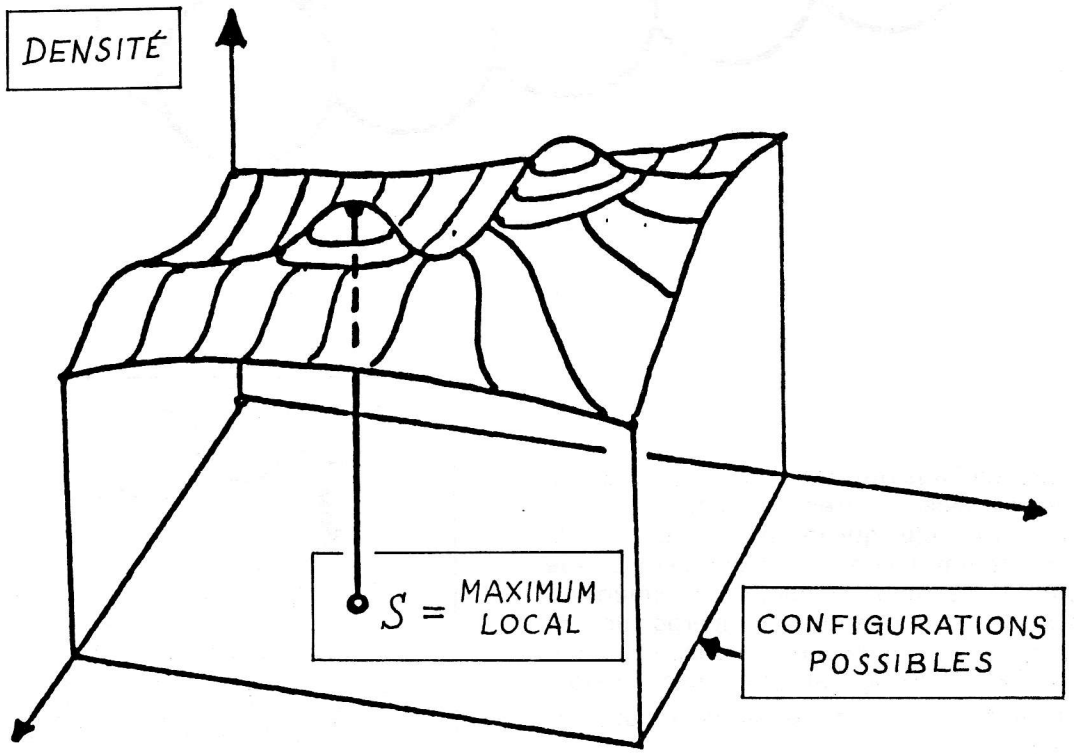
# EMPILEMENTS ET SYMÉTRIES

*François SIGRIST - Neuchatel*

**Comment disposer des sphères identiques de façon à obtenir l'empilement le plus dense possible ?**
**Ce problème, posé par David Hilbert en 1900 à Paris, n'est pas encore résolu. François Sigrist, de l'université de Neuchatel, en a présenté les différents aspects lors du concours mathématique de La Villette en 1983. L'intérêt du problème est multiple : son importance en cristallographie est évidente, les propriétés moléculaires des cristaux sont simulées en assimilant les molécules à des groupements de sphères. En mathématique, le problème a conduit à des travaux importants en arithmétique, permettant de résoudre des équations diophantiennes. Par ses généralisations à des dimensions supérieures à 3, il a trouvé des applications dans le codage, la transmission de messages et la construction de codes autocorrecteurs.**

On appelle densité d'empilement la portion de l'espace occupée par les grains. Le phénomène observé correspond à la notion mathématique de **maximum local** : une faible perturbation ne peut que diminuer la densité. Dans le croquis ci-contre, on observe qu'à un point proche de S, correspond une densité inférieure à la densité en S. Mais on remarque aussi que la densité en S n'est pas la plus grande qu'il soit possible d'obtenir.

