice suivante a été introduite :

$$M_{12} = \begin{pmatrix} M_1 & \star \\ \star & M_2 \end{pmatrix}.$$

Soit $M'$ la matrice de taille $(m-1) \times (m-1)$ résultante de l'élimination de la dernière ligne et la dernière colonne de $M$. Du théorème de Cauchy [279, Théorème 4.3.17], il s'ensuit que $\lambda_1(M) \leq \lambda_1(M')$. En appliquant successivement le théorème de Cauchy jusqu'à l'élimination complète de la matrice $M_3$ dans $M$, nous avons $\lambda_1(M) \leq \lambda_1(M_{12})$. Par conséquent,

$$\begin{aligned} 2\lambda_1(M) + \lambda_m(M) \;&\leq\; \lambda_1(M) + \lambda_{m_1+m_2}(M_{12}) + \lambda_{m_3}(M_3) \\ &\leq\; \lambda_1(M_{12}) + \lambda_{m_1+m_2}(M_{12}) + \lambda_{m_3}(M_3) \\ &\leq\; \lambda_{m_1}(M_1) + \lambda_{m_2}(M_2) + \lambda_{m_3}(M_3)\,, \end{aligned}$$

où nous avons appliqué le théorème A.9 de nouveau pour obtenir la dernière inégalité. Supposons désormais que l'équation (A.6) est vraie pour $k = n$ et considérons $k = n + 1$. Or,

$$\begin{aligned} n\lambda_1(M) + \lambda_m(M) &= (n-1)\lambda_1(M) + \lambda_1(M) + \lambda_{(m_1+\ldots+m_n)+m_{n+1}}(M) \\ &\leq \ (n-1)\lambda_1(M) + \lambda_{m_1+\ldots+m_n}(M_{1\ldots n}) + \lambda_{m_{n+1}}(M_{n+1})\,, \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le théorème A.9 et

$$M_{1\ldots n} = \begin{pmatrix} M_1 & & & \star \\ & M_2 & & \\ & & \ddots & \\ \star & & & M_n \end{pmatrix}.$$

L'application successive du théorème de Cauchy jusqu'à l'élimination de la matrice $M_{n+1}$ dans $M$ implique que $\lambda_1(M) \leq \lambda_1(M_{1\ldots n})$. De cette dernière inégalité et de l'hypothèse inductive, il en résulte que l'inégalité (A.6) est vraie pour $k = n + 1$ :

$$n\lambda_1(M) + \lambda_m(M) \ \leq \ (n-1)\lambda_1(M_{1\ldots n}) + \lambda_{m_1+\ldots+m_n}(M_{1\ldots n}) + \lambda_{m_{n+1}}(M_{n+1}) \leq \ \sum_{\ell=1}^{n+1} \lambda_{m_\ell}(M_\ell),$$

ce qui complète la preuve par induction. □

Ensuite, nous montrons comment la coloration d'un graphe partitionne les sommets en des ensembles indépendants, c'est-à-dire des ensembles de sommets non connectés.

**Lemme A.11.** *Soit un graphe non dirigé connexe $\bar{\mathcal{G}} = (\mathcal{V}, \bar{\mathcal{E}})$, son nombre chromatique $c = chr(\bar{\mathcal{G}})$ et sa coloration non fractionnaire en $c$ couleurs telle que deux sommets adjacents n'ont pas la même couleur. Alors, l'ensemble ordonné*

$$\mathscr{B} = (B_1, ..., B_c)\,, \tag{A.7}$$

*où $B_i$ est le $i$-ème ensemble de sommets de même couleur forme une partition de l'ensemble des sommets $\mathcal{V}$. De plus, la partition des sommets $\mathscr{B}$ induit une partition chromatique $\mathscr{E}$ sur les arêtes définie telle que*

$$\mathscr{E} = (E_{\mu\nu} \,|\, 1 \leq \mu < \nu \leq c \quad et \quad E_{\mu\nu} \neq \varnothing)\,, \tag{A.8}$$

*où $E_{\mu\nu} = \{(i,j) \in \bar{\mathcal{E}} \,|\, i < j,\ i \in B_\mu,\ j \in B_\nu\}$ est un sous-ensemble d'arêtes de $\bar{\mathcal{E}}$.*

*Démonstration.* Par la définition de la coloration, un sommet ne peut pas appartenir simultanément à $B_i$ et à $B_j$ pour $j \neq i$. Les ensembles de sommets d'une même couleur sont alors deux à deux disjoints. De plus, par la définition du nombre chromatique, il y a un minimum de $c$ couleurs pour colorer le graphe de cette manière. Les $c$ ensembles $B_i$ de $\mathscr{B}$ doivent alors

contenir au moins un sommet et sont par conséquent non vides. Finalement, puisque chaque sommet appartient à un ensemble $B_i$, l'union des $B_i$ sur $i \in \{1, ..., c\}$ est égale à $\mathcal{V}$.

Montrons désormais que la partition des sommets $\mathscr{B}$ induit une partition des arêtes. Nous ordonnons d'abord les sommets de $\mathcal{V}$ selon la partition $\mathscr{B}$, c'est-à-dire en ordre de couleurs. Si $i, j \in B_\mu$ et $\mu \in \{1, ..., c\}$, alors les sommets $i, j$ ont la même couleur et $(i, j) \notin \bar{\mathcal{E}}$ par définition de la coloration. Il s'ensuit que les éléments $E_{\mu\mu}$ pour tout $\mu$ ne font pas partie de la partition. Puisque le graphe est connexe, un sommet d'une certaine couleur sera connecté à au moins un sommet d'une autre couleur. Pour la première couleur, il existe alors au moins un ensemble non vide $E_{1\nu}$ avec $\nu > 1$ faisant partie de $\mathscr{E}$. Le même argument s'applique de la deuxième à la $c$-ième couleur. La procédure donne ainsi un certain nombre d'ensembles non vides disjoints $E_{\mu\nu}$ avec $\mu < \nu$ qui contiendront, pris ensemble, toutes les arêtes et qui forment la partition chromatique (A.8). □

Finalement, le théorème de Cauchy permet de borner la valeur propre minimale d'un graphe avec au moins une arête.

**Lemme A.12.** *Soit un graphe $\bar{\mathcal{G}}$ de matrice d'adjacence $A$ et avec au moins une arête. Alors, la valeur propre minimale $\lambda_{\min}(A)$ est telle que*

$$\lambda_{\min}(A) \leq -1.$$

*Démonstration.* Puisque le graphe contient au minimum une arête, alors le graphe complet à deux sommets $K_2$ est un sous-graphe de $\bar{\mathcal{G}}$ de matrice d'adjacence $A$. La matrice d'adjacence de $K_2$ est notée

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et ses valeurs propres sont $\lambda_{\min}(A_2) = -1$ et $\lambda_{\max}(A_2) = 1$. Sans perte de généralité, en indiçant adéquatement les sommets, la matrice d'adjacence peut être arrangée telle que

$$A = \begin{pmatrix} A_2 & & \star \\ & \ddots & \\ \star & & \end{pmatrix}.$$

Par l'application successive du théorème de Cauchy, nous éliminons toutes les lignes et colonnes de $A$ jusqu'à ce qu'il reste seulement $A_2$, ce qui donne $\lambda_{\min}(A) \leq \lambda_{\min}(A_2) = -1$. □

## A.4 Bornes spectrales sur les différences de matrices

Dans cette sous-section, nous présentons deux théorèmes de Hoffman et Wielandt pour les matrices normales et la norme de Frobenius, puis la généralisation de ces théorèmes par Mirsky pour les matrices rectangulaires quelconques et une norme quelconque.

**Théorème A.13** (Hoffman, Wielandt, 1953 [269]). *Si $A$ et $B$ sont deux matrices normales de valeurs propres $\lambda_1(A), ..., \lambda_n(A)$ et $\lambda_1(B), ..., \lambda_n(B)$ respectivement, alors il existe un numérotage des valeurs propres tel que*

$$\|A - B\|_F^2 \geq \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i(A) - \lambda_i(B)|^2. \tag{A.9}$$

*Démonstration.* Voir l'article original ou le théorème 6.3.5 du livre de Horn [279]. Une autre formulation du théorème qui ressemble davantage au théorème de Eckart-Young est donnée à la Réf. [269]. □

Dans l'article [269], les auteurs présentent également un exemple qui illustre pourquoi le dernier théorème est invalide pour des matrices non normales. De plus, le théorème montre qu'il *existe* un ordre adéquat des valeurs propres, mais il n'est pas évident de choisir cet ordre. Lorsque $A$ est une matrice hermitienne, il est possible de le faire.

**Corollaire A.14** (Hoffman, Wielandt, 1953 [269]). *Si $A$ est une matrice hermitienne et $B$ est une matrice normale de valeurs propres $\lambda_1(A), ..., \lambda_n(A)$ et $\lambda_1(B), ..., \lambda_n(B)$ respectivement, alors l'arrangement (« optimal ») des valeurs propres*

$$\lambda_1(A) \geq ... \geq \lambda_n(A) \quad et \quad \mathrm{Re}(\lambda_1(B)) \geq ... \geq \mathrm{Re}(\lambda_n(B))$$

*permet de borner inférieurement la norme de Frobenius entre $A$ et $B$ comme à l'Éq. (A.9).*

*Démonstration.* Voir l'article original ou le corollaire 6.3.8 du livre de Horn [279]. □

C'est à partir de ces résultats que Mirsky amorce le travail de généralisation pour les normes unitairement invariantes.

**Lemme A.15** (p.57, Mirsky, 1960 [411]). *Si $A$ et $B$ sont deux matrices hermitiennes de valeurs propres $\lambda_1(A), ..., \lambda_n(A)$ et $\lambda_1(B), ..., \lambda_n(B)$ respectivement, alors l'arrangement des valeurs propres*

$$\lambda_1(A) \geq ... \geq \lambda_n(A) \quad et \quad \lambda_1(B) \geq ... \geq \lambda_n(B)$$

*permet de borner inférieurement n'importe quelle norme unitairement invariante entre $A$ et $B$, soit*

$$\|A - B\| \geq \|\,\mathrm{diag}(\lambda_1(A) - \lambda_1(B), ..., \lambda_n(A) - \lambda_n(B))\|. \tag{A.10}$$

Mirsky obtient également une version plus faible du corollaire A.14 pour toute norme unitairement invariante.

**Lemme A.16** (p.57, Mirsky, 1960 [411]). *Si $A$ et $B$ sont deux matrices normales de valeurs propres $\lambda_1(A), ..., \lambda_n(A)$ et $\lambda_1(B), ..., \lambda_n(B)$ respectivement, alors l'arrangement des valeurs propres*

$$\mathrm{Re}(\lambda_1(A)) \geq ... \geq \mathrm{Re}(\lambda_n(A)) \quad et \quad \mathrm{Re}(\lambda_1(B)) \geq ... \geq \mathrm{Re}(\lambda_n(B))$$

*permet de borner inférieurement n'importe quelle norme unitairement invariante entre $A$ et $B$, soit*

$$\|A - B\| \geq \|\,\mathrm{diag}(\mathrm{Re}(\lambda_1(A)) - \mathrm{Re}(\lambda_1(B)),\ ..., \mathrm{Re}(\lambda_n(A)) - \mathrm{Re}(\lambda_n(B)))\|. \tag{A.11}$$

En utilisant les valeurs singulières, Mirsky réussit à aller plus loin.

**Théorème A.17** (Théorème 5, Mirsky 1960 [411]). *Soit $\sigma_1(A) \geq ... \geq \sigma_n(A)$ et $\sigma_1(B) \geq ... \geq \sigma_n(B)$, les valeurs singulières des matrices rectangulaires et complexes $A$ et $B$. Alors,*

$$\|A - B\| \geq \|\,\mathrm{diag}(\sigma_1(A) - \sigma_1(B),\ ...\ , \sigma_n(A) - \sigma_n(B))\| \tag{A.12}$$

*où $\|\cdot\|$ est une norme unitairement invariante.*

Appliquer le théorème pour la norme de Frobenius et prendre le carré des deux côtés de l'inégalité (A.12) mène à l'inégalité

$$\|A - B\|_F^2 \geq \sum_{i=1}^{n} (\sigma_i(A) - \sigma_i(B))^2, \tag{A.13}$$

ce qui est l'équivalent à l'inégalité de Hoffman-Wielandt pour les valeurs singulières.

**Remarque A.18.** Dans l'article [233], Golub, Hoffman et Stewart montrent comment obtenir, à partir de la décomposition $QR$, la meilleure approximation de faible rang tout en spécifiant un ensemble de colonnes de la matrice qui restent fixes. ■

Pour plus d'informations, il est utile de consulter le livre de Bai et Silverstein pour des inégalités reliées à la SVD et leurs preuves [40, Sec. A.2.1], de même que les sections 7.4.9 à 7.4.12 du livre de Horn [279].

## A.5 Espace des observables et algèbre de Banach

Pour définir l'espace des observables au chapitre 3, plusieurs notions d'analyse fonctionnelle sont d'intérêt. Comme le texte principal ne touche que peu à ce domaine, nous présentons ici l'algèbre de Banach commutative en nous basant sur des lectures préliminaires sur le sujet [164, 427, 509, 654].

Une algèbre de Banach commutative est une algèbre associative et commutative sur $\mathbb{C}$ qui est aussi un espace de Banach. Explicitement, l'algèbre est telle que $(\mathscr{O}, \mathbb{C}, +, \cdot, *, \|\cdot\|)$ où $\mathscr{O}$ est

un ensemble de fonctions non vide, $+$ est l'addition de fonction, $\cdot$ est la multiplication par un scalaire dans $\mathbb{C}$ de sorte que $(\mathscr{O}, \mathbb{C}, +, \cdot)$ forme un espace vectoriel. L'opération $* : \mathscr{O} \times \mathscr{O} \to \mathscr{O}$ est la multiplication de fonction. Pour $f, g, h \in \mathscr{O}$ et $a, b \in \mathbb{C}$, l'algèbre satisfait les propriétés suivantes :

1. Commutativité : $f * g = g * f$
2. Associativité : $f * (g * h) = (f * g) * h$
3. Distributivité : $f * (g + h) = f * g + f * h$
4. Compatibilité avec les scalaires : $(a \cdot f) * (b \cdot g) = (ab) \cdot (f * g)$
5. Sous-multiplicativité de la norme : $\|f * g\| \leq \|f\| \cdot \|g\|$
6. Élément identité de norme 1 : $e * f = f$ où $\|e\| = 1$.

Puisque l'algèbre est un espace de Banach, elle est complète, au sens où toute séquence de Cauchy [1] possède une limite qui est aussi dans l'algèbre. Pour alléger la notation, le symbole $*$ de la multiplication de fonction et le symbole $\cdot$ de la multiplication par un scalaire sont omis dans la thèse. Nous écrirons $af^2g$ plutôt que $a \cdot f * f * g$.

Dans la thèse, rappelons qu'une caractérisation précise de l'espace des observables $\mathscr{O}$ est généralement omise et la présente section est une tentative de progression sur le sujet. Bien qu'il n'est pas invariant sous l'action de $\mathcal{K}$ (remarques 3.21 et 3.22), nous avons considéré $\mathscr{O}$ comme étant un sous-algèbre (de Banach) de $\mathscr{C}^1$ contenant les observables de la définition 3.12. Un exemple de norme dans ce cas est la norme $\mathscr{C}^1$ définie comme $\|f\|_{\mathscr{C}^1} = \|f\|_\infty + \|\nabla f\|_\infty$ où $\|\cdot\|_\infty$ est la norme sup. Notons que l'espace $\mathscr{C}^\infty$, dans sa topologie naturelle, ne peut être muni d'une structure d'algèbre de Banach, car cette topologie n'est pas définie par une norme unique, mais par une famille de semi-normes. Dans ce contexte, il est d'usage de recourir à une algèbre de Fréchet. Sa définition et son utilisation dépassent toutefois le cadre de la thèse, ce qui explique entre autres le choix des algèbres de Banach. Les algèbres de Banach ont aussi l'avantage d'être fréquemment utilisées en théorie spectrale et dans le théorème de Hille-Yosida.

Pour plus d'informations, nous recommandons les chapitres 10 et 11 du livre de Rudin [509] qui sont entièrement dévoués aux algèbres de Banach. L'annexe C du livre de Eisner [164] sur les algèbres de Banach et l'analyse fonctionnelle en général est aussi une bonne référence plus récente à consulter.

1. Dans notre cas, une séquence de fonctions qui se rapproche arbitrairement l'une de l'autre alors que la séquence progresse.

# Annexe B

# Topologie et compactification du plan complexe

Les chapitres 6 et 7 ont touché à des notions d'analyse complexe dans la recherche de symétries de Lie et le développement de méthodes pour effectuer l'intégration partielle de façon systématique. En particulier, les groupes d'automorphismes ont joué un rôle central au cours de la recherche et une révision de différents concepts de l'analyse complexe s'est avérée utile. Cette annexe est le résultat de cette révision et elle sert surtout à préparer à l'annexe C.

La topologie occupe une place fondamentale en analyse complexe, qui s'intéresse principalement aux fonctions holomorphes [section B.5]. En effet, pour définir la différentiabilité, les ouverts et les voisinages doivent être définis sur $\mathbb{C}$, ce qui se fait rigoureusement via la topologie.

## B.1 Concepts de base en topologie

Rappelons les notions élémentaires de topologie [78, 308, 422]. Ci-bas, nous utilisons « collection » comme synonyme d'« ensemble » pour éviter les formulations du type « ensemble d'ensembles ».

**Définition B.1.** Une *topologie* $\tau$ sur un ensemble $E$ est une collection d'ensembles de $E$ satisfaisant les axiomes suivants :

1. $\varnothing \in \tau$ et $E \in \tau$
2. l'union arbitraire (finie ou infinie) d'ensembles dans $\tau$ appartient à $\tau$ ;
3. l'intersection finie d'ensembles dans $\tau$ appartient à $\tau$.

Le doublet $(E, \tau)$ est un espace topologique.

Un concept crucial découlant de la définition d'une topologie est celui d'ouvert.

**Définition B.2.** Un *ouvert* ou un ensemble ouvert est un élément d'une topologie $\tau$ sur $E$.

Notons que cette définition simple est plus fondamentale que celle rencontrée en analyse où une métrique est définie. Elle permet non seulement de clarifier la notion d'ouvert, mais elle donne un accès intuitif et sans définition d'objet supplémentaire à plusieurs concepts, dont celui de voisinage.

**Définition B.3.** Soit un espace topologique $(E, \tau)$. Un *voisinage d'un sous-ensemble* $U$ de $E$ est un ouvert de $\tau$ contenant $U$.

L'appellation « voisinage d'un point $x \in E$ » veut donc dire un « voisinage de $U = \{x\}$ ». Bien qu'une topologie peut être construite d'emblée en spécifiant les ouverts un par un, ce n'est généralement pas une stratégie efficace pour définir une topologie. En effet, il est plus commode de définir une base d'un ensemble en premier lieu.

**Définition B.4.** Soit un ensemble $E$. Une *base* sur $E$ est une collection de sous-ensembles de $E$, $\mathcal{B} \subset \mathcal{P}(E)$, telle que

1. pour tout $x \in E$, il y a au moins un élément $B$ de la base qui contient $x$, c.-à-d. $\mathcal{B}$ recouvre $E$ ;
2. pour tout $x \in B_1 \cap B_2$ avec $B_1, B_2 \in \mathcal{B}$, il existe un élément $B_3 \in \mathcal{B}$ contenant $x$ tel que $B_3 \subset B_1 \cap B_2$.

Deux exemples simples de bases sont (1) une topologie elle-même et (2) la collection des ensembles $\{x\}$ pour tout $x \in E$. Nous verrons des exemples non triviaux très utiles plus tard. Conceptuellement, cette notion de base est analogue à la notion mieux connue de base d'un espace vectoriel dans le sens où tout élément de l'ensemble est représenté par un ou des éléments de sa base. En topologie, une base engendre naturellement une topologie sur un ensemble.

**Lemme B.5.** *Soit un ensemble $E$ et une base $\mathcal{B}$ sur $E$. La collection des unions arbitraires d'éléments de la base $\mathcal{B}$*

$$\mathcal{T}_{\mathcal{B}} = \left\{ \bigcup_{B \in \mathcal{C}} B \ \textit{pour tout} \ \mathcal{C} \subset \mathcal{B} \right\} \tag{B.1}$$

*est une topologie.*

*Démonstration.* Voir la Réf. [308]. □

**Définition B.6.** L'ensemble $\mathcal{T}_{\mathcal{B}}$ est la *topologie générée par* $\mathcal{B}$.

Les prochaines définitions seront utiles dans la suite de cette section.

**Définition B.7.** Soient deux espaces topologiques $(X, \alpha)$ et $(Y, \beta)$. Une fonction $f : X \to Y$ est dite *continue* si pour tout ouvert $V \in \beta$, la préimage $f^{-1}(V) = \{x \in X \,\big|\, f(x) \in V\}$ est un ouvert de $X$, c'est-à-dire $f^{-1}(V) \in \alpha$.

**Définition B.8.** Soient deux espaces topologiques $(X, \alpha)$ et $(Y, \beta)$. Une fonction $f : X \to Y$ est un *homéomorphisme* si (1) $f$ est une bijection ; (2) $f$ est continue ; (3) $f^{-1}$ est continue. Les espaces topologiques sont alors dits homéomorphes.

**Définition B.9.** Un espace topologique $(E, \tau)$ est *Hausdorff* $(T_2)$ si pour toute paire de points distincts $x$ et $y$ de $E$, il existe un voisinage $U$ de $x$ et un voisinage $V$ de $y$ qui sont disjoints.

**Définition B.10.** Un espace topologique $(E, \tau)$ est *connexe* si $E$ ne peut être écrit comme l'union de deux ouverts non vides disjoints.

**Définition B.11.** Un espace topologique $(E, \tau)$ est *compact* si pour toute collection $C$ d'ouverts de $E$ telle que

$$\bigcup_{U \in C} U = E \,, \tag{B.2}$$

il y a une sous-collection finie $C' \subset C$ telle que

$$\bigcup_{V \in C'} V = E \,. \tag{B.3}$$

**Définition B.12.** Un espace topologique $(E, \tau)$ est *localement compact* à $x \in E$ s'il existe un sous-espace compact $C$ de $E$ qui contient un voisinage de $x$. Si $(E, \tau)$ est localement compact pour tout $x \in E$, alors $(E, \tau)$ est localement compact.

## B.2 Caractérisation topologique du plan complexe

L'objet de cette sous-section est d'établir une topologie $\gamma$ du plan complexe de même que certaines propriétés de l'espace topologique $(\mathbb{C}, \gamma)$ qui en découlent. Pour ce faire, il est standard de munir $\mathbb{C}$ d'une métrique $d : \mathbb{C} \times \mathbb{C} \to \mathbb{R}, (u, v) \mapsto |u - v|$ telle que pour $z = x + iy$, $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$. Le doublet $(\mathbb{C}, d)$ forme un espace métrique pour lequel $d$ satisfait les axiomes suivant : non-négativité $(d(x, y) \geq 0)$, symétrie $(d(x, y) = d(y, x))$, séparation $(d(x, y) = 0 \iff x = y)$ et inégalité du triangle $(d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z))$. Il devient alors pratique de définir le disque ouvert de rayon $r \in (0, \infty) \subset \mathbb{R}$ (abrégé $r > 0$) centré à $z_0 \in \mathbb{C}$ comme

$$D_r(z_0) = \{z \in \mathbb{C} \,\big|\, |z - z_0| < r\} \,. \tag{B.4}$$

Nous noterons le disque unité centré à 0 comme $\mathbb{D} = D_1(0) = \{\, z \in \mathbb{C} \,\big|\, |z| < 1 \,\}$ et le disque fermé

$$\overline{D}_r(z_0) = \{z \in \mathbb{C} \,\big|\, |z - z_0| \leq r\} \,. \tag{B.5}$$

Par leur forme simple, les disques ouverts sont tout indiqués pour construire une topologie en vue de faire de l'analyse sur le plan complexe. Plus précisément, l'ensemble des disques ouverts de $\mathbb{C}$

$$\mathcal{D} = \{D_r(z) \,|\, z \in \mathbb{C} \text{ et } r > 0\}$$

forme une base qui génère une topologie importante sur $\mathbb{C}$. En effet, c'est un cas particulier de la proposition suivante.

**Proposition B.1.** *Soit un espace métrique $(E, d)$. Alors la collection*

$$\mathcal{B}_d = \{B_\varepsilon(x) \,|\, x \in E \text{ et } \varepsilon > 0\}, \quad \text{où} \quad B_\varepsilon(x) = \{y \in E \,|\, d(x, y) < \varepsilon\}, \tag{B.6}$$

*forme une base sur $E$.*

*Démonstration.* Voir la Réf. [308]. □

Le lemme B.5 donne donc explicitement une topologie générée par la base $\mathcal{B}_d$ des boules ouvertes.

**Définition B.13.** Soit l'espace métrique $(E, d)$. La *topologie métrique* sur $E$ est la topologie générée par la base $\mathcal{B}_d$.

De façon particulière à l'espace métrique $(\mathbb{C}, d)$ où $d : (u, v) \mapsto |u - v|$, la topologie métrique $\gamma$ sur $\mathbb{C}$ est la topologie générée par la base $\mathcal{D}$ des disques ouverts. On dit alors que l'espace est métrisable.

**Définition B.14.** Un espace topologique $(E, \tau)$ est *métrisable* s'il y a une métrique $d$ sur $E$ qui génère la topologie $\tau$.

Considérer $(\mathbb{C}, \gamma)$ comme un espace métrisable a l'avantage d'impliquer naturellement plusieurs propriétés topologiques très utiles.

**Lemme B.15.** *Tout espace métrisable est un espace de Hausdorff.*

*Démonstration.* Soit l'espace métrique $(X, d)$. De plus, soit $x, y \in X$ avec $x \neq y$ et les boules ouvertes $B_r(x)$, $B_r(y)$ de rayon $r = d(x, y)/2$. Considérons qu'il y a un point $z$ dans l'intersection $B_r(x) \cap B_r(y)$. D'abord, cela implique que $d(x, z) < r$, $d(z, y) < r$ de sorte que $d(x, z) + d(z, y) < 2r = d(x, y)$. Cependant, l'inégalité du triangle est telle que $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$ et il y alors contradiction. Les boules ouvertes $B_r(x)$ et $B_r(y)$ sont donc disjointes pour tout $x \neq y$ et un espace métrique est un espace de Hausdorff. □

Un espace de Hausdorff (ou $T_2$) est aussi un espace $T_1$ (topologie de Fréchet). En plus d'être $T_1$ et $T_2$, un espace métrisable est également $T_3$ et $T_4$ [308, Chap. 12, Proposition 5.1]. Par ailleurs, un espace métrisable est un espace à bases dénombrables de voisinages [308, Chap. 12, Prop. 5.2] et un espace à base dénombrable [308, Chap. 12, Prop. 5.3].

Montrons désormais que le plan complexe n'est pas compact. Pour ce faire, il est pratique d'utiliser le théorème suivant pour vérifier si un espace topologique est compact.

**Théorème B.16** (Heine-Borel)**.** *Un sous-ensemble $U$ d'un espace euclidien $\mathbb{R}^n$ est compact si et seulement s'il est fermé et borné.*

**Remarque B.17.** Le théorème n'est malheureusement pas valide pour tout espace métrique, mais des généralisations existent. Un espace métrique est compact si et seulement s'il est précompact et complet. ■

Par sous-ensemble borné d'un espace métrique, on entend qu'il existe un $r > 0$ tel que pour tout $x, y \in U \subset \mathbb{R}^n$, $d(x, y) < r$. Rappelons aussi qu'un espace topologique euclidien $(\mathbb{R}^n, \rho)$ est métrisable par la métrique euclidienne $e(x, y) = \|x - y\|$. Il est alors facile de démontrer qu'il y a une équivalence entre $\mathbb{C}$ et $\mathbb{R}^2$ sur le plan topologique comme démontré dans le lemme suivant.

**Lemme B.18.** *Les espaces topologiques $(\mathbb{C}, \gamma)$ et $(\mathbb{R}^2, \rho)$, métrisables par les métriques induites par le module et la distance euclidienne respectivement, sont homéomorphes.*

*Démonstration.* La fonction $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$, $(x, y) \mapsto x + iy$ admet la fonction inverse $f^{-1} : \mathbb{C} \to \mathbb{R}^2$, $x + iy \mapsto (x, y)$ et il est évident qu'elle est une bijection. Soit un disque ouvert $D_\varepsilon(z_0)$ de la base générant $\gamma$ où $z_0 = x_0 + iy_0 \in \mathbb{C}$ et $\varepsilon > 0$. Sa préimage sous $f$ est $f^{-1}(D_\varepsilon(z_0)) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \,|\, f(x, y) = x + iy \in D_\varepsilon(z_0)\}$. Définissons $\boldsymbol{x} = (x\ y)^\top$ et $\boldsymbol{x}_0 = (x_0\ y_0)^\top$. Alors, la condition $x + iy \in D_\varepsilon(z_0)$ implique que $|(x - x_0) + i(y - y_0)| < \varepsilon$, mais $|(x - x_0) + i(y - y_0)| = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|$. Par conséquent, $f^{-1}(D_\varepsilon(z_0)) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \,|\, \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\| < \varepsilon\} = B_\varepsilon(\boldsymbol{x}_0)$, soit un élément de la base de $\rho$. Ainsi, chaque élément de la base de $\gamma$ donne un élément de la base de $\rho$ et vice-versa. Il s'ensuit que $f$ et $f^{-1}$ sont continues, puisque les ouverts des topologies sont générés par les éléments des bases qui sont en complète correspondance. $(\mathbb{C}, \gamma)$ et $(\mathbb{R}^2, \rho)$ sont donc homéomorphes. □

Les espaces homéomorphes partagent leurs propriétés topologiques. Par le lemme précédent et le théorème de Heine-Borel, puisque $\mathbb{R}^2$ n'est pas borné, alors il n'est pas compact et $\mathbb{C}$ n'est donc pas compact. Cependant, $\mathbb{C}$ est localement compact. En effet, pour tout $z \in \mathbb{C}$, il y a un disque $\bar{D}_\varepsilon(z)$ fermé et borné. Par le théorème de Heine-Borel, ce disque est un sous-ensemble compact contenant le disque ouvert $D_\varepsilon(z)$ (un élément de la base de la topologie) pour tout $z \in \mathbb{C}$. Il est même possible de compactifier $\mathbb{C}$, ce que la projection stéréographique définie à la prochaine sous-section nous permettra de faire à la sous-section B.4.

## B.3 Projection stéréographique

Soit la sphère

$$S^2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \,|\, x^2 + y^2 + z^2 = 1\} \tag{B.7}$$

dont le point au pôle Nord est $N = (0, 0, 1)$. La sphère, étant un sous-ensemble de $\mathbb{R}^3$, hérite de la topologie induite par la topologie métrique $\tau$ de $\mathbb{R}^3$, soit $\tau_{S^2} = \{S^2 \cap U \,|\, U \in \tau\}$. La projection stéréographique est une fonction qui envoie les points d'une sphère privée d'un point vers un plan. En analyse complexe, on s'intéresse à la projection stéréographique de $S^2 \setminus \{N\}$ sur le plan complexe, identifié comme le plan équatorial (lemme B.18) illustré à la Fig. B.1(a). Le prochain résultat donne la forme spécifique de cette projection et son inverse.

**Lemme B.19.** *La projection stéréographique $s$ du pôle Nord de la sphère unité sur le plan complexe est telle que*

$$\begin{aligned} s : S^2 \setminus \{N\} &\to \mathbb{C} \\ (a, b, c) &\mapsto \frac{a + ib}{1 - c}. \end{aligned} \tag{B.8}$$

*et son inverse est*

$$\begin{aligned} s^{-1} : \quad \mathbb{C} \quad &\to \quad S^2 \setminus \{N\} \\ w \quad &\mapsto \left( \frac{2\,\mathrm{Re}(w)}{|w|^2 + 1}, \frac{2\,\mathrm{Im}(w)}{|w|^2 + 1}, \frac{|w|^2 - 1}{|w|^2 + 1} \right) \end{aligned} \tag{B.9}$$

*Démonstration.* D'une part, la Fig. B.1(b) illustre des triangles équivalents, c'est-à-dire que les rapports entre les côtés opposés et adjacents sont identiques ce qui implique

$$\frac{1}{|w|} = \frac{c}{|w| - \sqrt{a^2 + b^2}}, \tag{B.10}$$

où $|w| = \sqrt{u^2 + v^2}$. En prenant le carré et en réarrangeant, cette dernière relation se réécrit comme

$$u^2 + v^2 = \frac{a^2 + b^2}{(1 - c)^2}. \tag{B.11}$$

D'autre part, le même raisonnement avec les triangles de la Fig. B.1(c) donne

$$\frac{u}{v} = \frac{a}{b}. \tag{B.12}$$

En substituant la forme réarrangée $v = bu/a$ de cette dernière équation dans l'équation (B.11), il s'ensuit que

$$u = \frac{a}{1 - c} \quad \text{et} \quad v = \frac{b}{1 - c},$$

où l'équation pour $v$ est obtenue avec l'équation de $u$ substituée dans l'équation (B.12). Puisque $w = u + iv$, le résultat (B.8) est bien obtenu.

