

Il est également facile de prouver qu'aucune autre configuration de n sphères, pour $n \leq 4$, ne pourrait avoir un C_n supérieur. En effet, dans ces grappes, chaque sphère touche chacune des autres sphères, et donc le nombre de contacts ne pourrait pas être supérieur. Dans la terminologie de la théorie des graphes, une telle grappe est une clique; le nombre de contacts dans une grappe-clique est $n(n-1)/2 = 0, 1, 3, 6, 10, 15, 21, \dots$

Mais à partir de $n = 5$, il est impossible de disposer cinq sphères identiques de façon qu'elles se touchent toutes. Si une clique à cinq sphères existait, elle aurait dix points de contact. Mais on ne peut faire mieux que $C_5 = 9$, qui est le nombre de contacts formés quand on attache une cinquième sphère à une face quelconque de la grappe tétraédrique. La structure ainsi obtenue est une dipyramide triangulaire.

Jusqu'ici, pour chaque valeur de n , il y avait une unique grappe qui maximise C_n . De plus, dans chaque cas, la grappe la mieux connectée comportant $n + 1$ sphères peut être obtenue par incrément en collant une nouvelle sphère quelque part à la surface de la grappe réalisant $\max(C_n)$.

Ces propriétés cessent d'être vraies à partir de $n = 6$. Avec six sphères, deux formes de grappes donnent le même nombre maximal de contacts, $C_6 = 12$ (voir la figure 4). L'une est construite par incrément, à partir de la dipyramide triangulaire à cinq sphères. Mais l'autre, l'octaèdre, ne peut pas être créée en collant simplement une sphère à la surface d'une grappe optimale plus petite.

Au-delà de $n = 6$, trouver toutes les grappes ayant le maximum de contacts devient plus difficile. Pour $n = 7$, l'approche incrémentale consistant à rajouter une sphère à la surface d'une grappe de $n = 6$ donne quatre solutions à 15 points de contact ($C_7 = 15$). Trois de ces grappes sont constituées de quatre tétraèdres collés face contre face de diverses façons (voir la figure 5).

En passant un peu de temps avec les *Geomag* ou un autre jeu de modèles tridimensionnels, on a de bonnes chances de trouver ces quatre configurations. Mais comment savoir s'il n'y a pas d'autres grappes de sept sphères à 15 contacts ? Et comment prouver que l'on ne peut avoir 16 contacts, voire plus ?

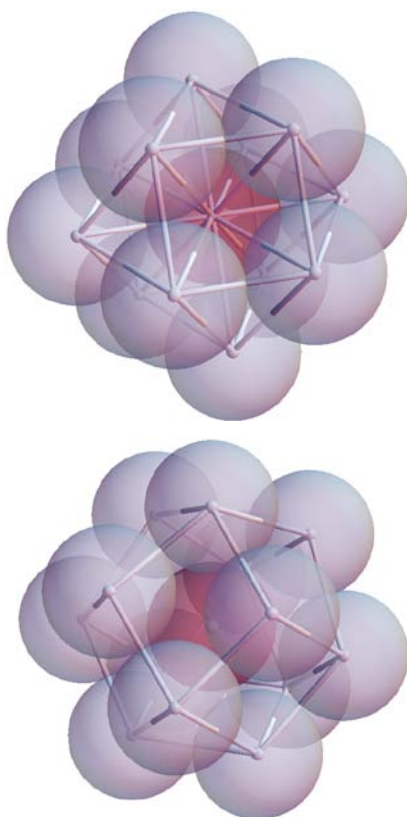
Il s'avère que 15 est effectivement le nombre maximal de contacts pour sept sphères, mais il y a aussi une cinquième grappe qui le réalise; il s'agit d'une dipyramide pentagonale (voir la figure 5e). Dotée

■ L'AUTEUR



Brian HAYES collabore à la revue *American Scientist* où il tient depuis 1993 la chronique *Computing Science*. Son blog (<http://bit-player.org/>) est également consacré à des questions mathématiques.

Article publié avec l'aimable autorisation de *American Scientist*.



