

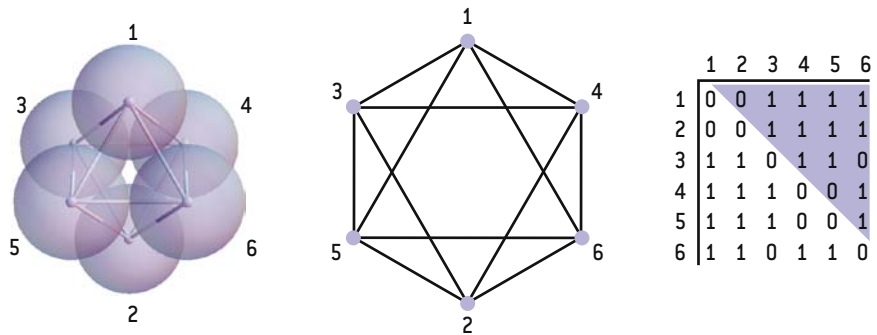
$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 = 1$ , ce qui signifie que la distance entre les centres des sphères  $i$  et  $j$  est égale à 1. Pour obtenir les coordonnées de toutes les sphères, ce système d'équations doit être résolu. Pour ce faire, N. Arkus a d'abord essayé une technique nommée base de Gröbner, qui s'est imposée ces dernières années comme un outil puissant de la géométrie algébrique. La méthode offre un moyen systématique de réduire le nombre de variables jusqu'à l'obtention d'une solution. Une implémentation de l'algorithme de base de Gröbner intégré à un système de calcul formel est parvenue à résoudre les équations pour  $n = 7$ , mais elle s'est révélée trop lente pour  $n = 8$ .

## Des règles géométriques

Une autre approche repose sur des méthodes numériques qui convergent vers une solution par approximations successives. L'exemple le plus connu est la méthode de Newton, qui calcule les racines d'une équation en affinant une estimation initiale. N. Arkus a trouvé que les techniques numériques étaient efficaces, mais elle craignait qu'elles ne garantissent pas de trouver toutes les solutions valables (quand l'algorithme converge, le résultat est une solution correcte, mais une non-convergence ne signifie pas nécessairement qu'il n'existe pas de solution ; cela dépend aussi de l'estimation initiale).

Mettant de côté les méthodes algébriques et numériques, N. Arkus a choisi de se fier au raisonnement géométrique comme guide pour assembler des grappes réalisables et comme moyen d'exclure celles qui sont physiquement impossibles. Une règle de base pour les sphères unité est que si  $i$  touche  $j$ , alors le centre de  $j$  doit se trouver quelque part sur une sphère de rayon 1 centrée sur  $i$ . Si  $k$  touche à la fois  $i$  et  $j$ , alors le centre de  $k$  doit se trouver quelque part sur l'intersection circulaire de deux sphères voisines. Si  $l$  touche à la fois  $i$ ,  $j$  et  $k$ , les sites possibles se résument à un ensemble de deux points (voir la figure 7). Avec une poignée de règles générales de ce type, il est toujours possible de déterminer les distances inconnues dans une matrice de distance, à supposer que la matrice d'adjacence décrive une structure réalisable.

On peut appliquer d'autres règles géométriques pour prouver que certaines



**6. L'ENSEMBLE DES LIENS DE CONTACT** entre sphères peut être résumé par un graphe, où les sommets représentent les sphères et les arêtes les contacts entre deux sphères. La même information est contenue dans la matrice d'adjacence (à droite). Si  $i$  et  $j$  sont deux sphères quelconques de la grappe, l'élément de la ligne  $i$  et de la colonne  $j$  de la matrice vaut 1 si  $i$  touche  $j$ , et 0 sinon. Seul le triangle supérieur (en mauve) a besoin d'être spécifié : le triangle inférieur est son image en miroir.