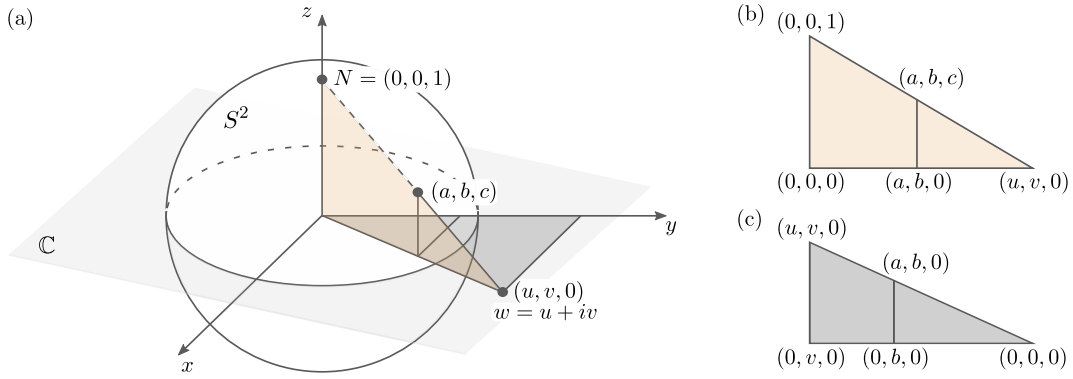



FIGURE B.1 – (a) Projection stéréographique de $S^2 \setminus \{N\}$ vers $\mathbb{C}$. (b) Triangles rectangles, mis en évidence en (a), utilisés pour obtenir la forme explicite de la projection stéréographique.

Pour la transformation inverse, trois équations sont à considérer, soit l'équation de la sphère unité et les équations (B.10-B.12). Celles-ci s'écrivent comme

$$a^2 + b^2 + c^2 = 1\,, \qquad b = \frac{v}{u}\,a\,, \qquad \sqrt{a^2+b^2} = (1-c)|w|\,.$$

De la première et la troisième équation, on déduit aisément que

$$c = \frac{|w|^2 - 1}{|w|^2 + 1} = \frac{u^2 + v^2 - 1}{u^2 + v^2 + 1}\,.$$

Cette équation peut être réinjectée dans la première pour donner

$$a^2 + b^2 = 1 - c^2 = 1 - \frac{(u^2+v^2-1)^2}{(u^2+v^2+1)^2}$$

et l'équation $b = va/u$ permet d'isoler complètement $a$ :

$$a^2 = \left(\frac{u^2}{u^2+v^2}\right)\left(1 - \frac{(u^2+v^2-1)^2}{(u^2+v^2+1)^2}\right)\,.$$

La simplification de cette dernière relation puis l'obtention de $b$ avec $b = va/u$ donnent le résultat attendu pour la projection inverse. □

Une projection stéréographique est topologiquement intéressante, c'est un homéomorphisme.

**Théorème B.20.** *La projection stéréographique $s$ depuis le pôle Nord de la sphère unité vers le plan complexe est un homéomorphisme. Autrement dit, la sphère unité privée du pôle Nord est homéomorphe à $\mathbb{C}$.*

*Démonstration.* Du lemme B.19, la fonction est bijective, ce que l'on s'assure comme suit :

$$s^{-1}(s(a,b,c)) = s^{-1}\left(\frac{a+ib}{1-c}\right) = \left(\frac{\frac{2a}{1-c}}{\frac{a^2+b^2}{(1-c)^2}+1}, \frac{\frac{2b}{1-c}}{\frac{a^2+b^2}{(1-c)^2}+1}, \frac{\frac{a^2+b^2}{(1-c)^2}}{\frac{a^2+b^2}{(1-c)^2}+1}\right) = (a,b,c)\,,$$

où $a^2+b^2+c^2=1$ a été utilisé. Similairement, avec $w=u+iv$, il se trouve que

$$s(s^{-1}(w))=s\left(\frac{2u}{u^2+v^2+1},\frac{2v}{u^2+v^2+1},\frac{u^2+v^2-1}{u^2+v^2+1}\right)=\frac{\frac{2u}{u^2+v^2+1}}{1-\frac{u^2+v^2-1}{u^2+v^2+1}}+i\,\frac{\frac{2v}{u^2+v^2+1}}{1-\frac{u^2+v^2-1}{u^2+v^2+1}}=w\,.$$

Pour démontrer la continuité de $s$ et $s^{-1}$, il est commode d'utiliser les règles de construction de fonctions continues. Définissons d'abord les fonctions

$$\begin{array}{rcl} f:S^2\setminus\{N\} & \to & \mathbb{R}^2 \\ (a,b,c) & \mapsto & \left(\dfrac{a}{1-c},\dfrac{b}{1-c}\right). \end{array}$$

et

$$\begin{array}{rcl} g: \quad \mathbb{R}^2 & \to & \mathbb{C} \\ (u,v) & \mapsto & u+iv\,. \end{array}$$

Ainsi, $s=g\circ f$ et par le Théorème 18.2(c) [422], si $f$ et $g$ sont continues, $s$ est continue. Le Théorème 18.4 [422] implique que $f$ est continue si et seulement si les fonctions

$$f_1(a,b,c)=\frac{a}{1-c}\quad\text{et}\qquad f_2(a,b,c)=\frac{b}{1-c}$$

sont continues. Considérant le numérateur $n_1(a,b,c)=a$ et le dénominateur $d_1(a,b,c)=1-c$ de $f_1$, $n_1$ et $d_1$ sont continues et puisque $c\neq 1$ (car $N$ est exclu de $S^2$), $f_1=n_1/d_1$ est continue par le Théorème 21.5 [422]. Le même raisonnement tient pour $f_2$ et $f$ est donc continue. De plus, du lemme B.18, $g$ est un homéomorphisme et est donc continue. Par conséquent, $s$ est continue. Un raisonnement similaire montre que $s^{-1}$ est continue, ce qui démontre que $s$ est un homéomorphisme. □

## B.4 Compactification du plan complexe et sphère de Riemann

Le fait que la sphère privée du pôle Nord soit homéomorphe au plan complexe mène naturellement à la question : quel serait l'équivalent topologique relié aux complexes de la sphère complète ? Par le théorème B.16 de Heine-Borel, la sphère $S^2$ est compacte puisqu'elle est fermée et bornée (pour tout $\boldsymbol{x}=(a,b,c)\in S^2$, $\|\boldsymbol{x}\|^2=a^2+b^2+c^2=1$). Pour passer de l'espace non compact $S^2\setminus\{N\}$ à l'espace compact $S^2$, un seul point $N$ a été ajouté. Considérant que la projection stéréographique $s$ est un homéomorphisme de $S^2\setminus\{N\}$ vers $\mathbb{C}$, cela suggère d'ajouter également un point $p\notin\mathbb{C}$ à $\mathbb{C}$ pour former $\hat{\mathbb{C}}=\mathbb{C}\cup\{p\}$ et une nouvelle bijection

$$\begin{array}{rcl} \hat{s}:S^2 & \to & \hat{\mathbb{C}} \\ (a,b,c) & \mapsto & \dfrac{a+ib}{1-c} \\ (0,0,1) & \mapsto & p \end{array} \tag{B.13}$$

dont la projection inverse $\hat{s}^{-1}$ est définie comme $s^{-1}$ avec $p \mapsto (0,0,1)$. Une observation attentive de la Fig. B.1(a) permet toutefois de donner une meilleure intuition au point $p$. En effet, lorsque $|w|$ tend vers l'infini, le point $(a,b,c)$ tend vers $N = (0,0,1)$. Il est donc naturel d'identifier $p$ comme l'infini et de le noter $\infty$. Cela mène aux notions d'extension en un point.

**Définition B.21.** Soit l'espace topologique $(E,\tau)$. Son *extension en un point (ou d'Alexandroff)* est l'espace topologique $(\hat{E},\hat{\tau})$ tel que

— l'ensemble $\hat{E}$ est l'union disjointe $E \cup \{\infty\}$ où $\infty$ est le point à l'infini ;

— la topologie $\hat{\tau}$ est constituée des ouverts

1. $U \in \tau$ de $E$ ;
2. $U = \{\infty\} \cup (E \setminus V)$ où $V$ est compact et fermé dans $E$.

On peut montrer que la topologie $\hat{\tau}$ est effectivement bien définie en vérifiant chaque propriété d'une topologie. Il se trouve également qu'une extension en un point est compacte.

**Lemme B.22.** *Pour tout espace topologique $(E,\tau)$, l'extension en un point $(\hat{E},\hat{\tau})$ est compacte.*

*Démonstration.* Soit la collection $C$ de sous-ensembles de $\hat{E}$ recouvrant $\hat{E}$. Soit $U_\infty \in C$, un ouvert contenant l'infini. Par construction (définition B.21), l'ouvert $U_\infty$ a la forme $\{\infty\} \cup (E \setminus V)$ où $V$ est compact et fermé dans $E$. Puisque $V \subset E$ et $\{U \in C\}$ recouvrent $\hat{E}$, alors $\{U \in C\}$ recouvre $V$. Mais puisque $V$ est compact, alors il existe un $C' \subset C$ tel que $\{W \in C'\}$ recouvre $V$. L'union de $U_\infty$ et des ensembles de $C'$ donne

$$U_\infty \cup \bigcup_{W \in C'} W = \{\infty\} \cup (E \setminus V) \cup V = \{\infty\} \cup E = \hat{E}\,,$$

de sorte que $\{U_\infty\} \cup \{W \in C'\}$ forme une sous-collection finie de $C$ recouvrant $\hat{E}$ et donc $(\hat{E},\hat{\tau})$ est compact. □

La définition de l'ensemble $\hat{\mathbb{C}}$ introduite précédemment devient alors plus claire.

**Définition B.23.** Le *plan complexe étendu* $\hat{\mathbb{C}}$ muni de la topologie $\hat{\gamma}$ (définition B.21) est l'extension en un point de $\mathbb{C}$ muni de la topologie métrique $\gamma$.

**Remarque B.24.** Lorsque $\mathbb{C}$ possède la structure d'espace vectoriel, les opérations d'addition et de multiplication sont bien définies. L'extension $\hat{\mathbb{C}}$ forme aussi un espace vectoriel en définissant adéquatement l'addition et la multiplication avec le point à l'infini. Les opérations arithmétiques sur $\hat{\mathbb{C}}$ sont comme celles de $\mathbb{C}$ et celles impliquant le point à l'infini sont

— $z + \infty = \infty$ pour tout $z \in \mathbb{C}$ ;

— $z \cdot \infty = \infty$ pour tout $z \in \hat{\mathbb{C}} \setminus \{0\}$ ;

— $z/\infty = 0$ pour tout $z \in \mathbb{C}$ ;

— $z/0 = \infty$ pour tout $z \in \hat{\mathbb{C}} \setminus \{0\}$.

À cette liste, on peut aussi ajouter que $-\infty = \infty$, $\overline{\infty} = \infty$ et $|\infty| = \infty$, mais notons que les opérations suivantes sont laissées indéterminées $\infty - \infty$, $0 \cdot \infty$, $\frac{\infty}{\infty}$, $\frac{0}{0}$. ■

On peut également munir le plan complexe étendu de la métrique $\hat{d} : \hat{\mathbb{C}} \times \hat{\mathbb{C}} \to \mathbb{R}$ [19, p.89] telle que

$$\hat{d}(z_1, z_2) = \begin{cases} \frac{2|z_1 - z_2|}{\sqrt{|z_1|^2+1}\sqrt{|z_2|^2+1}} & \text{si } z_1, z_2 \in \mathbb{C} \\ \frac{2}{\sqrt{|z|^2+1}} & \text{si } z_1 = z \in \mathbb{C}, z_2 = \infty \text{ ou } z_2 = z \in \mathbb{C}, z_1 = \infty \\ 0 & \text{si } z_1 = \infty, z_2 = \infty\,. \end{cases} \tag{B.14}$$

En anglais, on parle de la « chordal metric » du plan complexe étendu [457], que l'on traduira comme « métrique cordale » (notons que cette terminologie est marginale). Cette métrique permet ainsi de définir un voisinage sur $\hat{\mathbb{C}}$.

**Définition B.25.** Un *voisinage de* $z_0 \in \hat{\mathbb{C}}$ est

$$N_r(z_0) = \{z \in \hat{\mathbb{C}} \,|\, \hat{d}(z, z_0) < r\}\,,$$

où $r > 0$.

Cette définition est bien cohérente avec la notion d'ouverts incluant l'infini introduite à la définition B.21. En effet, avec $r > 0$,

$$\begin{aligned} N_r(\infty) &= \{z \in \hat{\mathbb{C}} \,|\, \hat{d}(z, \infty) < r\} \\ &= \{z \in \mathbb{C} \,|\, 2/\sqrt{|z|^2+1} < r\} \cup \{\infty\} \\ &= \{z \in \mathbb{C} \,|\, |z|^2 > 4/r^2 - 1\} \cup \{\infty\} \\ &= \begin{cases} \{z \in \mathbb{C} \,|\, |z| > \sqrt{4/r^2-1}\} \cup \{\infty\} & \text{si } 0 < r \leq 2 \\ \hat{\mathbb{C}} & \text{si } r > 2\,. \end{cases} \end{aligned}$$

En définissant $1/\varepsilon = \sqrt{4/r^2 - 1}$, on trouve

$$\{z \in \mathbb{C} \,|\, |z| > \sqrt{4/r^2-1}\} = \{z \in \mathbb{C} \,|\, |z| > 1/\varepsilon\} = \mathbb{C} \setminus \overline{D}_{1/\varepsilon}(0)\,, \tag{B.15}$$

où $\overline{D}_{1/\varepsilon}(0)$ est fermé, borné (compact), de sorte que le voisinage à l'infini $N_r(\infty)$ a bel et bien la forme désirée $\{\infty\} \cup \mathbb{C} \setminus V$ de la définition B.21 (l'ensemble vide est fermé et compact, donc en choisissant $V = \varnothing$, on retrouve aussi que $\hat{\mathbb{C}}$ à la forme attendue).

**Définition B.26.** Un *$\varepsilon$-voisinage de l'infini* est

$$\mathcal{D}_\varepsilon(\infty) = \{z \in \mathbb{C} \,|\, |z| > 1/\varepsilon\} \cup \{\infty\} \tag{B.16}$$

où $\varepsilon > 0$.

De plus, comme attendu, la projection stéréographique « étendue » $\hat{s}$ de l'équation B.13 est une fonction entre deux espaces compacts, mais elle est plus encore.

**Corollaire B.27.** *La fonction $\hat{s}$ est un homéomorphisme, c.-à-d. la sphère $S^2$ est homéomorphe à $\hat{\mathbb{C}}$.*

*Démonstration.* Considérons que $S^2$ muni de la métrique euclidienne de $\mathbb{R}^3$ et $\hat{\mathbb{C}}$ muni de $\hat{d}$ (B.14) sont des espaces métriques. Notons que $S^2$ est compact et que $(\hat{\mathbb{C}}, \hat{d})$ est Hausdorff par le lemme B.15. Puisque $\hat{s}$ est continue et bijective, le théorème 26.6 [422] implique donc que $\hat{s}$ est un homéomorphisme. □

Des considérations précédentes, le concept de compactification d'un espace topologique est à une étape près de pouvoir être défini précisément. Avant d'y arriver, il reste la notion de plongement à établir.

**Définition B.28.** Soit la fonction injective continue $f : X \to Y$ entre deux espaces topologiques $(X, \alpha)$, $(Y, \beta)$. Considérons aussi que l'image $f(X)$ est un sous-espace de $Y$ avec la topologie induite par $Y$ de sorte que $f' : X \to f(X)$ est une fonction bijective analogue à $f$, mais dont le codomaine est restreint. Si $f'$ est un homéomorphisme, alors $f$ est un *plongement* de $X$ dans $Y$, noté $f : X \hookrightarrow Y$.

**Lemme B.29.** *Soit l'espace topologique $(E, \tau)$ et son extension en un point $(\hat{E}, \hat{\tau})$. Alors la fonction $p : E \to \hat{E}$ est (1) continue, (2) ouverte et (3) un plongement.*

*Démonstration.*

(1) D'une part, si $U \in \hat{\tau}$ tel que $U \in \tau$, alors $p^{-1}(U) = \{x \in E \,|\, p(x) \in U\} = U \in \tau$. D'autre part, si $T \in \hat{\tau}$ inclut l'infini, alors $T = \{\infty\} \cup (E \setminus V)$ où $V \subset E$ est compact et fermé. La préimage $p^{-1}(T) = \{x \in E \,|\, p(x) \in T\} = E \setminus V$ appartient donc à $\tau$ puisque $V$ est fermé.

(2) Pour tout $U \in \tau$, l'image $p(U) = U$ qui est un ouvert de $\hat{E}$ par la définition de la topologie de l'extension en un point.

(3) Soit $p' : E \to p(E)$. De (2), $p(E) = E$ et la définition B.21 implique que $p'$ est l'identité qui est évidemment bijective, continue et d'inverse continue. La fonction $p'$ est donc un homéomorphisme et $p$ est un plongement. □

La définition suivante de compactification est basée sur nLab et la Réf. [p.185] [422].

**Définition B.30.** La *compactification d'un espace topologique* $(E, \tau)$ est un espace de Hausdorff compact $(\hat{E}, \hat{\tau})$ équipé d'un plongement $p : E \hookrightarrow \hat{E}$ tel que la fermeture $\overline{E}$ égale $\hat{E}$. Si $\hat{E} \setminus E$ est un ensemble contenant un seul point, alors $\hat{E}$ est une compactification en un point (ou d'Alexandroff).

Ainsi, le plan complexe étendu $(\hat{\mathbb{C}}, \hat{\gamma})$ avec le plongement $c : \mathbb{C} \hookrightarrow \hat{\mathbb{C}}$ est la compactification en un point de $(\mathbb{C}, \gamma)$. Les deux dernières sous-sections se résument ainsi par le diagramme

$$\begin{array}{ccc} S^2 \setminus \{N\} & \xrightarrow{s} & \mathbb{C} \\ \downarrow & & \downarrow c \\ S^2 & \xrightarrow[\hat{s}]{} & \hat{\mathbb{C}}\,, \end{array} \tag{B.17}$$

où $s$ et $\hat{s}$ sont des homéomorphismes et $c$ est un plongement. La sphère $S^2$, vu comme étant homéomorphe à $\hat{\mathbb{C}}$, est appelé la sphère de Riemann. En raison de l'équivalence topologique, on écrira que $\hat{\mathbb{C}}$ est la sphère de Riemann. Celle-ci a été considérée jusqu'à maintenant que comme un objet topologique/métrique, toutefois, celle-ci est habituellement munie d'une structure plus élaborée : c'est une variété complexe. Nous présenterons les variétés que plus tard dans le document.

## B.5 Continuité et holomorphicité à l'infini

À la dernière section, la projection stéréographique a été définie de $S^2 \setminus \{N\}$ vers $\mathbb{C}$ puis étendue de $S^2$ vers $\hat{\mathbb{C}}$, ce qui a l'avantage d'être un homéomorphisme entre des espaces compacts. Une telle extension est aussi particulièrement intéressante pour des fonctions complexes de $\mathbb{C}$ vers $\mathbb{C}$, puisque certaines fonctions n'étant pas continues ou holomorphes sur tout $\mathbb{C}$ peuvent le devenir lorsqu'étendues adéquatement à $\hat{\mathbb{C}}$.

**Définition B.31.** Soit la fonction complexe $f : U \subset \mathbb{C} \to \mathbb{C}$. Son *extension sur* $\hat{\mathbb{C}}$ est $\hat{f} : V \subset \hat{\mathbb{C}} \to \hat{\mathbb{C}}$. Par abus de notation, l'extension d'une fonction $f$ est aussi notée $f$.

**Example B.2.** Soit $f : \mathbb{C} \setminus \{0\} \to \mathbb{C}$ telle que $f(z) = 1/z$. Lorsqu'étendue à $\hat{\mathbb{C}}$, $1/0 = \infty \in \hat{\mathbb{C}}$, $1/\infty = 0 \in \hat{\mathbb{C}}$ et la fonction $f$ est donc bien définie sur tout $\hat{\mathbb{C}}$. ■

Comme la notion de voisinage à l'infini est également bien définie sur $\hat{\mathbb{C}}$ avec la métrique cordale (définition B.25), la notion de continuité en découle naturellement.

**Définition B.32.** Une fonction $f : U \subset \hat{\mathbb{C}} \to \hat{\mathbb{C}}$ est *continue à* $z_0 \in \hat{\mathbb{C}}$ si pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un $\delta > 0$ tel que

$$\hat{d}(z, z_0) < \delta \quad \Rightarrow \quad \hat{d}(f(z), f(z_0)) < \varepsilon\,.$$

ou de façon équivalente,

$$\lim_{z \to z_0} f(z) = f(z_0)\,.$$

La fonction est dite continue si elle est continue en tout point de son domaine $U$.

La continuité à $z_0 = \infty$ prend désormais un sens précis.

**Example B.3.** L'extension de l'inversion/réflexion de l'exemple B.2 est continue à l'infini. En effet, notons d'abord que

$$\hat{d}(f(z), f(\infty)) = \hat{d}(1/z, 0) = \frac{2/|z|}{\sqrt{1/|z|^2 + 1}} = \frac{2}{\sqrt{|z|^2 + 1}} = \hat{d}(z, \infty). \tag{B.18}$$

Ainsi, en choisissant $\delta = \varepsilon$, on a trivialement

$$\hat{d}(z, \infty) = \frac{2}{\sqrt{|z|^2 + 1}} < \varepsilon \quad \Rightarrow \quad \hat{d}(f(z), f(\infty)) = \frac{2}{\sqrt{|z|^2 + 1}} < \varepsilon \tag{B.19}$$

et la fonction est continue à l'infini. ∎

**Example B.4.** Soit le polynôme $p : \hat{\mathbb{C}} \to \hat{\mathbb{C}}$ de degré $n$ tel que $p(z) = \sum_{j=0}^{n} a_j z^j$. Pour tout $z_0 \in \hat{\mathbb{C}}$, ce polynôme « étendu » est une fonction continue :

$$\lim_{z \to z_0} p(z) = \sum_{j=0}^{n} a_j \lim_{z \to z_0} z^j = \sum_{j=0}^{n} a_j (\lim_{z \to z_0} z)^j = p(z_0)\,,$$

où l'extension fait seulement en sorte que $p(\infty) = \infty$. ∎

Un exemple d'extension qui nous sera particulièrement utile est celui des fonctions rationnelles, définies comme suit.

**Définition B.33.** Une *fonction rationnelle* est une fonction $r : \mathbb{C} \setminus \{s_1, ..., s_n\} \to \mathbb{C}$ telle que

$$r(z) = \frac{p(z)}{q(z)}\,, \tag{B.20}$$

où $p, q$ sont des polynômes en $z$, $q$ n'est pas la fonction constante nulle et $s_1, ..., s_n$ sont les zéros de $q$.

En effet, dans le cas des fonctions rationnelles, la restriction du domaine par rapport aux zéros du polynôme au dénominateur n'est plus nécessaire lorsqu'elle est étendue à la sphère de Riemann. Définissons maintenant ce que nous entendons lorsqu'on parle d'une fonction différentiable ou holomorphe à l'infini. Rappelons les définitions de base suivantes.

**Définition B.34.** Une fonction $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ est *différentiable* à $z_0 \in \mathbb{C}$ si la limite

$$f'(z_0) = \lim_{z \to z_0} \frac{f(z) - f(z_0)}{z - z_0}\,.$$

est un nombre fini qui ne dépend pas de la manière dont $z$ tend vers $z_0$ [391].

**Définition B.35.** Soit un ouvert $U$ de $\mathbb{C}$ et une fonction $f : U \to \mathbb{C}$. La fonction $f$ est *holomorphe* à $z_0$ s'il y a un $\varepsilon > 0$ tel que $D_\varepsilon(z_0) \subset U$ et $f$ est différentiable en tout point de $D_\varepsilon(z_0)$.

Notons que la condition pour l'holomorphicité en un point est plus forte que celle de la différentiabilité en un point, puisqu'elle demande la différentiabilité au point *et* son voisinage. Dans la dernière section, la topologie sur le plan complexe étendu a été introduite de même que la notion de voisinage à l'infini à partir de la métrique cordale, ce qui permet enfin d'établir la définition suivante.

**Définition B.36.** Soit une fonction complexe $f$ définie sur un voisinage de l'infini $\mathcal{D}_\varepsilon(\infty)$ (Eq. B.16) et la fonction complexe $g$ définie sur $D_\varepsilon(0)$ telle que $g(w) = f(1/w)$. La fonction $f$ est *différentiable à l'infini* si $g$ est différentiable à 0. La fonction $f$ est holomorphe à l'infini si $g$ est holomorphe à 0 [457].

La prochaine annexe fera usage de ces notions pour bien définir des fonctions sur le plan complexe étendu, notamment des automorphismes.

# Annexe C

# Groupes d'automorphismes en analyse complexe

Dans cette annexe, nous nous intéressons aux groupes d'automorphismes de la sphère de Riemann et plus particulièrement du disque unité, en raison de son intérêt pour l'intégration partielle de la dynamique de Kuramoto traitée aux chapitres 6 et 7. L'annexe aborde aussi brièvement les variétés différentielles et les groupes de Lie afin de soutenir les discussions sur les groupes de symétries dans les chapitres 5 et 6.

## C.1 Transformations conformes

Certaines fonctions ont la propriété de préserver localement les angles : ce sont les transformations conformes. En géométrie, un difféomorphisme $\sigma : S_1 \to S_2$ est une transformation conforme si et seulement s'il existe une fonction lisse de valeurs positives $\lambda : S_1 \to \mathbb{R}_{>0}$ telle que

$$\langle \mathrm{d}\sigma_p(x), \mathrm{d}\sigma_p(y) \rangle_{\sigma(p)} = \lambda(p)^2 \langle x, y \rangle_p \,,$$

pour tout $p \in S_1$ et pour tout $x, y \in T_p S_1$ [578, Proposition 3.72].

**Exemple C.1.** Avec $p = (u, v)$, $x = (x_1, x_2)$ et $y = (y_1, y_2)$, la surface d'Enneper (Fig. C.1) est décrite par la fonction $\sigma : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$ telle que

$$\sigma(u, v) = \left( u - \frac{u^3}{3} + uv^2,\ v - \frac{v^3}{3} + vu^2,\ u^2 - v^2 \right) .$$

La matrice jacobienne s'écrit alors

$$\mathrm{d}\sigma_p = \begin{pmatrix} 1 - u^2 + v^2 & 2uv \\ 2uv & 1 - v^2 + u^2 \\ 2u & -2v \end{pmatrix} ,$$

où les colonnes $\sigma_u$ et $\sigma_v$ sont orthogonales, $\langle \sigma_u, \sigma_v \rangle = 0$, de sorte que la matrice est de rang 2 pour tout $p$. Puisque $\sigma : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$ est lisse et que la matrice jacobienne est de rang 2, alors $\sigma$ est une surface paramétrée. Des manipulations algébriques élémentaires mènent ensuite à

$$\langle \mathrm{d}\sigma_p(x), \mathrm{d}\sigma_p(y) \rangle_{\sigma(p)} = (u^2 + v^2 + 1)^2 \langle x, y \rangle_p \,,$$

de sorte qu'il existe en effet une fonction lisse $\lambda$ à valeurs positives telle que $\lambda(p) = u^2 + v^2 + 1$. La fonction $\sigma$ décrivant la surface d'Enneper est donc une transformation conforme. ■

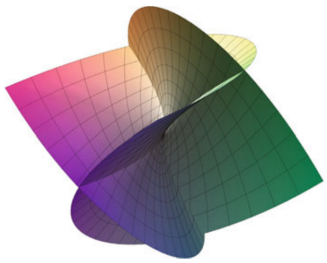


FIGURE C.1 – Surface d'Enneper [578]

La projection stéréographique de la sphère sur le plan complexe constitue un autre exemple de transformation conforme, introduite à la section B.3. D'ailleurs, la notion géométrique de transformation conforme coïncide avec celle de biholomorphisme en analyse complexe pour les fonctions à une variable complexe, ce qui justifie la définition suivante.

**Définition C.2.** Soient deux ouverts $U, V \subset \hat{\mathbb{C}}$. Une *transformation conforme* ou un *biholomorphisme* est une fonction holomorphe bijective de $U$ vers $V$. Lorsqu'une telle transformation existe, les ensembles $U$ et $V$ sont dits conformellement équivalents ou biholomorphes.

**Remarque C.3.** La dernière définition est basée sur la Réf. [558, p.206] qui nous guidera aussi dans des problèmes subséquents. Cependant, pour généraliser aux fonctions à plusieurs variables complexes (où $U, V \in \mathbb{C}^N$ avec $N > 1$), il serait préférable d'appeler de telles fonctions seulement des biholomorphismes [253, 538]. La raison est qu'un biholomorphisme ne préserve pas nécessairement les angles dans ce cas. Par exemple, $(z_1, z_2) \mapsto (z_1, 2z_2)$ n'est pas conforme [538, p.44]. ■

**Remarque C.4.** Un solide résultat découle de la notion de biholomorphisme et des surfaces de Riemann, soient des variétés complexes unidimensionnelles et connexes. En effet, il s'avère que toute surface de Riemann est biholomorphe à la sphère de Riemann $\hat{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$ (plan complexe étendu), le plan complexe $\mathbb{C}$ ou le disque unité $\mathbb{D}$. C'est le théorème d'uniformisation de Riemann, une généralisation du théorème de l'application conforme. ■

La définition C.2 implique que l'inverse d'une transformation conforme est également holomorphe, justifiant ainsi la terminologie « biholomorphisme ». Pour le prouver, nous suivons

essentiellement la Réf. [558, p.206] en décomposant la proposition 1.1 en un théorème, basé sur le théorème de Rouché [391, p.125], et un corollaire.

**Théorème C.5.** *Soient deux ouverts $U, V \subset \hat{\mathbb{C}}$. Si $f : U \to V$ est holomorphe et injective, alors $f'(z) \neq 0$ pour tout $z \in U$.*

*Démonstration.* Nous détaillons ici la preuve de la Réf. [558, Proposition 1.1] qui s'effectue par contradiction. Supposons qu'il existe un point $z_0 \in U$ tel que $f'(z_0) = 0$. Puisque la fonction est holomorphe, elle est analytique et s'exprime en série de puissance telle que

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \,,$$

où $f(z_0) = a_0$. La dérivée de la série de puissance est

$$f'(z) = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n (z - z_0)^{n-1} \tag{C.1}$$

de sorte que $f'(z_0) = 0$ implique $a_1 = 0$. La substitution de $a_0 = f(z_0)$ et $a_1 = 0$ dans la série de puissance de $f(z)$ donne

$$f(z) - f(z_0) = \sum_{n=2}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \,.$$

À partir d'ici, la stratégie consiste à utiliser le théorème de Rouché en commençant par séparer la somme du terme de droite en deux fonctions. Soit $k \geq 2$, le plus petit indice tel que $a_k \neq 0$. L'expression précédente devient alors

$$f(z) - f(z_0) = a_k (z - z_0)^k + \sum_{n=k+1}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \,.$$

En soustrayant un nombre $w$ suffisamment petit tel que $|w| > 0$ des deux côtés, on a

$$f(z) - f(z_0) - w = F(z) + G(z) \,,$$

où $F(z) := a_k (z - z_0)^k - w$ et $G(z) := \sum_{n=k+1}^{\infty} a_n (z - z_0)^n$.

