COMMENT RANGER DES BALLES DE PING PONG ?

Eric CHANEY (*)

La glace 9

Dans *"Cat's Cradle"*, (Le berceau du chat), Kurt Vonnegut Jr met en scène un savant un peu fou qu'un général américain vient consulter. Ce militaire en a assez de la boue, et voudrait que le savant aide l'armée U.S. à neutraliser cet ennemi insidieux. Trouvant l'idée amusante, le D^r Hoenikker lui explique qu'il suffirait de disposer d'un germe d'une eau qui gèlerait à, par exemple, 45°C. Et pour cela de **trouver une structure cristalline pour la glace, différente de sa structure usuelle.** Le savant se met alors à collectionner des photos d'empilement de vieux boulets de canon, visite les supermarchés pour observer les tas de pamplemousses etc... et finit par trouver la *"glace 9"*, condamnant ainsi le monde à périr gelé...

Fiction, bien sûr, science-fiction même, marquée par une réaction anti-scientiste qui n'est plus guère de mode aujourd'hui. Fiction donc, sauf sur un point capital : il est vrai qu'il y a encore beaucoup à apprendre sur les empilements de boulets de canon, d'oranges et autres sphères. Par exemple, nul ne savait en 1963 (date de parution du roman) si l'empilement *"naturel"* en quinconce est le meilleur possible. En 1984, la question est toujours ouverte !

Ces problèmes, et d'autres connexes, formaient le thème d'une conférence de M. François SIGRIST, de l'Université de Neuchâtel, donnée en mai 84 à l'Institut de mathématiques. L'article qui suit est issu des notes prises à cette séance fort excitante.

Il s'agit en premier lieu d'examiner la question suivante :

> **Comment faut-il s'y prendre pour mettre le plus possible de billes de roulement dans une boîte ?**

(*) D'après une conférence de M. François SIGRIST

En termes plus mathématiques :

(2) **Quelle est la densité maximale que l'on peut atteindre en "remplissant" l'espace avec des sphères de rayon donné ? Comment atteindre le maximum ?**

Remarquons tout de suite que, posé en dimension 3, ce problème peut l'être en dimension n, avec $n \geqslant 2$.

§ 1. REMPLIR-TASSER : L'EMPILEMENT ALÉATOIRE

C'est la solution adoptée pratiquement pour répondre à la question **(1)**. Le sens commun admet d'ailleurs que deux boîtes identiques, remplies à ras-bord de billes de roulement de même diamètre, en contiennent à peu près le même nombre.

Pour une fois, le dit sens commun ne se trompe pas : les physiciens ont constaté expérimentalement que la **densité** -c'est-à-dire **le rapport entre le volume occupé par les sphères et celui du contenant** - aléatoire ainsi obtenue est remarquablement stable, d'une expérience à l'autre, valant en gros $2/\pi$ ($\cong 0,63$).

Ce fait incite d'ailleurs à penser que la distribution des atomes (ou des molécules) dans un liquide, doit s'apparenter à l'empilement aléatoire. Prenons un corps dont la structure cristallinne à l'état solide est le réseau cubique à faces centrées, un métal comme le cuivre, par exemple. Il possède une densité ρ_1. Porté à sa température de fusion, ce métal a une densité ρ_2. Or le rapport mesuré ρ_2/ρ_1 vaut approximativement 63/74. 0,63, nous l'avons vu, c'est la densité aléatoire. Or, 0,74 ($\pi/\sqrt{18}$ pour être précis), c'est la densité de l'empilement des sphères dans un réseau cubique à faces centrées.

L'approximation est d'ailleurs bien meilleure dans des expériences faites sur les gaz rares, dont les atomes présentent une meilleure symétrie sphérique.

Malheureusement, la situation d'empilement aléatoire est rétive à la mathématisation. A défaut de produire un modèle fiable, les mathématiciens sont cependant parvenus à indiquer comment trouver une borne supérieure de la densité d'empilement des sphères, en dimension n.

