INVARIANTS DE GRAPHES LIÉS AUX GAZ IMPARFAITS

Amel Kaouche, LaCIM - UQAM

Septembre 2008, 61^e Séminaire Lotharingien de Combinatoire

En collaboration avec Pierre Leroux

• Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes

- Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes
- Propriété de multiplicativité du poids de Mayer

- Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes
- Propriété de multiplicativité du poids de Mayer
- Interprétation des poids en termes de volumes signés de polytopes

- Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes
- Propriété de multiplicativité du poids de Mayer
- Interprétation des poids en termes de volumes signés de polytopes
- Méthodes des homomorphismes de graphes

- Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes
- Propriété de multiplicativité du poids de Mayer
- Interprétation des poids en termes de volumes signés de polytopes
- Méthodes des homomorphismes de graphes
- Formules explicites pour certaines familles infinies de graphes

- Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes
- Propriété de multiplicativité du poids de Mayer
- Interprétation des poids en termes de volumes signés de polytopes
- Méthodes des homomorphismes de graphes
- Formules explicites pour certaines familles infinies de graphes
- Poids de Mayer des graphes bipartis complets

- Fonctions de poids de Mayer et de Ree-Hoover pour les graphes
- Propriété de multiplicativité du poids de Mayer
- Interprétation des poids en termes de volumes signés de polytopes
- Méthodes des homomorphismes de graphes
- Formules explicites pour certaines familles infinies de graphes
- Poids de Mayer des graphes bipartis complets
- $w_M(c)$ et $w_{RH}(c)$ sont des fonctions de quels paramètres?





Un graphe connexe avec ses blocs b_1 , b_2 , b_3 , b_4

DÉVELOPPEMENT DU VIRIEL

Développement du viriel:

$$\frac{P}{kT} = \rho + \beta_2 \rho^2 + \beta_3 \rho^3 + \cdots$$

DÉVELOPPEMENT DU VIRIEL

Développement du viriel:

$$\frac{P}{kT} = \rho + \beta_2 \rho^2 + \beta_3 \rho^3 + \cdots$$

• *P* : pression • *k* : constante • *T* : température • ρ : densité

Coefficient du viriel:

$$\beta_n = \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in B[n]} w_M(b)$$

DÉVELOPPEMENT DU VIRIEL

Développement du viriel:

$$\frac{P}{kT} = \rho + \beta_2 \rho^2 + \beta_3 \rho^3 + \cdots$$

• *P* : pression • *k* : constante • *T* : température • ρ : densité

Coefficient du viriel:

$$B_n = \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in B[n]} w_M(b)$$
$$= \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in B[n]} \overline{a}_n(b) w_{RH}(b)$$

B[n] = 1'ensemble des graphes 2-connexes (blocs) sur [n]

Poids de graphes: fonctions sur les graphes invariantes sous les réétiquetages des sommets

Poids de Mayer:

$$w_{M}(c) = \int_{(\mathbb{R}^{d})^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} f(\|\overrightarrow{x_{i}} - \overrightarrow{x_{j}}\|) d\overrightarrow{x_{1}} \cdots d\overrightarrow{x_{n-1}}$$

Poids de graphes: fonctions sur les graphes invariantes sous les réétiquetages des sommets

Poids de Mayer:

$$w_{M}(c) = \int_{(\mathbb{R}^{d})^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} f(\|\overrightarrow{x_{i}} - \overrightarrow{x_{j}}\|) d\overrightarrow{x_{1}} \cdots d\overrightarrow{x_{n-1}}$$

avec

- $\overrightarrow{x_n} = 0$
- *c* : graphe connexe avec *n* sommets
- $\overrightarrow{x_1}, \ldots, \overrightarrow{x_n} \in \mathbb{R}^d$: positions des *n* particules
- f = f(r): fonction à valeurs réelles associée à l'intéraction des particules deux-à-deux

