

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

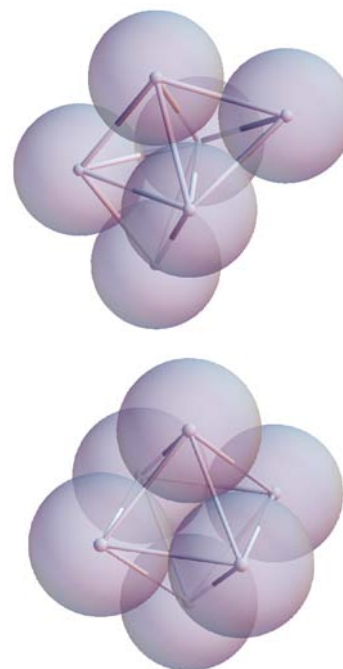
sphères correspondantes sont en contact. La même information peut être codée de façon encore plus abstraite dans une « matrice d'adjacence ». Une grappe de n sphères devient une matrice (un tableau) $n \times n$ de 0 et de 1 : l'élément de matrice à l'intersection de la ligne i et de la colonne j vaut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

que le nombre total de matrices d'adjacence différentes est $2^{n(n-1)/2}$.

Passer au crible $2^{n(n-1)/2}$ matrices serait une tâche redoutable ; la valeur de cette expression dépasse déjà deux millions pour $n = 7$, et 10^{16} pour $n = 11$. Mais toutes ces matrices ne sont pas distinctes. Beaucoup ne représentent qu'un étiquetage différent d'un même graphe. Quand on élimine les redondances de ce type, le nombre de matrices 7×7 distinctes tombe de 2097152 à seulement 1044.

Un autre tri a permis à N. Arkus et ses collègues de réduire encore ce nombre de façon spectaculaire. Pour des raisons que j'expliquerai plus loin, ces chercheurs n'ont examiné que les matrices remplissant deux critères : chaque colonne et chaque ligne doivent comporter au moins trois 1, et le nombre total de 1 dans le triangle du haut est $3n - 6$. Pour $n = 7$, le fait d'imposer ces conditions réduit le nombre de matrices d'adjacence candidates de 1044 à seulement 29. Et parmi ces 29 matrices, seules cinq correspondent à de véritables empilements compacts de sphères.

Comment ces structures géométriques ont-elles été déterminées ? L'idée centrale est de transformer la matrice d'adjacence A en une matrice de distance D . Alors que

chaque élément A_{ij} de la matrice d'adjacence est une valeur binaire (0 ou 1) qui répond à la question « Oui ou non les sphères i et j se touchent-elles ? », l'élément D_{ij} est un nombre réel donnant la distance euclidienne entre i et j .

Il se trouve que nous connaissons déjà certaines de ces distances. Chaque 1 de la matrice d'adjacence désigne une paire de sphères unitaires, dont les centres sont écartés d'une distance exactement égale à 1 ; ainsi, $A_{ij} = 1$ implique $D_{ij} = 1$. Nous savons même quelque chose des autres distances : une grappe n'est possible que si tous les éléments de la matrice de dis-

Réduire le nombre de matrices d'adjacence à examiner.