D'abord, on remarque que $F(z)$ et $G(z)$ sont déjà exprimées en série de puissance et elles sont donc analytiques dans un petit disque $D_r(z_0)$ ainsi que son contour $\partial D_r(z_0)$. De plus, il se trouve que

$$\lim_{z \to z_0} (|F(z)| - |G(z)|) = |w| > 0 \,.$$

Par conséquent, il existe un $r > 0$ suffisamment petit tel que $|G(z)| < |F(z)|$ est valide pour tout $z \in \partial D_r(z_0)$. Puisque $k \geq 2$, il y a au minimum deux zéros de la fonction $F(z)$ dans $D_r(z_0)$. Par le théorème de Rouché, il s'ensuit que $F(z) + G(z)$ a également, au minimum, deux zéros dans $D_r(z_0)$. De plus, puisque $f'(z) \neq 0$ pour tout $z \in D_r(z_0) \setminus \{z_0\}$, les zéros de $f(z) - f(z_0) - w$ sont distincts dans $D_r(z_0)$. La fonction n'est donc pas injective, ce qui est une contradiction. Il s'ensuit que $f'(z) \neq 0$ pour tout $z \in U$. □

**Corollaire C.6.** *Soit deux ouverts $U, V \subset \hat{\mathbb{C}}$. Si $f : U \to V$ est holomorphe et injective, alors l'inverse $f^{-1} : f(U) \to U$, où $f(U)$ est l'image de $f$, est holomorphe. En particulier, l'inverse d'une transformation conforme est holomorphe.*

*Démonstration.* Soit $u, u_0 \in f(U)$, de sorte qu'il existe deux points $z, z_0 \in U$ tels que $u = f(z)$ et $u_0 = f(z_0)$. Pour $u \neq u_0$, il se trouve que

$$\frac{f^{-1}(u) - f^{-1}(u_0)}{u - u_0} = \frac{z - z_0}{f(z) - f(z_0)} = \frac{1}{\frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0}}\,.$$

Du théorème C.5, $f'(z_0) \neq 0$ et la limite lorsque $z \to z_0$ ne fait pas diverger l'expression précédente, qui peut être réécrite telle que $(f^{-1})'(u_0) = 1/f'(z_0)$. Cela implique que la fonction inverse est holomorphe à $u_0$ et par extension, pour tout $u_0 \in f(U)$. Finalement, une transformation conforme est une fonction holomorphe bijective par la définition C.2, de sorte que son inverse est holomorphe par la démarche précédente. □

Une notion connexe aux transformations conformes est l'automorphisme, qui fait l'objet de la prochaine section.

## C.2 Automorphismes et transformations de Möbius

La définition d'automorphisme en analyse complexe n'est pas à confondre avec celle en théorie des groupes, où un automorphisme est plutôt un isomorphisme d'un groupe vers lui-même. Le but de cette section est de définir les automorphismes et leurs propriétés.

**Définition C.7.** Soit un ouvert $U$ de $\hat{\mathbb{C}}$. Un *automorphisme* est une transformation conforme d'un ensemble $U$ vers lui-même [558, p.219].

Un exemple important de fonction d'un ensemble vers lui-même est la transformation de Möbius. À la fin de cette sous-section, nous montrerons que cette relation est en fait beaucoup plus forte : un automorphisme sur $\hat{\mathbb{C}}$ est une transformation de Möbius.

**Définition C.8.** Une *transformation de Möbius* est une fonction rationnelle linéaire d'une variable complexe $z$ de $\hat{\mathbb{C}}$ vers $\hat{\mathbb{C}}$ telle que

$$f(z) = \frac{az + b}{cz + d}\,, \quad a, b, c, d \in \mathbb{C}\,, \tag{C.2}$$

où $ad - bc \neq 0$ ; pour $c = 0$, $f(\infty) = \infty$ et pour $c \neq 0$, $f(-d/c) = \infty$ et $f(\infty) = a/c$.

**Remarque C.9.** D'emblée, la transformation de Möbius est définie comme l'extension sur $\hat{\mathbb{C}}$ de la fonction rationnelle linéaire $f(z) = (az + b)/(cz + d)$ où $a, b, c, d \in \mathbb{C}$ et $ad - bc \neq 0$. ■

La quantité $ad-bc$ est appelée le déterminant de la transformation, puisque la transformation a un analogue matriciel de la forme $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. Commençons par donner un premier exemple trivial d'une telle transformation.

**Lemme C.10.** *La fonction identité* $\mathrm{id} : z \mapsto z$ *est une transformation de Möbius.*

*Démonstration.* La fonction identité a la forme d'une transformation de Möbius $\mathrm{id}(z) = z$ avec $a = d = 1$ et $b = c = 0$, ce qui implique que $ad - bc = 1 \neq 0$. De plus, $\mathrm{id}(\infty) = \infty$ comme il se doit lorsque $c = 0$. □

Considérons désormais les transformations élémentaires suivantes.

**Définition C.11.** Soit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. La fonction ...

- ... $r_\alpha(z) = \alpha z$ est un *agrandissement ou une dilatation* par $|\alpha|$ et une rotation par un angle $\arg(\alpha)$ ;
- ... $s(z) = 1/z$ est une *inversion* et une *réflexion* par rapport à l'axe réel ;
- ... $t_\beta(z) = z + \beta$ est une *translation* de $\beta$.

Ces transformations sont aussi des transformations de Möbius. Dans l'équation (C.2), pour $b = 0$, $c = 0$, $d = 1$, la transformation est une dilatation/rotation, pour $a = 0$, $b = 1$, $c = 1$, $d = 0$, la transformation est une inversion et pour $a = 1$, $c = 0$, $d = 1$, la transformation est une translation. Il est en fait facile de démontrer que la forme générale d'une transformation de Möbius s'écrit comme une composition de ces transformations élémentaires.

**Lemme C.12.** *Soit une transformation de Möbius* $f$*. Si* $c = 0$*, alors* $f = t_{b/d} \circ r_{a/d}$*. Si* $c \neq 0$*, alors* $f = t_{a/c} \circ r_e \circ s \circ t_{d/c}$ *où* $e = (bc - ad)/c^2$*.*

De façon plus générale, la composition de transformations de Möbius satisfait la propriété utile suivante.

**Lemme C.13.** *La composition de deux transformations de Möbius donne une transformation de Möbius.*

*Démonstration.* Soit les transformations de Möbius

$$f_1(z) = \frac{a_1 z + b_1}{c_1 z + d_1} \qquad \text{et} \qquad f_2(z) = \frac{a_2 z + b_2}{c_2 z + d_2}.$$

Leur composition donne

$$f_1(f_2(z)) = \frac{a_1\left(\frac{a_2 z + b_2}{c_2 z + d_2}\right) + b_1}{c_1\left(\frac{a_2 z + b_2}{c_2 z + d_2}\right) + d_1} = \frac{(a_1 a_2 + b_1 c_2) z + (a_1 b_2 + b_1 d_2)}{(c_1 a_2 + d_1 c_2) z + (c_1 b_2 + d_1 d_2)} := \frac{a_3 z + b_3}{c_3 z + d_3}\,. \tag{C.3}$$

De plus, le déterminant est

$$\begin{aligned} a_3d_3 - b_3c_3 &= (a_1a_2 + b_1c_2)(c_1b_2 + d_1d_2) - (a_1b_2 + b_1d_2)(c_1a_2 + d_1c_2) \\ &= (a_1d_1 - b_1c_1)(a_2d_2 - b_2c_2) \neq 0\,, \end{aligned}$$

puisque $a_1d_1 - b_1c_1 \neq 0$ et $a_2d_2 - b_2c_2 \neq 0$ ($f_1$ et $f_2$ sont des transformations de Möbius). Aussi, si $c_3 = 0$, $f_1(f_2(\infty)) = f_1(\infty) = \infty$. Finalement, si $c_3 \neq 0$, alors

$$\begin{aligned} f_1(f_2(-d_3/c_3)) &= f_1\left(\frac{-a_2d_3 + b_2c_3}{-c_2d_3 + d_2c_3}\right) = f_1(-d_1/c_1) = \infty \\ f_1(f_2(\infty)) &= f_1\left(\frac{a_2}{c_2}\right) = \frac{a_1a_2 + b_1c_2}{c_1a_2 + d_1c_2} = \frac{a_3}{c_3}\,. \end{aligned}$$

□

Une transformation de Möbius admet également une fonction inverse.

**Lemme C.14.** *Toute transformation de Möbius* (C.2) *possède une transformation de Möbius inverse*

$$f^{-1}(z) = \frac{dz - b}{-cz + a}\,.$$

*Démonstration.* Considérons l'équation (C.3) avec $f = f_1$. La transformation $f_2$ est l'inverse de $f_1$ si $f_1 \circ f_2 = \mathrm{id}$, ce qui survient, du lemme C.10, lorsque $a_3 = d_3 = 1$ et $b_3 = c_3 = 0$ ou plus explicitement,

$$a_1a_2 + b_1c_2 = 1 \qquad \text{(C.4)} \qquad\qquad c_1a_2 + d_1c_2 = 0 \qquad \text{(C.6)}$$

$$a_1b_2 + b_1d_2 = 0 \qquad \text{(C.5)} \qquad\qquad c_1b_2 + d_1d_2 = 1\,. \qquad \text{(C.7)}$$

L'isolation de $a_2$ dans l'équation (C.4) implique

$$a_2 = \frac{1 - b_1c_2}{a_1} \tag{C.8}$$

et sa substitution dans l'équation (C.6) donne $c_2 = -c_1/(a_1d_1 - b_1c_1)$ où $a_1d_1 - b_1c_1 \neq 0$ par la définition de $f_1$. En substituant $c_2$ dans l'équation (C.8), $a_2$ satisfait l'égalité

$$a_2 = \frac{d_1}{a_1d_1 - b_1c_1}\,. \tag{C.9}$$

Des manipulations similaires avec les équations (C.5) et (C.7) mènent à

$$b_2 = \frac{-b_1}{a_1d_1 - b_1c_1} \qquad \text{et} \qquad d_2 = \frac{a_1}{a_1d_1 - b_1c_1}.$$

Ainsi,

$$f_2(z) = \frac{\left(\frac{d_1}{a_1d_1 - b_1c_1}\right)z - \left(\frac{b_1}{a_1d_1 - b_1c_1}\right)}{\left(\frac{-c_1}{a_1d_1 - b_1c_1}\right)z + \left(\frac{a_1}{a_1d_1 - b_1c_1}\right)} = \frac{d_1z - b_1}{-c_1z + a_1} := f_1^{-1}(z)$$

dont le déterminant est $d_1a_1 - (-b_1)(-c_1) \neq 0$. Si $c_1 = 0$, alors $f_1(\infty) = \infty$ implique $f_1^{-1}(f_1(\infty)) = f_1^{-1}(\infty)$ et $\infty = f_1^{-1}(\infty)$. Lorsque $c_1 \neq 0$, d'une part, $f_1(-d_1/c_1) = \infty$ si et seulement si $f_1^{-1}(\infty) = -d_1/c_1 = a_2/c_2$ et d'autre part, $f_1(\infty) = a_1/c_1$ si et seulement si $f^{-1}(a_1/c_1) = \infty = f^{-1}(-d_2/c_2)$ comme désiré. □

Le lemme suivant prépare le terrain pour le théorème C.16 où la correspondance entre les automorphismes et les transformations de Möbius est établie.

**Lemme C.15.** *Une fonction rationnelle injective de $\hat{\mathbb{C}}$ vers $\hat{\mathbb{C}}$ est une transformation rationnelle linéaire.*

*Démonstration.* Considérons la fonction rationnelle (définition B.33) $r : \hat{\mathbb{C}} \to \hat{\mathbb{C}}$ telle que $r(z) = \hat{p}(z)/\hat{q}(z)$ où $\hat{p}$ est de degré $n$ et $\hat{q}$ est de degré $m$. Par le théorème fondamental de l'algèbre, la fonction rationnelle s'écrit

$$r(z) = \frac{\alpha(z - r_1)...(z - r_n)}{\beta(z - s_1)...(z - s_m)}$$

où $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $r_1, ..., r_n \in \mathbb{C}$ sont les zéros (pas nécessairement distincts) de $\hat{p}$ et $s_1, ..., s_m \in \mathbb{C}$ sont les zéros (pas nécessairement distincts) de $\hat{q}$ (les multiplicités sont comptées). Il y a donc $n + m$ facteurs, $n$ au numérateur et $m$ au dénominateur. Sans perte de généralité, s'il y a $\ell$ zéros de commun entre $\hat{p}$ et $\hat{q}$, alors $\ell$ facteurs s'annulent, il y a $n + m - \ell$ facteurs restants et par le théorème fondamental de l'algèbre, la fonction rationnelle s'écrit comme un rapport de deux nouveaux polynômes $p$ et $q$ telle que $r(z) = p(z)/q(z)$. La fonction est injective si

$$\forall z_1, z_2 \in \hat{\mathbb{C}}, \quad \frac{p(z_1)}{q(z_1)} = \frac{p(z_2)}{q(z_2)} \quad \Rightarrow \quad z_1 = z_2$$

En définissant $w_1 = p(z_1)/q(z_1)$ et $w_2 = p(z_2)/q(z_2)$, la condition d'injectivité se réécrit

$$\forall z_1, z_2 \in \hat{\mathbb{C}}, \quad p(z_1) - w_1q(z_1) = 0,\ p(z_2) - w_2q(z_2) = 0 \text{ et } w_1 = w_2 \quad \Rightarrow \quad z_1 = z_2$$

ou encore

$$\forall z_1, z_2 \in \hat{\mathbb{C}}, \quad f_w(z_1) = 0 \quad \text{et} \quad f_w(z_2) = 0 \quad \Rightarrow \quad z_1 = z_2$$

où $f_w(z) = p(z) - wq(z)$ avec $w \in \mathbb{C}$. La fonction $f_w$ est un polynôme de degré $\max(\deg p, \deg q)$ excepté pour possiblement une valeur de $w$, soit $w_0 = 0$ si les degrés de $p$ et $q$ ne coïncident pas ou $w' = a_n/b_n$ si les degrés coïncident, $a_n, b_n$ étant les coefficients de $z^n$ dans $p, q$ respectivement. D'abord, si la fonction $f_w$ est la fonction nulle, alors la dernière condition n'est pas respectée.

Ensuite, si $\deg(f_w) = \delta \geq 2$, alors $f_w(z)$ possède $\delta$ zéros en incluant leur multiplicité. Il existe seulement un nombre fini de $w$ pour lequel il y a des racines multiples. En effet, étant donné une racine multiple $z_0$ de degré $k \geq 2$, il faut par définition qu'il y ait un $s(z)$ tel que $s(z_0) \neq 0$

et $f_w(z) = p(z) - wq(z) = (z - z_0)^k s(z)$. Il s'ensuit que $f'_w(z_0) = p'(z_0) - wq'(z_0) = 0$ et $p'(z_0)q(z_0) - p(z_0)q'(z_0) = 0$ (via les expressions de $f_w(z_0) = 0$ et $f'_w(z_0) = 0$), ce dernier étant un polynôme avec un nombre fini de racines $z_1, ..., z_N$. Par conséquent, il n'y a qu'un nombre fini de valeurs de $w$ (un ensemble de mesure 0), soit $w_i = p(z_i)/q(z_i)$ pour $i \in \{1, ..., N\}$, pour lequel une racine multiple est possible. Ainsi, excepté pour un nombre fini de valeurs de $w$, soit $w_0$, $w'$, $w_1$,..., $w_N$, $f_w$ a des racines distinctes. Mais dès que deux racines $u$ et $v$ sont distinctes pour un $w$ donné, $f_w(u) = f_w(v) = 0$ et $f_w$ ne satisfait pas la condition d'injectivité.

La seule possibilité restante est que la fonction $f_w$ soit de degré 1 ce qui implique trois possibilités : (1) $\deg(p) = 1$ et $\deg(q) = 0$, (2) $\deg(p) = 0$ et $\deg(q) = 1$ ou (3) $\deg(p) = 1$ et $\deg(q) = 1$. De façon générale, on a donc $p(z) = az + b$ et $q(z) = cz + d$ avec $a, b, c, d \in \mathbb{C}$ et $r$ est donc une transformation rationnelle linéaire. □

Les définitions et les lemmes précédents impliquent finalement le résultat annoncé au début de la section.

**Théorème C.16.** *Une fonction $f$ est un automorphisme sur $\hat{\mathbb{C}}$ si et seulement si elle est une transformation de Möbius.*

*Démonstration.* (Esquisse de preuve)

($\Leftarrow$) Par la définition C.8, une transformation de Möbius est de $\hat{\mathbb{C}}$ vers $\hat{\mathbb{C}}$. Le lemme C.14 et les contraintes de la définition C.8 à $z = \infty$ ou $f(z) = \infty$ garantissent que $f$ est bijective. De plus, du lemme C.12, la transformation est une composition de deux translations, une inversion/réflexion et une dilatation/rotation. Puisque la composition de fonctions holomorphes est une fonction holomorphe, alors il suffit de montrer que les transformations élémentaires sont holomorphes. Toutes translations et dilatations/rotations sont analytiques (déjà exprimées en série de puissance) sur $\mathbb{C}$ et donc holomorphes sur $\mathbb{C}$. Soit la fonction $g(z) = \alpha z + \beta$ avec $\alpha \neq 0$, qui effectue une rotation/dilatation et une translation. Dans la limite $z \to \infty$, $g(z) \to \infty$ et elle est différentiable à l'infini si $h(z) = 1/g(1/z) = z/(\alpha + \beta z)$ est différentiable à 0, ce qui est effectivement le cas :

$$\lim_{z\to 0} \frac{h(z) - h(0)}{z} = \lim_{z\to 0} \frac{h(z)}{z} = \lim_{z\to 0} \frac{1}{\alpha + \beta z} = \frac{1}{\alpha}\,.$$

Soit le voisinage $\mathcal{D}_\varepsilon(\infty) = \mathbb{C} \setminus \overline{D}_{1/\varepsilon}(0) \cup \{\infty\}$ (définition B.26). Puisque $\mathbb{C} \setminus \overline{D}_{1/\varepsilon}(0)$ est un ouvert $U$ de $\mathbb{C}$, alors $g$ est aussi différentiable sur $U$ et par conséquent, elle est différentiable pour tout point dans $\mathcal{D}_\varepsilon(\infty)$. Les translations et dilatations/rotations sont alors holomorphes sur $\hat{\mathbb{C}}$. L'inversion $s : z \to 1/z$ est de toute évidence holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \{0\}$. Elle est aussi différentiable à 0, car $u(z) = 1/s(z) = z$ est différentiable à 0 et elle est différentiable à l'infini, parce que $v(z) = s(1/z) = z$ est différentiable à 0. Comme précédemment, on montre aisément que l'inversion est différentiable dans les voisinages de 0 et $\infty$. Somme toute, une transformation de Möbius est un automorphisme sur $\hat{\mathbb{C}}$.

($\Rightarrow$) Une fonction méromorphe sur $\mathbb{C}$ est une fonction holomorphe exceptée en certains points isolés, qui sont des pôles de la fonction. Une fonction méromorphe sur $\hat{\mathbb{C}}$ est une fonction méromorphe sur $\mathbb{C}$ qui est holomorphe à l'infini ou possède un pôle à l'infini [558, p.87]. Puisque $f$ est un automorphisme sur $\hat{\mathbb{C}}$, elle est holomorphe sur $\hat{\mathbb{C}}$ (donc, holomorphe à l'infini) et il s'ensuit que la fonction est méromorphe sur $\hat{\mathbb{C}}$. Du Théorème 3.4 de la Réf. [558, p.87], la fonction est donc rationnelle $f(z) = p(z)/q(z)$ (définition B.33). De plus, un automorphisme est une fonction injective et le lemme C.15 implique que $f$ est rationnelle linéaire : $f(z) = \frac{az+b}{cz+d}$. Un automorphisme est en plus une fonction bijective et donc, l'inverse de la fonction doit exister. Comme montré dans la preuve du lemme C.14, c'est la condition $ad - bc \neq 0$ qui garantit son existence. Finalement, la bijectivité implique que $f$ connecte chaque élément du codomaine $\hat{\mathbb{C}}$ à un unique élément du domaine $\hat{\mathbb{C}}$, ce qui est le cas de $f(z) = \frac{az+b}{cz+d}$ avec l'introduction des contraintes supplémentaires sur $f$ de la définition C.8. Un automorphisme de $\hat{\mathbb{C}}$ est nécessairement une transformation de Möbius (voir aussi la page 114 de la Réf. [146]). □

## C.3 Groupes d'automorphismes de la sphère de Riemann et du disque unité

Dans la dernière sous-section, les résultats introduits permettent de démontrer directement l'existence d'un groupe d'automorphismes pour la sphère de Riemann.

**Théorème C.17.** *L'ensemble des transformations de Möbius forme le groupe* $(\mathrm{Aut}(\hat{\mathbb{C}}), \circ)$ *sous la composition de fonctions* $\circ$.

*Démonstration.* Du théorème C.16, un automorphisme de $\hat{\mathbb{C}}$ est une transformation de Möbius de sorte que l'ensemble des transformations de Möbius est $\mathrm{Aut}(\hat{\mathbb{C}})$. Le lemme C.13 implique que le groupe est bien fermé, le lemme C.10 garantit l'existence de l'élément neutre $\mathrm{id} : z \mapsto z$ et le lemme C.14 démontre l'existence d'un unique élément inverse pour chaque élément du groupe. Finalement, la composition de fonctions est toujours une opération associative et il s'ensuit que $(\mathrm{Aut}(\hat{\mathbb{C}}), \circ)$ est bel et bien un groupe. □

**Remarque C.18.** Notons que ce groupe est un sous-groupe du groupe des homéomorphismes du plan complexe étendu [19, p.17 et p.29, Théorème 2.5]. De plus, le groupe des transformations de Möbius du modèle hyperbolique du demi-plan supérieur $\mathbb{H}$ est son groupe d'isométries sous la métrique hyperbolique [19, Théorème 3.19]. ■

Il y a aussi une forme générale aux automorphismes sur le disque.

**Théorème C.19.** *Une fonction* $f : \mathbb{D} \to \mathbb{D}$ *pour laquelle* $f(z) \in \partial\mathbb{D}$ *pour* $z \in \partial\mathbb{D}$ *est un automorphisme si et seulement si elle s'écrit comme*

$$f(z) = e^{i\theta} \frac{z - \alpha}{\bar{\alpha} z - 1}, \tag{C.10}$$

*où $\theta \in \mathbb{R}$ est un angle et $\alpha \in \mathbb{D}$ tel que $f(\alpha) = 0$.*

*Démonstration.* ($\Rightarrow$) Le théorème C.16 indique que les automorphismes du plan complexe étendu sont des transformations de Möbius. Le disque ouvert et sa frontière étant des sous-ensembles de $\hat{\mathbb{C}}$, on recherche donc une transformation de Möbius qui envoie le disque et sa frontière sur eux-mêmes. Soit

$$f(z) = \frac{az + b}{cz + d}$$

telle que $z \in \mathbb{D}$ ou $z \in \partial\mathbb{D}$ et $a, b, c, d \in \mathbb{C}$. Puisque $f$ est un automorphisme sur $\mathbb{D}$, alors il existe un unique point $\alpha \in \mathbb{D}$ tel que $f(\alpha) = 0$ :

$$f(\alpha) = \frac{a\alpha + b}{c\alpha + d} = 0\,,$$

de sorte que $a\alpha + b = 0$ ou $b = -a\alpha$. La fonction $f$ se réécrit comme

$$f(z) = a\frac{z - \alpha}{cz + d}\,.$$

Lorsque $f(z) \in \mathbb{D}$, $f(z) < \infty$. Si $z = 0 \in \mathbb{D}$, alors $f(z) = -a\alpha/d$ et la constante $d$ doit être non nul pour satisfaire $f(z) < \infty$. La factorisation de $1/d$ dans l'expression de $f(z)$ mène à

$$f(z) = \gamma\frac{z - \alpha}{\beta z - 1}\,, \tag{C.11}$$

où $\alpha$, $\beta$ et $\gamma$ s'expriment selon $a$, $b$, $c$ et $d$ comme

$$\alpha = -\frac{b}{a}\,, \quad \beta = -\frac{c}{d}\,, \quad \gamma = -\frac{a}{d}\,.$$

La fonction envoie aussi les points de $\partial\mathbb{D}$ vers $\partial\mathbb{D}$. Autrement dit, si $|z| = 1$, alors

$$|f(z)| = \left|\gamma\frac{z - \alpha}{\beta z - 1}\right| = 1.$$

En remanipulant et en prenant le carré, on obtient

$$|\gamma|^2|z - \alpha|^2 = |\beta z - 1|^2\,,$$

ce qui est équivalent à

$$|\gamma|^2(|\alpha|^2 - 2\,\mathrm{Re}(\bar{\alpha}z) + 1) = |\beta|^2 - 2\,\mathrm{Re}(\beta z) + 1$$

où nous avons utilisé le fait que $|z| = 1$. Cette dernière expression implique que

$$2\,\mathrm{Re}[(\beta - \bar{\alpha}|\gamma|^2)z] + |\gamma|^2|\alpha|^2 + |\gamma|^2 - |\beta|^2 - 1 = 0\,,$$

ce qui est satisfait seulement si

$$\begin{aligned} 2\,\mathrm{Re}[(\beta - \bar{\alpha}|\gamma|^2)z] &= 0 \\ |\gamma|^2|\alpha|^2 + |\gamma|^2 - |\beta|^2 - 1 &= 0\,. \end{aligned}$$

Puisque $|z| = 1$, on déduit que $\beta = \bar{\alpha}|\gamma|^2$ de la première équation. L'injection de ce résultat dans la deuxième équation donne

$$|\gamma|^2|\alpha|^2 + |\gamma|^2 - |\alpha|^2|\gamma|^4 - 1 = 0\,,$$

ce qui est une équation d'ordre 4 en $|\gamma|$. Avec $x = |\gamma|^2$, celle-ci s'écrit

$$|\alpha|^2 x^2 - (1 + |\alpha|^2)x + 1 = 0$$

dont la solution est

$$x_\pm = \frac{(|\alpha|^2 + 1) \pm \sqrt{(|\alpha|^2 + 1)^2 - 4|\alpha|^2}}{2|\alpha|^2} = \frac{(|\alpha|^2 + 1) \pm (|\alpha|^2 - 1)}{2|\alpha|^2}\,.$$

D'une part, $x_+ = 1 = |\gamma|^2$ si et seulement si $|\gamma| = 1$ car $|\gamma| > 0$. D'autre part, $x_- = 1/|\alpha|^2 = |\gamma|^2$ si et seulement si $|\alpha\gamma| = 1$ car $|\alpha\gamma| > 0$. Cependant, $|\alpha\gamma| = |f(0)| < 1$ puisque $0 \in \mathbb{D}$, ce qui exclue la deuxième solution. Nous concluons alors que $|\gamma| = 1$ et $\beta = \bar{\alpha}$. La condition $|\gamma| = 1$ implique que $\gamma = e^{i\theta}$ pour $\theta \in \mathbb{R}$. L'insertion de $\beta$ et $\gamma$ dans l'équation (C.11) donne le résultat escompté.

($\Leftarrow$) La fonction est évidemment une transformation de Möbius et elle est donc une transformation conforme, comme démontré au théorème C.16. Il reste à montrer qu'elle envoie les éléments de $\mathbb{D}$ vers $\mathbb{D}$ et les éléments de $\partial\mathbb{D}$ vers $\partial\mathbb{D}$. D'une part, si $z = e^{i\phi}$, alors

$$f(e^{i\phi}) = e^{i\theta}\frac{e^{i\phi} - \alpha}{\bar{\alpha}e^{i\phi} - 1} = -e^{i(\theta+\phi)}\frac{\alpha e^{-i\phi} - 1}{\bar{\alpha}e^{i\phi} - 1}.$$

Avec $w := \alpha e^{-i\phi} - 1 = re^{i\psi}$,

$$f(e^{i\phi}) = -e^{i(\theta+\phi)}\frac{w}{\bar{w}} = -e^{i(\theta+\phi+2\psi)} \in \partial\mathbb{D}.$$

D'autre part, $z \in \mathbb{D}$ ($|z| < 1$) implique

$$|f(z)|^2 = \left|e^{i\theta}\,\frac{z - \alpha}{\bar{\alpha}z - 1}\right|^2 = \frac{|z - \alpha|^2}{|\bar{\alpha}z - 1|^2} = \frac{(z - \alpha)(\bar{z} - \bar{\alpha})}{(\bar{\alpha}z - 1)(\alpha\bar{z} - 1)} = \frac{|z|^2 - 2\,\mathrm{Re}(\bar{\alpha}z) + |\alpha|^2}{|\alpha|^2|z|^2 - 2\,\mathrm{Re}(\bar{\alpha}z) + 1} = \frac{n(z,\alpha)}{d(z,\alpha)}\,.$$

La différence entre le numérateur et le dénominateur est

$$n(z,\alpha) - d(z,\alpha) = |z|^2 - 1 - |\alpha|^2(|z|^2 - 1) = (1 - |\alpha|^2)(|z|^2 - 1) < 0$$

parce que $|\alpha| < 1$ et $|z| < 1$. Ainsi, $n(z,\alpha) < d(z,\alpha)$ et $|f(z)| < 1$, ce qui conclut la preuve. □

**Remarque C.20.** Définir la fonction qui envoie les éléments du disque unité ouvert $\mathbb{D}$ vers lui-même et les éléments de sa frontière $\partial\mathbb{D}$ (cercle unité) vers elle-même est différent de définir la fonction du disque unité fermé $\bar{\mathbb{D}}$ vers lui-même. En effet, dans ce dernier cas, un élément de $\partial\mathbb{D}$ peut être envoyé vers $\mathbb{D}$ de façon générale. ■

**Remarque C.21.** Un automorphisme sur le disque envoyant sa frontière vers elle-même est donc un produit d'une rotation $z \mapsto e^{i\theta}z$ et d'un facteur de Blaschke $z \mapsto \frac{z-\alpha}{\bar{\alpha}z-1}$, ce dernier apparaissant dans plusieurs problèmes d'analyse complexe [558] (ex. produit de Blaschke). ■

**Remarque C.22.** Dans certains ouvrages [558, p.220] [343, p.213], une version similaire du théorème précédent est démontrée en utilisant le lemme de Schwarz C.23 (présenté à la suite de la remarque). Cependant, cela requiert d'avoir trouvé en avance que les facteurs de Blaschke sont des automorphismes, ce que nous ne voulions pas tenir pour acquis. ■

**Lemme C.23** (Schwarz)**.** *Soit $f : \mathbb{D} \to \mathbb{C}$, une fonction holomorphe telle que $f(0) = 0$ et $|f(z)| \leq 1$. Alors,*

$$|f(z)| \leq |z| \qquad \textit{et} \qquad |f'(0)| \leq 1\,. \tag{C.12}$$

*De plus, si $|f(z_0)| = |z_0|$ pour un certain $z_0 \neq 0$ ou $|f'(0)| = 1$, alors $f$ est une rotation, c.-à-d. $f(z) = az$ où $a \in \mathbb{C}$ et $|a| = 1$.*

*Démonstration.* Puisque $f(z)$ est holomorphe sur $\mathbb{D}$, alors $g(z) = f(z)/z$ est holomorphe sur $\mathbb{D} \setminus \{0\}$. De plus, puisque $f(0) = 0$, alors

$$f'(0) = \lim_{z\to 0} \frac{f(z) - f(0)}{z} = \lim_{z\to 0} \frac{f(z)}{z}.$$

Ces observations motivent la définition de la fonction

$$h(z) = \begin{cases} \frac{f(z)}{z} & \text{si } z \neq 0 \\ f'(0) & \text{si } z = 0, \end{cases}$$

qui est holomorphe pour tout $z \in \mathbb{D}$. En d'autres termes, la fonction $h$ est l'extension holomorphe à $\mathbb{D}$ de $g$ (0 est une singularité apparente de $g$, c'est-à-dire $\lim_{z\to 0} zg(z) = f(0) = 0$). Puisque $h$ est holomorphe, elle est analytique. Considérons un disque fermé $\mathbb{D}_r = \{\, z \in \mathbb{C} \,|\, |z| \leq r < 1 \,\}$ centré à l'origine dans $\mathbb{D}$. Par le théorème du maximum, le module de la fonction analytique $h$ ne peut pas avoir un maximum local à l'intérieur de $\mathbb{D}$, la région d'analyticité de $h$. Il s'ensuit qu'il existe un $z_r$ sur la frontière $\partial\mathbb{D}_r$ tel que

$$|h(z)| \leq |h(z_r)| = \left|\frac{f(z_r)}{z_r}\right| = \frac{|f(z_r)|}{|z_r|} \leq \frac{1}{r}\,, \tag{C.13}$$

car $|f(z_r)| \leq 1$ par hypothèse et $|z_r| = r$ puisque $z_r \in \partial\mathbb{D}_r$. En faisant tendre $r$ vers 1, on obtient $|h(z)| \leq 1$ pour $z \in \mathbb{D}$. D'une part, cela implique que $|f(z)| \leq |z|$ pour $z \neq 0$, mais $|f(0)| = |z(0)| = 0$ de sorte que $|f(z)| \leq |z|$ est valide sur tout $\mathbb{D}$. D'autre part, $|h(z)| \leq 1$ implique que $|h(0)| = |f'(0)| \leq 1$ comme désiré.