2. LE PROBLÈME DU NOMBRE DE BAISERS consiste à se demander combien de sphères peuvent toucher une sphère centrale de même taille. Il n'a reçu une réponse que dans les années 1950. En haut, 12 sphères sont en contact avec la sphère centrale rouge, dans une configuration dérivée du réseau hexagonal compact de Johannes Kepler. Lorsqu'on ajoute une 13^e sphère (en bas), tout le halo de sphères perd contact avec la sphère centrale, bien que le diamètre de la grappe n'augmente que d'environ cinq pour cent. Dans ces diagrammes, si deux sphères se touchent, leurs centres sont reliés par un bâtonnet.

d'une symétrie d'ordre cinq, cette structure n'a aucun motif en commun avec l'une quelconque des grappes plus petites. La nouveauté de cet objet soulève une fois de plus la question : comment être sûr qu'il n'existe pas d'autres configurations à découvrir ?

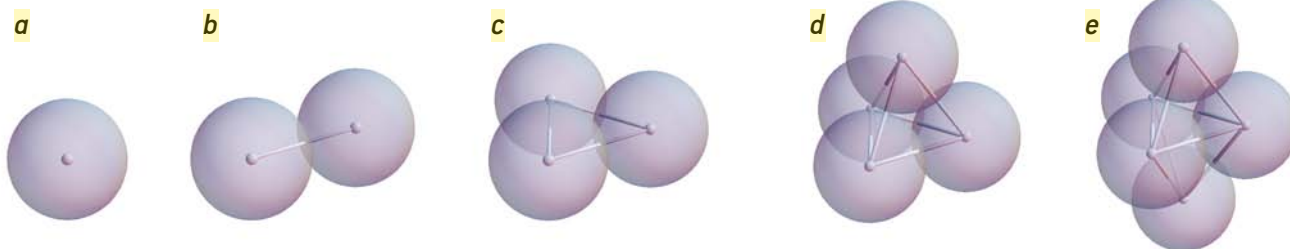
Pour répondre à ces questions, un programme fructueux a été lancé il y a cinq ans par Natalie Arkus, alors doctorante à l'Université Harvard. Dans une série d'articles écrits avec ses collègues Michael Brenner et Vinodhan Manoharan, elle a énuméré toutes les configurations réalisant $\max(C_n)$ pour $n = 7, 8, 9, 10$. Les résultats ont ensuite été étendus à $n = 11$ par Robert Hoy, Jared Harwayne-Gidansky et Corey O'Hern, de l'Université Yale. Tous les résultats que je décris ici sont issus des travaux de ces deux groupes.

Force de courte portée

Une façon de résoudre les problèmes d'empilements compacts de sphères est de considérer ces dernières comme des particules en interaction *via* une certaine force. Par analyse mathématique ou par des simulations numériques, on peut alors essayer de trouver une configuration géométrique qui minimise l'énergie potentielle du système. En général, la force s'exerçant entre deux particules est une fonction régulière de la distance qui les sépare. Quand les deux particules sont très éloignées, la force est négligeable ; à plus courte portée, la force devient fortement attractive ; à des distances encore plus courtes, une répulsion dite « de cœur dur » empêche les sphères de s'interpénétrer. À l'équilibre, les particules soumises à une force de ce type se disposent avec une séparation petite, mais non nulle.

Le problème du dénombrement des contacts peut être traduit en termes de forces et d'énergie, mais de façon assez particulière. Tout d'abord, la force n'est ici pas une fonction régulière de la distance. Tant que les sphères ne se touchent pas, aucune force ne s'exerce. Mais si les sphères viennent à se toucher, elles se collent ; brusquement, la force devient attractive. Et toute tentative de les rapprocher davantage se heurte à une résistance infinie.

Dans ce monde des sphères collantes, la portée des forces en jeu est plus que courte : elle est nulle (Martin Gardner avait suggéré un modèle pour de tels systèmes : des balles de ping-pong recouvertes de mastic).



3. NOMBRES MAXIMAUX DE CONTACTS. Une sphère isolée n'a pas de contact [a]. Deux sphères ne peuvent se toucher qu'en un point [b]. Trois sphères peuvent former un triangle équilatéral, avec trois contacts [c]. Quatre sphères disposées en tétraèdre ont six contacts [d].

Dans ces quatre cas, chaque sphère touche chaque autre sphère de la grappe, mais il n'existe plus de configuration de ce type à partir de cinq sphères. Pour ce cas, la meilleure configuration est celle d'une dipyramide triangulaire, avec neuf points de contact [e].

L'énergie totale de deux sphères diminue quand elles se touchent, et il faut apporter de l'énergie pour les séparer ; mais une fois séparées, elles n'ont plus d'influence l'une sur l'autre. L'énergie potentielle de l'ensemble du système est donc minimale quand le nombre de contacts est maximal.