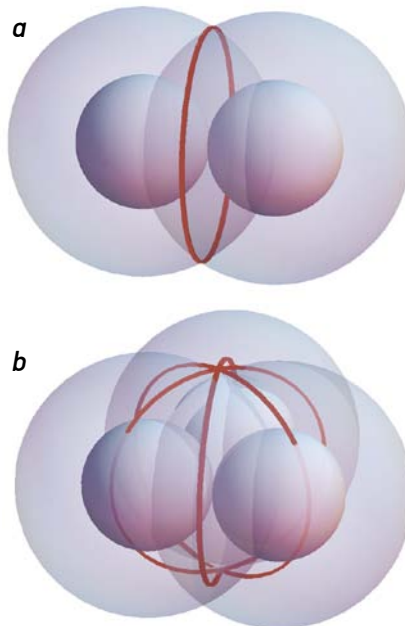
classes de matrices d'adjacence ne peuvent pas donner un empilement de sphères physiquement valide. Par exemple, si les sphères  $i$ ,  $j$  et  $k$  se touchent toutes les trois, elles doivent former un triangle équilatéral. Si le motif de 1 dans la matrice d'adjacence indique que plus de deux autres sphères touchent également  $i$ ,  $j$  et  $k$ , alors la grappe ne peut pas exister dans un espace tridimensionnel. On peut ainsi éliminer les matrices non physiques sans même explorer la géométrie des grappes.

N. Arkus a également utilisé le kit *Geomag* (voir la figure 5) pour vérifier la faisabilité de certaines configurations. *Geomag* comporte des billes d'acier poli et des tiges aimantées enveloppées d'une gaine de plastique coloré ; toutes les tiges ont la même longueur, et on peut facilement les assembler en un squelette de liens de longueur 1 joignant des centres de sphères. C'est une aide précieuse pour l'intuition géométrique.

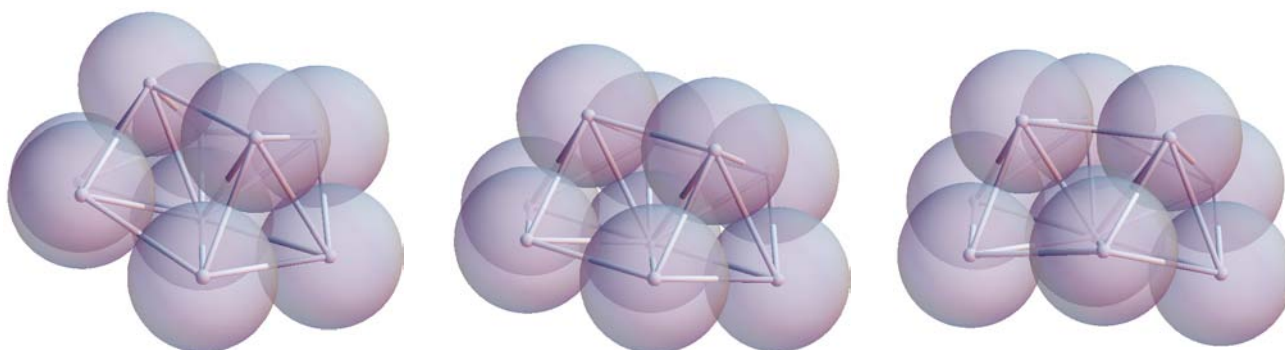
N. Arkus et ses collègues ont ainsi déterminé  $\max(C_n)$ , et identifié toutes les grappes réalisant ces nombres maximaux de contacts, pour tout  $n \leq 10$  (voir la figure 10). Ce faisant, ils ont découvert des grappes aux caractéristiques intéressantes.

Pour  $n = 8$ , le nombre maximal de contacts s'élève à 18, et il existe 13 façons différentes d'obtenir cette limite. Toutes ces grappes, sauf une, peuvent être obtenues par incrément en ajoutant une nouvelle sphère à la surface d'une des grappes de  $n = 7$ .

Les grappes de neuf sphères ( $n = 9$ ) ont jusqu'à 21 contacts ; pour ce maximum, il en existe 52 variétés. Dans cette foule d'empilements, une structure se singularise, avec une propriété jusqu'ici inédite, la flexibilité : elle peut être tordue autour d'un axe sans casser de liens entre sphères. Cette capacité



**7. SI DEUX SPHÈRES** sont en contact [a], une troisième sphère ne peut les toucher toutes deux que si son centre se trouve quelque part sur le cercle (en rouge) tracé par l'intersection des deux sphères de rayon double. De la même façon, avec trois sphères toutes en contact mutuel [b], les positions disponibles pour ajouter une quatrième sphère se réduisent à deux points, aux intersections de trois cercles de rayon double.



**8. L'UNE DES 52 CONFIGURATIONS** de neuf sphères qui maximisent le nombre de contacts a une propriété remarquable : elle est flexible.