Les conditions $|f(z_0)| = |z_0|$ avec $z_0 \neq 0$ ou $|f'(0)| = 1$ sont équivalentes à la condition $|h(z)| = 1$ pour tout $z \in \mathbb{D}$. Cela signifie que la fonction $h$ atteint son maximum dans toute la région d'analyticité et le théorème du maximum garantit donc directement que $h(z)$ est une

constante $a$ ou de façon équivalente, $f(z) = az$. D'une part, l'évaluation et le module de la dernière expression à $z_0$ donnent $|f(z_0)| = |a\, z_0| = |a|\,|z_0|$, mais puisque $|f(z_0)| = |z_0|$, alors $|a| = 1$. D'autre part, $f'(0) = \lim_{z\to 0} \frac{f(z)}{z} = a$ de sorte qu'encore une fois, $|f'(0)| = |a| = 1$. Avec $a = e^{i\theta}$ pour un certain $\theta \in \mathbb{R}$, cela revient donc à écrire que la fonction $f$ évaluée au point $z$ effectue simplement une rotation de $z$ d'un angle $\theta$. □

**Corollaire C.24.** *Tout automorphisme du disque s'écrit*

$$f(z) = \frac{az + b}{\bar{b}z + \bar{a}} \quad \textit{avec} \quad |a|^2 - |b|^2 = 1\,.$$

*Démonstration.* Du théorème C.19, nous avons qu'un automorphisme du disque s'écrit

$$f(z) = \frac{\zeta z - \zeta\alpha}{\bar{\alpha}z - 1}\,.$$

où $\alpha \in \mathbb{D}$ tel que $f(\alpha) = 0$ et $\zeta = e^{i\theta}$ avec $\theta \in \mathbb{R}$. La division par $\zeta^{1/2}$ au numérateur et au dénominateur donne

$$f(z) = \frac{\zeta^{1/2} z - \zeta^{1/2}\alpha}{\bar{\alpha}\bar{\zeta}^{1/2} z - \bar{\zeta}^{1/2}}\,,$$

où le fait que $\zeta^{-1} = \bar{\zeta}$ a été utilisé. La multiplication par $i$ au numérateur et dénominateur permet d'avoir les complexes conjugués des termes croisés (c.-à-d., $A$,$D$ et $B$,$C$ pour $(Az + B)/(Cz + D)$) :

$$f(z) = \frac{i\zeta^{1/2} z - i\zeta^{1/2}\alpha}{i\bar{\alpha}\bar{\zeta}^{1/2} z - i\bar{\zeta}^{1/2}}\,,$$

mais le déterminant de la transformation est $AD - BC = 1 - \alpha\bar{\alpha} \neq 1$. En divisant le numérateur et le dénominateur par $\sqrt{1 - \alpha\bar{\alpha}} = \sqrt{1 - |\alpha|^2} \in \mathbb{R}$, le résultat escompté émerge, soit

$$f(z) = \frac{az + b}{\bar{b}z + \bar{a}}\,,$$

avec $AD - BC = |a|^2 - |b|^2 = 1$ et

$$a = i\sqrt{\frac{\zeta}{1 - |\alpha|^2}} \quad \text{et} \quad b = -i\alpha\sqrt{\frac{\zeta}{1 - |\alpha|^2}}\,. \tag{C.14}$$

Les relations inverses entre les paramètres sont

$$\alpha = \frac{b}{a} \quad \text{et} \quad \zeta = -\frac{a^2}{|a|^2} \tag{C.15}$$

ou bien $\theta = \mathrm{Arg}(a) + (2k + 1)\pi$ avec $k \in \mathbb{Z}$. □

**Théorème C.25.** *L'ensemble des transformations de Möbius de l'équation* (C.10) *forme le groupe* $(\mathrm{Aut}(\mathbb{D}), \circ)$ *sous la composition de fonction* $\circ$.

*Démonstration.* C'est une conséquence directe du théorème C.19 et du théorème C.17. □

## C.4 Variété différentielle et groupe de Lie

À la dernière section, il a été démontré que les automorphismes du disque ont la forme

$$f(z) = e^{i\theta}\,\frac{z-\alpha}{\bar{\alpha}z-1}\,,$$

où $\alpha \in \mathbb{D}$, $\theta \in \mathbb{R}$ est un angle et ceux-ci forment le groupe d'automorphismes $(\mathrm{Aut}(\mathbb{D}), \circ)$. Le groupe dépend de trois paramètres réels, soit $\theta$, $\mathrm{Re}\,\alpha$ et $\mathrm{Im}\,\alpha$. Ces trois paramètres peuvent être vus comme faisant partie d'un espace avec une structure élaborée, soit une variété différentielle. C'est l'objectif de cette sous-section de se familiariser avec les variétés différentielles, après quoi la notion de groupe de Lie, dont celui des automorphismes du disque, se concrétise. L'histoire de la théorie de Lie est racontée aux pages 286-395 de la Réf. [77] et aux pages 67-69 de la Réf. [450], dans laquelle plusieurs autres références pertinentes sont données.

Une variété différentielle peut être définie informellement comme un espace qui ressemble localement à un espace euclidien sur lequel le calcul différentiel est possible. Il y a différents types de variétés différentielles, variant selon les différentes classes de différentiabilité possibles d'une fonction.

**Définition C.26.** Une fonction $f : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ est de *classe de différentiabilité*

1. $\mathscr{C}^k$ sur $U$ pour un entier positif $k$ si toutes les dérivées partielles

$$\frac{\partial^\alpha f_\beta}{\partial x_1^{\alpha_1} \ldots \partial x_n^{\alpha_n}}(p_1, ..., p_n) \tag{C.16}$$

   existent et sont continues pour tout $\beta \in \{1, ..., m\}$, pour tous entiers non négatifs $\alpha_1$, $\alpha_2$, ... , $\alpha_n$ tels que $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_n \leq k$ et pour tout $(p_1, p_2, \ldots, p_n) \in U$ ;

2. $\mathscr{C}^\infty$ (ou lisse) si les dérivées partielles à tous les ordres existent et sont continues ;

3. $\mathscr{C}^\omega$ (ou analytique) si la fonction est lisse et sa série de Taylor à n'importe quel point $x$ de $U$ converge vers la valeur de la fonction $f(x)$ dans un voisinage de $x$.

**Définition C.27.** Une *variété différentielle* $M$ de dimension $n$ et de classe $\mathscr{C}^k$ (où $k$ peut être un entier positif, $\infty$ ou $\omega$) est un espace métrique connexe formé d'une collection d'ouverts $\{U_\alpha\}_{\alpha\in I}$ telle que $M = \bigcup_{\alpha\in I} U_\alpha$, où $I$ est dénombrable, satisfaisant les axiomes suivants :

1. il existe un homéomorphisme $h_\alpha : U_\alpha \to V_\alpha \subset \mathbb{R}^n$ pour tout $\alpha \in I$ ;

2. si $U_\alpha \cap U_\beta \neq \varnothing$ et $h_\alpha : U_\alpha \to V_\alpha \subset \mathbb{R}^n$, $h_\beta : U_\beta \to V_\beta \subset \mathbb{R}^n$ sont des homéomorphismes, alors $h_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta)$, $h_\beta(U_\alpha \cap U_\beta)$ sont des sous-ensembles de $\mathbb{R}^n$ et la fonction

$$h = h_\alpha \circ h_\beta^{-1} : h_\beta(U_\alpha \cap U_\beta) \to h_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta) \tag{C.17}$$

   est de classe $\mathscr{C}^k$.

**Définition C.28.** Le doublet $(U_\alpha, h_\alpha)$ est appelé une *carte* de $M$ et l'ensemble des cartes $\{(U_\alpha, h_\alpha)\}_{\alpha\in I}$ est appelé un *atlas*.

Une variété différentielle peut être définie de façon plus rudimentaire à partir d'un espace topologique (variété topologique), mais nous la définissons d'emblée comme un espace métrique avec certaines propriétés en suivant la Réf. [471, p.107] et par cohérence avec le contenu précédent. Avec une métrique, la variété est un espace de Hausdorff [lemme B.15] (comme il est standard de le faire) et elle hérite de plusieurs autres propriétés topologiques désirables mentionnées à la sous-section B.2.

**Example C.1.** L'exemple le plus simple de variété différentielle de dimension $n$ est $\mathbb{R}^n$. En effet, avec $U = \mathbb{R}^n$ et l'homéomorphisme $\mathrm{id} : U \mapsto \mathbb{R}^n$, $U$ recouvre évidemment $\mathbb{R}^n$, $I = \{1\}$ est dénombrable, $(U, \mathrm{id})$ est la seule carte et la fonction id est analytique. Ainsi, $\mathbb{R}^n$ avec l'atlas $\{(U, \mathrm{id})\}$ est une variété différentielle analytique de dimension $n$. ■

Ayant considéré à la sous-section B.3 la projection stéréographique, l'exemple non trivial le plus naturel à considérer de variété différentielle est celui de la sphère.

**Example C.2.** Soit la sphère

$$M = S^2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \,\big|\, x^2 + y^2 + z^2 = 1\} \tag{C.18}$$

dont le pôle Nord est $(0, 0, 1)$ et le pôle Sud est $(0, 0, -1)$.

D'une part, tout comme à la sous-section B.3, considérons la sphère privée du pôle Nord $U_1 = S^2 \setminus \{(0, 0, 1)\}$. Du théorème B.20, la projection stéréographique $s$ est un homéomorphisme de $U_1$ vers $\mathbb{C}$ (homéomorphisme $s : (x, y, z) \mapsto (x+iy)/(1-z)$). Mais puisque $\mathbb{C}$ est homéomorphe à $\mathbb{R}^2$ (lemme B.18, homéomorphisme $f : x + iy \mapsto (x, y)$), la fonction

$$\begin{array}{rccc} h_1 : & S^2 \setminus \{(0,0,1)\} & \to & \mathbb{R}^2 \\ & (x, y, z) & \mapsto & \left(\dfrac{x}{1-z}, \dfrac{y}{1-z}\right) \end{array}$$

est un homéomorphisme vers $V_1 = \mathbb{R}^2 \subset \mathbb{R}^2$, étant une composition de homéomorphismes : $h_1 = f \circ s$. Le doublet $(U_1, h_1)$ est donc une carte de $M$.

D'autre part, un travail similaire démontre que la sphère privée du pôle Sud $U_2 = S^2 \setminus \{(0, 0, -1)\}$ est homéomorphe à $\mathbb{C}$ (homéomorphisme $q : (x, y, z) \mapsto (x + iy)/(1 + z)$, la projection stéréographique depuis le pôle Sud) et à $\mathbb{R}^2$, de sorte que l'homéomorphisme $h_2 = f \circ q$ telle que

$$\begin{array}{rccc} h_2 : & S^2 \setminus \{(0,0,-1)\} & \to & \mathbb{R}^2 \\ & (x, y, z) & \mapsto & \left(\dfrac{x}{1+z}, \dfrac{y}{1+z}\right) \end{array}$$

et $V_2 = \mathbb{R}^2$. Dans ce cas, la carte est $(U_2, h_2)$.

Il s'ensuit que $U_1 \cup U_2 = (S^2 \setminus \{(0,0,1)\}) \cup (S^2 \setminus \{(0,0,-1)\}) = S^2 = M$ comme désiré, $I = \{1,2\}$ est dénombrable et le premier critère est satisfait, car $U_1$ et $U_2$ sont homéomorphes à $\mathbb{R}^2$. L'atlas est ainsi $\{(U_1, h_1), (U_2, h_2)\}$.

Finalement, l'intersection entre les deux cartes est $U_1 \cap U_2 = S^2 \setminus \{(0,0,1),(0,0,-1)\} \neq \varnothing$ (ce qui est attendu, car $S^2$ est connexe [définition B.10]) et il reste à vérifier le deuxième critère. L'inverse de $h_1$ est la fonction $h_1^{-1} = s^{-1} \circ f^{-1}$ où $s^{-1}$ est donné au lemme B.19 et $f^{-1} : (x,y) \mapsto x + iy$. Nous déduisons alors

$$\begin{array}{rccc} h_1^{-1} : & \mathbb{R}^2 & \to & S^2 \setminus \{(0,0,1)\} \\ & (x,y) & \mapsto & \left( \dfrac{2x}{x^2+y^2+1}, \dfrac{2y}{x^2+y^2+1}, \dfrac{x^2+y^2-1}{x^2+y^2+1} \right) . \end{array}$$

Similairement, l'inverse de $h_2$ est $h_2^{-1} = q^{-1} \circ f^{-1}$ telle que

$$\begin{array}{rccc} h_2^{-1} : & \mathbb{R}^2 & \to & S^2 \setminus \{(0,0,-1)\} \\ & (x,y) & \mapsto & \left( \dfrac{2x}{x^2+y^2+1}, \dfrac{2y}{x^2+y^2+1}, \dfrac{1-x^2-y^2}{x^2+y^2+1} \right) . \end{array}$$

Ces derniers résultats impliquent que

$$\begin{array}{rccc} h = h_2 \circ h_1^{-1} : & \mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\} & \to & \mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\} \\ & (x,y) & \mapsto & \left( \dfrac{x}{x^2+y^2}, \dfrac{y}{x^2+y^2} \right) \end{array}$$

et que $h_1 \circ h_2^{-1} = h_2 \circ h_1^{-1} = h$, de sorte que $h$ est sa propre inverse ($h$ est une involution). En définissant

$$g_1(x,y) := \frac{x}{x^2+y^2} \quad \text{et} \quad g_2(x,y) := \frac{y}{x^2+y^2} ,$$

les dérivées partielles sont

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_1(x,y)}{\partial x} &= \frac{y^2-x^2}{(x^2+y^2)^2} , & \frac{\partial g_2(x,y)}{\partial x} &= \frac{-2xy}{(x^2+y^2)^2} , \\ \frac{\partial g_1(x,y)}{\partial y} &= \frac{-2xy}{(x^2+y^2)^2} , & \frac{\partial g_2(x,y)}{\partial y} &= \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2} , \end{aligned}$$

soient des fonctions rationnelles. En effet, leur domaine de définition est $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}$ de sorte que le seul zéro du polynôme au dénominateur est exclu du domaine et les fonctions rationnelles sont bien définies. Une fonction rationnelle est un ratio de polynômes qui sont des fonctions continues. Puisque le dénominateur $(x^2+y^2)^2$ n'est pas égal à 0 sur $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}$, alors les dérivées premières sont continues. Les dérivées d'ordre supérieur existent et étant aussi des fonctions rationnelles avec des dénominateurs de la forme $(x^2+y^2)^n$, elles sont également continues sur $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}$. Il s'ensuit que $h$ est lisse ($\mathscr{C}^\infty$). La sphère $S^2$ avec l'atlas $\{(U_1, h_1), (U_2, h_2)\}$ est donc une variété différentielle lisse de dimension 2. ∎

Un groupe de Lie se définit donc comme suit.

**Définition C.29.** [ [450]] Un *groupe de Lie à r-paramètres* est un groupe $(G, \cdot)$ qui possède également la structure d'une variété lisse de dimension $r$ de telle sorte que la loi de composition sur le groupe

$$m : G \times G \to G \; ; \; (g, h) \mapsto g \cdot h$$

et l'inversion

$$i : G \to G \; ; \; g \mapsto g^{-1}$$

sont des fonctions lisses entre des variétés.

**Example C.3.** Le groupe de rotation SO(2) qui s'écrit dans sa représentation matricielle tel que

$$G = \left\{ \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \,\middle|\, \theta \in [0, 2\pi) \right\}$$

forme un groupe de Lie avec un paramètre d'angle $\theta$ dont la variété associée est simplement le cercle unité $S^1 = \{(\cos\theta, \sin\theta) \,|\, \theta \in [0, 2\pi)\}$. ■

Les exemples de SO(3), $\mathrm{SL}_2(\mathbb{C})$, $\mathrm{PSL}_2(\mathbb{C})$, SU(1, 1) et PSU(1, 1) sont d'autres bons exemples. Aux chapitres 6 et 7, nous travaillons beaucoup avec les générateurs infinitésimaux du groupe d'automorphismes sur le disque (relié à PSU(1, 1)), ce qui nous permet d'étudier les groupes de symétrie reliés à la dynamique de Kuramoto et aussi d'effectuer l'intégration partielle.

# Annexe D

# Méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques permet de trouver une solution générale à une équation différentielle partielle du premier ordre linéaire, quasilinéaire ou non linéaire [159]. De plus, lorsque des générateurs de symétries d'un système d'équations différentielles ordinaires sont connus, cette méthode est parfois utile pour trouver un changement de coordonnées astucieux pour intégrer le système. Nous l'utilisons à la section 6.13.2 de la thèse pour démontrer que les birapports sont des invariants conjoints d'une algèbre et par conséquent, des quantités conservées de la dynamique de Kuramoto sous certaines conditions. Dans cette annexe, des notions et des exemples de base sur la méthode sont présentés de façon informelle.

## D.1 Courbes et équations caractéristiques

Considérons l'équation différentielle partielle de premier ordre quasilinéaire à $N$ variables indépendantes $(x_1, ..., x_N) \in X$ et une variable dépendante $u \in U$ :

$$\sum_{i=1}^{N} a_i(x_1, ..., x_N, u) \frac{\partial u}{\partial x_i} = b(x_1, ..., x_N, u)\,,$$

où $a_1, ..., a_N, b$ sont des fonctions de classe $\mathscr{C}^1$. Pour simplifier la notation, nous écrivons plutôt

$$\sum_{i=1}^{N} a_i(x, u) \partial_i u = b(x, u)\,. \tag{D.1}$$

Supposons qu'une solution $u = f(x)$ existe. Le graphe de cette solution est

$$S = \{(x, f(x)) \,|\, x \in X\}\,,$$

ce qui définit une surface intégrale (ou la surface de la solution) à $N + 1$ dimensions dans $X \times U$. Puisque $f$ est une solution de l'équation (D.1), il se trouve qu'à chaque point $x \in X$, l'équation

$$(a_1(x, f(x)), ..., a_N(x, f(x)), b(x, f(x))) \cdot (\partial_1 f(x), ..., \partial_N f(x), -1) = 0 \tag{D.2}$$

est satisfaite. En introduisant la fonction $\sigma$ sur $X \times U$ telle que $\sigma(x,u) := f(x) - u = 0$ décrivant la surface $S$, il est plus clair que le deuxième vecteur du produit scalaire est le gradient

$$\nabla\sigma(x,u) = (\partial_1 f(x), ..., \partial_N f(x), -1)$$

décrivant le vecteur normal à $S$ au point $(x,u)$. Si $\tau(x,u) := (a_1(x,u), ..., a_N(x,u), b(x,u))$, il s'ensuit que $\tau(x,u) \cdot \nabla\sigma(x,u) = 0$ décrit une relation d'orthogonalité. Puisque $\nabla\sigma(x,u)$ est un vecteur normal, alors $\tau(x,u)$ est un vecteur tangent à la surface au point $(x,u)$, nommé direction caractéristique ou axe de Monge [424, p.33]. Autrement dit, $\tau$ est un champ vectoriel parfois appelé le champ caractéristique [159, p. 82].

Par conséquent, les courbes sur $S$ contraintes par le champ caractéristique sont appelées les courbes caractéristiques. Pour les décrire, introduisons un paramètre $s$ Les courbes sur $S$ s'écrivent ainsi

$$c(s) = (x_1(s), ..., x_N(s), u(s))$$

pour $s \in [s_1, s_2]$ et le vecteur tangent à $c$ au point $s$ est

$$\frac{\mathrm{d}c(s)}{\mathrm{d}s} = \left( \frac{\mathrm{d}x_1(s)}{\mathrm{d}s}, \cdots, \frac{\mathrm{d}x_N(s)}{\mathrm{d}s}, \frac{\mathrm{d}u(s)}{\mathrm{d}s} \right) .$$

Mais rappelons que les vecteurs tangents à la surface sont donnés par $\tau(x,u)$ et donc $\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}s} = \tau(x,u)$ ou plus explicitement,

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}s} &= a_i(x,u) \quad \forall i \in \{1, ..., N\} \\ \frac{\mathrm{d}u(s)}{\mathrm{d}s} &= b(x,u)\,, \end{aligned}$$

un système d'équations différentielles ordinaires autonome parfois appelé les équations de Lagrange-Charpit. De plus, pour tout $i$, la $i$-ème première équation s'écrit

$$\mathrm{d}s = \frac{\mathrm{d}x_i}{a_i(x,u)}\,,$$

alors que la deuxième équation s'écrit

$$\mathrm{d}s = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,u)}\,.$$

Il en découle que le système d'équations différentielles ordinaires précédent s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{a_1(x,u)} = ... = \frac{\mathrm{d}x_N}{a_N(x,u)} = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,u)}\,,$$

ce qui représente les équations caractéristiques, dont la forme est avantageuse du fait qu'elle est sous une forme non paramétrique.

Somme toute, l'équation différentielle partielle du départ a été transformée en équations différentielles ordinaires, puis en un système d'équations caractéristiques. Pour trouver la solution la plus générale possible aux équations initiales, il faut résoudre les équations caractéristiques en toute généralité, ce qui requiert quelques précautions. Contrairement aux équations différentielles ordinaires où une solution générale dépend de constantes d'intégration, une solution générale d'une équation différentielle partielle de premier ordre dépend d'une fonction générale [424]. Remarquons que résoudre les équations caractéristiques pour $\frac{\mathrm{d}x_1}{a_1(x,u)} = ... = \frac{\mathrm{d}x_N}{a_N(x,u)}$ donne les invariants de l'opérateur de premier ordre $\sum_{i=1}^{N} a_i(x_1, ..., x_N, u)\frac{\partial}{\partial x_i}$, ce qui revient à trouver les courbes caractéristiques de la version homogène de l'équation différentielle partielle.

Cela dit, pour clarifier la méthode, considérons d'abord le cas $N = 2$ avec $x_1 = x$ et $x_2 = y$.

## D.2 Illustration de la méthode en 2D

Les équations caractéristiques en deux dimensions sont

$$\frac{\mathrm{d}x}{a_1(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}y}{a_2(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,y,u)}\,.$$

Les égalités possibles et leurs solutions, considérant qu'elles existent, sont

1. $\frac{\mathrm{d}x}{a_1(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}y}{a_2(x,y,u)}$ donne $\Phi(x,y,u) = \alpha$ pour une constante d'intégration $\alpha$ ;
2. $\frac{\mathrm{d}x}{a_1(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,y,u)}$ donne $\Psi(x,y,u) = \beta$ pour une constante d'intégration $\beta$ ;
3. $\frac{\mathrm{d}y}{a_2(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,y,u)}$ donne $\Gamma(x,y,u) = \gamma$ pour une constante d'intégration $\gamma$ .

Seulement deux de ces équations sont indépendantes. Effectivement, en particulier, la substitution de $\frac{\mathrm{d}x}{a_1(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}y}{a_2(x,y,u)}$ dans $\frac{\mathrm{d}x}{a_1(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,y,u)}$ donne $\frac{\mathrm{d}y}{a_2(x,y,u)} = \frac{\mathrm{d}u}{b(x,y,u)}$. Considérons alors seulement les deux premières équations sans perte de généralité. Les équations $\Phi(x,y,u) = \alpha$ et $\Psi(x,y,u) = \beta$ forment deux familles de courbes à un paramètre ($\alpha$ et $\beta$, respectivement).

La stratégie à partir d'ici est de former la surface intégrale $S$ à partir des deux familles de courbes caractéristiques. Pour ce faire, introduisons un résultat intermédiaire tiré de la Réf. [424, Theorem 2.3.1].

**Lemme D.1.** *Soit $\Phi$ et $\Psi$, deux fonctions $\mathscr{C}^1(\Omega)$ de $x, y, u \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$. Si $g(\Phi, \Psi) = 0$ où $g$ est une fonction différentiable dans ses deux arguments telle que $\nabla g \neq \mathbf{0}$, alors $u = f(x,y)$ satisfait l'équation différentielle partielle de premier ordre*

$$\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(y,u)}\right| \frac{\partial u}{\partial x} + \left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right| \frac{\partial u}{\partial y} = \left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(x,y)}\right|\,, \tag{D.3}$$

*où les matrices jacobiennes sont notées $\frac{\partial(\alpha,\beta)}{\partial(\gamma,\delta)}$ et $|\cdot|$ est le déterminant.*

*Démonstration.* Soit $\Phi(x,y,u)=\phi$ et $\Psi(x,y,u)=\psi$. Les dérivées de $g(\phi,\psi)=0$ par rapport à $x$ et $y$ sont respectivement

$$\frac{\partial g}{\partial \phi}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial g}{\partial \psi}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}+\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\right)=0$$
$$\frac{\partial g}{\partial \phi}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial y}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\right)+\frac{\partial g}{\partial \psi}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial y}+\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\right)=0\,.$$

Sous forme matricielle, ces deux équations s'écrivent

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial x}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial \Psi}{\partial x}+\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x} \\ \\ \frac{\partial \Phi}{\partial y}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial \Psi}{\partial y}+\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial \phi} \\ \\ \frac{\partial g}{\partial \psi} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\,.$$

Puisque $\nabla g \neq \mathbf{0}$, alors la matrice doit être non inversible ou autrement dit, son déterminant doit être nul :

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial \Psi}{\partial y}+\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\right)-\left(\frac{\partial \Phi}{\partial y}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}+\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\right)=0\,.$$

En explicitant la dernière expression, nous obtenons

$$\begin{aligned} 0=&\frac{\partial \Phi}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial y}+\frac{\partial \Phi}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial y}+\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\\ &-\frac{\partial \Phi}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial x}-\frac{\partial \Phi}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial x}-\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\,. \end{aligned}$$

Des manipulations simples mènent ensuite à la forme simplifiée

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial u}-\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\right)\frac{\partial u}{\partial x}+\left(\frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{\partial \Psi}{\partial x}-\frac{\partial \Phi}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial u}\right)\frac{\partial u}{\partial y}=\frac{\partial \Phi}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial y}-\frac{\partial \Phi}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\,.$$

Finalement, en repérant les déterminants de trois différentes matrices jacobiennes dans l'équation précédente, nous obtenons le résultat désiré. □

Ce dernier lemme permet de démontrer le théorème suivant énoncé et prouvé similairement dans la Réf. [424], concernant la solution générale des équations différentielles partielles quasilinéaires de premier ordre, pour deux variables indépendantes.

**Théorème D.2.** *Une solution générale à l'équation différentielle partielle quasilinéaire de premier ordre*

$$a_1(x,y,u)\frac{\partial u}{\partial x}+a_2(x,y,u)\frac{\partial u}{\partial y}=b(x,y,u)\,,$$

*où $a_1, a_2, b$ sont de classe $\mathscr{C}^1(\Omega)$ avec $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, est*

$$g(\Phi,\Psi)=0\,,$$

*où la fonction différentiable $g$ telle que $\nabla g \neq \mathbf{0}$ est composée des fonctions $\Phi$ et $\Psi$, formant deux familles distinctes de courbes (surfaces) caractéristiques $\Phi(x,y,u)=\alpha$ et $\Psi(x,y,u)=\beta$ de l'équation différentielle partielle pour certaines constantes $\alpha, \beta$.*

*Démonstration.* La différentielle de $\Phi(x, y, u) = \alpha$ est

$$\mathrm{d}\Phi = \frac{\partial \Phi}{\partial x}\,\mathrm{d}x + \frac{\partial \Phi}{\partial y}\,\mathrm{d}y + \frac{\partial \Phi}{\partial u}\,\mathrm{d}u = 0\,.$$

Avec $\mathrm{d}y/a_2(x, y, u) = \mathrm{d}x/a_1(x, y, u)$ et $\mathrm{d}u/b(x, y, u) = \mathrm{d}x/a_1(x, y, u)$, nous avons

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x}\,\mathrm{d}x + \frac{\partial \Phi}{\partial y}\frac{a_2(x, y, u)}{a_1(x, y, u)}\,\mathrm{d}x + \frac{\partial \Phi}{\partial u}\frac{b(x, y, u)}{a_1(x, y, u)}\,\mathrm{d}x = 0\,.$$

La multiplication par $a_1(x, y, u)/\,\mathrm{d}x$ implique

$$a_1(x, y, u)\frac{\partial \Phi}{\partial x} + a_2(x, y, u)\frac{\partial \Phi}{\partial y} + b(x, y, u)\frac{\partial \Phi}{\partial u} = 0\,. \tag{D.4}$$

Similairement pour $\Psi$, nous obtenons

$$a_1(x, y, u)\frac{\partial \Psi}{\partial x} + a_2(x, y, u)\frac{\partial \Psi}{\partial y} + b(x, y, u)\frac{\partial \Psi}{\partial u} = 0\,. \tag{D.5}$$

L'objectif est maintenant de résoudre pour $a_1, a_2, b$. D'abord, l'isolation de $b$ dans l'équation (D.4) donne

$$b(x, y, u) = -a_1(x, y, u)\frac{\Phi_x}{\Phi_u} - a_2(x, y, u)\frac{\Phi_y}{\Phi_u}\,,$$

où nous notons la dérivée partielle de $f$ par rapport à $z$, $f_z$, pour simplifier la notation. En substituant cette dernière relation dans l'équation (D.5) et en réarrangeant, nous trouvons

$$\frac{a_1(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(y,u)}\right|} = \frac{a_2(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|}\,.$$

De la même manière, l'isolation de $a_1$ dans l'équation (D.4) et sa substitution dans l'équation (D.5) mène à

$$\frac{a_2(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|} = \frac{b(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(x,y)}\right|}\,.$$

Par transitivité, il s'ensuit que

$$\frac{a_1(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(y,u)}\right|} = \frac{a_2(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|} = \frac{b(x, y, u)}{\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(x,y)}\right|}\,. \tag{D.6}$$

Du lemme D.1, si $g(\Phi, \Psi) = 0$, alors $u = f(x, y)$ satisfait

$$\left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(y, u)}\right|\frac{\partial u}{\partial x} + \left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(u, x)}\right|\frac{\partial u}{\partial y} = \left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(x, y)}\right|\,. \tag{D.7}$$

De l'équation (D.6), nous dégageons

$$\left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(y, u)}\right| = \frac{a_1(x, y, u)}{a_2(x, y, u)}\left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(u, x)}\right| \quad \text{et} \quad \left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(x, y)}\right| = \frac{b(x, y, u)}{a_2(x, y, u)}\left|\frac{\partial(\Phi, \Psi)}{\partial(u, x)}\right|$$

dont la substitution dans l'équation (D.7) implique

$$\frac{a_1(x,y,u)}{a_2(x,y,u)}\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|\frac{\partial u}{\partial x}+\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|\frac{\partial u}{\partial y}=\frac{b(x,y,u)}{a_2(x,y,u)}\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|.$$

En multipliant par $a_2(x,y,u)/\left|\frac{\partial(\Phi,\Psi)}{\partial(u,x)}\right|$, nous retrouvons finalement l'équation différentielle partielle quasilinéaire de premier ordre

$$a_1(x,y,u)\frac{\partial u}{\partial x}+a_2(x,y,u)\frac{\partial u}{\partial y}=b(x,y,u)\,.$$

Par conséquent, $g(\Phi,\Psi)=0$ forme la solution générale à cette dernière équation. □

Les solutions où $g$ est fixé sont dites des solutions particulières à l'équation différentielle. Soulignons que la solution donnée au dernier théorème est donnée sous forme implicite et l'obtention d'une solution explicite dépend de la possibilité d'isoler $u$ pour un choix particulier de $g$. Donnons maintenant quelques exemples pour illustrer la mécanique de la méthode, sans mentionner les domaines sur lesquels les solutions s'appliquent.