§ 2. UNE MAJORATION THÉORIQUE

Le résultat suivant, dû à C.-A. ROGERS, date de 1958 :

Soit Δ_n le simplexe régulier d'arête 1 dans l'espace euclidien de dimension n. On place n+1 sphères centrées en ses sommets, de rayon 1/2. Soit σ_n le rapport du volume occupé dans Δ_n par ces sphères à celui de Δ_n .
La densité de tout empilement de sphères en dimension n est inférieure à σ_n .

Le cas n = 2

Le théorème de Rogers se visualise bien dans le plan (Fig. 1) où, de plus, cette borne supérieure est atteinte.

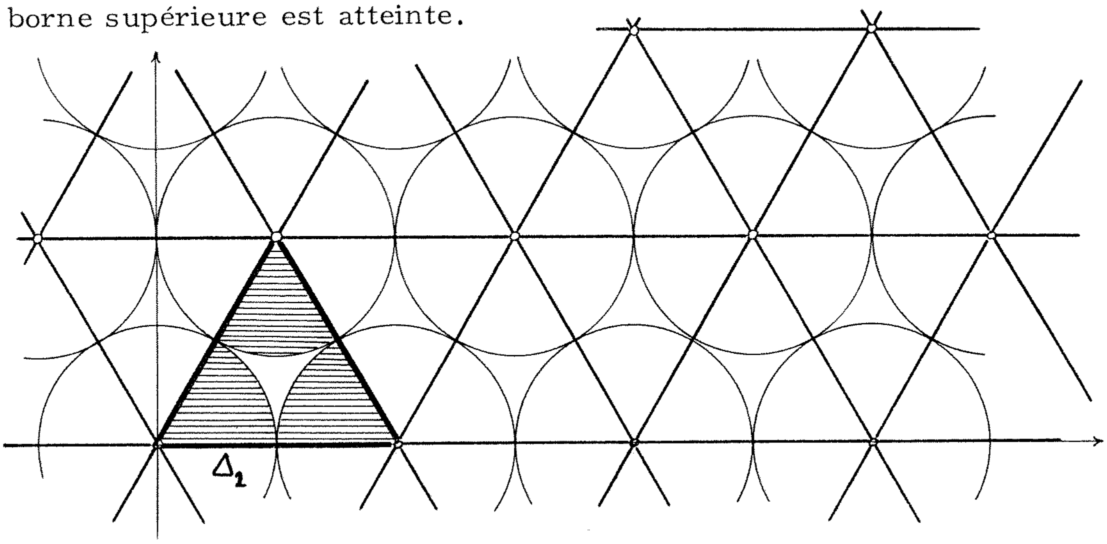

Fig. 1 : Le réseau hexagonal

Le simplexe régulier Δ_2 est ici le triangle équilatéral.

On calcule aisément que $\sigma_2 = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \cong 0,907$.

Comme cette disposition des disques unités correspond à un véritable *"empilement"*, les disques ne se chevauchant pas, on voit que le maximum est atteint.

Le cas n = 3 : mystère !

Tout d'abord, il n'est pas possible de remplir l'espace ordinaire avec des boules de rayon 1/2 disposées aux sommets de tétraèdres réguliers : on sait que les tétraèdres ne fournissent pas un pavage de l'espace. Mais rien n'empêche de calculer σ_3 :

$$\sigma_3 = \sqrt{2}\,(3 \arccos (1/3) - \pi) \cong 0,779.$$

Le meilleur empilement connu est celui obtenu en superposant en quinconce des plans de sphères disposées selon le réseau hexagonal. Celui utilisé sur les étals des marchands de fruits soucieux d'esthétique. Il est également possible de le réaliser en superposant d'une certaine façon des réseaux à mailles carrées. En un mot, c'est le réseau cubique à faces centrées déjà évoqué, (*) dont la densité vaut $\pi / 3\sqrt{2} \cong 0,740$.

Entre 0,74 et σ_3 , il y a donc encore de la place pour répondre à **(2)**. Peut-on faire mieux que les marchands d'oranges ? Nul ne le sait ! Situation que le mathématicien John MILNOR n'hésite pas à qualifier de scandaleuse...