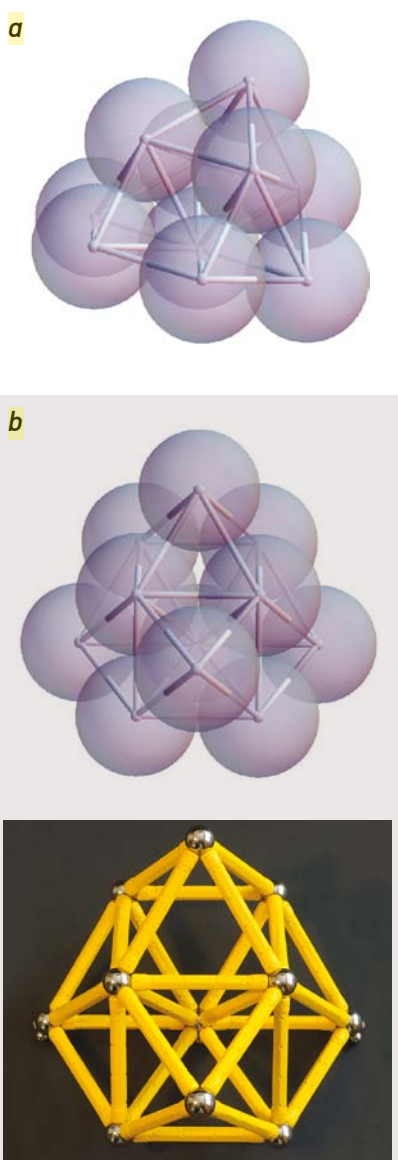
Deux morceaux de la structure peuvent se tordre dans des directions opposées sans qu'aucun contact entre sphères ne soit rompu.

à se tortiller peut surprendre, sachant que les matrices d'adjacence ont été conçues avec l'objectif explicite de garantir une « rigidité minimale ». Mais ce n'est pas sans raison que cette forme de rigidité est dite minimale. L'exigence que chaque sphère soit en contact avec au moins trois autres implique qu'aucune sphère individuelle ne peut bouger par rapport au reste de la grappe sans rompre au moins un contact. Mais d'autres modes de mouvement, où des groupes plus gros de sphères se plient ou tournent, ne sont pas exclus. Dans la grappe flexible  $n = 9$ , deux faces carrées accolées par une arête peuvent se tordre et se déformer légèrement (voir la figure 8).

## À l'assaut de $n = 10$ et 11

Quand  $n = 10$ , les grappes franchissent un autre seuil : pour la première fois, le nombre de contacts dépasse  $3n - 6$  (soit, ici, 24). On a 259 agrégats de 10 sphères qui ont exactement 24 contacts, mais trois autres en ont chacun 25. Là encore, c'est un peu surprenant. L'algorithme de recherche part d'une liste de matrices qui spécifient exactement  $(3n - 6)$  adjacences ; comment la recherche peut-elle mettre au jour une grappe ayant encore plus de contacts ? L'explication est que même si deux sphères n'ont pas l'obligation de se toucher, cela ne leur est pas interdit. Quand on résout un système d'équations spécifiant 24 adjacences, il peut se trouver, comme par coïncidence, que les sphères d'une 25<sup>e</sup> paire soient aussi séparées d'une distance exactement égale à un (voir la figure 9a).

Pour compiler le catalogue des grappes de dix sphères, N. Arkus et ses collègues ont dû examiner plus de 750 000 matrices de structures de rigidité minimale. Le défi consistant à repousser la frontière jusqu'à  $n = 11$  a été relevé par R. Hoy, J. Harwayne-



**9. UNE GRAPPE DE 10 SPHÈRES** ayant 25 contacts [a] est construite à partir de la grappe flexible à 9 sphères en ajoutant une sphère à une des faces carrées [ce qui supprime la flexibilité]. La championne des grappes à 11 sphères a 29 contacts [b].

Gidansky et C. O'Hern. Ils ont eu recours en grande partie aux mêmes méthodes, mais ils ont adopté une approche différente pour rationaliser les algorithmes.