**Exemple D.3.** Soit l'équation différentielle partielle

$$u_x+u_y=u\,. \tag{D.8}$$

Nous avons ainsi $a_1(x,y,u)=a_2(x,y,u)=1$ et $b(x,y,u)=u$. Les équations caractéristiques sont alors

$$\mathrm{d}x=\mathrm{d}y=\frac{\mathrm{d}u}{u}\,.$$

Considérons toutes les égalités possibles :

1. $\mathrm{d}x=\mathrm{d}y$ donne $x+\alpha=y$
2. $\mathrm{d}x=\mathrm{d}u/u$ donne $x+\gamma=\ln u$
3. $\mathrm{d}y=\mathrm{d}u/u$ donne $y+\delta=\ln u\,.$

Les équations 1. et 3. sont indépendantes, alors nous pouvons considérer seulement celles-ci. Les courbes caractéristiques sont

$$y-x=\alpha\quad\text{et}\quad ue^{-y}=\beta\,,$$

où $\beta=e^{\delta}$. D'une part, notons que n'importe quelle fonction de $y-x$ est une solution à la version homogène de l'équation différentielle partielle initiale. D'autre part, $u(x,y)=\beta e^{y}$ (et $u(x,y)=\varepsilon e^{x}$ si nous avions utilisé la troisième équation) est une solution particulière à l'équation différentielle partielle. Du théorème D.2, la solution générale combine les deux familles de courbes caractéristiques telles que

$$g(y-x,ue^{-y})=0\,.$$

Un cas particulier à cette dernière équation est lorsque $g$ prend la forme $g(\phi, \psi) = \psi - f(\phi)$. Cela donne

$$g(y - x, ue^{-y}) = ue^{-y} - f(x - y) = 0\,,$$

ou bien

$$u(x, y) = f(y - x)e^{y}\,.$$

Nous aurions aussi pu choisir $g(\phi, \psi) = \ln(\psi) - f(\phi)$, ce qui donne

$$u(x, y) = h(y - x)e^{y}$$

où $h(y - x) = e^{f(y-x)}$, ce qui a la même forme que précédemment. Plus généralement, pour n'importe quelle fonction inversible $f$, $g(\phi, \psi) = f(\psi) - h(\phi)$,

$$u(x, y) = f^{-1}(h(y - x))e^{y}$$

Toutefois, si $g(\phi, \psi) = \psi\phi$, nous avons

$$ue^{-y}(y - x) = 0\,,$$

ce qui laisse seulement la solution triviale lorsque $x \neq y$. ■

**Exemple D.4.** Soit l'équation différentielle partielle

$$yu_y - xu_x = 2\,.$$

Les équations caractéristiques sont

$$\frac{\mathrm{d}x}{-x} = \frac{\mathrm{d}y}{y} = \frac{\mathrm{d}u}{2}\,. \tag{D.9}$$

D'une part, l'intégration de $\mathrm{d}x/(-x) = \mathrm{d}y/y$ implique $-\ln x + a = \ln y$ pour une certaine constante $a$. La dernière expression se réarrange telle que

$$xy = e^{a}\,. \tag{D.10}$$

La fonction $xy$ représente d'ailleurs une solution de la version homogène de l'équation différentielle partielle initiale, mais pas de la version inhomogène. Pour ce faire, nous avons d'autre part que l'intégration de $\mathrm{d}y/y = \mathrm{d}u/2$ donne $\ln y + b = \frac{1}{2}u$, qui se réécrit comme

$$u - 2\ln y = 2b\,. \tag{D.11}$$

En combinant les équations (D.10-D.11), nous trouvons que

$$g(xy, u - 2\ln y) = 0\,.$$

Pour écrire une solution explicite pour $u$, nous nous intéressons au cas particulier où $g$ est linéaire selon son deuxième argument :

$$-f(xy) + u - 2\ln y = 0$$

pour une certaine fonction $f$. Il en découle la solution

$$u(x, y) = 2\ln y + f(xy)\,.$$

■

Une multitude d'exemples sont donnés dans les ouvrages sur les équations différentielles partielles [159, 424, 452]. La méthode y est souvent introduite de façon intuitive, mais un peu moins détaillée que la procédure ci-dessus. En un sens, nous avons donc procédé à l'inverse des ouvrages standards, en allant des équations générales aux équations spécifiques puis aux exemples de base. Le plus simple et commun des exemples pour illustrer la méthode des caractéristiques est probablement l'équation du transport (*advection equation*).

**Exemple D.5.** Soit l"équation du transport

$$u_t + cu_x = 0\,,$$

où $x$ représente la position d'un objet et $t$, le temps. Les équations caractéristiques sont donc

$$\frac{\mathrm{d}t}{1} = \frac{\mathrm{d}x}{c} = \frac{\mathrm{d}u}{0}$$

où $\frac{\mathrm{d}u}{0}$ est en réalité un raccourci pour représenter l'équation paramétrée $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}s} = 0$. Il s'ensuit donc déjà que $u = \beta$. De plus, $\frac{\mathrm{d}t}{1} = \frac{\mathrm{d}x}{c}$ implique que $ct + \alpha = x$ ou bien $x - ct = \alpha$. La solution est donc

$$g(x - ct, u) = 0$$

ou plus spécifiquement,

$$u(x, t) = f(x - ct)$$

pour une certaine fonction différentiable $f$. Il est commun de mentionner que la solution $u$ est constante selon les variations le long des courbes caractéristiques. Justifions ce propos en reconsidérant la famille de courbes caractéristiques

$$\alpha = x - ct\,.$$

La constante $\alpha$ peut être considérée comme une nouvelle variable intuitive : c'est la position relative d'un observateur qui se déplace à une vitesse constante $c$ [452]. En recommençant

du début dans cette perspective, nous pouvons faire un changement de coordonnées d'une solution à l'équation du transport tel que

$$u(x,t) = v(x-ct,t) = v(\alpha,t)\,,$$

de sorte que

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial \alpha}\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} - c\frac{\partial v}{\partial \alpha} \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial \alpha}\frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial \alpha}\,.$$

La substitution de ces dernières dérivées dans l'équation du transport donne

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial t} - c\frac{\partial v}{\partial \alpha} + c\frac{\partial v}{\partial \alpha} = \frac{\partial v}{\partial t} = 0\,.$$

La dernière égalité signifie que $v$ est une fonction indépendante du temps : le fait d'avoir imposé un référentiel en mouvement uniforme à pour effet de transformer une onde se déplaçant à vitesse $c$ en une onde stationnaire [452]. Mathématiquement, cela revient à écrire $v(\alpha,t) = f(\alpha)$ qui implique $u(x,t) = f(x-ct)$, soit le résultat attendu. Des versions un peu plus compliquées de l'équation du transport permettent de gagner des intuitions supplémentaires sur l'évolution des solutions dans le temps en lien avec les courbes caractéristiques. ■

Le dernier exemple, aussi simple soit-il, illustre donc déjà comment la méthode des caractéristiques peut être utilisée pour effectuer des changements de coordonnées astucieux. Passons maintenant aux cas plus généraux.

## D.3 Cas général en $N$ dimensions

La méthode des caractéristiques pour les équations différentielles partielles de premier ordre non linéaires à $N$ variables indépendantes est décrite dans la Réf. [176] avec les théorèmes associés et des exemples. Cela requiert toutefois un peu plus de travail et il ne sera pas nécessaire d'atteindre ce niveau. En ce qui nous concerne, il nous suffit d'avoir une généralisation à $N$ variables indépendantes des résultats précédents sur les équations quasilinéaires.

**Lemme D.6.** *Soient les fonctions $\Phi_1,...,\Phi_N$ de $x_1,...,x_N,u$ et de classe $\mathscr{C}^1(\Omega)$ avec $\Omega \subset \mathbb{R}^{N+1}$. Si $g(\Phi_1,...,\Phi_N) = 0$ où $g$ est une fonction différentiable dans chacun de ses arguments satisfaisant $\nabla g \neq \mathbf{0}$, alors $u = f(x_1,...,x_N)$ satisfait l'équation différentielle partielle de premier ordre*

$$\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_1,...,x_{i-1},u,x_{i+1},...,x_N)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_i} = \left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_N,x_{N-1},...,x_2,x_1)}\right|$$

*où $(x_1,...,x_{i-1},u,x_{i+1},...,x_k) = (x_1,...,x_k)\cdot(u/x_i)e_i$ avec $e_i$ est le vecteur unité avec un élément 1 à la $i$-ème position, les matrices jacobiennes sont notées $\frac{\partial(\alpha,...,\beta)}{\partial(\gamma,...,\delta)}$ et $|\cdot|$ est le déterminant.*

*Démonstration.* Soit $\Phi_j(x_1, ..., x_N, u) = \phi_j$ pour tout $j \in \{1, ..., N\}$. La dérivée de l'expression $g(\phi_1, ..., \phi_N) = 0$ par rapport à $x_i$ est

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial g}{\partial \phi_j} \left( \frac{\partial \Phi_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \Phi_j}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) = 0 \quad \forall\, i \in \{1, ..., N\}.$$

Sous forme matricielle, le système d'équations s'écrit

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \Phi_1}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_1} + \frac{\partial \Phi_N}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_N} + \frac{\partial \Phi_1}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_N} & \cdots & \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_N} + \frac{\partial \Phi_N}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial \phi_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial g}{\partial \phi_N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Puisque $\nabla g \neq \mathbf{0}$, la matrice est non inversible ou autrement dit, son déterminant doit être nul :

$$\sum_{i_1, i_2, ..., i_N = 1}^{N} \varepsilon_{i_1 \cdots i_N} \prod_{k=1}^{N} \left( \frac{\partial \Phi_{i_k}}{\partial x_k} + \frac{\partial \Phi_{i_k}}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_k} \right) = 0\,,$$

où $\varepsilon_{i_1 \cdots i_N}$ est le symbole de Levi-Civita. Considérons d'abord les cas $N = 2$ et $N = 3$. Pour $N = 2$, le lemme D.1 implique

$$\left( \frac{\partial \Phi_1}{\partial u}\frac{\partial \Phi_2}{\partial x_2} - \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_2}{\partial u} \right) \frac{\partial u}{\partial x_1} + \left( \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_2}{\partial u} - \frac{\partial \Phi_1}{\partial u}\frac{\partial \Phi_2}{\partial x_1} \right) \frac{\partial u}{\partial x_2} = \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_2}{\partial x_1} - \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_2}{\partial x_2}\,.$$

Pour $N = 3$,

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \left( \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_1} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial \Phi_j}{\partial x_2} + \frac{\partial \Phi_j}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2} \right) \left( \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_3} + \frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_3} \right) \\ &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \left( \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_3} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_3} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_3} \right. \\ &\quad + \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_3} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_3} + \left. \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_3} \right). \end{aligned}$$

En raison du symbole de Levi-Civita qui alterne les signes et les indices non identiques, nous trouvons que le dernier terme s'évanouit :

$$\sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial \Phi_j}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_3} = 0$$

Un réarrangement mène à

$$
\begin{aligned}
0 = {} & \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} \\
& + \left( \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} \right)\frac{\partial u}{\partial x_1} \\
& + \left( \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} \right)\frac{\partial u}{\partial x_2} \\
& + \left( \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u} \right)\frac{\partial u}{\partial x_3} \\
& + \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_2} \\
& + \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_2} \\
& + \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_2} \\
& - \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial u}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_2} \\
& - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial u}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_2} \\
& - \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_2}\frac{\partial u}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}\frac{\partial u}{\partial x_1}\frac{\partial u}{\partial x_2}
\end{aligned}
$$

où nous voyons que (1) les déterminants des matrices jacobiennes $\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(a,b,c)}$ apparaissent et (2) tous les termes multipliés par un certain $\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial u}{\partial x_j}$ s'annulent entre eux. Il en résulte une équation différentielle partielle de premier ordre

$$
\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(u,x_2,x_3)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_1} + \left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_1,u,x_3)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_2} + \left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_1,x_2,u)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_3} = \left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_3,x_2,x_1)}\right|
$$

Dans le cas général, l'expression du déterminant s'écrit

$$
\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_N=1}^{N} \varepsilon_{i_1\cdots i_N}\left(\frac{\partial\Phi_{i_1}}{\partial x_1} + \frac{\partial\Phi_{i_1}}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_1}\right)\ldots\left(\frac{\partial\Phi_{i_N}}{\partial x_N} + \frac{\partial\Phi_{i_N}}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_N}\right) = 0\,,
$$

Le produit de $N$ facteurs se réarrange tel que

$$
\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_N=1}^{N} \varepsilon_{i_1\cdots i_N}\left(\prod_{k=1}^{N}\frac{\partial\Phi_{i_k}}{\partial x_k} + \sum_{\ell=1}^{N}\frac{\prod_{k=1}^{N}\frac{\partial\Phi_{i_k}}{\partial x_k}}{\frac{\partial\Phi_{i_\ell}}{\partial x_\ell}}\frac{\partial\Phi_{i_\ell}}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_\ell} + R_{i_1\cdots i_N}\right) = 0\,,
$$

où $R_{i_1\cdots i_N}$ contient tous les termes impliquant plus d'une dérivée partielle de $u$ par rapport à $x_\ell$ pour certains $\ell$. Cependant,

$$
\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_N=1}^{N} \varepsilon_{i_1\cdots i_N} R_{i_1\cdots i_N} = 0\,,
$$

puisque les coefficients devant les facteurs $\frac{\partial u}{\partial x_{i_1}}\frac{\partial u}{\partial x_{i_2}}\cdots\frac{\partial u}{\partial x_{i_\ell}}$ pour tout $\ell\in\{2,\ldots,N\}$ s'annulent via le symbole de Levi-Cevita (voir l'exemple $N=3$). Il s'ensuit que

$$
\sum_{\ell=1}^{N}\left(\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_N=1}^{N}\varepsilon_{i_1\cdots i_N}\frac{\prod_{k=1}^{N}\frac{\partial\Phi_{i_k}}{\partial x_k}}{\frac{\partial\Phi_{i_\ell}}{\partial x_\ell}}\frac{\partial\Phi_{i_\ell}}{\partial u}\right)\frac{\partial u}{\partial x_\ell} = -\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_N=1}^{N}\varepsilon_{i_1\cdots i_N}\prod_{k=1}^{N}\frac{\partial\Phi_{i_k}}{\partial x_k}\,,
$$

et le lemme en découle directement. □

**Théorème D.7.** *Une solution générale à l'équation différentielle partielle quasilinéaire de premier ordre*

$$\sum_{i=1}^{N} a_i(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_i} = b(x,u)\,,$$

*avec* $x \in \mathbb{R}^N$, $a_1, ..., a_N, b \in \mathscr{C}^1(\Omega)$ *et* $\Omega \subset \mathbb{R}^{N+1}$, *est*

$$g(\Phi_1, ..., \Phi_N) = 0\,,$$

*où la fonction* $g$ *est différentiable en chacun de ses arguments et satisfait telle que* $\nabla g \neq \mathbf{0}$, *formant* $N$ *familles distinctes de courbes (hypersurfaces) caractéristiques* $\Phi_i(x,u) = \alpha_i$ *pour tout* $i \in \{1, ..., N\}$ *de l'équation différentielle partielle pour certaines constantes* $\alpha_1, ..., \alpha_N$.

*Démonstration.* Nous proposons ici une esquisse de la preuve générale. La différentielle de $\Phi_i(x,u) = \alpha_i$ est

$$\mathrm{d}\Phi_i = \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j}\,\mathrm{d}x_j + \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\,\mathrm{d}u = 0\,,$$

pour tout $i \in \{1, ..., N\}$. Avec $\mathrm{d}x_j/a_j(x,u) = \mathrm{d}x_1/a_1(x,u)$ pour tout $j \in \{2, ..., N\}$ et $\mathrm{d}u/b(x,u) = \mathrm{d}x_1/a_1(x,u)$, nous avons

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_1}\,\mathrm{d}x_1 + \sum_{j=2}^{N} \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j}\frac{a_j(x,u)\,\mathrm{d}x_1}{a_1(x,u)} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\frac{b(x,u)\,\mathrm{d}x_1}{a_1(x,u)} = 0\,.$$

La multiplication par $a_1(x,u)/\,\mathrm{d}x_1$ implique

$$\sum_{j=1}^{N} a_j(x,u)\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j} + b(x,u)\frac{\partial \Phi_i}{\partial u} = 0\,, \tag{D.12}$$

pour tout $i \in \{1, ..., N\}$. Solutionnons désormais pour $a_1, ..., a_N, b$. D'abord, l'isolation de $b$ dans l'équation (D.12) pour $i = k$ donne

$$b(x,u) = -\sum_{j=1}^{N} a_j(x,u)\frac{\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_j}}{\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}}\,.$$

En substituant cette dernière relation dans l'équation (D.12) pour un indice $i \neq k$, nous trouvons

$$\sum_{j=1}^{N} a_j(x,u)\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j} - \sum_{j=1}^{N} a_j(x,u)\frac{\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_j}}{\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}}\frac{\partial \Phi_i}{\partial u} = 0\,,$$

ce qui se réécrit comme

$$\sum_{j=1}^{N} a_j(x,u)\left(\frac{\partial \Phi_k}{\partial u}\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_j}\frac{\partial \Phi_i}{\partial u}\right) = 0\,,$$

Pour $N=2$ et $k=1$, l'équation devient

$$a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)+a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)=0$$

et s'écrit

$$\frac{a_1(x_1,x_2,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2)}{\partial(x_2,u)}\right|}=\frac{a_2(x_1,x_2,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2)}{\partial(u,x_1)}\right|}\,.$$

Il est simple de procéder comme au théorème D.2 pour obtenir

$$\frac{a_1(x_1,x_2,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2)}{\partial(u,x_2)}\right|}=\frac{a_2(x_1,x_2,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2)}{\partial(x_1,u)}\right|}=\frac{b(x_1,x_2,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2)}{\partial(x_2,x_1)}\right|}\,.$$

Pour ce qui est de $N=3$ avec $k=1$, les deux équations suivantes sont satisfaites :

$$a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)+a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)+a_3(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)=0$$
$$a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)+a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)+a_3(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)=0\,.$$

La première équation donne

$$a_3(x,u)=\frac{-a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)-a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)}{\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}}$$

et sa substitution dans la deuxième implique

$$\begin{aligned}
0&=a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)+a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\\
&\quad+\left(\frac{-a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)-a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)}{\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\\
&=a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\\
&\quad+a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\\
&\quad-a_1(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\\
&\quad-a_2(x,u)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\,.
\end{aligned}$$

Le regroupement des termes donne

$$\begin{aligned}
&a_1(x,u)\left[\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)-\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\right]\\
&=a_2(x,u)\left[\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)-\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\right)\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}-\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\right)\right]\,.
\end{aligned}$$

Sous forme explicite, le premier crochet s'écrit

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\\
&- \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\\
&= -\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial x_1}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3}\right)\\
&= -\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_1,u,x_3)}\right|
\end{aligned}$$

et le deuxième crochet s'exprime comme

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\\
&- \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\\
&= -\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} + \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_2}{\partial u}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_3}{\partial x_3} - \frac{\partial\Phi_3}{\partial u}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x_2}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x_3}\right)\\
&= -\frac{\partial\Phi_1}{\partial u}\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(u,x_2,x_3)}\right| .
\end{aligned}$$

Nous déduisons ainsi que

$$\frac{a_1(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(u,x_2,x_3)}\right|} = \frac{a_2(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_1,u,x_3)}\right|} .$$

Une démarche similaire nous permet d'obtenir

$$\frac{a_1(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(u,x_2,x_3)}\right|} = \frac{a_2(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_1,u,x_3)}\right|} = \frac{a_3(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_1,x_2,u)}\right|} = \frac{b(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,\Phi_2,\Phi_3)}{\partial(x_3,x_2,x_1)}\right|} .$$

Par induction ou par une procédure itérative de substitutions de coefficients d'une équation à l'autre (Éq. (D.12) pour tout $i$), le cas général est tel que

$$\frac{a_1(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,...x_N)}\right|} = ... = \frac{a_N(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_1,...,x_{N-1},u)}\right|} = \frac{b(x,u)}{\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_N,x_{N-1},...,x_2,x_1)}\right|} . \tag{D.13}$$

Le lemme D.6 donne ensuite que si $g(\Phi_1,...,\Phi_N)=0$, alors $u=f(x)$ satisfait

$$\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_1,...,x_{i-1},u,x_{i+1},...,x_N)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_i} = \left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_N,x_{N-1},...,x_2,x_1)}\right| . \tag{D.14}$$

L'équation (D.13) implique ensuite que

$$\begin{aligned}
\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_1,u,x_3,...,x_N)}\right| &= \frac{a_2(x,u)}{a_1(x,u)}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|\\
&\vdots\\
\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_1,x_2,...,x_{N-1},u)}\right| &= \frac{a_N(x,u)}{a_1(x,u)}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|\\
\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(x_N,x_{N-1},...,x_2,x_1)}\right| &= \frac{b(x,u)}{a_1(x,u)}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|
\end{aligned}$$

dont la substitution dans l'équation (D.14) donne

$$\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_1}+\sum_{i=2}^{N}\frac{a_i(x,u)}{a_1(x,u)}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|\frac{\partial u}{\partial x_i}=\frac{b(x,u)}{a_1(x,u)}\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|.$$

En multipliant par $a_1(x,u)/\left|\frac{\partial(\Phi_1,...,\Phi_N)}{\partial(u,x_2,x_3,...,x_N)}\right|$, nous obtenons l'équation différentielle partielle quasilinéaire de premier ordre

$$\sum_{i=1}^{N}a_i(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_i}=b(x,u)\,.$$

Par conséquent, $g(\Phi_1,...,\Phi_N)=0$ est une solution générale à cette dernière équation. □

À la sous-section 6.13.2, nous montrons comment la méthode des caractéristiques permet de trouver les invariants conjoints des générateurs d'une algèbre de Lie.

## D.4 Changement de coordonnées basé sur les symétries

Dans les Réfs. [450, p.132] [283, p.130], une puissante technique est introduite pour trouver un changement de coordonnées qui simplifie l'action de la prolongation et les équations différentielles de telle sorte que certaines d'entre elles s'intègrent. Nous laissons le lecteur consulter ces références pour plus de détails et présentons des exemples basés sur ceux du chapitre 5. Considérons d'abord la dynamique de Kuramoto avec $N=2$.

**Exemple D.8.** La solution à la dynamique de Kuramoto

$$\dot\theta_1=\sin(\theta_2-\theta_1)\,,\qquad \dot\theta_2=\sin(\theta_1-\theta_2)$$

s'obtient aisément. Par inspection, il suffit de poser $\Delta=\theta_2-\theta_1$ et $\sigma=\theta_1+\theta_2$, ce qui donne la dynamique d'un oscillateur non uniforme comme à l'exemple 5.25 (avec $\omega=0$ et $a=2$) en plus d'un invariant :

$$\dot\Delta=-2\sin(\Delta)\,,\qquad \dot\sigma=0\,.$$

La solution est donc $\Delta(t)=2\arctan(ce^{-2t})$ et $\sigma(t)=d\in\mathbb{R}$. Par conséquent,

$$\begin{aligned}\theta_1(t)&=\frac{\sigma(t)-\Delta(t)}{2}=\frac{d}{2}-\arctan(ce^{-2t})\\ \theta_2(t)&=\frac{\sigma(t)+\Delta(t)}{2}=\arctan(ce^{-2t})+\frac{d}{2}\,.\end{aligned}$$

Il est toutefois possible d'arriver à cette solution sans utiliser l'inspection. Du chapitre 6, il est connu que $L_0=z_1\partial/\partial z_1+z_2\partial/\partial z_2$ est un générateur de symétrie, ce qui s'écrit de façon

équivalente en $\theta$ tel que $v_1 = iL_0 = \partial/\partial\theta_1 + \partial/\partial\theta_2$. Avec $y = \eta(\theta_1, \theta_2)$ et $w = \zeta(\theta_1, \theta_2)$, le générateur $v_1$ se transforme en $\partial_w$ si $\eta$ et $\zeta$ satisfont

$$\begin{aligned} v_1(\eta) &= \frac{\partial\eta}{\partial\theta_1} + \frac{\partial\eta}{\partial\theta_2} = 0 \\ v_1(\zeta) &= \frac{\partial\zeta}{\partial\theta_1} + \frac{\partial\zeta}{\partial\theta_2} = 1\,, \end{aligned}$$

ce qui est une conséquence de la dérivation en chaîne[1] :

$$v_1 = \frac{\partial}{\partial\theta_1} + \frac{\partial}{\partial\theta_2} = \frac{\partial\eta}{\partial\theta_1}\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{\partial\eta}{\partial\theta_2}\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{\partial\zeta}{\partial\theta_1}\frac{\partial}{\partial\zeta} + \frac{\partial\zeta}{\partial\theta_2}\frac{\partial}{\partial\zeta} = v_1(\eta)\frac{\partial}{\partial\eta} + v_1(\zeta)\frac{\partial}{\partial\zeta}\,.$$

La première équation signifie que $\eta$ est un invariant du groupe généré par $v_1$. L'équation caractéristique est $\mathrm{d}\theta_1 = \mathrm{d}\theta_2$, ce qui donne, par intégration, la famille de courbes caractéristiques $\theta_2 = \theta_1 + c$ pour une certaine constante $c$. Il s'ensuit que $\eta(\theta_1, \theta_2) = \theta_2 - \theta_1 = c$ est un invariant de $v_1$. En ce qui concerne la deuxième équation, l'équation caractéristique est $\mathrm{d}\theta_1 = \mathrm{d}\theta_2 = \mathrm{d}u$, où $u$ est une variable auxiliaire. Une solution à la deuxième équation est alors $\zeta(\theta_1, \theta_2) = a\theta_1 + b\theta_2$ tel que $a + b = 1$ (prenons $a = b = 1/2$ pour le problème en question). Cela permet d'introduire les nouvelles coordonnées

$$y = \eta(\theta_1, \theta_2) = \theta_2 - \theta_1 \quad \text{et} \quad w = \zeta(\theta_1, \theta_2) = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}\,,$$

qui sont respectivement la différence de phase et la phase moyenne. Comme attendu, le système d'équations devient donc $\dot{y} = -2\sin y$ et $\dot{w} = 0$. ■

Effectuons désormais un exemple pour un système linéaire.

**Exemple D.9.** Le générateur $v_4 = \partial_1 - \partial_2$ de l'exemple 5.26 permet de réduire la dimension du système linéaire $\dot{u}_1 = u_1 + u_2$ , $\dot{u}_2 = u_1 + u_2$ de façon systématique. En effet, il suffit encore de résoudre les équations différentielles partielles

$$\begin{aligned} v_4(\eta) &= \frac{\partial\eta}{\partial u_1} - \frac{\partial\eta}{\partial u_2} = 0 \\ v_4(\zeta) &= \frac{\partial\zeta}{\partial u_1} - \frac{\partial\zeta}{\partial u_2} = 1\,. \end{aligned}$$

D'une part, l'équation caractéristique de la première équation est

$$\mathrm{d}u_1 = -\,\mathrm{d}u_2\,, \tag{D.15}$$

ce qui donne $u_1 + u_2 = c := 2\eta(u_1, u_2)$ . D'autre part, une solution à la deuxième équation est $\zeta(u_1, u_2) = (u_1 - u_2)/2$. Les fonctions $\eta$ et $\zeta$ correspondent alors aux observables spectrales $f_1/\sqrt{2}$ et $f_2/\sqrt{2}$ du début de l'exemple 5.26, qui découplent le système, et la méthode donne en plus un invariant de la dynamique linéaire. ■

1. Ce qui est aussi vrai pour un générateur $v$ général : $v(\eta) = 1$ et $v(\zeta) = 1$ permet d'écrire $v = \partial_w$.

# Bibliographie


[1] Abbott L. F. et al. , *The Mind of a Mouse*, Cell, 182 (2020), p. 1372.

[2] Abdi H. et Williams L. J., *Principal component analysis*, WIREs Comput. Stat., 2 (2010), p. 433.

[3] Abrams D. M., Mirollo R., Strogatz S. H. et Wiley D. A., *Solvable model for chimera states of coupled oscillators*, Phys. Rev. Lett., 101 (2008), p. 084103.

[4] Abrams D. M. et Strogatz S. H., *Chimera states for coupled oscillators*, Phys. Rev. Lett., 93 (2004), p. 174102.

[5] Acebrón J. A., Bonilla L. L., Pérez-Vicente C. J., Ritort F. et Spigler R., *The Kuramoto model : A simple paradigm for synchronization phenomena*, Rev. Mod. Phys., 77 (2005), p. 137.

[6] Aggarwal C. C. et Reddy C. K., *Data Clustering : Algorithms and Applications*, Chapman & Hall/CRC, 2014.

[7] Aguiar M. A. D. et Dias A. P. S., *Synchronization and equitable partitions in weighted networks*, Chaos, 28 (2018), p. 073105.

[8] Ahmadian Y., Fumarola F. et Miller K. D., *Properties of networks with partially structured and partially random connectivity*, Phys. Rev. E, 91 (2015), p. 012820.

[9] Aicher C., Jacobs A. Z. et Clauset A., *Learning latent block structure in weighted networks*, J. Complex Netw., 3 (2015), p. 221.

[10] Aljadeff J., Renfrew D. et Stern M., *Eigenvalues of block structured asymmetric random matrices*, J. Math. Phys., 56 (2015), p. 103502.

[11] Allard A., Serrano M. Á. et Boguñá M., *Geometric description of clustering in directed networks*, Nat. Phys., 20 (2024), p. 150.

[12] Allard A., Serrano M. Á., García-Pérez G. et Boguñá M., *The geometric nature of weights in real complex networks*, Nat. Commun., 8 (2017), p. 14103.

[13] Allee W. C. et Bowen E. S., *Studies in animal aggregations: Mass protection against colloidal silver among goldfishes*, J. Exp. Zool., 61 (1932), p. 185.

[14] Almagro P., Boguñá M. et Ángeles Serrano M., *Detecting the ultra low dimensionality of real networks*, Nat. Commun., 13 (2022), p. 6096.

[15] Alon U., *Network motifs: Theory and experimental approaches*, Nat. Rev. Gen., 8 (2007), p. 450.

[16] Alter O., Brown P. O. et Botstein D., *Singular value decomposition for genome-Wide expression data processing and modeling*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 97 (2000), p. 10101.

[17] Anco S. C. et Bluman G., *Direct Construction of Conservation Laws from Field Equations*, Phys. Rev. Lett., 78 (1997), p. 2886.

[18] Anco S. C. et Bluman G., *Integrating factors and first integrals for ordinary differential equations*, Euro. J. App. Math., 9 (1998), p. 245.

[19] Anderson J. W., *Hyperbolic Geometry*, Springer, London, 2005.

[20] Anderson P. W., *More is different*, Science, 177 (1972), p. 393.

[21] ——, *More and Different : Notes from a Thoughtful Curmudgeon*, World Scientific Publishing, 2011.

[22] Angulo M. T., Liu Y. Y. et Slotine J.-J., *Network motifs emerge from interconnections that favour stability*, Nat. Phys., 11 (2015), p. 848.

[23] Antoulas A. C., *Approximation of Large-Scale Dynamical System*, SIAM, 2005.

[24] Appel K. et Haken W., *Every planar map is four colorable. Part I: Discharging*, Ill. J. Math., 21 (1977), p. 429.

[25] Appel K., Haken W. et Koch J., *Every planar map is four colorable. Part II: Reducibility*, Ill. J. Math., 21 (1977), p. 491.

[26] Arathoon P. et Kvalheim M. D., *Koopman embedding and super-linearization counterexamples with isolated equilibria*, arXiv preprint :2306.15126, (2023).

[27] Arenas A., Díaz-Guilera A., Kurths J., Moreno Y. et Zhou C., *Synchronization in complex networks*, Phys. Rep., 469 (2008), p. 93.

[28] Arenas A., Díaz-Guilera A. et Pérez-Vicente C. J., *Synchronization reveals topological scales in complex networks*, Phys. Rev. Lett., 96 (2006), p. 114102.

[29] Arenas A. et Pérez Vicente C. J., *Phase locking in a network of neural oscillators*, EPL, 26 (1994), p. 79.

[30] Arnold L., *On the asymptotic distribution of the eigenvalues of random matrices*, J. Math. Anal. Appl., 20 (1967), p. 262.

[31] Arnold V., *Catastrophe Theory*, Springer-Verlag, 3 éd., 1992.

[32] Aronszajn N., *Rayleigh-Ritz and A. Weinstein methods for approximation of eigenvalues. i . Operators in a Hilbert space*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 34 (1948), p. 474.

[33] Ashwin P. et Rodrigues A., *Hopf normal form with SN symmetry and reduction to systems of nonlinearly coupled phase oscillators*, Physica, 325 (2016), p. 14.

[34] Ashwin P. et Swift J. W., *The dynamics of n weakly coupled identical oscillators*, J. Nonlinear Sci., 2 (1992), p. 69.

[35] Asllani M., Lambiotte R. et Carletti T., *Structure and dynamical behavior of non-normal networks*, Sci. Adv., 4 (2018), p. eaau9403.

[36] Athreya A., Cape J. et Tang M., *Eigenvalues of stochastic blockmodel graphs and random graphs with low-rank edge probability matrices*, Sankhya A, 84 (2022), p. 36.

[37] Athreya A., Cape J. et Tang M., *Eigenvalues of stochastic blockmodel graphs and random graphs with low-rank edge probability matrices*, Sankhya A, 84 (2022), p. 36.

[38] Athreya A., Fishkind D. E., Tang M., Priebe C. E., Park Y., Vogelstein J. T., Levin K., Lyzinski V., Qin Y. et Sussman D. L., *Statistical inference on random dot product graphs: A survey*, J. Mach. Learn. Res., 18 (2018), p. 1.

[39] Autonne L., *Sur les matrices hypohermitiennes et sur les matrices unitaires*, Ann. Univ. Lyon, 38 (1915), p. 1.

[40] Bai Z. et Silverstein J. W., *Spectral Analysis of Large Dimensional Random Matrices*, Springer, New York, 2 éd., 2010.

[41] Bai Z. D., *Circular law*, Ann. Probab., 25 (1997), p. 494.

