Arrangements de boules dans l'espace

Origines historiques

En 1611, l'astronome et mathématicien Johannes Kepler écrivit à l'attention de son protecteur Johannes Matthäus Wackher von Wackenfels un petit opuscule dans lequel il tentait d'expliquer la forme en étoile des flocons de neige et méditait sur diverses autres configurations géométriques. Kepler affirmait notamment qu'il n'était pas possible de trouver un empilement de boules (pleines) toutes de même rayon plus serré que l'empilement que nous appelons de nos jours « cubique à faces centrées », et qui est celui selon lequel les marchands de fruits entassent les oranges. Cet énoncé constitue la conjecture de Kepler[1].

De l'autre côté de la Manche, une controverse opposa en 1694 Isaac Newton et David Gregory[2]. Gregory pensait qu'il était possible de se débrouiller pour placer dans l'espace 14 boules de même rayon sans qu'elles ne s'interpénètrent et de sorte que l'une d'entre elles soit en contact avec les 13 autres. En effet, si l'on dessine sur une sphère les 12 sommets d'un icosaèdre régulier auquel elle est circonscrite, si l'on positionne 12 autres boules de sorte qu'elles touchent la sphère en ces points, on s'aperçoit que ces 12 boules ne se touchent pas. Mieux, il y a assez d'espace entre elles pour qu'on puisse les permuter comme on veut en les faisant rouler sur notre sphère de départ. Peut-être ainsi y a-t-il assez de place pour qu'on puisse mettre une treizième boule au contact de la sphère centrale. Newton pensait au contraire que cela n'était pas possible.

Kepler et Newton avaient-ils raison ?

Même les plus grands font des erreurs bien sûr, mais en ce qui concerne ces problèmes, Kepler et Newton avaient vu juste. Il a fallu attendre longtemps pour en être certain.

Théorème (Schütte et van der Waerden, 1953) : Etant donnée une boule dans l'espace euclidien de dimension 3, on ne peut placer à son contact 13 autres boules de même rayon que la première sans que ces dernières ne s'interpénètrent.

Théorème (Hales et Ferguson, 1998) : Tout empilement de sphères dans l'espace euclidien de dimension 3 a une densité au plus égale à la densité $\pi/(3\sqrt{2})$ de l'empilement cubique à faces centrées.

Expliquons l'énoncé du théorème de Hales et Ferguson. Un *empilement de sphères* est une famille de boules de même rayon ne s'interpénétrant pas. Appelons X la réunion de ces boules, c'est-à-dire l'ensemble des points qui sont à l'intérieur d'une des sphères de l'empilement. La *densité de l'empilement* est la limite (la limite supérieure pour être précis) de la portion de volume $\mathrm{vol}(X \cap C)/\mathrm{vol}(C)$ occupée par les boules à l'intérieur d'un cube C dont la taille tend vers l'infini. Le théorème de Hales et Ferguson signifie donc que si X est la réunion des boules d'un empilement et si α est un nombre strictement supérieur

---

[1] Une autre source indique que Kepler formula cette conjecture dès la fin du XVI$^{\mathrm{e}}$ siècle dans une réponse à une lettre que lui avait adressée le mathématicien anglais Thomas Harriot.

[2] David Gregory (1659–1708) fut par ailleurs un fervent défenseur de Newton et enseigna ses théories à l'université d'Edimbourg dès 1683, alors qu'à Cambridge, on continuait à enseigner la vieille philosophie naturelle grecque.

à $\pi/(3\sqrt{2})$, alors il y a un nombre R tel que pour tout cube C dont l'arête est de longueur plus grande que R, on ait $\mathrm{vol}(X \cap C) < \alpha \cdot \mathrm{vol}(C)$. Répétons encore : si on cherche à remplir un très grand cube par de toutes petites oranges sphériques de même rayon, alors le volume occupé par les oranges sera au plus égal à $\pi/(3\sqrt{2}) \times 100\%$ du volume total du cube.