σ_n est d'ailleurs un nombre bien inconfortable : son calcul pour $n > 4$ est à peu près inextricable, et si σ_4 est connu exactement, c'est grâce à COXETER qui l'a trouvé dans les oeuvres d'un géomètre suisse du XIXe siècle, Ludwig SCHÄFLI. Un miracle, n'hésite pas à dire son compatriote François SIGRIST.

§ 3. EMPILEMENT RÉGULIERS ET ÉQUATIONS DIOPHANTIENNES

L'empilement aléatoire se formalise mal. Le maximum de Rogers semble bien difficile à atteindre. Reste à adopter une démarche plus constructive : tenter de ranger les sphères régulièrement, c'est-à-dire centrées sur les points d'un **réseau** (Fig. 2)

> **Dans R^n, toute base $(e_1, \ldots, e_n)$ définit un réseau : l'ensemble des points à coordonnées entières dans cette base.**

(*) Les réseaux plans hexagonaux apparaissent mal sur le réseau cubique à faces centrées, vu classiquement. Ils sont en effet distribués sur des plans parallèles aux plans de symétrie des cubes, qui passent par un sommet et une diagonale d'une face qui ne contient pas ce sommet. Ces plans font apparaître des triangles équilatéraux dans le cube.

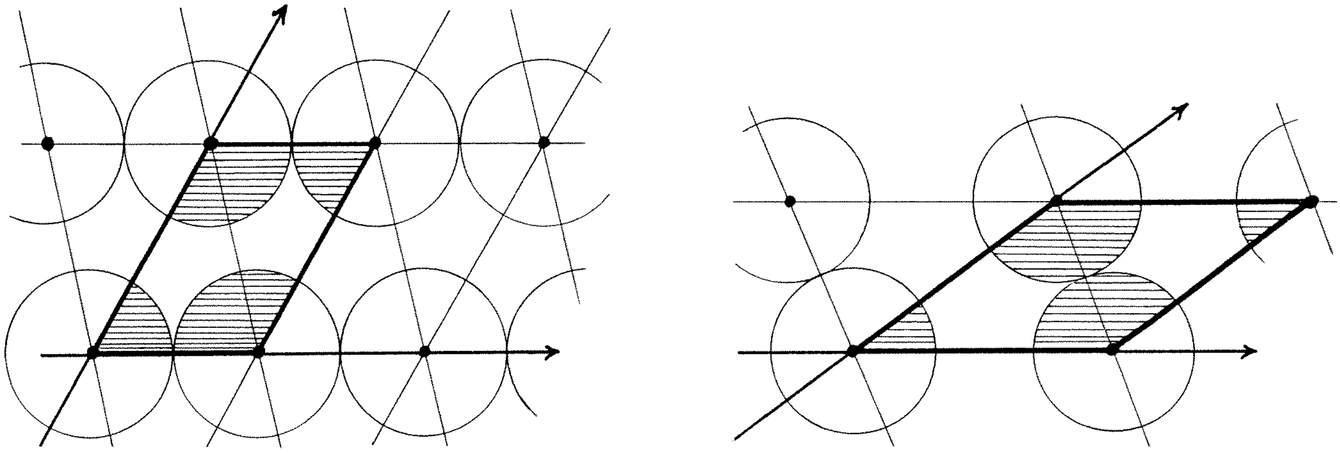

Fig. 2

Pour un réseau donné, la densité la plus grande est obtenue pour le plus grand rayon de sphères qui évite le chevauchement. C'est, en regardant bien, la moitié de la distance entre **0** et le point du réseau le plus proche. La densité est *"facile"* à mesurer, d'ailleurs, une fois que l'on a remarqué que les traces des sphères dans un domaine fondamental du réseau (en gras sur la Fig. 2) reconstituent une sphère complète.

En faisant varier le réseau, la densité varie aussi, toujours majorée par σ_n. Elle possède donc une borne supérieure.

HERMITE a montré que la densité maximale (sur l'ensemble des réseaux) est effectivement atteinte pour un certain réseau.