[42] Baik J., Ben Arous G. et Péché S., *Phase transition of the largest eigenvalue for nonnull complex sample covariance matrices*, Ann. Probab., 33 (2005), p. 1643.

[43] Barabási A.-L., *Network science*, Cambridge University Press, 2016.

[44] Barabási A.-L. et Albert R., *Emergence of scaling in random networks*, Science, 289 (1999), p. 509.

[45] Barnes E. R., *An algorithm for partitioning the nodes of a graph*, SIAM J. Alg. Disc. Meth., 3 (1982), p. 541.

[46] Barnes E. R. et Hoffman A. J., *Patitioning, spectra and linear programming*, dans Prog. Comb. Optim., Pulleyblank W. R., éd., vol. 45, Academic Press, 1984, p. 13.

[47] Barnett L. et Seth A. K., *Dynamical independence: Discovering emergent macroscopic processes in complex dynamical systems*, Phys. Rev. E, 108 (2023), p. 014304.

[48] Bartolucci S., Caccioli F., Caravelli F. et Vivo P., *Distribution of centrality measures on undirected random networks via the cavity method*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 121 (2024), p. e2403682121.

[49] Battiston F., Amico E., Barrat A., Bianconi G., Arruda G. F.d. , Franceschiello B., Iacopini I. et Kéfi S., *The physics of higher-order interactions in complex systems*, Nat. Phys., 17 (2021), p. 1093.

[50] Battiston F., Cencetti G., Iacopini I., Latora V., Lucas M., Patania A., Young J.-G. et Petri G., *Networks beyond pairwise interactions: Structure and dynamics*, Phys. Rep., 874 (2020), p. 1.

[51] Beckermann B. et Townsend A., *On the singular values of matrices with displacement structure*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 38 (2017), p. 1227.

[52] Beer R. D., *The dynamics of adaptive behavior: A research program*, Robot. Auton. Syst., 20 (1997), p. 257.

[53] Beiran M., Dubreuil A., Valente A., Mastrogiuseppe F. et Ostojic S., *Shaping dynamics with multiple populations in low-rank recurrent networks*, Neural Comput., 33 (2021), p. 1572.

[54] Bellman R., *Dynamic Programming*, Princeton University Press, Princeton, 1957.

[55] Ben-Israel A. et Greville T. N. E., *Generalized Inverses : Theory and Applications*, Springer, New York, 2 éd., 2003.

[56] Benaych-Georges F. et Nadakuditi R. R., *The eigenvalues and eigenvectors of finite, low rank perturbations of large random matrices*, Adv. Math., 227 (2011), p. 494.

[57] Benaych-Georges F. et Nadakuditi R. R., *The singular values and vectors of low rank perturbations of large rectangular random matrices*, J. Multivar. Anal., 111 (2012), p. 120.

[58] Berge C., *Hypergraphs*, North-Holland, 1989.

[59] Bialek W. S., *Biophysics : Searching for Principles*, Princeton University Press, 2012.

[60] Bianconi G., *Entropy of network ensembles*, Phys. Rev. E, 79 (2009), p. 036114.

[61] ——, *Higher-Order Networks*, Cambridge University Press, Cambridge, 2021.

[62] Bianconi G., Arenas A., Biamonte J., Carr L. D., Kahng B., Kertesz J., Kurths J., Lü L., Masoller C., Motter A. E., Perc M., Radicchi F., Ramaswamy R., Rodrigues F. A., Sales-Pardo M., Miguel M. S., Thurner S. et Yasseri T., *Complex systems in the spotlight: next steps after the 2021 nobel prize in physics*, J. Phys. Complex., 4 (2023), p. 010201.

[63] Bick C., Goodfellow M., Laing C. R. et Martens E. A., *Understanding the dynamics of biological and neural oscillator networks through exact mean-field reductions: a review*, J. Math. Neurosc., 10 (2020), p. 1.

[64] Bick C., Panaggio M. J. et Martens E. A., *Chaos in Kuramoto oscillator networks*, Chaos, 28 (2018), p. 071102.

[65] Blanes S., Casas F., Oteo J. A. et Ros J., *The Magnus expansion and some of its applications*, Phys. Rep., 470 (2009), p. 151.

[66] Bloemendal A. et Virág B., *Limits of spiked random matrices i*, Probab. Theory Relat. Fields, 156 (2013), p. 795.

[67] ——, *Limits of spiked random matrices ii*, Ann. Probab., 44 (2016), p. 2726.

[68] Bluman G. W. et Anco S. C., *Symmetry and Integration Methods for Differential Equations*, Springer, New York, 2002.

[69] Boccaletti S., Pisarchik A. N., Del Genio C. I. et Amann A., *Synchronization : From Coupled Systems to Complex Networks*, Cambridge University Press, 2018.

[70] Bollobás B., *Modern Graph Theory*, Springer, New York, 1998.

[71] Bollobas B., *Random Graphs*, Cambridge University Press, 2001.

[72] Bonacich P., *Factoring and weighting approaches to status scores and clique identification*, J. Math. Sociol., 2 (1972), p. 113.

[73] ——, *Power and Centrality: A Family of Measures*, Am. J. Sociol., 92 (1987), p. 1170.

[74] Bondy J. A. et Murty U. S. R., *Graph Theory*, Springer, 2008.

[75] Borgqvist J., Ohlsson F. et Baker R. E., *Symmetries of systems of first order ODEs: Symbolic symmetry computations, mechanistic model construction and applications in biology*, arXiv :2008.10543, (2022).

[76] Böttcher L. et Porter M. A., *Complex networks with complex weights*, Phys. Rev. E, 109 (2024), p. 024314.

[77] Bourbaki N., *Groupes et algèbres de Lie : Chapitres 2 et 3*, Springer, 2006.

[78] ——, *Topologie Générale : Chapitres 1 à 4*, Springer, 2007.

[79] Bourlard H. et Kabil S. H., *Autoencoders reloaded*, Biol. Cybern., 116 (2022), p. 389.

[80] Bourlard H. et Kamp Y., *Auto-association by multilayer perceptrons and singular value decomposition*, Biol. Cybern., 59 (1988), p. 291.

[81] Boyd S. et Vandenberghe L., *Convex Optimization*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.

[82] Bramburger J. J., *Data-Driven Methods for Dynamic Systems*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 2024.

[83] Brandes U., Lerner J., Nagel U. et Nick B., *Structural trends in network ensembles*, dans Complex Networks : Results of the 2009 International Workshop on Complex Networks (CompleNet 2009), 2009, p. 83.

[84] Broido A. D. et Clauset A., *Scale-free networks are rare*, Nat. Commun., 10 (2019), p. 1017.

[85] Bronski J. C., Carty T. E. et Simpson S. E., *A Matrix-Valued Kuramoto Model*, J. Stat. Phys., 178 (2020), p. 595.

[86] Brown K. S. et Sethna J. P., *Statistical mechanical approaches to models with many poorly known parameters*, Phys. Rev. E, 68 (2003), p. 021904.

[87] Brunton S. L., Brunton B. W., Proctor J. L. et Kutz J. N., *Koopman invariant subspaces and finite linear representations of nonlinear dynamical systems for control*, PLoS One, 11 (2016).

[88] Brunton S. L., Budišić M., Kaiser E. et Kutz J. N., *Modern Koopman theory for dynamical systems*, SIAM Rev., 64 (2022), p. 229.

[89] Brunton S. L. et Kutz J. N., *Data-Driven Science and Engineering : Machine Learning, Dynamical Systems, and Control*, Cambridge University Press, 2019.

[90] Bryson J., Vershynin R. et Zhao H., *Marchenko-pastur law with relaxed independence conditions*, Random Matrices : Theory Appl., 10 (2021), p. 2150040.

[91] Budišić M., Mohr R. et Mezić I., *Applied koopmanism*, Chaos, 22 (2012), p. 047510.

[92] Buendía V., *Mesoscopic theory for coupled stochastic oscillators*, Phys. Rev. Lett., 134 (2025), p. 197201.

[93] Burda Z., Duda J., Luck J. M. et Waclaw B., *Localization of the maximal entropy random walk*, Phys. Rev. Lett., 102 (2009), p. 160602.

[94] Burylko O., Martens E. A. et Bick C., *Symmetry breaking yields chimeras in two small populations of Kuramoto-type oscillators*, Chaos, 32 (2022).

[95] Cai J.-F., Candès E. J. et Shen Z., *A singular value thresholding algorithm for matrix completion*, SIAM J. Optim., 46 (2010), p. 1956.

[96] Campbell L. L., *Minimum coefficient rate for stationary random processes*, Inf. Control, 3 (1960), p. 360.

[97] Cangelosi R. et Goriely A., *Component retention in principal component analysis with application to cDNA microarray data*, Biol. Direct, 2 (2007), p. 1.

[98] Capitaine M., Donati-Martin C. et Féral D., *The largest eigenvalues of finite rank deformation of large wigner matrices: convergence and nonuniversality of the fluctuation*, Ann. Probab., 37 (2009), p. 1.

[99] Carathéodory C., *The beginning of research in the calculus of variations*, Osiris, 3 (1937), p. 224.

[100] ——, *Calculus of Variations and Partial Differential Equations of the first order*, Chelsea Publishing Company, 3 éd., 1989.

[101] Carlberg K., Barone M. et Antil H., *Galerkin v. least-squares Petrov–Galerkin projection in nonlinear model reduction*, J. Comput. Phys., 330 (2017), p. 693.

[102] Carleman T., *Application de la théorie des équations intégrales linéaires aux systèmes d'équations différentielles non linéaires*, Acta Math., 59 (1932), p. 63.

[103] Castellano C. et Pastor-Satorras R., *Topological determinants of complex networks spectral properties: structural and dynamical effects*, Phys. Rev. X, 7 (2017), p. 041024.

[104] Castiglione P., Falcioni M., Lesne A. et Vulpiani A., *Chaos and Coarse Graining in Statistical Mechanics*, Cambridge University Press, 2008.

[105] Cestnik R. et Martens E. A., *Integrability of a globally coupled complex Riccati array: Quadratic integrate-and-fire neurons, phase oscillators, and all in between*, Phys. Rev. Lett., 132 (2024), p. 057201.

[106] Cestnik R. et Pikovsky A., *Exact finite-dimensional reduction for a population of noisy oscillators and its link to Ott-Antonsen and Watanabe-Strogatz theories*, Chaos, 32 (2022), p. 113126.

[107] ——, *Hierarchy of exact low-dimensional reductions for populations of coupled oscillators*, Phys. Rev. Lett., 128 (2022), p. 054101.

[108] Chandra S., Girvan M. et Ott E., *Continuous versus Discontinuous Transitions in the D -Dimensional Generalized Kuramoto Model : Odd D is Different*, Phys. Rev. X, 9 (2019), p. 011002.

[109] Chaudhuri R. et Fiete I., *Computational principles of memory*, Nat. Neurosci., 19 (2016), p. 394.

[110] Chebotarev A. M. et Teretenkov A. E., *Singular value decomposition for the Takagi factorization of symmetric matrices*, Appl. Math. Comput., 234 (2014), p. 380.

[111] Chen B., Engelbrecht J. R. et Mirollo R., *Hyperbolic geometry of Kuramoto oscillator networks*, J. Phys. A Math. Theor., 50 (2017), p. 355101.

[112] Chen B., Engelbrecht J. R. et Mirollo R., *Dynamics of the Kuramoto-Sakaguchi oscillator network with asymmetric order parameter*, Chaos, 29 (2019), p. 013126.

[113] Chen H., Sun Y., Gao J., Xu C. et Zheng Z., *Order parameter analysis of synchronization transitions on star networks*, Front. Phys., 12 (2017), p. 120504.

[114] Chen Z., Zou Y., Guan S., Liu Z. et Kurths J., *Fully solvable lower dimensional dynamics of Cartesian product of Kuramoto models*, New J. Phys., 21 (2019), p. 123019.

[115] Cho Y. S., Nishikawa T. et Motter A. E., *Stable chimeras and independently synchronizable clusters*, Phys. Rev. Lett., 119 (2017), p. 084101.

[116] Chong E. K. P. et Zak S. H., *An Introduction to Optimization*, Wiley, New Jersey, 4 éd., 2013.

[117] Chow C. C. et Karimipanah Y., *Before and beyond the Wilson–Cowan equations*, J. Neurophysiol., 123 (2020), p. 1645.

[118] Chung F., *Spectral Graph Theory*, CBMS, Rhode Island, 1994.

[119] Chung F. et Lu L., *Connected components in random graphs with given expected degree sequences*, Ann. Comb., 6 (2002), p. 125.

[120] ——, *The average distances in random graphs with given expected degrees*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 99 (2002), p. 15879.

[121] Chung F., Lu L. et Vu V., *Eigenvalues of random power law graphs*, Ann. Comb., 7 (2003), p. 21.

[122] ——, *Spectra of random graphs with given expected degrees*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 100 (2003), p. 6313.

[123] Chung F. et Radcliffe M., *On the spectra of general random graphs*, Electron. J. Comb., 18 (2011), p. P215.

[124] Cimini G., Squartini T., Saracco F., Garlaschelli D., Gabrielli A. et Caldarelli G., *The statistical physics of real-world networks*, Nat. Rev. Phys., 1 (2019), p. 58.

[125] Cionca A., Chan C. H. M. et Ville D. V. D., *Community detection for directed networks revisited using bimodularity*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 122 (2025).

[126] Claveau B., *Perspective spectrale sur la dynamique des systèmes complexes par la théorie de Koopman*, mémoire de maîtrise, Université Laval, 2025.

[127] Cohen M. A. et Grossberg S., *Absolute stability of global pattern formation and parallel memory storage by competitive neural networks*, IEEE Trans. Syst. Man Cybern., SMC-13 (1983), p. 815.

[128] Cohen M. B., Nelson J. et Woodruff D. P., *Optimal approximate matrix product in terms of stable rank*, dans 43rd Int. Colloq. Autom. Lang. Program. (ICALP 2016), vol. 55, 2016, p. 11.

[129] Colbrook M. J. et Townsend A., *Rigorous data-driven computation of spectral properties of Koopman operators for dynamical systems*, Commun. Pure Appl. Math., 77 (2023), p. 221.

[130] Coletta L., Pagani M., Whitesell J. D., Harris J. A., Bernhardt B. et Gozzi A., *Network structure of the mouse brain connectome with voxel resolution*, Sci. Adv., 6 (2020), p. eabb7187.

[131] Cook N., *The circular law for random regular digraphs with random edge weights*, Random Matrices : Theory and Applications, 6 (2017), p. 1750012.

[132] Cook R. D., *A slice of multivariate dimension reduction*, J. Multivar. Anal., 188 (2022), p. 104812.

[133] Cook S. J., Jarrell T. A., Brittin C. A., Wang Y., Bloniarz A. E., Yakovlev M. A., Nguyen K. C. Q., Tang L. T.-H., Bayer E. A., Duerr J. S., Bülow H. E., Hobert O., Hall D. H. et Emmons S. W., *Whole-animal connectomes of both Caenorhabditis elegans sexes*, Nature, 571 (2019), p. 63.

[134] Costello K. P. et Vu V., *On the rank of random sparse matrices*, Combinatorics, Probability and Computing, 19 (2010), p. 321.

[135] Cowan J. D., *Stochastic neurodynamics*, dans Adv. Neural Inf. Process. Syst., vol. 3, 1990, p. 62.

[136] Cvetkovic D. M., Doob M. et Sachs H., *Spectra of graphs. Theory and application*, 1980.

[137] Darboux G., *Mémoire sur les équations différentielles algébriques du premier ordre et du premier degré*, Bulletin des sciences mathématiques et astronomiques, (1878), p. 60.

[138] De Domenico M., Solé-Ribalta A., Cozzo E., Kivela M., Moreno Y., Sole A., Arenas A., Porter M. A., Gomez S. et Arenas A., *Mathematical formulation of multilayer networks*, Phys. Rev. X, 3 (2013), p. 041022.

[139] Solla Price D.d. , *A general theory of bibliometric and other cumulative advantage processes*, J. Am. Soc. Inf. Sci., 27 (1976), p. 292.

[140] Delabays R., Jacquod P. et Dörfler F., *The Kuramoto model on oriented and signed graphs*, SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 18 (2019), p. 458.

[141] Descartes R., *Discours de la Méthode*, Collection Résurgences, 1995 [1637].

[142] Desrosiers P. et Forrester P., *Asymptotic correlations for Gaussian and Wishart matrices with external source*, Int. Math. Res. Not., 2006 (2006), p. 27395.

[143] Desrosiers P. et Roy-Pomerleau X., *One for all*, Nat. Phys., 18 (2022), p. 238.

[144] Destexhe A. et Sejnowski T. J., *The Wilson-Cowan model, 36 years later*, Biol. Cybern., 101 (2009), p. 1.

[145] D'Huys O., Vicente R., Erneux T., Danckaert J. et Fischer I., *Synchronization properties of network motifs: Influence of coupling delay and symmetry*, Chaos, 18 (2008).

[146] Di Francesco P., Mathieu P. et Sénéchal D., *Conformal field theory*, Springer, 1997.

[147] Ding C., Li T. et Jordan M. I., *Convex and semi-nonnegative matrix factorizations*, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell., 32 (2010), p. 45.

[148] Ding C., Li T., Peng W. et Park H., *Orthogonal nonnegative matrix tri-factorizations for clustering*, Proc. 12th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discov. data Min. , (2006), p. 126.

[149] *NIST Digital Library of Mathematical Functions*. `https://dlmf.nist.gov/`, Release 1.1.9 of 2023-03-15. F. W. J. Olver, A. B. Olde Daalhuis, D. W. Lozier, B. I. Schneider, R. F. Boisvert, C. W. Clark, B. R. Miller, B. V. Saunders, H. S. Cohl, and M. A. McClain, eds.

[150] Donath W. E. et Hoffman A. J., *Lower Bounds for the Partitioning of Graphs.*, IBM J. Res. Dev., 17 (1973), p. 420.

[151] Donoho D., Gavish M. et Johnstone I., *Optimal shrinkage of eigenvalues in the spiked covariance model1*, Ann. Statis., 46 (2018), p. 1742.

[152] Dörfler F. et Bullo F., *Synchronization in complex networks of phase oscillators : A survey*, Automatica, 50 (2014), p. 1539.

[153] Dorkenwald S., Matsliah A., Sterling A. R., Schlegel P., Yu S.-C., McKellar C. E., Lin A., Costa M., Eichler K., Yin Y., Silversmith W., Schneider-Mizell C., Jordan C. S., Brittain D., Halageri A., Kuehner K., Ogedengbe O., Morey R., Gager J., Kruk K., Perlman E., Yang R., Deutsch D., Bland D., Sorek M., Lu R., Macrina T., Lee K., Bae J. A., Mu S., Nehoran B., Mitchell E., Popovych S., Wu J., Jia Z., Castro M., Kemnitz N., Ih D., Bates A. S., Eckstein N., Funke J., Collman F., Bock D. D., Jefferis G. S. X. E., Seung H. S., Murthy M. et Consortium F., *Neuronal wiring diagram of an adult brain*, Nature, 634 (2024), p. 124.

[154] Dorogovtsev S. N., Goltsev A. V. et Mendes J. F., *k-core organization of complex networks*, Phys. Rev. Lett., 96 (2006), p. 040601.

[155] Dorogovtsev S. N., Goltsev A. V. et Mendes J. F. F., *Critical phenomena in complex networks*, Rev. Mod. Phys., 80 (2008), p. 1275.

[156] Dorogovtsev S. N., Goltsev A. V., Mendes J. F. F. et Samukhin A. N., *Spectra of complex networks*, Phys. Rev. E, 68 (2003), p. 046109.

[157] Dyson F., *A meeting with enrico fermi*, Nature, 427 (2004), p. 297.

[158] Désy B., Desrosiers P. et Allard A., *Dimension matters when modeling network communities in hyperbolic spaces*, PNAS Nexus, 2 (2023), p. 1.

[159] E. Zauderer , *Partial Differential Equation of Applied Mathematics*, Wiley-Interscience, 2006.

[160] Eckart C. et Young G., *The approximation of one matrix by another of lower rank*, Psychometrika, 1 (1936), p. 211.

[161] Editors , *Georgii Ivanovich Petrov (on his 100th birthday)*, Fluid Dyn., 47 (2012), p. 289.

[162] Eilertsen G., Jönsson D., Ropinski T., Unger J. et Ynnerman A., *Classifying the classifier : dissecting the weight space of neural networks*, Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence (ECAI 2020), 325 (2020), p. 1119.

[163] Einstein A., *On the method of theoretical physics*, Philos. Sci., 1 (1934), p. 163.

[164] Eisner T., Farkas B., Haase M. et Nagel R., *Operator Theoretic Aspects of Ergodic Theory*, Springer, New York, 2015.

[165] Engel K.-J. et Nagel R., *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*, Springer, 2000.

[166] Engelbrecht J. R. et Mirollo R., *Classification of attractors for systems of identical coupled kuramoto oscillators*, Chaos, 24 (2014), p. 013114.

[167] Engelbrecht J. R. et Mirollo R., *Is the Ott-Antonsen manifold attracting?*, Phys. Rev. Research, 2 (2020), p. 023057.

[168] Erdős P. et Rényi A., *On the evolution of random graphs*, Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci, 5 (1960), p. 17.

[169] Ermann L., Frahm K. M. et Shepelyansky D. L., *Spectral properties of Google matrix of Wikipedia and other networks*, Eur. Phys. J. B., 86 (2013), p. 193.

[170] Ermentrout G. B. et Kopell N., *Parabolic bursting in an excitable system coupled with a slow oscillation*, SIAM J. Appl. Math., 46 (1986), p. 233.

[171] Ermentrout G. B. et Terman D. H., *Mathematical Foundations of Neuroscience*, Springer, 2010.

[172] Español P., *Statistical Mechanics of Coarse-graining*, dans Nov. Methods Soft Matter Simulations, Karttunen M., Vattulainen I. et Lukkarinen A., éds., vol. 140, Springer, Berlin, 2003, p. 69.

[173] Estes J. A., Terborgh J., Brashares J. S., Power M. E., Berger J., Bond W. J., Carpenter S. R., Essington T. E., Holt R. D., Jackson J. B. C., Marquis R. J., Oksanen L., Oksanen T., Paine R. T., Pikitch E. K., Ripple W. J., Sandin S. A., Scheffer M., Schoener T. W., Shurin J. B., Sinclair A. R. E., Soulé M. E., Virtanen R. et Wardle D. A., *Trophic downgrading of planet earth*, Science, 333 (2011), p. 301.

[174] Estrada E., *What is a complex system, after all?*, Found. Sci., 29 (2024), p. 1143.

[175] Estrada E. et Knight P., *A first course on network science*, Oxford University Press, 2015.

[176] Evans L. C., *Partial Differential Equations*, American Mathematical Society, 2 éd., 2010.

[177] Everson R. et Sirovich L., *Karhunen-Lòeve procedure for gappy data*, J. Opt. Soc. Am. A, 12 (1995), p. 1657.

[178] Faccin M., Schaub M. T. et Delvenne J. C., *State Aggregations in Markov Chains and Block Models of Networks*, Phys. Rev. Lett., 127 (2021), p. 078301.

[179] Fan K., *Maximum properties and inequalities for the eigenvalues of completely continuous operators*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 37 (1951), p. 760.

[180] Fan K. et Hoffman A. J., *Some metric inequalities in the space of matrices*, Proc. Am. Math. Soc., 6 (1955), p. 111.

[181] Farkas I., Derényi I., Barabási A.-L. et Viscek T., *Spectra of "real-world" graphs: Beyond the semicircle law ´*, Phys. Rev. E, 64 (2001), p. 026704.

[182] Fenyves B. G., Szilágyi G. S., Vassy Z., Sőti C. et Csermely P., *Synaptic polarity and sign-balance prediction using gene expression data in the Caenorhabditis elegans chemical synapse neuronal connectome network*, PLOS Comput. Biol., 16 (2020), p. e1007974.

[183] Féral D. et Péché S., *The largest eigenvalue of rank one deformation of large wigner matrices*, Commun. Math. Phys., 272 (2007), p. 185.

[184] Ferraz de Arruda G., Tizzani M. et Moreno Y., *Phase transitions and stability of dynamical processes on hypergraphs*, Commun. Phys., 4 (2021), p. 24.

[185] Ferré L., *Selection of components in principal component analysis: A comparison of methods*, Comput. Stat. Data Anal., 19 (1995), p. 669.

[186] Fetcho J. R., *What matters most about zebrafish work (to me at least)*. Keynote presentation, Cold Spring Harbor Laboratory, 2023. https://www.youtube.com/watch?v=wUaB0aaCfIY.

[187] Fiedler M., *A property of eigenvectors of nonnegative symmetric matrices and its application to graph theory*, Czechoslov. Math. J., 25 (1975), p. 619.

[188] Field M. J., *Dynamics and symmetry*, Imperial College Press, 2007.

[189] Filatrella G., Nielsen A. H. et Pedersen N. F., *Analysis of a power grid using a Kuramoto-like model*, Eur. Phys. J. B, 61 (2008), p. 485.

[190] Flaschka H., *The Toda lattice. II. Existence of integrals*, Phys. Rev. B, 9 (1974), p. 1924.

[191] Forni F. et Sepulchre R., *Differential dissipativity theory for dominance analysis*, IEEE Trans. Autom. Control, 64 (2019), p. 2340.

[192] Forrester P. J., *Log-Gases and Random Matrices*, Princeton University Press, New Jersey, 2010.

[193] Forrow A., Woodhouse F. G. et Dunkel J., *Functional control of network dynamics using designed Laplacian spectra*, Phys. Rev. X, 8 (2018), p. 41043.

[194] Fortunato S. et Hric D., *Community detection in networks: A user guide*, Phys. Rep., 659 (2016), p. 1.

[195] Fortunato S. et Newman M. E. J., *20 years of network community detection*, Nat. Phys., 18 (2022), p. 848.

[196] Frobenius G., *Über Matrizen aus positiven Elementen, 1*, Sitzber. K. Preuss. Aka., (1908), p. 471.

[197] ——, *Über Matrizen aus positiven Elementen, 2*, Sitzber. K. Preuss. Aka., (1909), p. 514.

[198] Fruchart M., Hanai R., Littlewood P. B. et Vitelli V., *Non-reciprocal phase transitions*, Nature, 592 (2021), p. 363.

[199] Frédérick P.-M., *Étude des mécanismes de modulation du microRNA Induced Silencing Complex chez C. elegans*, thèse de doctorat, Université Laval, 2025.

[200] Frédérick P.-M., Jannot G., Banville I. et Simard M. J., *Interaction between a j-domain co-chaperone and a specific argonaute protein contributes to microrna function in animals*, Nucleic Acids Res., 52 (2024), p. 6253.

[201] Fujimoto K., *What are singular values of nonlinear operators?*, dans 43rd IEEE Conf. Decis. Control, 2004, p. 1623.

[202] Funahashi K. I. et Nakamura Y., *Approximation of dynamical systems by continuous time recurrent neural networks*, Neural Netw., 6 (1993), p. 801.

[203] Furedi Z. et Komlos J., *The eigenvalues of random symmetric matrices*, Combinatorica, 1 (1981), p. 233.

[204] Gaeta G., *Nonlinear Symmetries and Nonlinear Equations*, Springer, 1994.

[205] Gallo G., Longo G., Pallottino S. et Nguyen S., *Directed hypergraphs and applications*, Discret. Appl. Math., 42 (1993), p. 177.

[206] Gander M. J. et Wanner G., *From Euler, Ritz, and Galerkin to modern computing*, SIAM Rev., 54 (2012), p. 627.

[207] Ganguli S. et Sompolinsky H., *Compressed sensing, sparsity, and dimensionality in neuronal information processing and data analysis*, Annu. Rev. Neurosci., 35 (2012), p. 485.

[208] Gao J., Barzel B. et Barabási A.-L., *Universal resilience patterns in complex networks*, Nature, 530 (2016), p. 307.

[209] Gao J., Cao Y. et Lee J.-M., *Principal component analysis of $1/f^{\alpha}$ noise*, Phys. Lett. A, 314 (2003), p. 392–400.

[210] Gao P. et Ganguli S., *On simplicity and complexity in the brave new world of large-scale neuroscience*, Curr. Opin. Neurobiol., 32 (2015), p. 148.

[211] García-Pérez G., Boguñá M. et Serrano M. Á., *Multiscale unfolding of real networks by geometric renormalization*, Nat. Phys., 14 (2018), p. 583.

[212] Gardiner C. W., *Handbook of Stochastic Methods*, Springer, 3 éd., 2004.

[213] Garlaschelli D., *The weighted random graph model*, New J. Phys., 11 (2009), p. 073005.

[214] Garlaschelli D. et Loffredo M. I., *Generalized Bose-Fermi statistics and structural correlations in weighted networks*, Phys. Rev. Lett., 102 (2009), p. 038701.

[215] Gavish M. et Donoho D. L., *The optimal hard threshold for singular values is $4/\sqrt{3}$*, IEEE Trans. Inf. Theory, 60 (2014), p. 5040.

[216] ——, *Optimal shrinkage of singular values*, IEEE Trans. Inf. Theory, 63 (2017), p. 2137.

[217] Georgeot B., Giraud O. et Shepelyansky D. L., *Spectral properties of the Google matrix of the World Wide Web and other directed networks*, Phys. Rev. E, 81 (2010), p. 056109.

[218] Gerbrands J. J., *On the relationships between SVD, KLT and PCA*, Pattern Recognit., 14 (1981), p. 375.

[219] Gfeller D. et De Los Rios P., *Spectral coarse graining of complex networks*, Phys. Rev. Lett., 99 (2007), p. 038701.

[220] ——, *Spectral coarse graining and synchronization in oscillator networks*, Phys. Rev. Lett., 100 (2008), p. 174104.

[221] Gilbert E. N., *Random graphs*, Ann. Math. Stat., 30 (1959), p. 1141.

[222] Ginibre J., *Statistical ensembles of complex, quaternion, and real matrices*, J. Math. Phys., 6 (1965), p. 440.

[223] Giorgi G. et Kjeldsen T. H., éds., *Traces and emergence of nonlinear programming*, Birkhauser, New York, 2014.

[224] Girko V. L., *Circular law*, Theory Probab. Its Appl., 29 (1983), p. 694.

[225] Girko V. L., *Elliptic law*, Theory Probab. Appl., 30 (1986), p. 677.

[226] Glauber R. J., *Time-Dependent Statistics of the Ising Model*, J. Math. Phys., 4 (1963), p. 294.

[227] Goebel C. J., *Comment on "Constants of motion for superconductor arrays"*, Physica D, 80 (1995), p. 18.

[228] Goldobin D. S., *Relationships between the distribution of Watanabe-Strogatz variables and circular cumulants for ensembles of phase elements*, Fluct. Noise Lett., 18 (2019), p. 1.

[229] Goldobin D. S. et Dolmatova A. V., *Ott-Antonsen ansatz truncation of a circular cumulant series*, Phys. Rev. Res., 1 (2019), p. 033139.

[230] Goldobin D. S., Tyulkina I. V., Klimenko L. S. et Pikovsky A., *Collective mode reductions for populations of coupled noisy oscillators*, Chaos, 28 (2018), p. 101101.

[231] Goldobin D. S., Volo M. D. et Torcini A., *Reduction methodology for fluctuation driven population dynamics*, Phys. Rev. Lett., 127 (2021).

[232] Goltsev A. V., Dorogovtsev S. N., Oliveira J. G. et Mendes J. F. F., *Localization and spreading of diseases in complex networks*, Phys. Rev. Lett., 109 (2012), p. 128702.

[233] Golub G. H., Hoffman A. et Stewart G. W., *A generalization of the Eckart-Young-Mirsky matrix approximation theorem*, Linear Algebr. Appl., 8 (1987), p. 317.

[234] Golub G. H. et Van Loan C. F., *Matrix Computations*, John Hopkins University Press, 4 éd., 2013.

[235] Golubitsky M. et Stewart I., *The Symmetry Perspective : From Equilibrium to Chaos in Phase Space and Physical Space*, Springer Basel AG, 2002.

[236] ——, *Nonlinear dynamics on networks: The groupoid formalism*, Bull. Am. Math. Soc., 43 (2006), p. 305.

[237] ——, *Dynamics and Bifurcation in Networks : Theory and Applications of Coupled Differential Equations*, SIAM, 2023.

[238] Golubitsky M., Stewart I., Buono P.-L. et Collins J. J., *Symmetry in locomotor central pattern generators and animal gaits*, Nature, 401 (1999), p. 693.

[239] Gómez-Gardeñes J., Gomez S., Arenas A. et Moreno Y., *Explosive synchronization transitions in scale-free networks*, Phys. Rev. Lett., 106 (2011), p. 128701.

