



**HAL**  
open science

# ESTIMATIONS RIGOUREUSES DE $n$ -GRAPHERS DE MAYER ET APPLICATIONS

M. Lavaud

► **To cite this version:**

M. Lavaud. ESTIMATIONS RIGOUREUSES DE  $n$ -GRAPHERS DE MAYER ET APPLICATIONS. Journal de Physique Colloques, 1978, 39 (C1), pp.C1-183-C1-183. 10.1051/jphyscol:1978135 . jpa-00217332

**HAL Id: jpa-00217332**

**<https://hal.science/jpa-00217332>**

Submitted on 4 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## ESTIMATIONS RIGOUREUSES DE *n*-GRAPHERS DE MAYER ET APPLICATIONS


M. LAVAUD

CRPHT/CNRS, 45100 Orléans la Source, France

**Résumé.** — On a mis au point des méthodes rigoureuses pour obtenir des estimations précises de *n*-graphes de Mayer généraux, qui sont valables pour des systèmes neutres, polaires ou ionisés. Elles sont obtenues à l'aide de majorants et minorants qui tiennent compte de la structure topologique détaillée des graphes, et leur précision peut être basse, modérée ou élevée selon que l'on utilise des invariants de graphes, des algorithmes ou une méthode de Monte Carlo. Par exemple, on obtient la borne très simple

$$\left( \int |f|^{l/(p-1)} \right)^{p-1}$$

pour un 1-graphe à *p* points et *l* lignes *f*(*r*) identiques, à l'aide d'arbres maximaux du graphe. On peut obtenir, à l'aide de cycles, une borne plus précise. Pour le gaz gaussien, celle-ci surestime la valeur de tous les 1-graphes à 4, 9 et 15 points de 30 % et d'un facteur 25 et  $3 \times 10^3$  respectivement, alors que les majorants de Groeneveld les surestiment d'un facteur 8,  $4 \times 10^8$  et  $10^{21}$  respectivement. Pour les systèmes ionisés à lignes  $e^{-r}/r$ , un majorant simple à l'aide de chaînes

surestime le 2-graphe élémentaire  d'un facteur compris entre 1 et 3, uniformément en *r*,


alors que la borne de Groeneveld est divergente. On a trouvé aussi la décroissance à l'infini de 2-graphes quelconques, et des majorants uniformes en *r* avec la bonne décroissance.

Tout cela permet de construire les corrections à la longueur de Debye aux hautes densités, de calculer ou de borner des coefficients du viriel inaccessibles par d'autres méthodes, et constitue une première étape nécessaire pour une étude quantitative rigoureuse des systèmes ionisés, en particulier pour prouver la convergence des séries de Mayer.

**Abstract.** — We have developed rigorous methods to obtain precise estimates of general Mayer *n*-graphs, which are valid for polar, ionized and neutral systems. These are obtained by means of upper and lower bounds which take into account the detailed topological structure of the graphs. They can have a low, moderate or high precision, according as one makes use of graph invariants, algorithms or Monte Carlo methods. For example, one finds the very simple bound :

$$\left( \int |f|^{l/(p-1)} \right)^{p-1}$$

for a 1-graph with *p* points and *l* identical lines *f*(*r*), by means of maximal trees of the graph. One can obtain, by means of cycles, more precise bounds. For the gaussian gas, these overestimate the value of all the 1-graphs with 4, 9 and 15 points by 30 %, a factor 25 and  $3 \times 10^3$  respectively, while the Groeneveld bounds overestimate these 1-graphs by a factor 8,  $4 \times 10^8$  and  $10^{21}$  respectively. For ionized systems with lines  $e^{-r}/r$ , a simple bound by means of cycles overestimate the

simplest elementary 2-graph  by a factor lying between 1 and 3, uniformly in *r*, while

the Groeneveld bound is divergent. We have also found the decay at infinity of any 2-graphs, and uniform upper bounds with the correct decay.

This enables one to construct high density corrections to the Debye length, to calculate or bound virial coefficients inaccessible by other methods, and is a first necessary step for a rigorous and quantitative study of ionized systems, in particular to prove the convergence of the Mayer series.