Entrons un peu dans le détail. Dans ce problème, on travaille dans l'espace **euclidien**, avec un réseau **variable.** Il est commode de le transformer en un problème dans $\mathbb{R}^n$ muni d'un produit scalaire (une forme quadratique définie positive) **variable.** Ceci se fait très simplement :

Etant donné un réseau de base $(\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n)$, on l'envoie sur $\mathbb{Z}^n \subset \mathbb{R}^n$ muni de sa base canonique $(\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n)$ par l'application linéaire :

$$\mathbf{a}_i \mapsto \mathbf{e}_i$$

On transforme du même coup le produit scalaire de l'espace euclidien en une forme quadratique de matrice $A = [a_{ij}]$ où $a_{ij} = (\mathbf{a}_i \mid \mathbf{a}_j)$.

Ceci revient à transformer les réseaux de la figure 2 en réseaux à maille carrée, et l'empilement de disques en empilement d'ellipses.

Réciproquement, toute forme quadratique définie positive A provient d'un réseau, défini à une transformation orthogonale près. On l'obtient en *"redressant"* l'ellipsoïde de la forme quadratique en une sphère !

Ainsi, il y a correspondance bijective entre réseaux et classes de formes quadratiques définies positives.

Conservant le point de vue de l'espace $\mathbb{R}^n$, muni du réseau $\mathbb{Z}^n$, et d'une forme quadratique A variable, introduisons :

$$m(A) = \min (X^t A X), \text{ minimum pris sur } \mathbb{Z}^n - \{ 0 \}$$

Si l'on revient au réseau qui définit A, **m(A) est la distance entre 0 et le point le plus proche du réseau.**

Il est pratique d'introduire aussi :

$$\mu(A) = \frac{m(A)}{(\det A)^{1/n}}$$

, invariant si on transforme A par homothétie ou transformation unimodulaire. La densité maximale d'empilement de sphères sur le réseau est alors :

$$\delta\ (A) = \frac{\omega_n}{2^n} \left[\mu(A)\right]$$

, où ω_n est le volume de la boule unité de $\mathbb{R}^n$.

Le résultat de Hermite peut maintenant s'exprimer sous sa forme originale :

Sur l'ensemble des formes quadratiques à n variables, $\mu(A)$ est borné, et atteint son maximum (noté γ_n).

La version géométrique - il existe un cristal permettant l'empilement régulier de sphères de densité maximale - est loin d'être évidente !

On se trouve donc avec un nouveau majorant pour la densité. σ_n , dont on ne sait pas s'il est atteint (sauf pour n=2) est un majorant pour tout empilement. γ_n ne l'est que pour les empilements réguliers, mais lui au moins, est atteint.

Les réseaux détiennent-ils le record de densité ? Encore une question ouverte ! Pour n=2, la réponse est oui. Pour n=3, beaucoup pensent que le réseau cubique à faces centrées est vainqueur toutes catégories.

Au delà, le mystère s'épaissit. Utilisant la théorie des codes, LEECH et SLOANE ont fabriqué en dimension 10 un empilement non distribué sur un réseau, plus dense que tous les empilements en réseau connus jusqu'à ce jour. Si l'on connaissait γ_n , il serait facile de jauger ce prétendant. Seulement voilà, on n'a pu calculer γ_n que pour $n \leqslant 8$...

On sait quand même, grâce à MINKOWSKI, que $\gamma_n < n$.

Application à une équation diophantienne :

L'équation $4181x^2 - 5168xy + 1597y^2 = 1$ possède une solution entière et les empilements de sphère le prouvent !

Son premier membre est une forme quadratique de déterminant +1.

De façon générale, soit $ax^2 + 2b\,xy + c\,y^2 = 1$ une équation à coefficients entiers telle que $ac - b^2 = 1$ et $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ la forme quadratique du premier membre. Comme $\det A = 1$, on a $\mu(A) = m(A)$.

Selon Minkowski, $\gamma_2 < 2$. Le minimum de A sur $\mathbb{Z}^2 - \{0\}$ est un entier < 2 ! Il vaut donc 1. Il est atteint pour un certain couple d'entiers (x,y). Voila !

