

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.

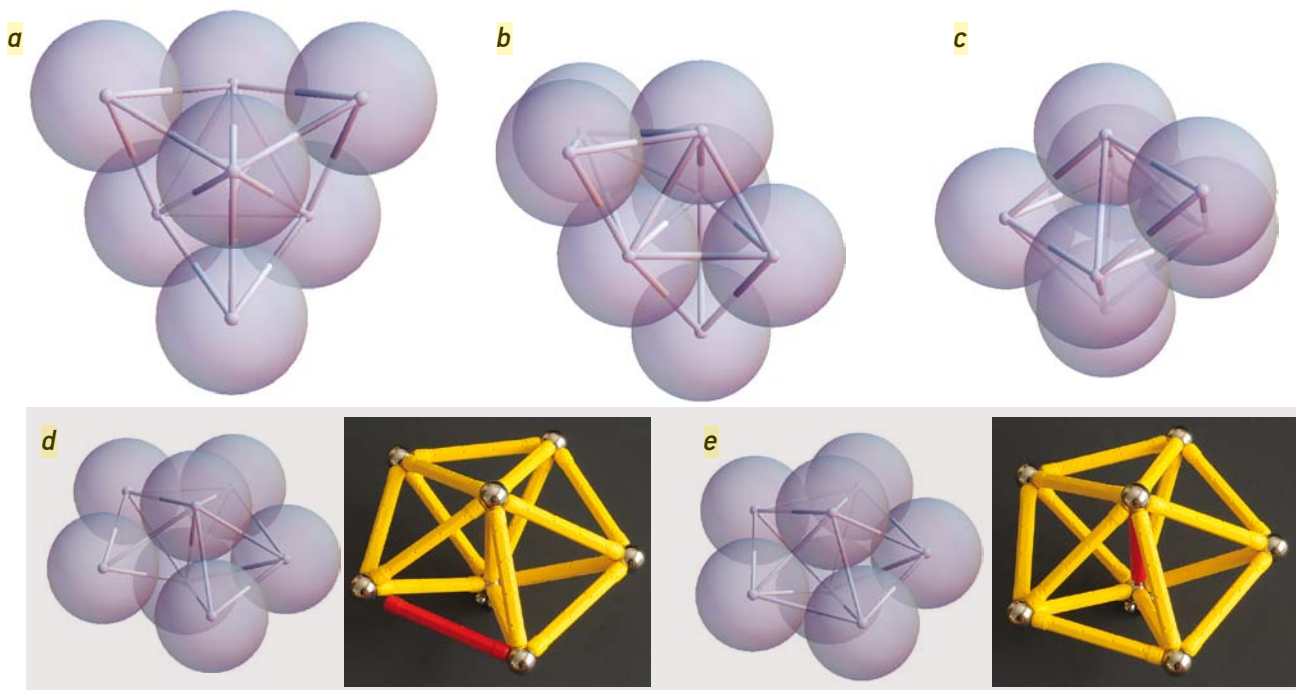
tance satisfont la contrainte $D_{ij} \geq 1$. Toute distance inférieure à 1 signifierait que deux sphères s'interpénètrent.

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'exactly 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).