Poids de Ree-Hoover:

$$w_{RH}(b) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} f(\|\overrightarrow{x_i} - \overrightarrow{x_j}\|) \prod_{\{i,j\} \in \overline{b}} \overline{f}(\|\overrightarrow{x_i} - \overrightarrow{x_j}\|) d\overrightarrow{x_1} \cdots d\overrightarrow{x_{n-1}}$$

Poids de Ree-Hoover:

$$w_{RH}(b) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} f(\|\overrightarrow{x_i} - \overrightarrow{x_j}\|) \prod_{\{i,j\} \in \overline{b}} \overline{f}(\|\overrightarrow{x_i} - \overrightarrow{x_j}\|) d\overrightarrow{x_1} \cdots d\overrightarrow{x_{n-1}}$$

avec

- $\overrightarrow{x_n} = 0$
- *b* : graphe 2-connexe avec *n* sommets
- $\overline{f}(r) = 1 + f(r)$
- $\overline{b} = K_n \setminus b$: graphe complémentaire de *b*

RELATION ENTRE W_M ET W_{RH}

Pour tout graphe 2-connexe b, on a

- $w_{RH}(b) = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} w_M(d)$ (par définition)
- $w_M(b) = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d) e(b)} w_{RH}(d)$ (par inversion de Möbius)
- $|w_M(b)| = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} |w_{RH}(d)|$ (dans le cas d'un gaz à noyaux durs)







POIDS ET VOLUME DE POLYTOPES

$$w_{M}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_{i} - x_{j}| < 1) dx_{1} \dots dx_{n-1}, \quad x_{n} = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c))$

POIDS ET VOLUME DE POLYTOPES

$$w_{M}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_{i} - x_{j}| < 1) dx_{1} \dots dx_{n-1}, \quad x_{n} = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c))$

où $P(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \le 1 \quad \forall \{i, j\} \in c\}$

POIDS ET VOLUME DE POLYTOPES

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_i - x_j| < 1) dx_1 \dots dx_{n-1}, \quad x_n = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c))$

où $P(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \le 1 \forall \{i, j\} \in c\}$

Exemple



LE POLYNÔME D'EHRHART

Théorème d'Ehrhart

$$#\left(N \cdot P(c) \bigcap \mathbb{Z}^n\right) = a_0 N^n + a_1 N^{n-1} + \dots + a_n$$

et

 $a_0 = Vol(P(c))$

avec

 $a_0N^n + a_1N^{n-1} + \dots + a_n$: polynôme d'Ehrhart









$$w_{M}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_{i} - x_{j}| < 1) dx_{1} \dots dx_{n-1}, \quad x_{n} = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c))$

MÉTHODE DES HOMOMORPHISMES DE GRAPHES

$$w_{M}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_{i} - x_{j}| < 1) dx_{1} \dots dx_{n-1}, \quad x_{n} = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c))$

où $P(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \le 1 \quad \forall \{i, j\} \in c\}$

MÉTHODE DES HOMOMORPHISMES DE GRAPHES

$$w_{M}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_{i} - x_{j}| < 1) dx_{1} \dots dx_{n-1}, \quad x_{n} = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c))$

où $P(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \le 1 \forall \{i, j\} \in c\}$

Exemple



MÉTHODE DES HOMOMORPHISMES DE GRAPHES

$$w_{M}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_{i} - x_{j}| < 1) dx_{1} \dots dx_{n-1}, \quad x_{n} = 0$$

= $(-1)^{e(c)} Vol(P(c)),$

où $P(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \le 1 \forall \{i, j\} \in c\}$

Exemple



Représentation fractionnaire: $x_i = h_i + \xi_i$

 h_i : partie entière de x_i ξ_i : partie fractionnaire de x_i

Représentation fractionnaire: $x_i = h_i + \xi_i$ h_i : partie entière de x_i ξ_i : partie fractionnaire de x_i



$$|x_i - x_j| < 1 \iff$$



$|x_i - x_j| > 1 \iff$



• Idée [Bodo Lass]: Évaluer le volume du polytope P(c) en le décomposant en v(c) simplexes (valides) chacun de volume $\frac{1}{(n-1)!}$