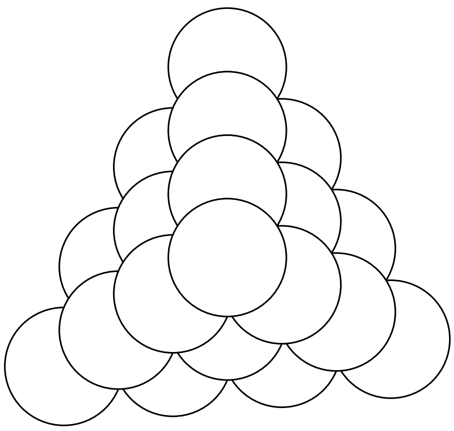
Quelques définitions

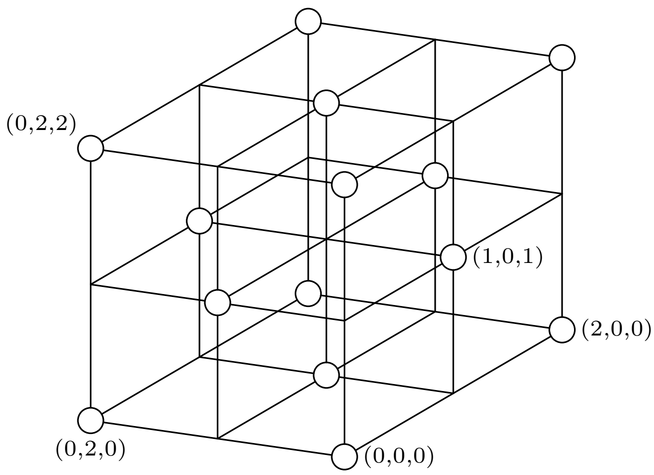
Avant d'aller plus loin, introduisons quelque terminologie. Nous considérons un ensemble de boules ne s'interpénétrant pas et de même rayon. Se donner un tel ensemble revient à se donner l'ensemble P de leurs centres ; la distance entre deux points de P est toujours supérieure ou égale au diamètre des boules.

L'ensemble de boules présentera une certaine régularité si les points de P sont périodiquement répartis. Une condition encore plus forte est d'exiger que P soit un *réseau*, c'est-à-dire un ensemble discret de points satisfaisant aux deux conditions suivantes :

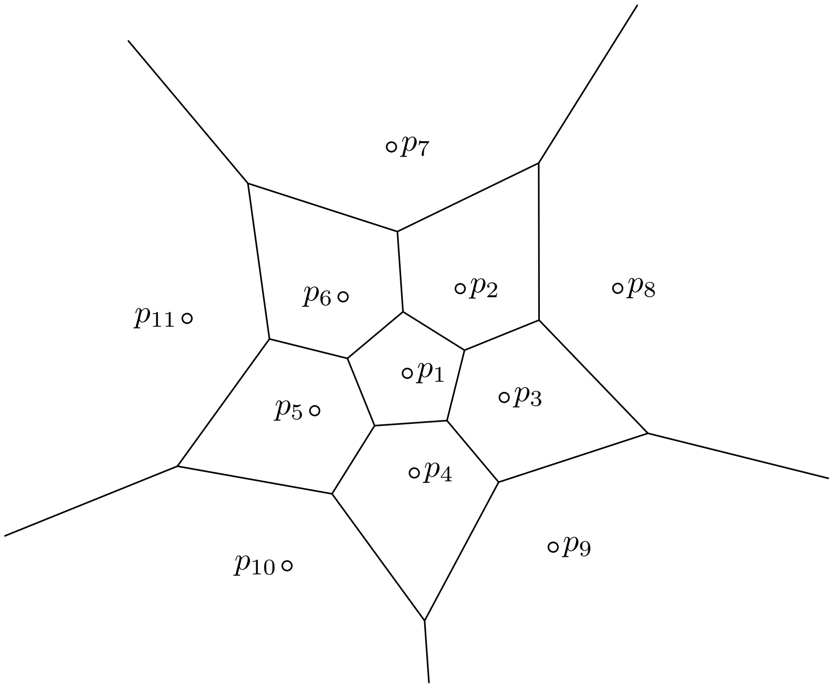
– les points de P ne sont pas tous contenus dans un même plan ;
– pour tous points non-alignés p, q, r appartenant à P, le point s tel que $pqrs$ soit un parallélogramme appartient à P.