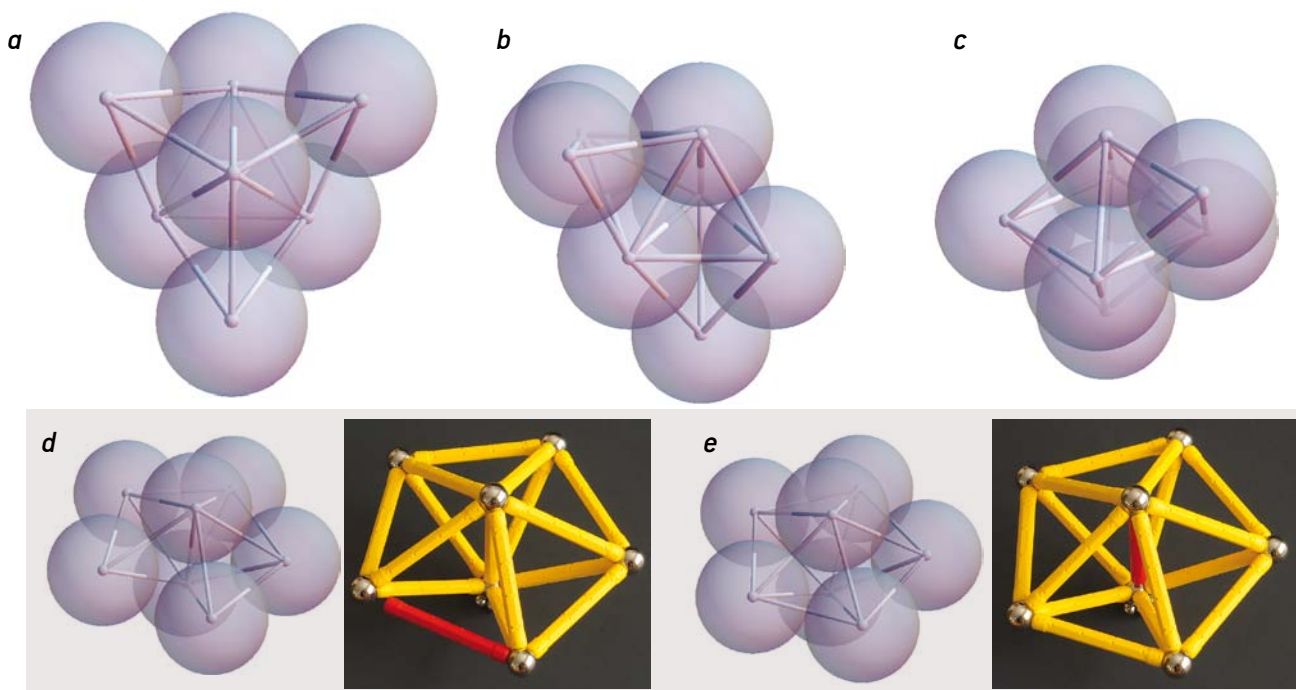
tance satisfont la contrainte $D_{ij} \geq 1$. Toute distance inférieure à 1 signifierait que deux sphères s'interpénètrent.

Pour déterminer complètement la géométrie d'une grappe, il faut déterminer les coordonnées x , y et z de chacune de ses n sphères. Une règle algébrique élémentaire suggère qu'il faudrait $3n$ équations pour déterminer ces $3n$ inconnues ; en fait, il suffit de $(3n - 6)$ équations. Pourquoi ? L'énergie de la grappe ne dépend que des positions relatives des n sphères, et non

de la position ou de l'orientation de la grappe dans son ensemble. Par conséquent, on peut arbitrairement supposer qu'une sphère est située à l'origine O du système de coordonnées, et qu'une autre, en contact avec elle, en est éloignée d'exactlyement une unité sur la partie positive de l'axe Ox . Six coordonnées sont ainsi fixées. Il s'ensuit que les $(3n - 6)$ équations fournies par les 1 de la matrice d'adjacence sont exactement ce dont on a besoin pour localiser le reste des sphères.

Le fait que l'on ait juste assez de contraintes pour résoudre le système d'équations est plus qu'une simple coïncidence ; c'est également une condition nécessaire pour la stabilité mécanique dans une grappe. Spécifiquement, $(3n - 6)$ contacts et au moins trois contacts par sphère confèrent à une grappe ce qu'on appelle une rigidité minimale. Si l'une quelconque des sphères n'avait qu'un ou deux contacts, elle pourrait balloter ou osciller librement. Une telle grappe ne peut pas être une configuration réalisant le maximum de C_n , car la sphère non contrainte peut toujours pivoter pour entrer en contact avec au moins une sphère de plus, augmentant ainsi C_n .

Chacune des $(3n - 6)$ équations est de la forme :



5. LES GRAPPES DE SEPT SPHÈRES les mieux connectées ont 15 contacts. Trois des structures ci-dessus (*a*, *b*, *d*) sont des assemblages de quatre tétraèdres réguliers collés par différentes faces. La grappe *b* est chirale (il en existe une forme droite et une autre gauche).

La grappe *c* est formée d'un octaèdre collé par une de ses faces à un tétraèdre. Les grappes *d* et *e* semblent identiques, mais ont en fait des structures très différentes, comme le montrent les modèles *Geomag* (la tige rouge indique une paire de sphères qui ne sont pas en contact).