Par exemple, ces trois chercheurs de Yale ont supposé que tout empilement compact de sphères contient un chemin continu, non ramifié, qui traverse la structure de part en part, comme une longue chaîne de polymère. Cela implique que l'on peut toujours réarranger les lignes et les colonnes de la matrice d'adjacence de façon que la surdiagonale (juste au-dessus et à droite de la diagonale principale) soit entièrement constituée de 1. En se concentrant sur ces seules matrices, la charge de travail est réduite d'un facteur 1 000 pour  $n = 11$ .

Le groupe de Yale a également mis au point des règles simplifiées pour exclure les empilements non valides, et ont reformulé davantage de règles géométriques de façon à pouvoir tester les matrices sans devoir passer par les étapes laborieuses de calcul des distances entre paires de sphères. Pour  $n = 11$ , le groupe de Yale a ainsi identifié 1 641 grappes distinctes où  $C_{11} \geq 27$  (la valeur  $3n - 6$ ). La plupart de ces structures ont exactement 27 contacts ; mais 20 grappes ont 28 contacts, et il existe une grappe qui en a 29 (voir la figure 9b).

Signalons que l'on peut facilement ajouter une 12<sup>e</sup> sphère à cette dernière grappe pour produire une structure à 33 contacts, soit  $3n - 3$ . Mais 33 est-il la valeur maximale de  $C_{12}$  ? On le saura quand Miranda Holmes-Cerfon, de l'Université de New York, aura publié ses récents travaux sur les grappes contenant jusqu'à 12 sphères.

Même pour  $n = 11$ , il est possible d'ergoter sur des questions de complétude et de certitude. Certains des résultats de l'équipe de Yale reposent sur un algorithme numérique pour résoudre le sys-

tème d'équations des distances. Comme on l'a déjà indiqué, la non-convergence de l'algorithme ne prouve pas qu'il n'existe pas de solution. En pratique, les risques de passer à côté d'un empilement valide sont très faibles ; selon la conception que l'on se fait de la rigueur, on estimera la question préoccupante ou non.

## Des questions liées à des travaux de physique

Si l'équipe de Harvard comme celle de Yale se sont livrées à cet exercice, c'est par intérêt pour les agrégats de sphères matérielles plutôt que pour les sphères mathématiques. Le groupe de Yale se penche sur les mystères de la cristallisation. Dans leur masse, les matériaux tendent à privilégier les configurations qui maximisent la densité, comme l'empilement de Kepler. Mais la croissance des cristaux a pour point de départ des agrégats de quelques atomes seulement, pour lesquels les configurations qui minimisent l'énergie ne sont pas les mêmes.

N. Arkus s'intéresse à l'auto-assemblage dans les nanostructures, qu'elles soient naturelles (comme les capsides des virus) ou artificielles. Guangnam Meng de Harvard, en collaboration avec N. Arkus, M. Brenner et V. Manoharan, a développé un système expérimental qui offre un autre moyen d'explorer les petits amas de sphères collantes. Les sphères sont des billes de polystyrène d'un micromètre de diamètre, en suspension dans de l'eau et en présence d'une population plus importante de nanoparticules de plastique. Quand deux sphères se rapprochent, la présence des nanoparticules crée une attraction effective de courte portée entre les sphères, ce qui fait du système un bon modèle de sphères collantes.

Dans les expériences de G. Meng, on étalait les microsphères sur des plaques de verre comportant des milliers de micropuits cylindriques, où se formaient des grappes d'environ dix sphères par puits. Les puits étaient examinés au microscope pour évaluer les abondances relatives des différentes configurations. Si l'énergie potentielle était le seul critère, les grappes ayant davantage de contacts seraient plus nombreuses, mais l'entropie entre également en ligne de compte : les structures qui peuvent se former de nombreuses façons différentes sont plus probables. Pour l'essentiel, les résultats étaient à peu près en accord avec les attentes théoriques. L'entropie

| $n$ | $\frac{n(n-1)}{2}$ | $3n-6$ | $C_n$ | Multiplicité |
|-----|--------------------|--------|-------|--------------|
| 1   | 0                  |        | 0     | 1            |
| 2   | 1                  |        | 1     | 1            |
| 3   | 3                  | 3      | 3     | 1            |
| 4   | 6                  | 6      | 6     | 1            |
| 5   | 10                 | 9      | 9     | 1            |
| 6   | 15                 | 12     | 12    | 2            |
| 7   | 21                 | 15     | 15    | 5            |
| 8   | 28                 | 18     | 18    | 13           |
| 9   | 36                 | 21     | 21    | 52           |
| 10  | 45                 | 24     | 24    | 259          |
|     |                    |        | 25    | 3            |
|     |                    |        | 27    | 1 620        |
| 11  | 55                 | 27     | 28    | 20           |
|     |                    |        | 29    | 1            |