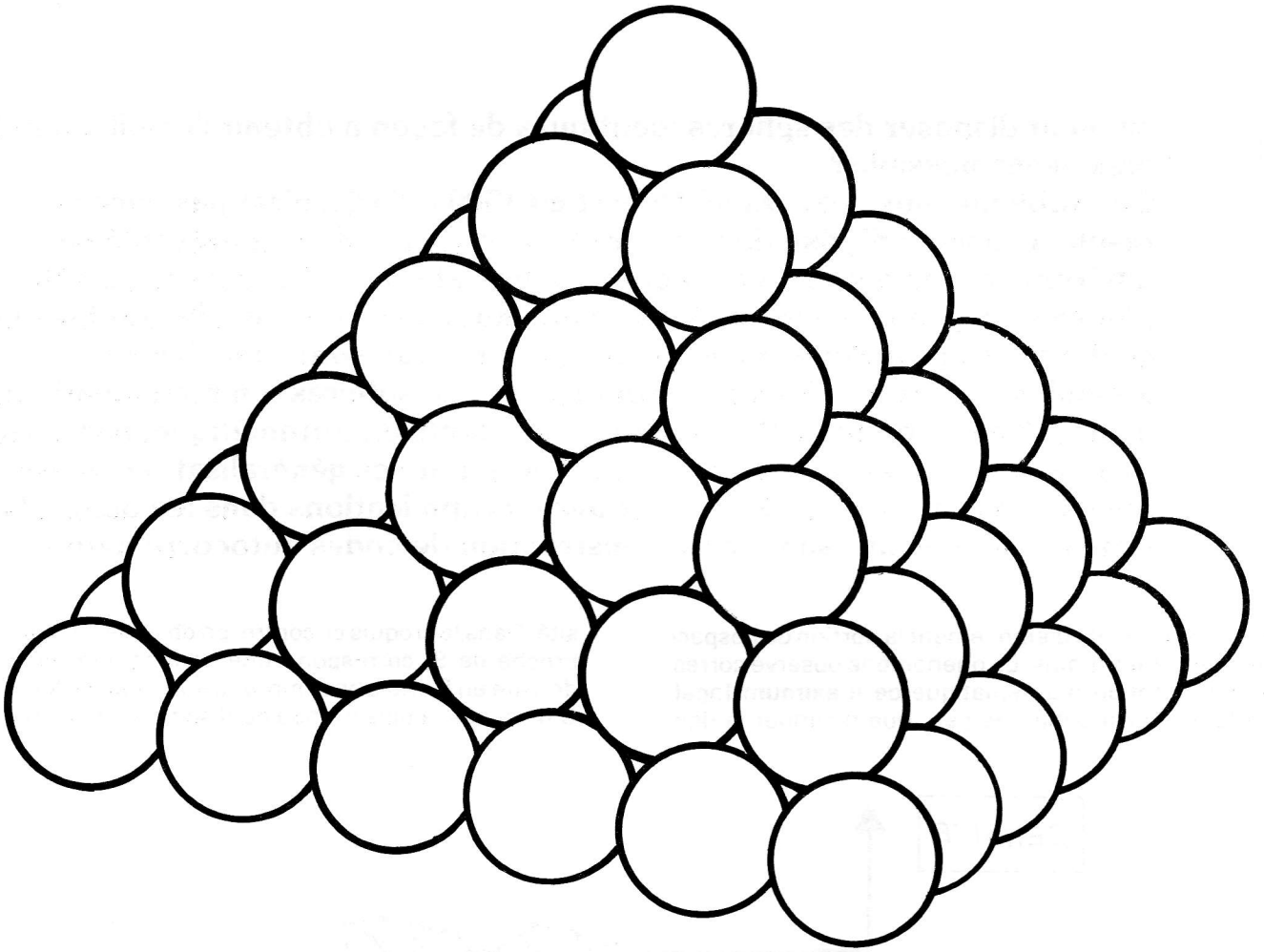


Toutes les observations relatives aux empilements rendent plausible l'existence d'une densité pour les empilements aléatoires de sphères. Deux sachets d'un kilogramme de sable ont même volume. Deux sachets de café moulu, même à des finesses de grain différentes, ont aussi même volume. Les différences de densité observées sont dues à la forme des grains. Du sable se tasse mieux que du riz, qui lui se tasse mieux que des billes d'acier. Et pourtant : Les mathématiques ne sont actuellement pas à même de démontrer l'existence d'une telle densité " universelle ".