[240] Gong C. C. et Pikovsky A., *Low-dimensional dynamics for higher order harmonic globally coupled phase oscillator ensemble*, arXiv :1909.07718, (2019).

[241] González-Gascón F. et Moreno-Insertis F., *Symmetries, first integrals and splittability of dynamical systems*, Lett. Al Nuovo Cim., 21 (1978), p. 253.

[242] Goriely A., *Integrability, partial integrability, and nonintegrability for systems of ordinary differential equations*, J. Math. Phys., 37 (1996), p. 1871.

[243] Goriely A., *Integrability and Nonintegrability of Dynamical Systems*, World Scientific, 2001.

[244] Gottwald G. A., *Model reduction for networks of coupled oscillators*, Chaos, 25 (2015), p. 053111.

[245] ——, *Finite-size effects in a stochastic Kuramoto model*, Chaos, 27 (2017), p. 101103.

[246] Götze F. et Tikhomirov A., *The circular law for random matrices*, Ann. Probab., 38 (2010), p. 1444.

[247] Gould H. et Tobochnik J., *Statistical and Thermal Physics : With Computer Applications*, Princeton University Press, 2010.

[248] Gower J., *Properties of Euclidean and non-Euclidean distance matrices*, Linear Algebra Appl., 67 (1985), p. 81.

[249] Grilli J., Barabás G., Michalska-Smith M. J. et Allesina S., *Higher-order interactions stabilize dynamics in competitive network models*, Nature, 548 (2017), p. 210.

[250] Grossberg S., *Nonlinear neural networks: Principles, mechanisms, and architectures*, Neural Netw., 1 (1988), p. 17.

[251] Guckenheimer J. et Holmes P., *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer, 1983.

[252] Guionnet A., *Bernoulli random matrices*, arXiv :2112.05506, (2021).

[253] Gunning R. C., *Introduction to Holomorphic Functions of Several Variables, Volume I : Function Theory*, Wadsworth & Brooks/Cole, 1990.

[254] Gutman I., *The energy of a graph: Old and new results*, Algebr. Comb. Appl., (2001), p. 196.

[255] Götze F. et Tikhomirov A., *Rate of convergence in probability to the marchenko-pastur law*, Bernoulli, 10 (2004), p. 503.

[256] Hadjiabadi D., Lovett-Barron M., Raikov I. G., Sparks F. T., Liao Z., Baraban S. C., Leskovec J., Losonczy A., Deisseroth K. et Soltesz I., *Maximally selective single-cell target for circuit control in epilepsy models*, Neuron, 109 (2021), p. 2556.

[257] Hahnloser R. H. R. et Seung H. S., *Permitted and forbidden sets in symmetric threshold-linear networks*, dans Adv. Neural Inf. Process. Syst., 2000.

[258] Hanson J. et Raginsky M., *Universal simulation of stable dynamical systems by recurrent neural nets*, Proc. Mach. Learn. Res., 120 (2020), p. 1.

[259] Harvey N., *Low-rank approximation of matrices*, 2011. Lecture 15, Section 1, University of British Columbia.

[260] Hashimoto K., *Zeta Functions of Finite Graphs and Representations of p-Adic Groups*, Adv. Stud. Pure Math., 15 (1989), p. 211.

[261] Healy J. et McInnes L., *Uniform manifold approximation and projection*, Nat. Rev. Methods Prim., 4 (2024), p. 1.

[262] Hermans J., *Étude spectrale des réseaux de neurones aléatoires*, mémoire de maîtrise, Université Laval, 2024.

[263] Hernández-Bermejo B. et Fairén V., *Lotka-Volterra representation of general nonlinear systems*, Math. Biosci., 140 (1997), p. 1.

[264] Hilbert D., *Mathematische probleme*, dans Göttinger Nachrichten, 1900, p. 253.

[265] Hirsch M. W., *Convergent activation dynamics in continuous time networks*, Neural Netw., 2 (1989), p. 331.

[266] Hodgkin A. L. et Huxley A. F., *A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve*, Bulletin of Mathematical Biology, 117 (1952), p. 500.

[267] Hoefler T., Alistarh D., Ben-Nun T., Dryden N. et Peste A., *Sparsity in deep learning : Pruning and growth for efficient inference and training in neural networks*, J. Mach. Learn. Res., 23 (2021), p. 1.

[268] Hoffman A. J., *On eigenvalues and colorings of graphs*, dans Selected Papers of Alan J. Hoffman, Micchelli C. A., éd., World Scientific, 2003, p. 407.

[269] Hoffman A. J. et Wielandt H. W., *The variation of the spectrum of a normal matrix*, Duke Math. J., 20 (1953), p. 37.

[270] Holland J. H., *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, MIT Press, 1992.

[271] ——, *Hidden Order : How Adaptation Builds Complexity*, Addison-Wesley, 1995.

[272] Holland P. W., Laskey K. B. et Leinhardt S., *Stochastic blockmodels: First steps*, Soc. Netw., 5 (1983), p. 109.

[273] Holme P., *Rare and everywhere: Perspectives on scale-free networks*, Nat. Commun., 10 (2019), p. 1016.

[274] Holme P. et Saramäki J., *Temporal networks*, Phys. Rep., 519 (2012), p. 97.

[275] Hong H. et Strogatz S. H., *Conformists and contrarians in a Kuramoto model with identical natural frequencies*, Phys. Rev. E, 84 (2011), p. 046202.

[276] Hopfield J. J., *Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities.*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 79 (1982), p. 2554.

[277] Hopfield J. J., *Neurons with graded response have collective computational properties like those of two-state neurons*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 81 (1984), p. 3088.

[278] Horn R. A. et Johnson C. R., *Topics in matrix analysis*, Cambridge University Press, 1991.

[279] ——, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 2013.

[280] Hotelling H., *Analysis of a complex of statistical variables into principal components*, J. Educ. Psych., 24 (1933), p. 417.

[281] ——, *Analysis of a complex of statistical variables into principal components*, J. Educ. Psych., 24 (1933), p. 498.

[282] Hu E., Shen Y., Wallis P., Allen-Zhu Z., Li Y., Wang S., Wang L. et Chen W., *LoRA: Low-Rank Adaptation of Large Language Models*, arXiv :2106.09685v2, (2021), p. 1.

[283] Hydon P. E., *Symmetry Methods for Differential Equations : A Beginner's Guide*, Cambridge University Press, 2000.

[284] Hénon M., *Integrals of the Toda lattice*, Phys. Rev. B, 9 (1974), p. 1921.

[285] Ibragimov N. H., *Elementary Lie Group Analysis and Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, Chichester, 1999.

[286] Izhikevich E. M., *Dynamical Systems in Neuroscience*, MIT Press, 2007.

[287] Jasek S., Verasztó C., Brodrick E., Shahidi R., Kazimiers T. et Jékely G., *Desmosomal connectomics of all somatic muscles in an annelid larva*, eLife, 11 (2022), p. e71231.

[288] Jaynes E. T., *Information Theory and Statistical Mechanics*, Phys. Rev., 106 (1957), p. 620.

[289] Jaćimović V. et Crnkić A., *Low-dimensional dynamics in non-Abelian Kuramoto model on the 3-sphere*, Chaos, 28 (2018), p. 083105.

[290] Jiang J., Huang Z.-G., Seager T. P., Lin W., Grebogi C., Hastings A. et Lai Y.-C., *Predicting tipping points in mutualistic networks through dimension reduction.*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 115 (2018), p. E639.

[291] Johnson R. E., Linderman S., Panier T., Wee C. L., Song E., Herrera K. J., Miller A. et Engert F., *Probabilistic Models of Larval Zebrafish Behavior: Structure on Many Scales*, bioRxiv, (2019), p. 672246.

[292] Johnstone I. M., *On the distribution of the largest eigenvalue in principal components analysis*, Ann. Stat., 29 (2001), p. 295.

[293] Johnstone I. M. et Paul D., *PCA in high dimensions: An orientation*, Proc. IEEE, 106 (2018), p. 1277.

[294] Joseph I., *Koopman–von Neumann approach to quantum simulation of nonlinear classical dynamics*, Phys. Rev. Res., 2 (2020), p. 043102.

[295] Juhász F., *On the spectrum of a random graph*, Algebr. Methods Graph Theory, (1978), p. 313.

[296] Kadanoff L. P., *Scaling laws for Ising models near $T_c$*, Phys. Phys. Fiz., 2 (1966), p. 263.

[297] Kadmon J. et Sompolinsky H., *Transition to chaos in random neuronal networks*, Phys. Rev. X, 5 (2015), p. 041030.

[298] Kalloniatis A. C., *From incoherence to synchronicity in the network Kuramoto model*, Phys. Rev. E, 82 (2010), p. 066202.

[299] Kalman R. E., *Contributions to the theory of time-optimal control*, Bol. Soc. Mat. Mex., 5 (1960), p. 102.

[300] ——, *On the general theory of control systems*, dans 1st International IFAC Congress on Automatic and Remote Control, 1960, p. 491.

[301] Karatetskaia E., Kazakov A., Safonov K. et Turaev D., *Robust chaos in a totally symmetric network of four phase oscillators*, Phys. Rev. Lett., 134 (2025), p. 167201.

[302] Karhunen K., *Über lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung*, thèse de doctorat, University of Helsinki, 1947.

[303] Karrer B. et Newman M. E. J., *Stochastic blockmodels and community structure in networks*, Phys. Rev. E, 83 (2011), p. 016107.

[304] Karrer B., Newman M. E. J. et Zdeborová L., *Percolation on sparse networks*, Phys. Rev. Lett., 113 (2014), p. 208702.

[305] Katz L., *A new status index derived from sociometric analysis*, Psychometrika, 18 (1953), p. 39.

[306] Kazanovich Y. et Borisyuk R., *Synchronization in oscillator systems with a central element and phase shifts*, Prog. Theor. Phys., 110 (2003), p. 1047.

[307] Kerschen G., Golinval J.-C., Vakakis A. F. et Bergman L. A., *The method of proper orthogonal decomposition for dynamical characterization and order reduction of mechanical systems: An overview*, Nonlinear Dyn., 41 (2005), p. 147.

[308] Khatchatourian I., *MAT327–Introduction to topology*. University of Toronto, 2018.

[309] Kim R., Li Y. et Sejnowski T. J., *Simple framework for constructing functional spiking recurrent neural networks*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 116 (2019), p. 22811.

[310] Kim R. et Sejnowski T. J., *Strong inhibitory signaling underlies stable temporal dynamics and working memory in spiking neural networks*, Nat. Neurosci., 24 (2021), p. 129.

[311] Kiss I. Z., Miller J. C. et Simon P. L., *Mathematics of epidemics on networks : From exact to approximate models*, Springer, Cham, 2017.

[312] Klamt S., Haus U. U. et Theis F., *Hypergraphs and cellular networks*, PLoS Computational Biology, 5 (2009).

[313] Kleinberg J. M., *Authoritative sources in a hyperlinked environment*, dans SODA '98 : Proceedings of the ninth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms, 1998, p. 668.

[314] Klus S. et Djurdjevac Conrad N., *Dynamical systems and complex networks: A Koopman operator perspective*, J. Phys. Complex., 5 (2024), p. 041001.

[315] Koch O. et Lubich C., *Dynamical low-rank approximation*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 29 (2007), p. 434.

[316] Kong N. C. L., Margalit E., Gardner J. L. et Norcia A. M., *Increasing neural network robustness improves match to macaque v1 eigenspectrum, spatial frequency preference and predictivity*, PLoS Comput. Biol., 18 (2022), p. e1009739.

[317] Koopman B. O., *Hamiltonian systems and transformations in Hilbert Space*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 17 (1931), p. 315.

[318] Koopman B. O. et von Neumann J., *Dynamical systems of continuous spectra*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 18 (1932), p. 301.

[319] Kosack S., Coscia M., Smith E., Albrecht K., Barabási A.-L. et Hausmann R., *Functional structures of us state governments*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 115 (2018), p. 11748.

[320] Kotwal T., Jiang X. et Abrams D. M., *Connecting the Kuramoto model and the chimera state*, Phys. Rev. Lett., 119 (2017), p. 264101.

[321] Kowalski K. et Steeb W.-H., *Nonlinear Dynamical Systems and Carleman Linearization*, World Scientific, Singapore, 1991.

[322] Krakauer D., *The Complex World : An Introduction to the Foundations of Complexity Science*, SFI Press, 2025.

[323] Kreyszig E., *Introductory Functional Analysis with Applications*, John Wiley & Sons, 1978.

[324] Krioukov D., Papadopoulos F., Kitsak M., Vahdat A. et Boguná M., *Hyperbolic geometry of complex networks*, Phys. Rev. E, 82 (2010), p. 036106.

[325] Krumbeck Y., Yang Q., Constable G. W. A. et Rogers T., *Fluctuation spectra of large random dynamical systems reveal hidden structure in ecological networks*, Nat. Commun., 12 (2021), p. 3625.

[326] Kuehn C. et Bick C., *A universal route to explosive phenomena*, Sci. Adv., 7 (2021), p. 1.

[327] Kundu P., Kori H. et Masuda N., *Accuracy of a one-dimensional reduction of dynamical systems on networks*, Phys. Rev. E, 105 (2022), p. 024305.

[328] Kundu P. et Pal P., *Synchronization transition in Sakaguchi-Kuramoto model on complex networks with partial degree-frequency correlation*, Chaos, 29 (2019), p. 013123.

[329] Kunkel P. et Mehrmann V., *Differential-Algebraic Equations : Analysis and Numerical Solution*, European Mathematical Society, 2006.

[330] Kunst M., Laurell E., Mokayes N., Kramer A., Kubo F., Fernandes A. M., Förster D., Dal Maschio M. et Baier H., *A cellular-resolution atlas of the larval zebrafish brain*, Neuron, 103 (2019), p. 21.

[331] Kuo J. C. W. et Wei J., *A lumping analysis in monomolecular reaction systems: Analysis of the approximately lumpable system*, Ind. Eng. Chem. Fundamen., 8 (1969), p. 124.

[332] Kuramoto Y., *Self-entrainment of a population of coupled non-linear oscillators*, dans International Symposium on Mathematical Problems in Theoretical Physics, 1975, p. 420.

[333] Kuramoto Y. et Battogtokh D., *Coexistence of coherence and incoherence in nonlocally coupled phase oscillators.*, Nonlinear Phenom. Complex Syst., 5 (2002), p. 380.

[334] Kutz J. N., Brunton S. L. et Brunton B. W., *Dynamic Mode Decomposition*, SIAM, 2016.

[335] Kvalheim M. D. et Arathoon P., *Linearizability of flows by embeddings*, arXiv preprint :2305.18288, (2025).

[336] Kvalheim M. D. et Revzen S., *Existence and uniqueness of global Koopman eigenfunctions for stable fixed points and periodic orbits*, Physica D, 425 (2021), p. 132959.

[337] Kvalheim M. D. et Sontag E. D., *Global linearization of asymptotically stable systems without hyperbolicity*, Syst. Control Lett., 203 (2025), p. 106163.

[338] Kyrillidis A., Vlachos M. et Zouzias A., *Approximate matrix multiplication with application to linear embeddings*, IEEE Int. Symp. Inf. Theory, (2014), p. 2182.

[339] Ladyman J. et Wiesner K., *What Is a Complex System ?*, Yale University Press, New Haven, 2020.

[340] Lambiotte R., Rosvall M. et Scholtes I., *From networks to optimal higher-order models of complex systems*, Nat. Phys., 15 (2019), p. 313.

[341] Lambiotte R. et Schaub M. T., *Modularity and Dynamics on Complex Networks*, Cambridge University Press, 2021.

[342] Lan Y. et Mezić I., *Linearization in the large of nonlinear systems and Koopman operator spectrum*, Physica D, 242 (2013), p. 42.

[343] Lang S., *Complex analysis*, Springer, 4 éd., 1999.

[344] Lasota A. et Mackey M. C., *Chaos, fractals, and noise : stochastic aspects of dynamics*, Springer, New York, 1994.

[345] Latora V., Nicosia V. et Russo G., *Complex Networks : Principles, Methods and Applications*, Cambridge University Press, 2017.

[346] Laurence E., Doyon N., Dubé L. J. et Desrosiers P., *Spectral dimension reduction of complex dynamical networks*, Phys. Rev. X, 9 (2019), p. 011042.

[347] Leeb W., *Optimal singular value shrinkage for operator norm loss: Extending to non-square matrices*, Stat. Probab. Lett., 186 (2022), p. 109472.

[348] Lei J. et Rinaldo A., *Consistency of spectral clustering in stochastic block models*, Ann. Statist., 43 (2015), p. 215.

[349] León I. et Pazó D., *Phase reduction beyond the first order : The case of the mean-field complex Ginzburg-Landau equation*, Phys. Rev. E, 100 (2019), p. 012211.

[350] Levine J. M., Bascompte J., Adler P. B. et Allesina S., *Beyond pairwise mechanisms of species coexistence in complex communities*, Nature, 546 (2017), p. 56.

[351] Levnajić Z. et Mezić I., *Ergodic theory and visualization. i. mesochronic plots for visualization of ergodic partition and invariant sets*, Chaos, 20 (2010), p. 033114.

[352] Li G., *A lumping analysis in mono- or/and bimolecular reaction systems*, Chem. Eng. Sci., 39 (1984), p. 1261.

[353] Li G. et Rabitz H., *A general analysis of exact lumping in chemical kinetics*, Chem. Eng. Sci., 44 (1989), p. 1413.

[354] ——, *A general analysis of approximate lumping in chemical kinetics*, Chem. Eng. Sci., 45 (1990), p. 977.

[355] Lim R., Cabatbat J. J. T., Martin T. L. P., Kim H., Kim S., Sung J., Ghim C. M. et Kim P. J., *Large-scale metabolic interaction network of the mouse and human gut microbiota*, Sci. Data, 7 (2020), p. 1.

[356] Lipton M., Mirollo R. et Strogatz S. H., *The Kuramoto model on a sphere: Explaining its low-dimensional dynamics with group theory and hyperbolic geometry*, Chaos, 31 (2021), p. 093113.

[357] Liu Y. Y. et Barabási A.-L., *Control principles of complex systems*, Rev. Mod. Phys., 88 (2016), p. 035006.

[358] Livan G., Novaes M. et Vivo P., *Introduction to Random Matrices - Theory and Practice*, Springer, Gewerbestrasse, 2018.

[359] Lodato I., Boccaletti S. et Latora V., *Synchronization properties of network motifs*, EPL, 78 (2007), p. 28001.

[360] Loève M., *Probability theory : foundations, random sequences*, Springer, 1955.

[361] Lohe M. A., *Non-Abelian Kuramoto models and synchronization*, J. Phys. A, 42 (2009), p. 395101.

[362] ——, *Quantum synchronization over quantum networks*, J. Phys. A, 43 (2010), p. 465301.

[363] ——, *The WS transform for the Kuramoto model with distributed amplitudes, phase lag and time delay*, J. Phys. A Math. Theor., 50 (2017), p. 505101.

[364] ——, *Higher-dimensional generalizations of the Watanabe-Strogatz transform for vector models of synchronization*, J. Phys. A Math. Theor., 51 (2018), p. 225101.

[365] ——, *Systems of matrix Riccati equations, linear fractional transformations, partial integrability and synchronization*, J. Math. Phys., 60 (2019), p. 072701.

[366] ——, *On the double sphere model of synchronization*, Physica D, 412 (2020), p. 132642.

[367] Lohe M. A., *Exact linearization and stability of fixed points in synchronization models*, J. Phys. Complex., 6 (2025), p. 045015.

[368] Lohe M. A., *Exact reduction of synchronized systems in higher-dimensional spaces*, Chaos, 35 (2025), p. 023144.

[369] Lorenz E., *Empirical orthogonal functions and statistical weather prediction*, rap. tech., Massachusetts Institute of Technology, 1956.

[370] Lotka A. J., *Contribution to the theory of periodic reactions*, J. Phys. Chem., 14 (1910), p. 271.

[371] Lu L., *Spectra of random graphs*. Présentation, Université de Nankai, Tianjin, 2014. Selected Topics on Spectral Graph Theory (III).

[372] Luce R. D. et Perry A. D., *A method of matrix analysis of group structure*, Psychometrika, 14 (1949), p. 95.

[373] Lukoševičius M. et Jaeger H., *Reservoir computing approaches to recurrent neural network training*, Comput. Sci. Rev., 3 (2009), p. 127.

[374] Lynn C. W. et Bassett D. S., *The physics of brain network structure, function and control*, Nat. Rev. Phys., 1 (2019), p. 318.

[375] Lynn C. W. et Bassett D. S., *Compressibility of complex networks*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 118 (2021), p. e2023473118.

[376] Légaré A., Lemieux M., Boily V., Poulin S., Légaré A., Desrosiers P. et Koninck P. D., *Structural and genetic determinants of zebrafish functional brain networks*, Sci. Adv., 7576 (2025), p. eadv7576.

[377] MacArthur B. D., Sánchez-García R. J. et Anderson J. W., *Symmetry in complex networks*, Discrete Appl. Math., 156 (2008), p. 3525.

[378] Maćešić S., Črnjařić-Žic N. et Mezić I., *Koopman operator family spectrum for nonautonomous systems*, SIAM J. Appl. Dyn. Sys., 17 (2018), p. 2478.

[379] Machta B. B., Chachra R., Transtrum M. K. et Sethna J. P., *Parameter Space Compression Underlies Emergent Theories and Predictive Models*, Science, 342 (2013), p. 604.

[380] Magnus W., *On the exponential solution of differential equations for a linear operator*, Commun. Pure Appl. Math., 7 (1954), p. 649.

[381] Mahoney M. W., *Randomized algorithms for matrices and data*, Found. Trends Mach. Learn., 3 (2011), p. 123.

[382] Makse H. A., Boldi P., Sorrentino F. et Stewart I., *Symmetries of Living Systems : Symmetry Fibrations and Synchronization in Biological Networks*, Cambridge University Press, 2025.

[383] Malinowski E. R., *Theory of error in factor analysis*, Anal. Chem., 49 (1977), p. 606.

[384] Marčenko V. A. et Pastur L. A., *Distribution of eigenvalues for some sets of random matrices*, Math. USSR-Sbornik, 1 (1967), p. 457.

[385] Markovsky I., *Low-Rank Approximations : Algorithms, Implementation, Applications*, Springer, 2 éd., 2019.

[386] Marshall A. W., Olkin I. et Arnold B. C., *Inequalities : Theory of Majorization and its Application*, Springer, 2 éd., 2011.

[387] Martin C. H. et Mahoney M. W., *Implicit self-regularization in deep neural networks: Evidence from random matrix theory and implications for learning*, J. Mach. Learn. Res., 22 (2021), p. 1.

[388] Marvel S. A., Mirollo R. E. et Strogatz S. H., *Identical phase oscillators with global sinusoidal coupling evolve by Möbius group action*, Chaos, 19 (2009), p. 043104.

[389] Mastrogiuseppe F. et Ostojic S., *Linking connectivity, dynamics, and computations in low-rank recurrent neural networks*, Neuron, 99 (2018), p. 609.

[390] Matheny M. H., Emenheiser J., Fon W., Chapman A., Salova A., Rohden M., Li J., Hudoba De Badyn M., Pósfai M., Duenas-Osorio L., Mesbahi M., Crutchfield J. P., Cross M. C., D'Souza R. M. et Roukes M. L., *Exotic states in a simple network of nanoelectromechanical oscillators*, Science, 363 (2019), p. 1057.

[391] Mathieu P., *Méthodes mathématiques en physique*. Université Laval, 2017.

[392] Matone M., *An algorithm for the Baker-Campbell-Hausdorff formula*, J. High Energy Phys., 2015 (2015), p. 1.

[393] Matone M., *Closed form of the Baker–Campbell–Hausdorff formula for the generators of semisimple complex Lie algebras*, Eur. Phys. J. C, 76 (2016), p. 610.

[394] Mauroy A. et Mezić I., *Global stability analysis using the eigenfunctions of the Koopman operator*, IEEE Trans. Autom. Control, 61 (2016), p. 3356.

[395] Mauroy A., Mezić I. et Moehlis J., *Isostables, isochrons, and Koopman spectrum for the action-angle representation of stable fixed point dynamics*, Physica D, 261 (2013), p. 19.

[396] May R. M., *Will a large complex system be stable ?*, Nature, 238 (1972), p. 413.

[397] ——, *Simple mathematical models with very complicated dynamics*, Nature, 261 (1976), p. 459.

[398] ——, *Stability and Complexity in Model Ecosystems*, Princeton University Press, 2001.

[399] Mayfield M. M. et Stouffer D. B., *Higher-order interactions capture unexplained complexity in diverse communities*, Nat. Ecol. Evol., 1 (2017), p. 1.

[400] McKay B. D., *The expected eigenvalue distribution of a large regular graph*, Linear Algebra Appl., (1981), p. 203.

[401] McKee J. et Smyth C., *Around the Unit Circle : Mahler Measure, Integer Matrices and Roots of Unity*, Springer, 2021.

[402] Meena C., Hens C., Acharyya S., Haber S., Boccaletti S. et Barzel B., *Emergent stability in complex network dynamics*, Nat. Phys., 19 (2023), p. 1033.

[403] Mehta M. L., *Random matrices and the Statistical Theory of Energy Levels*, Academic press, 1967.

[404] ——, *Random matrices*, Academic Press, 3 éd., 2004.

[405] Metz F. L. et Silva J. D., *The spectral density of dense random networks and the breakdown of the Wigner law*, Phys. Rev. Research, 2 (2020), p. 043116.

[406] Mezic I., *Spectral properties of dynamical systems, model reduction and decompositions*, Nonlinear Dyn., 41 (2005), p. 309.

[407] Mezić I., *Spectrum of the Koopman operator, spectral expansions in functional spaces, and state-space geometry*, J. Nonlinear Sci., 30 (2019), p. 2091.

[408] Mezić I. et Banaszuk A., *Comparison of systems with complex behavior*, Physica D, 197 (2004), p. 101.

[409] Milo R., Shen-Orr S., Itzkovitz S., Kashtan N., Chklovskii D. et Alon U., *Network motifs: Simple building blocks of complex networks*, Science, 298 (2002), p. 824.

[410] Milonni P. W. et Eberly J. H., *Lasers*, Wiley, 1988.

[411] Mirsky L., *Symmetric gauge functions and unitarily invariant norms*, Q. J. Math., 11 (1960), p. 50.

[412] Mitchell M., *Complexity : A Guided Tour*, Oxford University Press, 2009.

[413] Monahan A. H., Fyfe J. C., Ambaum M. H. P., Stephenson D. B. et North G. R., *Empirical orthogonal functions: The medium is the message*, J. Clim., 22 (2009), p. 6501.

[414] Montanari A. N., Duan C., Aguirre L. A. et Motter A. E., *Functional observability and target state estimation in large-scale networks*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 119 (2022), p. e2113750119.

[415] Montbrió E. et Pazó D., *Kuramoto model for excitation-inhibition-based oscillations*, Phys. Rev. Lett., 120 (2018), p. 244101.

[416] Moore C. C., *Ergodic theorem, ergodic theory, and statistical mechanics*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 112 (2015), p. 1907.

[417] Moreno Y., Vázquez-Prada M. et Pacheco A. F., *Fitness for synchronization of network motifs*, Phys. A, 343 (2004), p. 279.

[418] Morone F., Ferraro G. D. et Makse H. A., *The k-core as a predictor of structural collapse in mutualistic ecosystems*, Nat. Phys., 15 (2019), p. 95.

[419] Morone F., Leifer I. et Makse H. A., *Fibration symmetries uncover the building blocks of biological networks*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 117 (2020), p. 8306.

[420] Morone F. et Makse H. A., *Symmetry group factorization reveals the structure-function relation in the neural connectome of Caenorhabditis elegans*, Nat. Commun., 10 (2019), p. 1.

[421] Mulas R., Kuehn C. et Jost J., *Coupled dynamics on hypergraphs: Master stability of steady states and synchronization*, Phys. Rev. E, 101 (2020), p. 062313.

[422] Munkres J. R., *Topology*, Prentice Hall, 2 éd., 2000.

[423] Murphy C., Thibeault V., Allard A. et Desrosiers P., *Duality between predictability and reconstructability in complex systems*, Nat. Commun., 15 (2024), p. 4478.

[424] Myint-U T. et Debnath L., *Linear Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, Birkhauser, 4 éd., 2007.

[425] Nadakuditi R. R. et Newman M. E. J., *Graph spectra and the detectability of community structure in networks*, Phys. Rev. Lett., 108 (2012), p. 188701.

[426] Nadakuditi R. R. et Newman M. E. J., *Spectra of random graphs with arbitrary expected degrees*, Phys. Rev. E, 87 (2013), p. 012803.

[427] Naimark M. A., *Normed Algebras*, Wolters-Noordhoff, 1972.

[428] Nakahara M. G., *Geometry, Topology and Physics*, CRC Press, New York, 2003.

[429] Neri I. et Metz F. L., *Linear stability analysis of large dynamical systems on random directed graphs*, Phys. Rev. Res., 2 (2020), p. 033313.

[430] Newman M. E. J., *The structure and function of complex networks*, SIAM Rev., 45 (2003), p. 167.

[431] ——, *Modularity and community structure in networks*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 103 (2006), p. 8577.

[432] ——, *Resource letter cs–1: Complex systems*, Am. J. Phys., 79 (2011), p. 800.

[433] ——, *Networks*, Oxford University Press, 2018.

[434] ——, *Spectra of networks containing short loops*, Phys. Rev. E, 100 (2019), p. 012314.

[435] Newman M. E. J. et Girvan M., *Finding and evaluating community structure in networks*, Phys. Rev. E, 69 (2004), p. 026113.

[436] Newman M. E. J., Zhang X. et Nadakuditi R. R., *Spectra of random networks with arbitrary degrees*, Phys. Rev. E, 99 (2019), p. 042309.

[437] Ng T. L. J. et Murphy T. B., *Weighted stochastic block model*, Statistical Methods & Applications, 30 (2021), p. 1365.

[438] Nica B., *A Brief Introduction to Spectral Graph Theory*, European Mathematical Society, Zurich, 2018.

[439] Nicolaou Z. G., Cho H., Zhang Y., Kutz J. N. et Brunton S. L., *Signature of glassy dynamics in dynamic mode decompositions*, Phys. Rev. E, 113 (2026), p. L053301.

[440] Nicolaou Z. G., Eroglu D. et Motter A. E., *Multifaceted Dynamics of Janus Oscillator Networks*, Phys. Rev. X, 9 (2019), p. 11017.

[441] Nicosia V., Valencia M., Chavez M., Díaz-Guilera A. et Latora V., *Remote synchronization reveals network symmetries and functional modules*, Phys. Rev. Lett., 110 (2013), p. 174102.

[442] Nijholt E., Ocampo-Espindola J. L., Eroglu D., Kiss I. Z. et Pereira T., *Emergent hypernetworks in weakly coupled oscillators*, Nat. Commun., 13 (2022), p. 4849.

[443] Nijholt E., Rink B. et Sanders J., *Graph fibrations and symmetries of network dynamics*, J. Differ. Equ., 261 (2016), p. 4861.

[444] Nikiforov V., *Eigenvalues and extremal degrees of graphs*, Linear Algebra Appl., 419 (2006), p. 735.

[445] Nikiforov V., *The energy of graphs and matrices*, J. Math. Anal. Appl., 326 (2007), p. 1472.

[446] Nishikawa T., Lai Y. C. et Hoppensteadt F. C., *Capacity of oscillatory associative-memory networks with error-free retrieval*, Phys. Rev. Lett., 92 (2004), p. 108101.

[447] Nishikawa T. et Motter A. E., *Symmetric states requiring system asymmetry*, Phys. Rev. Lett., 117 (2016), p. 114101.

[448] Noether E., *Invariante variationsprobleme*, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. Kl., (1918), p. 235.

[449] Oh S. W. et al. , *A mesoscale connectome of the mouse brain*, Nature, 508 (2014), p. 207.

[450] Olver P. J., *Applications of Lie Groups to Differential Equations*, Springer, 2 éd., 1993.

[451] ——, *Equivalence, invariance, and symmetry*, Cambridge University Press, 1995.

[452] ——, *Introduction to Partial Differential Equations*, Springer, 2014.

[453] Ott E. et Antonsen T. M., *Low dimensional behavior of large systems of globally coupled oscillators*, Chaos, 18 (2008), p. 037113.

[454] Ottino-Löffler B. et Strogatz S. H., *Volcano transition in a solvable model of frustrated oscillators*, Phys. Rev. Lett., 120 (2018), p. 264102.

[455] Painchaud V., Doyon N. et Desrosiers P., *Beyond Wilson-Cowan dynamics: oscillations and chaos without inhibition*, Biol. Cybern., 116 (2022), p. in press.