**10. CE TABLEAU RÉSUME** ce que l'on sait à ce jour des grappes de  $n$  sphères collantes qui maximisent le nombre  $C_n$  de contacts. Jusqu'à  $n = 4$ ,  $\max\{C_n\}$  est égal à  $n(n-1)/2$ , le nombre de contacts formés quand chaque sphère touche chacune des autres sphères. De  $n = 5$  à  $n = 9$ ,  $\max\{C_n\}$  est égal à  $3n-6$ , le minimum pour avoir la stabilité mécanique. La « multiplicité » désigne le nombre de grappes différentes ayant la même valeur de  $C_n$ .

### ■ SUR LE WEB

Pour des figures de cet article en version animée, voir : [www.americanscientist.org/issues/pub/2012/6/the-science-of-sticky-spheres/1](http://www.americanscientist.org/issues/pub/2012/6/the-science-of-sticky-spheres/1)

### ■ BIBLIOGRAPHIE

R. S. Hoy *et al.*, Structure of finite sphere packings via exact enumeration : Implications for colloidal crystal nucleation, *Physical Review E*, vol. 85, 051403, 2012.

N. Arkus *et al.*, Deriving finite sphere packings, *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, vol. 25(4), pp. 1860-1901, 2011.

R. S. Hoy et C. S. O'Hern, Minimal energy packings and collapse of sticky tangent hard-sphere polymers, *Physical Review Letters*, vol. 105, 068001, 2010.

N. Arkus *et al.*, Minimal energy clusters of hard sphere with short range attractions, *Physical Review Letters*, vol. 103, 118303, 2009.

N. J. A. Sloane *et al.*, Minimal-energy clusters of hard spheres, *Discrete and Computational Geometry*, vol. 14, pp. 237-259, 1995.

favorisait les grappes de symétrie inférieure, et augmentait aussi la proportion de structures non rigides. Mais parce que les contacts supplémentaires abaissent l'énergie potentielle, les structures ayant plus de  $3n-6$  contacts étaient également surreprésentées.

En dehors de ces applications physiques des sphères collantes, le dénombrement des contacts évoque un problème ouvert de mathématiques pures, posé en 1964 par le mathématicien d'origine hongroise Paul Erdős : étant donné  $n$  points dans un espace de dimension  $d$ , combien de paires de points peuvent être séparées par la même distance ? On peut toujours s'arranger pour que cette distance soit égale à 1, et c'est pourquoi on parle parfois du problème de la distance-unité.

En trois dimensions, le problème du maximum de contacts pour des sphères est équivalent au problème de la distance-unité d'Erdős, avec la contrainte supplémentaire qu'aucune distance ne soit inférieure à 1. Ainsi, les résultats récents sur les sphères collantes résolvent cette version restreinte du problème pour tout  $n \leq 11$ .

Qu'y a-t-il au-delà de  $n = 11$  ? D'après N. Arkus, le principal obstacle est le problème combinatoire consistant à engendrer toutes les matrices d'adjacence qui conviennent. Ces dernières sont si rares que le processus devient extrêmement inefficace. N. Arkus suggère une approche alternative, mais qui n'a pas encore abouti. Jusqu'à  $n = 10$ , elle a montré que toute grappe à  $3n-6$  contacts peut être convertie en n'importe quelle autre grappe à  $3n-6$  contacts par une chaîne de transformations simples, où une seule liaison est cassée et une autre formée. Elle fait l'hypothèse que cette propriété est vérifiée pour tout  $n$ . Si c'est le cas, le problème du maximum de contacts pourrait être résolu en produisant n'importe quelle structure à  $3n-6$  contacts, puis en parcourant systématiquement l'arbre de toutes les transformations constituées d'un simple échange de liaisons.

Quand  $n$  atteindra une valeur suffisamment grande, la diversité de ces curieuses structures géométriques commencera nécessairement à diminuer, puisqu'en grossissant, les grappes ressemblent de plus en plus à des morceaux d'empilements de Kepler. Mais nous n'en sommes pas encore là, et il pourrait y avoir encore bien des curiosités à découvrir. ■