Par exemple, les points dont les trois coordonnées sont entières forment un réseau. L'ensemble des points dont les trois coordonnées sont entières et de somme paire est aussi un réseau. Ce dernier est représenté ci-dessous de deux façons différentes et s'appelle *réseau cubique à faces centrées.*

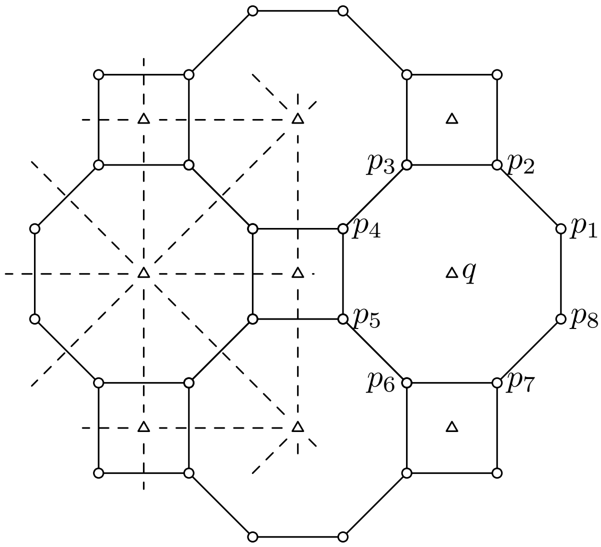




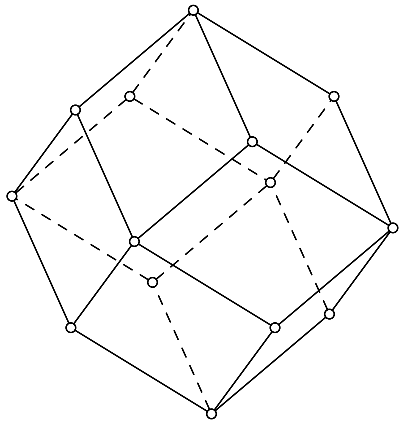
Revenons au cas d'un ensemble P discret quelconque, a priori sans régularité. La *cellule de Voronoï* d'un point p de P est le lieu des points de l'espace qui sont plus proches de p que d'aucun autre point de P. (Les physiciens parlent de zones de Brillouin ou encore de cellules de Wigner-Seitz.) C'est une partie de l'espace limitée par des faces planes. Les cellules de Voronoï pavent l'espace. La figure suivante représente les cellules de Voronoï pour l'ensemble $P = \{p_1, \ldots, p_{11}\}$ de points dans le plan (la définition marche aussi bien dans le plan que dans l'espace).



Un autre pavage de l'espace est réalisé par les *cellules de Delaunay.* A un sommet q d'une cellule de Voronoï, on associe sa cellule de Delaunay qui est le polyèdre convexe dont les sommets sont les points de P les plus proches de q. La figure ci-dessous représente (dans le plan pour plus de clarté) les cellules de Delaunay pour l'ensemble P formé des petits ronds ; les cellules de Delaunay sont en traits pleins, les pointillés représentent quelques unes des cellules de Voronoï, et les petits triangles sont les sommets des cellules de Voronoï.



Si P est un réseau, les cellules de Voronoï se déduisent les unes des autres par translation. Pour le réseau cubique à faces centrées, les cellules de Voronoï ressemblent à ceci.



Ce polyèdre a deux types de sommets : ceux d'où partent trois arêtes et ceux d'où en partent quatre. Le réseau cubique à faces centrées a deux sortes de cellules de Delaunay : des tétraèdres et des octaèdres réguliers.

Vers la preuve de la conjecture de Kepler

La densité de l'empilement cubique à faces centrées est facile à calculer. En effet, le cube de volume 8 dont les sommets sont les points dont les trois coordonnées valent 0 ou 2 est une brique élémentaire dont les translatées pavent l'espace. Ce cube contient une demi-boule au centre de chacune de ses six faces et un huitième de boule en chacun de ses huit sommets, soit quatre boules au total. Les boules centrées aux points de coordonnées $(0, 0, 0)$ et $(1, 0, 1)$ se touchent, donc les boules ont pour rayon $\sqrt{2}/2$ et pour volume $(\pi\sqrt{2})/3$. La densité de l'empilement est donc $(1/8) \times 4 \times (\pi\sqrt{2})/3 = \pi/(3\sqrt{2})$.