La nature discontinue de la loi de force modifie le type d'outils mathématiques à utiliser. Avec une loi de force régulière, on peut résoudre les problèmes d'empilements compacts de sphères par des méthodes d'optimisation continue. Un tel algorithme essaie de réduire l'énergie totale en ajustant petit à petit les positions des particules, et en continuant jusqu'à ce qu'aucun progrès ne soit obtenu. Cette approche ne fonctionne pas avec les sphères collantes, parce qu'il n'y a pas de gradient régulier pour guider les particules vers les configurations de basse énergie. C'est pourquoi le problème des sphères collantes a pu paraître plus ardu que la plupart des autres questions d'empilements compacts de sphères.

D'un autre côté, la nature discrète (tout ou rien) de l'énergie potentielle des sphères collantes confère un avantage important. Puisque chaque paire de sphères soit se touche, soit ne se touche pas, le nombre de configurations essentiellement différentes est fini. En principe, on peut examiner toutes ces possibilités et simplement choisir celle présentant le plus de contacts, donc l'énergie potentielle la plus basse. C'est cet angle d'approche – l'idée que le problème peut être résolu par une énumération exhaustive – qui a conduit aux résultats récents des équipes de Harvard et Yale.

On peut représenter toutes les données essentielles relatives aux contacts au sein d'une grappe de sphères par un graphe, c'est-à-dire un ensemble de sommets et d'arêtes. Chaque sphère est représentée par un sommet, et deux sommets sont reliés par une arête si et seulement si les

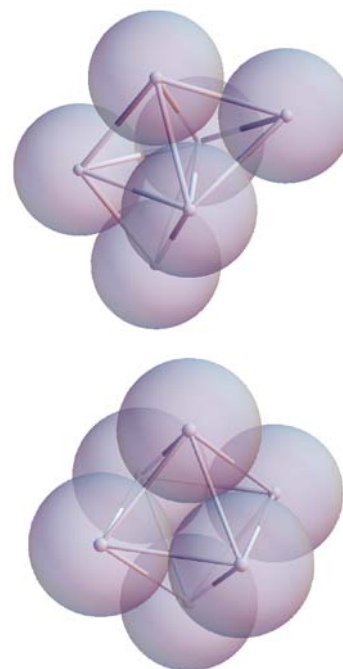
sphères correspondantes sont en contact. La même information peut être codée de façon encore plus abstraite dans une « matrice d'adjacence ». Une grappe de n sphères devient une matrice (un tableau) $n \times n$ de 0 et de 1 : l'élément de matrice à l'intersection de la ligne i et de la colonne j vaut 1 si la sphère i touche la sphère j , et 0 sinon.

De la géométrie à la théorie des graphes

Une grappe de sphères étant donnée, il est facile de construire le graphe ou la matrice d'adjacence correspondants. Mais, inversement, est-il possible de reconstituer la géométrie de la grappe à partir d'une matrice d'adjacence ? En d'autres termes, sans autre point de départ qu'un tableau indiquant quelles sphères se touchent, peut-on déterminer les coordonnées de toutes les sphères dans l'espace à trois dimensions ?

Pas toujours. Par exemple, la matrice constituée exclusivement de 0 ne révèle rien sur les positions des sphères, mis à part qu'elles ne se touchent pas. Et la matrice constituée uniquement de 1 décrit une grappe qui ne peut tout simplement pas exister dès lors que $n \geq 4$. Mais pour une classe importante de grappes, la matrice d'adjacence apporte assez d'information pour autoriser une reconstruction complète. Cette classe inclut les grappes qui maximisent le nombre de contacts. Ces éléments suggèrent une stratégie de résolution directe : recenser toutes les matrices candidates, puis vérifier lesquelles produisent des grappes géométriquement possibles.

Combien de matrices d'adjacence faut-il tester ? Puisque le contact est une relation symétrique (si i touche j , alors j touche i), toute l'information de la matrice est confinée à son triangle supérieur, qui comporte $n(n-1)/2$ éléments (voir la figure 6). Chaque élément a deux valeurs possibles, si bien



4. POUR LES GRAPPES DE SIX SPHÈRES, deux géométries distinctes maximisent le nombre de contacts. La grappe du haut est construite par incrément à partir de la grappe optimale à cinq sphères en attachant une sixième sphère à une face de la dipyramide triangulaire. L'autre configuration est l'octaèdre (en bas). Les deux structures ont chacune 12 points de contact.