La densité de 74 % des structures métalliques montre que la nature elle-même offre des exemples de densité bien supérieure à celle du sable. La structure cristalline s'appelle **réseau cubique à faces centrées**. Une excellente illustration de cet empilement est fournie par les piles de boulets de canon que l'on trouve dans les monuments militaires.

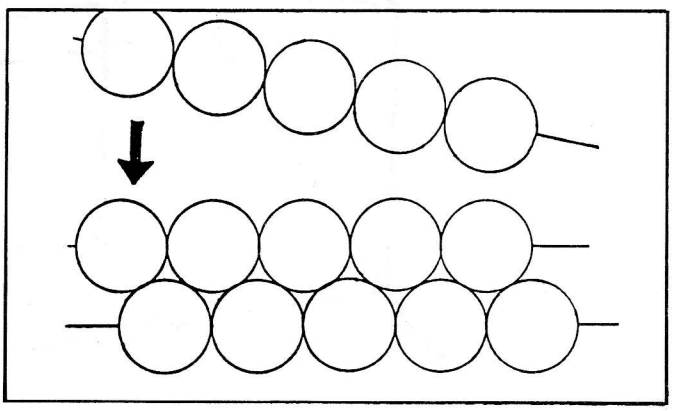
Les sections horizontales sont en **réseau carré**, alors que les faces latérales présentent le **réseau hexagonal** bien connu (alvéoles des abeilles).

Posée sur une face latérale, la pyramide explique un phénomène remarquable : contrairement à l'intuition, il **revient au même**, si l'on veut ranger des billes dans une boîte, de superposer des couches successives en réseau hexagonal ou en réseau carré.



* *
*

C'est Carl Friedrich Gauss qui démontra en 1831 que le réseau cubique à faces centrées est, parmi tous les réseaux cristallins, celui qui fournit la plus grande densité d'empilement. La démonstration est illustrée ci-contre dans le cas (plus simple) de la dimension deux. Il est facile de prouver que la superposition de deux couches donne la meilleure densité lorsque l'empilement devient hexagonal. La densité est alors $\pi/\sqrt{12} \approx 0{,}907$. A trois dimensions, on obtient $\pi/\sqrt{18} \approx 0{,}740$.



Les empilements cristallins de sphères peuvent être définis en toute dimension. Ils permettent de transcrire géométriquement la théorie algébrique des formes quadratiques réelles définies. La densité est liée, par une relation facile à établir, à la valeur minimale d'une forme quadratique unimodulaire lorsque les variables sont entières et ne sont pas toutes nulles.

Le simple fait que la densité d'empilement est inférieure ou égale à 100 % se traduit par un résultat algébrique fondamental. Cette observation de Minkowski fonda la géométrie des nombres. C'est un éclair de génie d'une importance historique considérable.

La densité maximale des empilements en réseau est connue jusque, et y compris, la dimension 8. Il paraît actuellement plausible que certains réseaux construits en dimension 9, 12 et 24 soient de densité maximale, mais la question n'a pas progressé depuis une vingtaine d'années.

| Dimension | Densité cristalline maximale | | Date |
|---|---|---|---|
| | Exacte | Approximative | |
| 2 | $\pi/2\sqrt{3}$ | 0,9069 | 1773 |
| 3 | $\pi/3\sqrt{2}$ | 0,7404 | 1831 |
| 4 | $\pi^2/16$ | 0,6168 | 1872 |
| 5 | $\pi^2/15\sqrt{2}$ | 0,4652 | 1877 |
| 6 | $\pi^3/48\sqrt{3}$ | 0,3729 | 1925 |
| 7 | $\pi^3/105$ | 0,2952 | 1926 |
| 8 | $\pi^4/384$ | 0,2536 | 1934 |
| 9 | $\geqslant 2\pi^4/945\sqrt{2}$ | $\geqslant$ 0,1457 | 1946 |

C'est en dimension 10 que les informaticiens, à l'aide de la théorie des codes, ont produit un empilement de sphères non cristallin qui est plus dense que tous les empilements en réseau connus.