• Idée [Bodo Lass]: Évaluer le volume du polytope P(c) en le décomposant en v(c) simplexes (valides) chacun de volume $\frac{1}{(n-1)!}$

• Comment: Ces simplexes sont classifiés en fixant les parties entières (h_1, h_2, \dots, h_n) et les positions relatives des parties fractionnaires $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ des coordonnées des points $X = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in P(c)$



• Simplexes valides:

 $\forall \{i, j\} \in c, \ \xi_i < \xi_j \text{ implique } h_i = h_j \text{ ou } h_i = h_j + 1$

• Simplexes valides:

 $\forall \{i, j\} \in c, \ \xi_i < \xi_j \text{ implique } h_i = h_j \text{ ou } h_i = h_j + 1$

• Prop [Bodo Lass]: $Vol(P(c)) = \frac{v(c)}{(n-1)!}$ où

 $\mathbf{v}(c) = \#$ de simplexes valides de P(c)

= # de configurations pour le graphe c

NOMBRE DE CONFIGURATIONS





NOMBRE DE CONFIGURATIONS









NOMBRE DE CONFIGURATIONS







Le poids de chaque configuration est $\frac{(-1)^{e(c)}}{(n-1)!}$











LE POIDS DE MAYER DE $K_n \setminus S_3$

On a
$$|w_M(g_n)| = n + \frac{6}{(n-1)} + \frac{12}{(n-1)(n-3)}$$

LE POIDS DE MAYER DE $K_n \setminus S_3$ On a $|w_M(g_n)| = n + \frac{6}{(n-1)} + \frac{12}{(n-1)(n-3)}$ En effet $|w_M(g_n)| = \sum_{g_n \subset d \subset K_n} |w_{RH}(d)|$ $= |w_{RH}(K_n)| + 3|w_{RH}(K_n \setminus S_1)| + {\binom{3}{2}}|w_{RH}(K_n \setminus S_2)| + 1|w_{RH}(K_n \setminus S_3)|$ $= n+3\frac{2}{n-1} + \binom{3}{2}\frac{4}{(n-1)(n-2)} + 1\frac{12}{(n-1)(n-2)(n-3)}$ $= n + \frac{6}{(n-1)} + \frac{12}{(n-1)(n-3)}$

AUTRES FORMULES EXPLICITES

Soit $(S_j - S_k)$ le graphe obtenu en joignant par une nouvelle arête les centres d'une *j*-étoile et d'une *k*-étoile



Pour $j \ge k \ge 1$, $n \ge k + j + 3$ et $g_n = K_n \setminus (S_j - S_k)$

$$|w_{RH}(g_n)| = \frac{2k! j!}{(n-1)(n-2)\cdots(n-(k+j+1))}$$

$$|w_M(g_n)| = n + \sum_{l=1}^{j+1} 2\left[\binom{j+1}{l} + \binom{k+1}{l}\right] \frac{l!}{(n-1)\cdots(n-l)} - \frac{2}{(n-1)}$$

$$+ \sum_{m=1}^{j} \sum_{l=1}^{k} 2\binom{j}{m}\binom{k}{l} \frac{m!l!}{(n-1)\cdots(n-(m+l+1))}$$

FORMULES EXPLICITES (SUITE)

Soit $(S_j \cdot C_4 \cdot S_k)$ le graphe obtenu en joignant par une arête du graphe C_4 les centres d'une *j*-étoile et d'une *k*-étoile