En 1831, le grand mathématicien allemand Carl Friedrich Gauss démontra que tous les empilements de sphères donnés par des réseaux satisfaisaient à la conjecture de Kepler, et que seul le réseau cubique à faces centrées réalisait la densité maximale $\pi/(3\sqrt{2})$. Mais on était encore loin du compte : non seulement les empilements donnés par les réseaux ne donnent pas toutes les configurations périodiques, mais encore il faut tenir compte des empilements qui n'ont aucune périodicité.

En 1958, Claude Ambrose Rogers démontra que la densité d'un empilement de sphères était au plus égale à la portion de volume que recouvrent dans un tétraèdre régulier de longueur d'arête 2 des boules de rayon 1 centrées en ses sommets. Malheureusement, la borne ainsi obtenue vaut $\sqrt{2}\left[3(\arccos(1/3)) - \pi\right] \approx 0,780$ et est donc moins bonne que celle donnée par la conjecture de Kepler, $\pi/(3\sqrt{2}) \approx 0,740$. Rogers exprima son désarroi de manière laconique : « Many mathematicians believe, and all physicists know, that the density cannot exceed $\pi/(3\sqrt{2})$. »

Une méthode plus efficace avait été proposée par László Fejes Tóth dès 1943. Supposons que P soit l'ensemble des centres d'un empilement de sphères de rayon 1. Alors chaque cellule de Voronoï contient une sphère de rayon 1. Si l'on réussit à minorer le volume d'une cellule de Voronoï, alors on pourra majorer la proportion de volume occupée dans la cellule par la boule qu'elle contient. On peut ainsi espérer pouvoir majorer la densité de l'empilement de sphères. Fejes Tóth a de fait conjecturé le résultat suivant.

Conjecture du dodécaèdre : Le volume d'une cellule de Voronoï d'un empilement de sphères de rayon 1 est toujours supérieur ou égal à $10\sqrt{130 - 58\sqrt{5}}$.

Si Fejes Tóth avait su démontrer sa conjecture, il aurait obtenu une meilleure borne que celle de Rogers, à savoir $4\pi/\big(30\sqrt{130-58\sqrt{5}}\big) \approx 0,755$. Mais le problème que Fejes Tóth s'était posé est très difficile, et sa résolution récente nécessite le recours à l'ordinateur, la masse de calculs à effectuer étant trop importante pour l'homme. Le principe de la preuve de la conjecture du dodécaèdre est toutefois intéressant :

- Il ne coûte rien de supposer que l'empilement est maximal, c'est-à-dire que l'on ne peut pas rajouter de boule à l'empilement.
- Dans ces conditions, la cellule de Voronoï d'un point p de P est incluse dans la boule de centre p et de rayon 2, donc la forme de la cellule est déterminée par les points de P dont la distance à p est inférieure ou égale à 4.
- Il n'est donc pas nécessaire de considérer tous les empilements de sphères, mais seulement les configurations de points à distance mutuelle plus grande que 2 dans la sphère de centre p et de rayon 4.

On a ainsi ramené un problème qui dépendait d'une infinité de paramètres (les coordonnées des points de P) à un problème à un nombre fini de paramètres (les coordonnées des points de P dont la distance à p est inférieure ou égale à 4). Le travail n'est bien sûr pas fini, car le problème qui reste appartient à la classe des « problèmes d'optimisation non-linéaire », et c'est là que s'était arrêté Fejes Tóth.

La preuve de Hales et Ferguson

La méthode de Hales et Ferguson repose sur un principe analogue à celle de Fejes Tóth. Elle est toutefois sensiblement plus compliquée : il ne suffit pas de considérer les cellules de Voronoï, mais il faut utiliser un pavage hybride entre celui de Voronoï et celui de Delaunay ; et la fonction qu'il s'agit d'étudier n'est plus le volume de la cellule mais une certaine valeur appelée « score ».