§ 4. "THE KISSING NUMBER"

Convenons d'appeler *"baiser"* le chaste contact entre deux sphères. Le problème du *"kissing number"* se formule ainsi :

> **Combien de sphères de rayon donné peut-elle recevoir de baisers simultanés de la part de sphères de même rayon ?**

Autrement dit, combien peut-on coller de balles de ping-pong autour de l'une d'entre elles ?

Le réseau cubique à faces centrées, encore lui, fournit déjà un candidat : 12.

Mais en observant la réalisation de ce *"polybaiser"*, on a la nette impression qu'il reste de la place...

Le problème suscita une polémique dès la fin du XVIIe siècle : NEWTON pensait que 12 était le maximum, GREGORY soutenait que c'était 13.

Les notions introduites au § 1 permettent de constater que l'alternative est bien entre 12 et 13:

Imaginons la sphère centrale couverte par ses soeurs, et celles-ci entourées par la sphère tangente extérieure, de rayon choisi égal à 1. En disposant au centre de la figure une source ponctuelle de lumière, chaque *"sphère-soeur"* découpera sur l'enveloppe extérieure une calotte d'ombre d'aire facile à calculer : $\pi\ (2 - \sqrt{3})$. S'il y a N sphères couvrantes, l'aire d'ombre sera $N \,.\, \pi\ (2 - \sqrt{3})$. D'où une première majoration :

$$N \,.\, \pi\ (2 - \sqrt{3}) < 4\ \pi$$

Il suffit d'injecter l'idée de Rogers pour l'affiner : la densité maximale d'empilement est précisément le rapport entre l'aire de la zone ombrée et l'aire totale de la sphère extérieure. La somme des aires des calottes ne saurait donc excéder $4\ \pi \,.\, \sigma_3$. D'où :

$$N < \frac{4\ \sigma_3}{2 - \sqrt{3}} \cong 13,4.$$

Plus que 13 candidates.

Mais il a fallu attendre 1953 pour départager les illustres savants : VAN DER WAERDEN et SCHÜTTE donnèrent raison à Newton : le *"kissing number"* en dimension 3 est bien 12.

On peut généraliser le problème en faisant varier le rayon de la sphère centrale, celui des sphères couvrantes restant constant. S'introduisent alors deux fonctions :

* R(N) : rayon minimum de la sphère couverte par N sphères de rayon 1.
* N(R) : nombre maximal de sphères de rayon 1 couvrant une sphère de rayon R.

Ces deux fonctions restent mal connues.

Une dernière curiosité : R(N) ne croît pas **strictement** avec N. En effet R(5) = R(6). En termes plus concrets :

En plaçant six sphères aux sommets d'un octaèdre régulier d'arête 1 de façon que trois sphères d'une même face soient tangentes, la sphère inscrite a pour rayon R(6). Imaginons cette dernière de rayon variable. En enlevant une sphère couvrante, on fait de la place. Il devrait donc être possible de dégonfler la sphère centrale. Or il n'en est rien !

NOTE : M. François Sigrist est l'un des trois lauréats du Concours lancé pour la partie mathématique du Musée de la Villette. Concours où notre ami Jean LEFORT a obtenu un accessit. C'est dire que M. Sigrist n'est pas de la variété "confinée en tour d'ivoire". Voici d'ailleurs ce qu'il écrivait dans "Mathematical Intelligence" Vol. 5 n° 3, en introduction à un article consacré aux empilements de sphères :

> *"Les faits de base dans la vie de tous les jours relèvent de la géométrie euclidienne, mais la familiarité avec la géométrie fait de moins en moins partie de ce qu'on pourrait appeler la culture de M. Tout-le-monde. Les mauvais jours, j'incrimine Bourbaki. Les autres, je pense que tous les mathématiciens portent une part de responsabilité. Combien de mes collègues mathématiciens ont une intuition correcte de la densité d'une sphère dans un cube ? (...) Combien savent que le volume de la boule unité dans $\mathbb{R}^n$ commence par croître, puis décroît très vite avec n ? (...)"*