Pour $j \ge k \ge 1$, $n \ge k + j + 5$ et $g_n = K_n \setminus (S_j \cdot C_4 \cdot S_k)$

$$|w_{RH}(g_n)| = \frac{2k!j!}{(n-1)(n-2)\cdots(n-(k+j+3))}$$

FORMULES EXPLICITES (SUITE)

$$\begin{aligned} |w_{M}(g_{n})| &= n + \sum_{l=1}^{j+2} 2\left[\binom{j+2}{l} + \binom{k+2}{l}\right] \frac{l!}{(n-1)\cdots(n-l)} \\ &+ \frac{8}{(n-1)(n-2)} + \frac{10}{(n-1)(n-2)(n-3)} \\ &+ \sum_{l=1}^{j} 4\left[\binom{j}{l} + \binom{k}{l}\right] \frac{l!}{(n-1)\cdots(n-(l+3))} \\ &+ \sum_{m=1}^{j} \sum_{l=1}^{k} 2\binom{j}{m}\binom{k}{l} \frac{m!l!}{(n-1)\cdots(n-(m+l+3))} \\ &+ \sum_{m=1}^{j+1} 2\left[\binom{j+1}{l} + \binom{k+1}{l}\right] \frac{l!}{(n-1)\cdots(n-(l+2))} \\ &+ \sum_{m=1}^{j+1} \sum_{l=1}^{k+1} 2\binom{j+1}{m}\binom{k+1}{l} \frac{m!l!}{(n-1)\cdots(n-(l+1))} \end{aligned}$$

GRAPHES BIPARTIS COMPLETS

En collaboration avec Gilbert Labelle

$$w_M(K_{m,n}) = (-1)^{mn} \cdot \frac{2^{m+n-1}m!n!}{(m+n-1)!}$$

Preuve: Méthode des homomorphismes de graphes

Exemple 1: Le cas Gaussien en dimension d

$$f(r) = -\exp(-\alpha r^2), \quad \alpha > 0$$
$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{d(n-1)}{2}} \gamma(c)^{-\frac{d}{2}}$$

Exemple 1: Le cas Gaussien en dimension d

$$f(r) = -\exp(-\alpha r^2), \quad \alpha > 0$$

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{d(n-1)}{2}} \gamma(c)^{-\frac{d}{2}}$$

γ(c) = complexité du graphe c = # d'arbres couvrants de c
 n = # de sommets
 e(c) = # d'arêtes

Exemple 2: Le cas d'un gaz à noyaux durs en dimension 1

 $f(r) = -\chi(|r| < 1)$ $w_M(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_i - x_j| < 1) \, dx_1 \dots dx_{n-1}$

Exemple 2: Le cas d'un gaz à noyaux durs en dimension 1

$$f(r) = -\chi(|r| < 1)$$

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_i - x_j| < 1) \ dx_1 \dots dx_{n-1}$$

Analyse informatique avec Jérôme Tremblay $w_M(c) \neq$ une fonction de seulement (# d'arbres couvrants, # de sommets, # d'arêtes, liste des degrés)





Mais

même # d'arbres couvrants: 2160 même # de sommets: 8 même # d'arêtes: 16 même liste des degrés: (7,5,4,4,4,3,3,2)

Exemple 3: Le cas d'un gaz à noyaux durs en dimension 1 $f(r) = -\chi(|r| < 1)$ $\overline{f}(r) = \chi(|r| \ge 1)$

$$w_{RH}(b) = (-1)^{e(b)} \int_{R^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} \chi(|x_i - x_j| < 1) \cdot \\ \cdot \prod_{\{i,j\} \in \overline{b}} \chi(|x_i - x_j| \ge 1) \, dx_1 \dots dx_{n-1}$$

Exemple 3: Le cas d'un gaz à noyaux durs en dimension 1 $f(r) = -\chi(|r| < 1)$ $\overline{f}(r) = \chi(|r| \ge 1)$

$$w_{RH}(b) = (-1)^{e(b)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} \chi(|x_i - x_j| < 1) \cdot \\ \cdot \prod_{\{i,j\} \in \overline{b}} \chi(|x_i - x_j| \ge 1) \ dx_1 \dots dx_{n-1}$$

 $w_{RH}(b) \neq$ une fonction de seulement (# d'arbres couvrants, # de sommets, # d'arêtes, |groupe d'automorphismes|)





Mais

même # d'arbres couvrants: 55 même # de sommets: 6 même # d'arêtes: 9 même |groupe d'automorphismes|: 2

Merci