On se perd actuellement en conjectures sur cette éventuelle malformation. Peut-être est-elle l'effet de notre ignorance...

* *
*

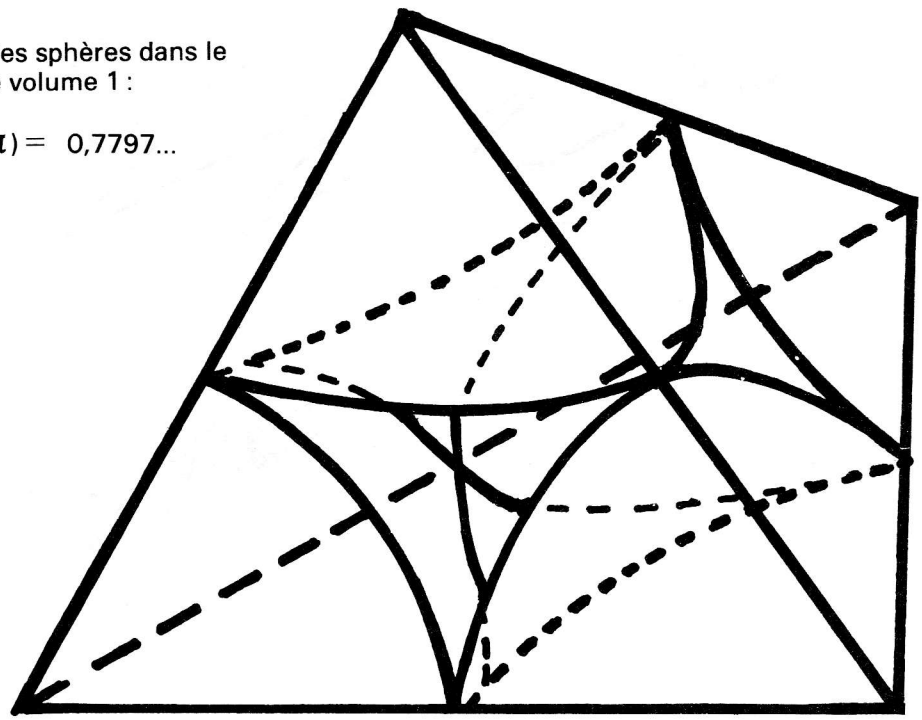
Un empilement de sphères, quelle que soit sa régularité, ne peut atteindre la densité de 100 %. En 1958, le mathématicien britannique C.A. Rogers a donné, grâce à une idée très ingénieuse, une limite supérieure de densité qui est la meilleure estimation connue.

En dimension trois, cette limite est donnée par la densité d'occupation des sphères centrées aux sommets d'un tétraèdre régulier, comme l'illustre la figure ci-contre.

La valeur exacte de la limite obtenue est $\sqrt{2}\,(3\arccos 1/3 - \pi)$, presque 78 %. Cette densité est cependant inaccessible, pour une raison géométrique bien connue : il est impossible d'empiler des tétraèdres réguliers de façon serrée. Les petits récipients contenant de la crème à café, tétraédriques, se prêtent particulièrement bien à une expérience directe.

Volume occupé par les sphères dans le tétraèdre régulier de volume 1 :

$\sqrt{2}\,(3 \arccos \frac{1}{3} - \pi) = 0{,}7797...$



La densité de la sphère inscrite dans un **dodécaèdre** régulier est légèrement supérieure à 75 %. On a affirmé que cette valeur constitue une limite supérieure de densité, mais la démonstration est hélas **incomplète**.