[456] Palla G., Derényi I., Farkas I. et Vicsek T., *Uncovering the overlapping community structure of complex networks in nature and society*, Nature, 435 (2005), p. 814.

[457] Papadimitrakis M., *Notes on Complex Analysis*.

[458] Parisi G., *Statistical physics and biology*, Phys. World, 6 (1993), p. 42.

[459] Park J. et Newman M. E. J., *Statistical mechanics of networks*, Phys. Rev. E, 70 (2004), p. 066117.

[460] Parmelee C., Alvarez J. L., Curto C. et Morrison K., *Sequential attractors in combinatorial threshold-linear networks*, SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 21 (2022), p. 1597.

[461] Pastor-Satorras R. et Castellano C., *The localization of non-backtracking centrality in networks and its physical consequences*, Sci. Rep., 10 (2020).

[462] Pastur L. A., *Spectra of random self adjoint operators*, Russ. Math. Surv., 28 (1973), p. 1.

[463] Pazó D., *Thermodynamic limit of the first-order phase transition in the Kuramoto model*, Phys. Rev. E, 72 (2005), p. 046211.

[464] Pecora L. M. et Carroll T. L., *Master stability functions for synchronized coupled systems*, Phys. Rev. Lett., 80 (1998), p. 2109.

[465] Pecora L. M., Sorrentino F., Hagerstrom A. M., Murphy T. E. et Roy R., *Cluster synchronization and isolated desynchronization in complex networks with symmetries*, Nat. Commun., 5 (2014), p. 4079.

[466] Peixoto T. P., *Eigenvalue spectra of modular networks*, Phys. Rev. Lett., 111 (2013), p. 098701.

[467] Peixoto T. P., *Nonparametric weighted stochastic block models*, Phys. Rev. E, 97 (2018), p. 012306.

[468] Pelletier-Dumont J., Knystautas E. J. et Desrosiers P., *Étude des opérateurs de koopman pour des systèmes hamiltoniens*, rap. tech., Université Laval, 2018.

[469] Penrose R., *Generalized inverse matrices*, Math. Proc. Camb. Philos. Soc., 51 (1955), p. 406.

[470] ——, *On best approximate solutions of linear matrix equations*, Math. Proc. Camb. Philos. Soc., 52 (1956), p. 17.

[471] Perko L., *Differential Equations and Dynamical Systems*, Springer, 2001.

[472] Peron T., Eroglu D., Rodrigues F. A. et Moreno Y., *Collective dynamics of random Janus oscillator networks*, Phys. Rev. Research, 2 (2020), p. 013255.

[473] Perron O., *Zur Theorie der Matrices*, Math. Ann., 64 (1907), p. 248.

[474] Perry A., Wein A. S., Bandeira A. S. et Moitra A., *Optimality and sub-optimality of PCA I: Spiked random matrix models*, Ann. Statis., 46 (2018), p. 2416.

[475] Perry P. O., *Cross-Validation for Unsupervised Learning*, thèse de doctorat, Stanford University, 2009.

[476] Pietras B. et Daffertshofer A., *Network dynamics of coupled oscillators and phase reduction techniques*, Phys. Rep., 819 (2019), p. 1.

[477] Pikovsky A. et Rosenblum M., *Partially integrable dynamics of hierarchical populations of coupled oscillators*, Phys. Rev. Lett., 101 (2008), p. 264103.

[478] ——, *Dynamics of heterogeneous oscillator ensembles in terms of collective variables*, Physica D, 240 (2011), p. 872.

[479] Pikovsky A., Rosenblum M. et Kurths J., *Synchronization : a Universal Concept in Nonlinear Sciences*, Cambridge university press, 2003.

[480] Pizzo A., Renfrew D. et Soshnikov A., *On finite rank deformations of wigner matrices*, dans Ann. I. H. Poincaré – PR, vol. 49, 2013, p. 64.

[481] Pope M., Fukushima M., Betzel R. F. et Sporns O., *Modular origins of high-amplitude cofluctuations in fine-scale functional connectivity dynamics*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 118 (2021), p. e2109380118.

[482] Porfiri M., Stilwell D. J. et Bollt E. M., *Synchronization in random weighted directed networks*, IEEE Transactions on Circuits and Systems I, 55 (2008), p. 3170.

[483] Pourciau B. H., *Modern multiplier rules*, Am. Math. Mon., 87 (1980), p. 433.

[484] Powers D. L., *Graph partitioning by eigenvectors*, Linear Algebr. Appl., 101 (1988), p. 121.

[485] Pressley A., *Elementary Differential Geometry*, Springer, 2 éd., 2010.

[486] Prigogine I. et Nicolis G., *Self-organisation in nonequilibrium systems: Towards a dynamics of complexity*, dans Bifurcation Analysis, Hazewinkel M., Jurkovich R. et Paelinck J., éds., Springer, 1985.

[487] Prinz A. A., Bucher D. et Marder E., *Similar network activity from disparate circuit parameters*, Nat. Neurosci., 7 (2004), p. 1345.

[488] Punetha N., Ramaswamy R. et Atay F. M., *Bipartite networks of oscillators with distributed delays: Synchronization branches and multistability*, Phys. Rev. E, 91 (2015), p. 042906.

[489] Qi L. et Luo Z., *Tensor analysis*, SIAM, 2017.

[490] Quinn K. N., Abbott M. C., Transtrum M. K., Machta B. B. et Sethna J. P., *Information geometry for multiparameter models: new perspectives on the origin of simplicity*, Rep. Prog. Phys., 86 (2023), p. 035901.

[491] Quinn K. N., Wilber H., Townsend A. et Sethna J. P., *Chebyshev Approximation and the Global Geometry of Model Predictions*, Phys. Rev. Lett., 122 (2019), p. 158302.

[492] Rajan K. et Abbott L. F., *Eigenvalue spectra of random matrices for neural networks*, Phys. Rev. Lett., 97 (2006), p. 188104.

[493] ——, *Eigenvalue spectra of random matrices for neural networks*, Phys. Rev. Lett., 97 (2006), p. 188104.

[494] Raju A., Machta B. B. et Sethna J. P., *Information loss under coarse graining: A geometric approach*, Phys. Rev. E, 98 (2018), p. 052112.

[495] Ranganathan S., Kivelä M. et Kanniainen J., *Dynamics of investor spanning trees around dot-com bubble*, PLOS ONE, 13 (2018), p. e0198807.

[496] Ravasz E. et Barabási A.-L., *Hierarchical organization in complex networks*, Phys. Rev. E, 67 (2003), p. 026112.

[497] Reed M. et Simon B., *Methods of Mathematical Physics I : Functional Analysis.*, Academic Press, 1980.

[498] Restrepo J. G., Ott E. et Hunt B. R., *Onset of synchronization in large networks of coupled oscillators*, Phys. Rev. E, 71 (2005), p. 036151.

[499] ——, *Weighted percolation on directed networks*, Phys. Rev. Lett., 100 (2008), p. 058701.

[500] Ribordy O., *De la densité spectrale des réseaux extrêmement creux*, mémoire de maîtrise, Université Laval, 2023.

[501] Rizi A. K., *What is emergence, after all?*, PNAS Nexus, 5 (2026), p. pgag010.

[502] Rodrigues F. A., Peron T., Ji P. et Kurths J., *The Kuramoto model in complex networks*, Phys. Rep., 610 (2016), p. 1.

[503] Rohden M., Sorge A., Timme M. et Witthaut D., *Self-organized synchronization in decentralized power grids*, Phys. Rev. Lett., 109 (2012), p. 064101.

[504] Rowley C. W., Colonius T. et Murray R. M., *Model reduction for compressible flows using POD and Galerkin projection*, Physica D, 189 (2004), p. 115.

[505] Rowley C. W., Mezić I., Bagheri S., Schlatter P. et Henningson D. S., *Spectral analysis of nonlinear flows*, J. Fluid Mech., 641 (2009), p. 115.

[506] Roy O. et Vetterli M., *The effective rank: A measure of effective dimensionality*, dans Eur. Signal Process. Conf., 2007, p. 606.

[507] Roy-Pomerleau X., *Inférence d'interactions d'ordre supérieur et de complexes simpliciaux à partir de données de présence/absence*, mémoire de maîtrise, Université Laval, 2020.

[508] Rudelson M. et Vershynin R., *Sampling from large matrices: An approach through geometric functional analysis*, J. ACM, 54 (2007), p. 1.

[509] Rudin W., *Functional analysis*, McGraw-Hill, 2 éd., 1991.

[510] Russell B., *Why I am not a Christian, and other essays on religion and related subjects*, Simon and Schuster, 1957.

[511] ——, *Fact and Fiction*, George Allen & Unwin Ltd., 1961.

[512] ——, *Sur l'éducation universitaire (1959)*, dans Écrits sur l'éducation, Baillargeon N. et Santerre S., éds., Écosociété, 2019.

[513] Ryan K., Lu Z. et Meinertzhagen I. A., *The CNS connectome of a tadpole larva of Ciona intestinalis (L.) highlights sidedness in the brain of a chordate sibling*, eLife, 5 (2016), p. 1.

[514] Saad Y., *Iterative methods for sparse linear systems*, SIAM, Philadelphia, 2003.

[515] Sakaguchi H. et Kuramoto Y., *A soluble active rotator model showing phase transitions via mutual entrainment*, Prog. Theor. Phys., 76 (1986), p. 576.

[516] Salova A. et D'Souza R. M., *Decoupled synchronized states in networks of linearly coupled limit cycle oscillators*, Phys. Rev. Res., 2 (2020), p. 043261.

[517] Salova A., Emenheiser J., Rupe A., Crutchfield J. P. et D'Souza R. M., *Koopman operator and its approximations for systems with symmetries*, Chaos, 29 (2019), p. 093128.

[518] Samani K. A. et Ghanbarian S., *Stability of synchronized states in networks of phase oscillators*, Phys. Rev. E, 77 (2008), p. 036209.

[519] Sánchez E. et Kowalski B. R., *Generalized rank annihilation factor analysis*, Anal. Chem., 58 (1986), p. 496.

[520] Sánchez-Islas M., Toledo-Roy J. C. et Frank A., *Criticality in a multisignal system using principal component analysis*, Phys. Rev. E, 103 (2021), p. 042111.

[521] Sanhedrai H., Gao J., Bashan A., Schwartz M., Havlin S. et Barzel B., *Reviving a failed network through microscopic interventions*, Nat. Phys., 18 (2022), p. 338.

[522] Sarkar C. et Jalan S., *Spectral properties of complex networks*, Chaos, 28 (2018), p. 102101.

[523] Sattinger D. H. et Weaver O. L., *Lie Groups and Algebras with Applications to Physics, Geometry, and Mechanics*, Springer, 1986.

[524] Saunders D. J., *The Geometry of Jet Bundles*, Cambridge University Press, 1989.

[525] Schaeffer S. E., *Graph clustering*, Comput. Sci. Rev., 1 (2007), p. 27.

[526] Schaub M. T., O'Clery N., Billeh Y. N., Delvenne J. C., Lambiotte R. et Barahona M., *Graph partitions and cluster synchronization in networks of oscillators*, Chaos, 26 (2016).

[527] Scheffer L. K. et al. , *A connectome and analysis of the adult Drosophila central brain*, eLife, 9 (2020), p. 1.

[528] Schmid P. J., *Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data*, J. Fluid Mech., 656 (2010), p. 5.

[529] Schmid P. J. et Sesterhenn J. L., *Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data*, dans Bull. Amer. Phys. Soc., 61st APS meeting, 2008, p. 208.

[530] Schmidt E., *Zur Theorie der linearen und nichtlinearen Integralgleichungen.*, Math. Ann., 63 (1907), p. 433.

[531] Schröder M., Timme M. et Witthaut D., *A universal order parameter for synchrony in networks of limit cycle oscillators*, Chaos, 27 (2017), p. 073119.

[532] Schuessler F., Dubreuil A., Mastrogiuseppe F., Ostojic S. et Barak O., *Dynamics of random recurrent networks with correlated low-rank structure*, Phys. Rev. Research, 2 (2020), p. 013111.

[533] Schuessler F., Mastrogiuseppe F., Dubreuil A., Ostojic S. et Barak O., *The interplay between randomness and structure during learning in RNNs*, dans Adv. Neural Inf. Process. Syst. 34, 2020, p. 1.

[534] Schuster H. G. et Wagner P., *A model for neuronal oscillations in the visual cortex*, Biol. Cybern, 64 (1990), p. 77.

[535] Schwarz F. et Steeb W.-H., *Symmetries and first integrals for dissipative systems*, J. Phys. A Math. Gen., 17 (1984), p. L819.

[536] Serrano M. A. et Boguñá M., *Weighted configuration model*, dans AIP conference proceedings, vol. 776, American Institute of Physics, 2005, p. 101.

[537] Shabalin A. A. et Nobel A. B., *Reconstruction of a low-rank matrix in the presence of Gaussian noise*, J. Multivar. Anal., 118 (2013), p. 67.

[538] Shabat B. V., *Introduction to complex analysis : Functions of several variables - part II*, vol. 110, American Mathematical Society, 1992.

[539] Shalizi C. R. et Moore C., *What is a macrostate? Subjective observations and objective dynamics*, Fond. Phys., 55 (2025), p. 1.

[540] Sherrington D. et Kirkpatrick S., *Solvable model of a spin-glass*, Phys. Rev. Lett., 35 (1975), p. 1792.

[541] Simon H. A., *The architecture of complexity*, Proc. Am. Phil. Soc., 106 (1962), p. 467.

[542] Smith L. D. et Gottwald G. A., *Model reduction for the collective dynamics of globally coupled oscillators: From finite networks to the thermodynamic limit*, Chaos, 30 (2020), p. 093107.

[543] Solomonoff R. et Rapoport A., *Connectivity of random nets*, Bull. Math. Biophys., 13 (1951), p. 59.

[544] Sompolinsky H., Crisanti A. et Sommers H.-J., *Chaos in random neural networks*, Phys. Rev. Lett., 61 (1988), p. 259.

[545] Song C., Havlin S. et Makse H. A., *Self-similarity of complex networks*, Nature, 433 (2005), p. 392.

[546] Sorrentino F., Pecora L. M., Hagerstrom A. M., Murphy T. E. et Roy R., *Complete characterization of the stability of cluster synchronization in complex dynamical networks*, Science, (2016), p. 1.

[547] Squartini T. et Garlaschelli D., *Maximum-Entropy Networks : Pattern Detection, Network Reconstruction and Graph Combinatorics*, Springer, 2017.

[548] St-Onge G., *Dynamique de propagation sur réseaux aléatoires: Caractérisation de la transition de phase*, mémoire de maîtrise, Université Laval, 2017.

[549] ——, *Processus de contagion sur réseaux complexes au-delà des interactions dyadiques*, thèse de doctorat, Université Laval, 2022.

[550] St-Onge G., Davis J. T., Hébert-Dufresne L., Allard A., Urbinati A., Scarpino S. V., Chinazzi M. et Vespignani A., *Pandemic monitoring with global aircraft-based wastewater surveillance networks*, Nat. Med., 31 (2025), p. 788.

[551] St-Onge G., Thibeault V., Allard A., Dubé L. J. et Hébert-Dufresne L., *Master equation analysis of mesoscopic localization in contagion dynamics on higher-order networks*, Phys. Rev. E, 103 (2021), p. 032301.

[552] ——, *Social confinement and mesoscopic localization of epidemics on networks*, Phys. Rev. Lett., 126 (2021), p. 098301.

[553] Städter P., Schälte Y., Schmiester L., Hasenauer J. et Stapor P. L., *Benchmarking of numerical integration methods for ODE models of biological systems*, Sci. Rep., 11 (2021), p. 2696.

[554] Stanić Z., *Inequalities for Graph Eigenvalues*, Cambridge University Press, Cambridge, 2015.

[555] ——, *Bounding the largest eigenvalue of signed graphs*, Linear Algebr. Appl., 573 (2019), p. 80.

[556] ——, *Some bounds for the largest eigenvalue of a signed graph*, Bull. Math. Soc. Sci. Math. Roum., 110 (2019), p. 183.

[557] Stein D. L. et Newman C. M., *Spin Glasses and Complexity*, Princeton University Press, New Jersey, 2013.

[558] Stein E. M. et Shakarchi R., *Complex analysis*, Princeton University Press, 2003.

[559] Stephani H., *Differential Equations : Their solution using symmetries*, Cambridge University Press, 1989.

[560] Stewart G. W., *On the early history of singular value decomposition*, SIAM Rev., 35 (1993), p. 551.

[561] Stewart I., *Phase oscillators with sinusoidal coupling interpreted in terms of projective geometry*, Int. J. Bifurc. Chaos, 21 (2011), p. 1795.

[562] Strang G., *Linear Algebra and its Applications*, Brooks Cole, 4 éd., 2005.

[563] ——, *Introduction to Linear Algebra*, Wellesley-Cambridge Press, Wellesley, 6 éd., 2023.

[564] Stringer C., Pachitariu M., Steinmetz N., Carandini M. et Harris K. D., *High-dimensional geometry of population responses in visual cortex*, Nature, 571 (2019), p. 361.

[565] Stringer C., Pachitariu M., Steinmetz N., Reddy C. B., Carandini M. et Harris K. D., *Spontaneous behaviors drive multidimensional, brainwide activity*, Science, 364 (2019), p. eaav7893.

[566] Strogatz S. H., *SYNC : How Order Emerges from Chaos in the Universe, Nature, and Daily Life*, Hachette Books, 2003.

[567] ——, *Nonlinear Dynamics and Chaos*, CRC Press, 2018.

[568] Strogatz S. H., Walker S., Yeomans J. M., Tarnita C., Arcaute E., De Domenico M., Artime O. et Goh K.-I., *Fifty years of 'More is different'*, Nat. Rev. Phys., 4 (2022), p. 508.

[569] Sussillo D. et Abbott L. F., *Generating coherent patterns of activity from chaotic neural networks*, Neuron, 63 (2009), p. 544.

[570] Sylvester J. J., *Sur l'équation en matrices $px = xq$*, C. R. Acad. Sci. Paris, 99 (1884), p. 67.

[571] Takagi T., *On an algebraic problem related to an analytic theorem of carathéodory and fejér and on an allied theorem of landau*, Jpn. J. Math., 1 (1924), p. 83.

[572] Tanaka T., *Solvable model of the collective motion of heterogeneous particles interacting on a sphere*, New J. Phys., 16 (2014), p. 0236016.

[573] Tang M., *The eigenvalues of stochastic blockmodel graphs*, arXiv preprint :1803.11551v1, (2018).

[574] Tao T., *Topics in Random Matrix Theory*, vol. 132, American Mathematical Society, 2012.

[575] Tao T. et Vu V., *Random matrices: the circular law*, Communications in Contemporary Mathematics, 10 (2008), p. 261.

[576] Tao T. et Vu V., *Random matrices: Universality of esds and the circular law*, Ann. Probab., 38 (2010), p. 2023.

[577] Tao T. et Vu V., *Random covariance matrices: Universality of local statistics of eigenvalues*, Ann. Probab., 40 (2012), p. 1285.

[578] Tapp K., *Differential Geometry of Curves and Surfaces*, Springer, 2016.

[579] Teschl G., *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*, American Mathematical Society, 2012.

[580] Thibeault V., *Réduire la dimension des systèmes complexes : un regard sur l'émergence de la synchronisation*, mémoire de maîtrise, Université Laval, 2020.

[581] Thibeault V., Allard A. et Desrosiers P., *The low-rank hypothesis of complex systems*, Nat. Phys., 20 (2024).

[582] Thibeault V., Claveau B., Allard A. et Desrosiers P., *VinceThi/koopman-kuramoto:first_release_kooku*, juin 2026. Zenodo, Python code.

[583] Thibeault V., St-Onge G., Dubé L. J. et Desrosiers P., *Threefold way to the dimension reduction of dynamics on networks: An application to synchronization*, Phys. Rev. Research, 2 (2020), p. 043215.

[584] Thümler M., Srinivas S. G. M., Schröder M. et Timme M., *Synchrony for weak coupling in the complexified Kuramoto model*, Phys. Rev. Lett., 130 (2023), p. 187201.

[585] Timme M., *Revealing network connectivity from response dynamics*, Phys. Rev. Lett., 98 (2007), p. 224101.

[586] Timofeyev T. et Patania A., *Cluster synchronization via graph Laplacian eigenvectors*, arXiv :2503.18978v1, (2025).

[587] Toda M., *Theory of Nonlinear Lattices*, Springer-Verlag, 1981.

[588] Tóth J., Li G., Rabitz H. et Tomlin A. S., *The effect of lumping and expanding on kinetic differential equations*, SIAM J. Appl. Math., 57 (1997), p. 1531.

[589] Transtrum M. K., Machta B. B., Brown K. S., Daniels B. C., Myers C. R. et Sethna J. P., *Perspective: Sloppiness and emergent theories in physics, biology, and beyond*, J. Chem. Phys., 143 (2015), p. 010901.

[590] Trefethen L. N. et Embree M., *Spectra and Pseudospectra : The Behavior of Nonnormal Matrices and Operators*, Princeton University Press, 2005.

[591] Tu C., Grilli J., Schuessler F. et Suweis S., *Collapse of resilience patterns in generalized Lotka-Volterra dynamics and beyond*, Phys. Rev. E, 95 (2017), p. 062307.

[592] Tyulkina I. V., Goldobin D. S., Klimenko L. S. et Pikovsky A., *Dynamics of noisy oscillator populations beyond the Ott-Antonsen Ansatz*, Phys. Rev. Lett., 120 (2018), p. 264101.

[593] Udell M. et Townsend A., *Why are big data matrices approximately low rank?*, SIAM J. Math. Data Sci., 1 (2019), p. 144.

[594] Valdano E. et Arenas A., *Exact rank reduction of network models*, Phys. Rev. X, 9 (2019), p. 031050.

[595] Valente A., Pillow J. W. et Ostojic S., *Extracting computational mechanisms from neural data using low-rank RNNs*, dans Advances in Neural Information Processing Systems, Koyejo S., Mohamed S., Agarwal A., Belgrave D., Cho K. et Oh A., éds., Curran Associates, Inc., 2022, 2022, p. 24072.

[596] Van Mieghem P., *Graph Spectra for Complex Networks*, Cambridge University Press, 2011.

[597] Van Mieghem P., *Epidemic phase transition of the sis type in networks*, EPL, 97 (2012), p. 48004.

[598] Varshney L., Chen B., Paniagua E., Hall D. et Chklovskii D., *Wormatlas : Neuronal wiring.* https://www.wormatlas.org/neuronalwiring.html#Connectivitydata. Accessed : 2023-02-01.

[599] Vegué M., Thibeault V., Desrosiers P. et Allard A., *Dimension reduction of dynamics on modular and heterogeneous directed networks*, PNAS Nexus, (2023), p. pgad150.

[600] Verasztó C., Jasek S., Gühmann M., Shahidi R., Ueda N., Beard J. D., Mendes S., Heinz K., Bezares-Calderón L. A., Williams E. et Jékely G., *Whole-animal connectome and cell-type complement of the three-segmented Platynereis dumerilii larva*, bioRxiv, (2020).

[601] Verasztó C., Jasek S., Gühmann M., Bezares-Calderón L. A., Williams E. A., Shahidi R. et Jékely G., *Whole-body connectome of a segmented annelid larva*, eLife, 13 (2025), p. RP97964.

[602] Vershynin R., *High-Dimensional Probability : An Introduction with Applications in Data Science*, Cambridge University Press, New York, 2018.

[603] Villegas P., Gili T., Caldarelli G. et Gabrielli A., *Laplacian renormalization group for heterogeneous networks*, Nat. Phys., 19 (2023), p. 445.

[604] Vlasov V. et Bifone A., *Hub-driven remote synchronization in brain networks*, Sci. Rep., 7 (2017), p. 10403.

[605] Vlasov V., Pikovsky A. et Macau E. E. N., *Star-type oscillatory networks with generic Kuramoto-type coupling: A model for "Japanese drums synchrony"*, Chaos, 25 (2015), p. 123120.

[606] Vlasov V., Rosenblum M. et Pikovsky A., *Dynamics of weakly inhomogeneous oscillator populations: Perturbation theory on top of Watanabe-Strogatz integrability*, J. Math. Phys. A Math. Theor., 49 (2016), p. 31LT02.

[607] Vlasov V., Zou Y. et Pereira T., *Explosive synchronization is discontinuous*, Phys. Rev. E, 92 (2015), p. 012904.

[608] Voitalov I., Hoorn P. V. D., Hofstad R. V. D. et Krioukov D., *Scale-free networks well done*, Phys. Rev. Research, 1 (2019), p. 033034.

[609] Volkwein S., *Proper orthogonal decomposition: Theory and reduced-order modelling*, rap. tech., University of Konstanz, 2013.

[610] Volterra V., *Fluctuations in the abundance of a species considered mathematically*, Nature, 118 (1926), p. 558.

[611] Bertalanffy L.v. , *General System Theory : Foundations, Development, Applications*, George Braziller, 2 éd., 1968.

[612] von Neumann J., *Zur operatorenmethode in der klassischen mechanik*, Ann. Math., 33 (1932), p. 587.

[613] ——, *The general and logical theory of automata*, dans John von Neumann Collected Work, Taub A. H., éd., vol. V, Bergamon Press, 1963, p. 288.

[614] ——, *The role of high and extremely high complication & complicated automata - hierarchy and evolution*, dans Theory of Self-Reproducing Automata, Burks A. W., éd., vol. 21, University of Illinois Press, 1966.

[615] Vázquez A., Pastor-Satorras R. et Vespignani A., *Large-scale topological and dynamical properties of the internet*, Phys. Rev. E, 65 (2002), p. 066130.

[616] Wachs J., Fazekas M. et Kertész J., *Corruption risk in contracting markets: a network science perspective*, Int. J. Data Sci. Anal., 12 (2021), p. 45.

[617] Wang W., Tang M., Stanley E. H. et Braunstein L. A., *Unification of theoretical approaches for epidemic spreading on complex networks*, Rep. Prog. Phys., 80 (2017), p. 036603.

[618] Wang X. et Sloan I. H., *Why are high-dimensional finance problems often of low effective dimension?*, SIAM J. Comput, 27 (2005), p. 159.

[619] Watanabe S. et Strogatz S. H., *Integrability of a globally coupled oscillator array*, Phys. Rev. Lett., 70 (1993), p. 2391.

[620] ——, *Constants of motion for superconducting Josephson arrays*, Physica D, 74 (1994), p. 197.

[621] Watts D. J. et Strogatz S. H., *Collective dynamics of 'small-world' networks*, Nature, 393 (1998), p. 440.

[622] Weaver W., *Science and Complexity*, Am. Sci., 36 (1948), p. 536.

[623] Wei J. et Kuo J. C. W., *A lumping analysis in monomolecular reaction systems: Analysis of the exactly lumpable system*, Ind. Eng. Chem. Fundamen., 8 (1969), p. 114.

[624] Wei Y., *Eigenvalue spectra of asymmetric random matrices for multicomponent neural networks*, Phys. Rev. E, 8 (2012), p. 066116.

[625] Weyl H., *Das asymptotische Verteilungsgesetz der Eigenwerte linearer partieller Differentialgleichungen (mit einer Anwendung auf die Theorie der Hohlraumstrahlung)*, Math. Ann., 71 (1912), p. 441.

[626] White J. G., Southgate E., Thomson J. N. et Brenner S., *The Structure of the Nervous System of the Nematode Caenorhabditis elegans*, Philos. Trans. R. Soc. Lond., B, Biol. Sci., 314 (1986), p. 1.

[627] Wiener N., *Cybernetics : Or Control and Communication in the Animal and the Machine*, MIT Press, 1961.

[628] Wiesenfeld K., Colet P. et Strogatz S. H., *Synchronization transitions in a disordered Josephson series array*, Phys. Rev. Lett., 76 (1996), p. 404.

[629] Wigner E. P., *Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions*, Ann. Math., 62 (1955).

[630] ——, *Characteristics Vectors of Bordered Matrices with Infinite Dimensions II*, Ann. Math., 65 (1957), p. 203.

[631] ——, *On the Distribution of the Roots of Certain Symmetric Matrices*, Ann. Math., 67 (1958), p. 325.

[632] Wikipedia , *Matrix decomposition*. https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_decomposition. Accessed : 2023-02-03.

[633] Wilf H. S., *The eigenvalues of a graph and its chromatic number*, J. Lond. Math. Soc., 1 (1967), p. 330.

[634] Wilson H. R. et Cowan J. D., *Excitatory and inhibitory interactions in localized populations of model neurons*, Biophys. J., 12 (1972), p. 1.

[635] ——, *A mathematical theory of the functional dynamics of cortical and thalamic nervous tissue*, Biol. Cybern., 13 (1973), p. 55.

[636] Wilson K. G., *Renormalization group and critical phenomena. I. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture*, Phys. Rev. B, 4 (1971), p. 3174.

[637] Winding M., Pedigo B. D., Barnes C. L., Patsolic H. G., Park Y., Kazimiers T., Fushiki A., Andrade I. V., Khandelwal A., Valdes-Aleman J., Li F., Randel N., Barsotti E., Correia A., Fetter R. D., Hartenstein V., Priebe C. E., Vogelstein J. T., Cardona A. et Zlatic M., *The connectome of an insect brain*, Science, 379 (2023), p. eadd9330.

[638] Winfree A. T., *Biological rhythms and the behavior of populations of coupled oscillators*, J. Theoret. Biol., 16 (1967), p. 15.

[639] ——, *The Geometry of Biological Time*, Springer, 2000.

[640] Wittmeyer H., *Einfluiß der Änderung einer Matrix auf die Lösung des zugehörigen Gleichungssystems, sowie auf die charakteristischen Zahlen und die Eigenvektoren.*, Z. Angew. Math. Mech., 16 (1936), p. 287.

[641] Witvliet D., Mulcahy B., Mitchell J. K., Meirovitch Y., Berger D. R., Wu Y., Liu Y., Koh W. X., Parvathala R., Holmyard D., Schalek R. L., Shavit N., Chisholm A. D., Lichtman J. W., Samuel A. D. T. et Zhen M., *Connectomes across development reveal principles of brain maturation*, Nature, 596 (2021), p. 257.

[642] Wold S., Esbensen K. et Geladi P., *Principal component analysis*, Chemom. Intell. Lab. Syst., 2 (1987), p. 37.

[643] Wolfram S., *Cellular automata as models of complexity*, Nature, 311 (1984), p. 419.

[644] Wood P. M., *Universality and the circular law for sparse random matrices*, Ann. Appl. Probab., 22 (2012), p. 1266.

[645] Xu C., Gao J., Boccaletti S., Zheng Z. et Guan S., *Synchronization in starlike networks of phase oscillators*, Phys. Rev. E, 100 (2019), p. 012212.

[646] Xu C., Sun Y., Gao J., Jia W. et Zheng Z., *Phase transition in coupled star networks*, Nonlinear Dyn., 94 (2018), p. 1267.

[647] Yan G., Vértes P. E., Towlson E. K., Chew Y. L., Walker D. S., Schafer W. R. et Barabási A.-L., *Network control principles predict neuron function in the Caenorhabditis elegans connectome*, Nature, 550 (2017), p. 519.

[648] Yang C.-N., *Einstein's impact on theoretical physics*, Phys. Today, 33 (1980), p. 42.

[649] Yosida K., *Functional Analysis*, Springer Berlin, 4 éd., 1974.

[650] Young J.-G., *De la détection de la structure communautaire des réseaux complexes*, mémoire de maîtrise, Univ. Laval, 2014.

[651] Young J.-G., St-Onge G., Desrosiers P. et Dubé L. J., *Universality of the stochastic block model*, Phys. Rev. E, 98 (2018), p. 032309.

[652] Yu S., Feng Y., Zhang D., Bedru H. D., Xu B. et Xia F., *Motif discovery in networks: A survey*, Comput. Sci. Rev., 37 (2020), p. 100267.

[653] Yu S., Yang H., Nakahara H., Plenz D., Santos G. S. et Nikolic D., *Higher-order interactions characterized in cortical activity*, J. Neurosci., 31 (2011), p. 17514.

[654] Zeidler E., *Applied functional analysis : Applications to Mathematical Physics*, Springer-Verlag, 1995.

[655] Zhang X., *Integrability of Dynamical Systems : Algebra and Analysis*, Springer, 2017.

[656] Zhang X., Hallerberg S., Matthiae M., Witthaut D. et Timme M., *Fluctuation-induced distributed resonances in oscillatory networks*, Sci. Adv., 5 (2019), p. eaav1027.

[657] Zhang X., Nadakuditi R. R. et Newman M. E. J., *Spectra of random graphs with community structure and arbitrary degrees*, Phys. Rev. E, 89 (2014), p. 042816.

[658] Zhang Y. et Strogatz S. H., *Basins with tentacles*, Phys. Rev. Lett., 127 (2021), p. 194101.