Thomas Hales, professeur de mathématiques à l'université du Michigan, a mis dix ans à trouver cette preuve. Cette dernière totalise environ 300 pages, dont certaines ont été écrites en collaboration avec son étudiant Samuel Ferguson. Ces deux auteurs se ramènent à traiter une centaine de problèmes d'optimisation non-linéaire, lesquels sont convertis en problèmes d'optimisation linéaire, traitables de façon exacte sur ordinateur (les erreurs d'arrondis sont prises en compte par les programmes). C'est ainsi que 3 gigaoctets de fichiers informatiques, représentant la solution de quelques 100 000 problèmes d'optimisation linéaire en 100 à 200 variables avec 1000 à 2000 contraintes constituent *in fine* la preuve de la conjecture de Kepler.

A quoi ça sert ?

Les questions reliées aux empilements de sphères ont des applications dans la vie quotidienne. Des problèmes semblables à celui de Newton interviennent dans l'étude des agrégats, qui sont des arrangements compacts d'une dizaine ou d'une centaine de corpuscules (atomes, molécules, ...). On constate expérimentalement que des agrégats stables existent pour certains « nombres magiques » de corpuscules, nombres pour lesquels existent des configurations géométriques qui maximisent l'énergie de liaison totale.

D'autres retombées concernent les codes correcteurs utilisés pour supprimer les erreurs commises par les lecteurs de disques compacts ou encore les erreurs causées par des perturbations dans les réseaux de transmission de données numériques. On veut ici transmettre ou stocker une suite de bits, c'est-à-dire une suite de 0 et de 1, mais de temps en temps, il y a des erreurs. L'idée est de rendre le message redondant. Par exemple, une langue humaine est redondante, car si quelques lettres manquent dans les phrases d'un article de presse, le lecteur peut rectifier de lui-même et reconstituer le texte original. Au contraire, une modification de quelques chiffres dans un nombre change ce dernier de façon non-corrigible. Il faut donc étudier quelles sont les manières les plus efficaces pour rendre un message redondant sans trop l'allonger. Dans le langage des lecteurs de CD, les « mots » qui ont un sens sont répertoriés dans un « dictionnaire », les mots lus par le système optique comportent des « fautes d'orthographe », et le système de correction doit déterminer le mot du dictionnaire le plus proche du mot lu.

La théorie mathématique développée pour comprendre les empilements de sphères est pertinente ici : les mots du dictionnaire correspondent aux centres des sphères, les mots qu'on peut écrire correspondent aux points de l'espace, et le système de correction attribue à chaque point de l'espace le centre de la cellule de Voronoï à laquelle ce point appartient. Pour optimiser l'efficacité du système, il faut rendre les cellules de Voronoï les plus rondes possibles. Il n'est pas correct de dire que les mathématiques font marcher les lecteurs de CD ou les réseaux de transmission de données numériques, mais il est vrai que pour optimiser leurs techniques, les concepteurs ont étudié les solutions que leur proposaient les mathématiciens.

Enfin, la théorie des empilements de sphères possède aussi des applications à l'intérieur des mathématiques, puisqu'elle est reliée à la fois à la théorie des nombres (plus précisément à l'étude des fonctions theta et des fonctions modulaires) et à la théorie des groupes (par exemple l'étude du réseau de Leech, qui est un réseau remarquable dans l'espace de dimension 24, est reliée aux phénomènes du clair de lune et au groupe monstrueux de Fischer-Griess).

Bibliographie

- J. H. Conway et N. J. A. Sloane, *Sphere packings, lattices, and groups*, 3rd edition, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, 3. Band, volume 290, Springer-Verlag (1999).
- J. Oesterlé, *Densité maximale des empilements de sphères en dimension 3 [d'après Thomas C. Hales et Samuel P. Ferguson]*, Séminaire Bourbaki no. 863, Astérisque **266** (2000), pp. 405–413, Société Mathématique de France.
- P. A. Griffiths, *Mathematics at the turn of the millennium*, American Mathematical Monthly **107** (2000), pp. 1–14, Mathematical Association of America.

Notes rédigées en octobre 2000 à l'occasion de la Fête de la Science et d'après les ouvrages cités en bibliographie par Pierre Baumann, Institut de Recherche Mathématique Avancée, Université Louis Pasteur et CNRS, 7 rue René Descartes, F-67084 Strasbourg Cedex ; Mél : baumann@math.u-strasbg.fr