La question reste irritante à cause du réseau cubique à faces centrées, de densité 74 %. C'est **le record du monde,** mais est-ce le record absolu ?

La question est si ouverte que même les spécialistes sont divisés. Sous forme d'énigme, elle peut s'énoncer ainsi :

"Un récipient, de capacité un litre, est savamment rempli de grains d'un matériau inconnu. Le poids net est 750 grammes.

Est-il possible que, déversé dans l'eau, ce matériau flotte ?"

Il serait dommage de traduire les deux phrases suivantes, l'une canadienne, l'autre anglaise, qui résument les doutes et les espoirs des mathématiciens.

H.S.M. Coxeter (1951) :

"It is conceivable that some irregular packing might be still denser"

C.A. Rogers (1958) :

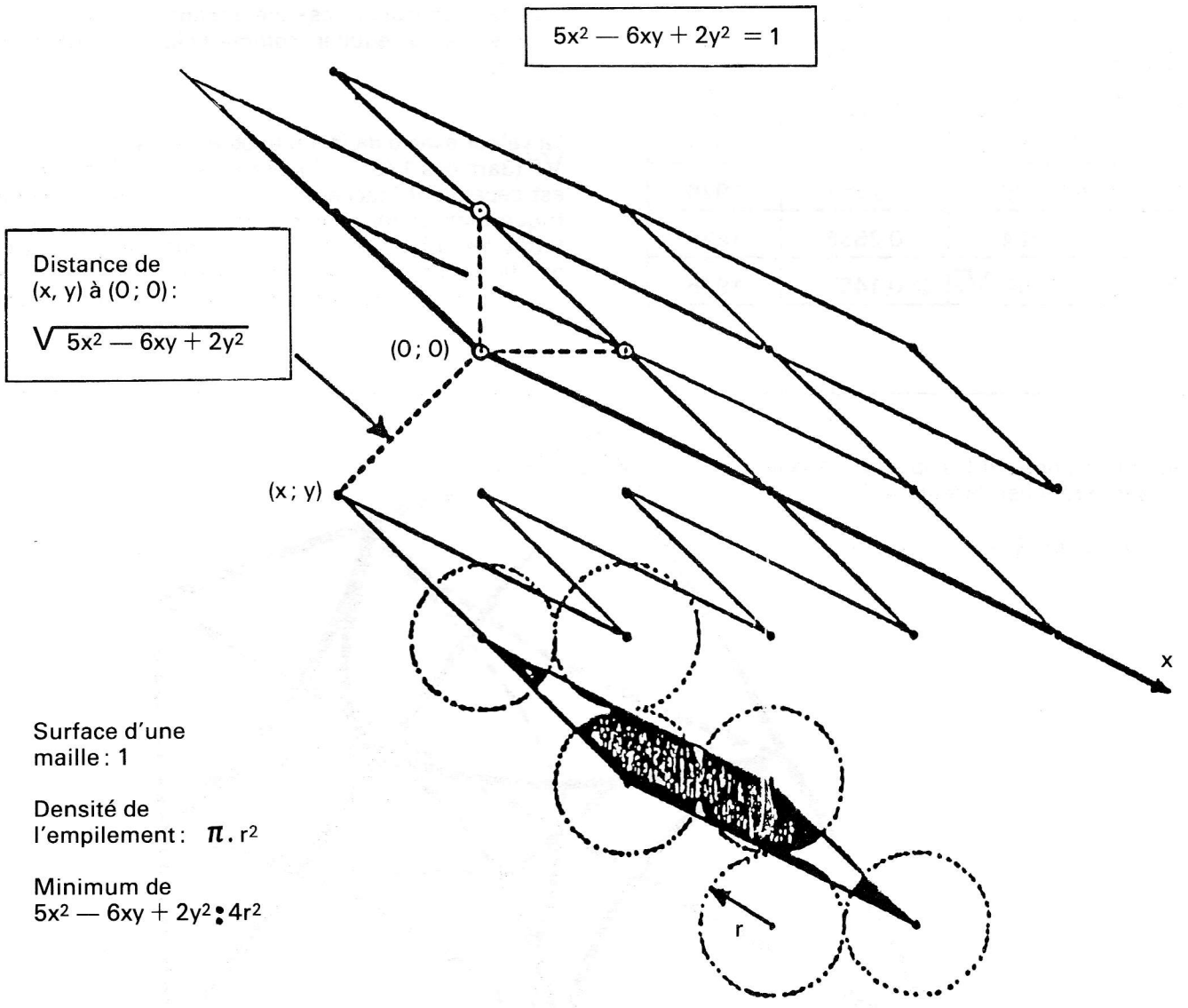
"Many mathematicians believe, and all physicists know, that the density cannot exceed $\pi / \sqrt{18} = 0{,}7404...$"

■

Un bel échantillon d'application de la géométrie des nombres est le résultat suivant : « On donne trois entiers a, b, c satisfaisant $a > 0$ et $ac - b^2 = 1$. Alors, l'équation $ax^2 + 2bxy + cy^2 = 1$ a toujours une solution entière ».

La preuve, géométrique, est illustrée ci-contre dans le cas particulier $a = 5 \quad b = -3 \quad c = 2$.

Il existe un système de coordonnées obliques tel que la distance à l'origine du point (x, y), soit $\sqrt{ax^2 + 2bxy + cy^2}$. En outre, la maille fondamentale est de surface 1. On prend alors l'empilement de sphères centrées aux points à coordonnées entières, de rayon maximal. Le carré $4r^2$ du diamètre de la sphère est un **entier** : c'est la valeur minimale de $ax^2 + 2bxy + cy^2$ lorsque x et y sont entiers. La densité d'empilement est $\pi\, r^2 \leqslant 1$. Donc $4r^2 \leqslant \frac{4}{\pi} = 1{,}27...$ et par conséquent $4r^2 = 1$. Ce qu'il fallait démontrer.



L'énumération des entiers qui peuvent s'écrire comme somme de deux carrés est un problème d'arithmétique bien connu.

C'est le résultat de la page précédente qui permet de franchir le seul passage délicat :
" Soit b un entier quelconque. Alors tout diviseur de $b^2 + 1$ est une somme de deux carrés ".

Preuve : Si a divise $b^2+1$, il existe c tel que $ac-b^2=1$. Alors (page précédente) $ax^2 + 2bxy + cy^2 = 1$ possède une solution entière.
On en déduit successivement :

$(ax + by)^2 + y^2 =$
$a^2x^2 + 2abxy + (b^2 + 1)y^2 =$
$a^2x^2 + 2abxy + acy^2 =$
$a(ax^2 + 2bxy + cy^2) = \ldots$
$= a$

Ce qu'il fallait démontrer.

**Sommes de deux carrés**

| | |
|---|---|
| Premiers | $1789 = 5^2 + 42^2$ |
| | $1993 = 12^2 + 43^2$ |
| Composés | $1985 = 7^2 + 44^2 = 31^2 + 32^2$ |
| | $1989 = 15^2 + 42^2 = 30^2 + 33^2$ |

Le point final de l'investigation concerne les nombres premiers. C'est :
" Soit p un nombre premier tel que
$(p-1)/2$ soit un nombre pair.
Alors p est une somme de deux carrés ".

Preuve : Tout nombre premier impair divise

$$1 + (-1)^{\frac{p-1}{2}} \times \left(\frac{p-1}{2}!\right)^2$$

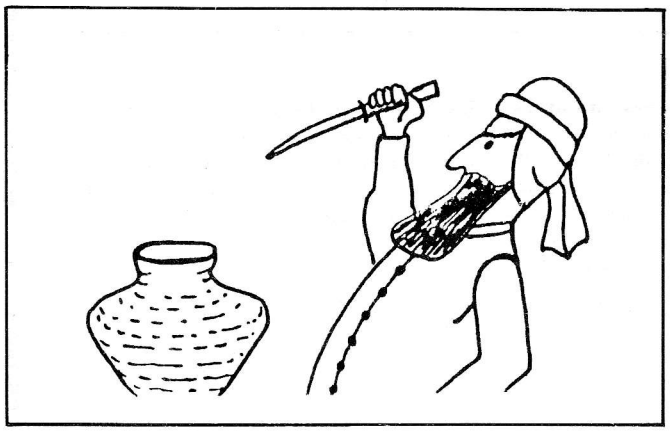
C'est une propriété facile à établir et que l'on appelle le "théorème de Wilson". La conclusion suit immédiatement du résultat précédent.

## Problèmes " Chocs de billes "

Les empilements de sphères sont le domaine de nombreuses situations paradoxales. En voici cinq :

**● Le fakir**

Des fakirs plongent, plusieurs fois de suite, un couteau dans une jarre de riz bien tassée. Après une douzaine de coups, la jarre reste suspendue au couteau.
Plus près de nous, chacun peut, à l'aide d'un cure-dents et d'une salière, réussir ce tour très spectaculaire.

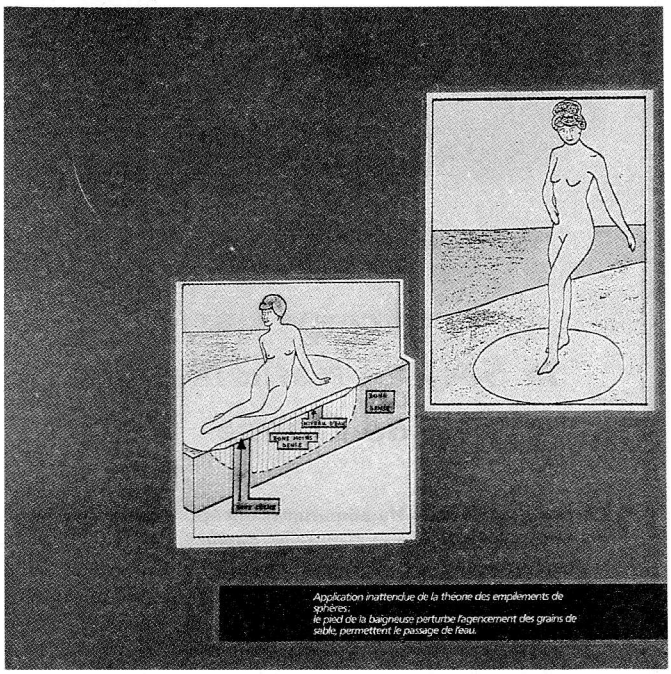


**● Agitez, agitez-moi !**

Dans une boîte, placez des billes de même matière (acier par exemple) et de différents diamètres. Agitez fortement la boîte. Que se passe-t-il ? Où sont les grosses billes ? les petites ? en haut ? en bas ?

**● Café moulu, café foutu !**

Observez un paquet de café en grain et un paquet de café moulu. Pour le même poids, quel est celui qui occupe le volume le plus petit ? En êtes-vous sûr ?



*Application inattendue de la théorie des empilements de sphères : le pied de la baigneuse perturbe l'agencement des grains de sable, permettant le passage de l'eau.*

**● La baigneuse**

Une baigneuse au bord de l'eau pose son pied sur le sable humide. Observez bien son petit pied carré ! A votre avis, s'enfonce-t-il ou remonte-t-il plus haut ? Tout est affaire de densité maximum locale !

● Voyage à travers les dimensions

Dans $R^n$ la mesure du volume d'une boule de rayon 1 est :

$$\frac{(2.\pi)^{n/2}}{n\,(n-2)\,(n-4)\ldots 4.2} \quad \text{si n est pair}$$

$$\frac{2\,(2.\pi)^{(n-1)/2}}{n\,(n-2)\,(n-4)\ldots 3.1} \quad \text{si n est impair}$$

d'où le "problème-choc" : dans quelle dimension la sphère est-elle la plus grosse ? ■