Tas d'oranges, cristaux et empilements de sphères

Denis Auroux (CNRS - Ecole Polytechnique)

Comment empiler efficacement des oranges (ou tout autre fruit sphérique) de façon à obtenir un tas occupant aussi peu de volume que possible ? Est-il préférable d'empiler des couches où les fruits sont disposés en carrés, ou une disposition en triangles est-elle plus efficace ? Ce problème, en apparence anodin, mais dont le champ d'application s'étend de l'étude des cristaux à la théorie des codages informatiques, aura donné du mal aux mathématiciens pendant près de quatre siècles : dès 1610, Kepler formulait une conjecture sur la question, mais il aura fallu attendre 1998 pour que les travaux de Thomas Hales en apportent la preuve de façon rigoureuse.

La densité d'un empilement de sphères

Le problème d'empilement peut être formulé mathématiquement de la façon suivante :

Quelle est la densité maximale d'un empilement de sphères pleines, toutes identiques, dans l'espace euclidien de dimension 3 ?

On définit la *densité* d'un empilement en considérant un cube dont le côté tend vers l'infini : c'est la proportion du volume à l'intérieur du cube occupée par les sphères. Plus précisément, la densité est la limite (supérieure) de cette proportion lorsque la taille du cube tend vers l'infini.

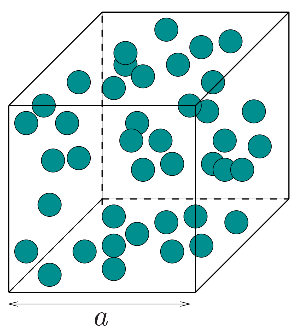


Figure 1 :
$$\delta = \frac{\text{volume des boules}}{\text{volume du cube}} \quad \text{lorsque } a \to +\infty$$

La figure 2 montre certains empilements réguliers remarquables (dans un but de lisibilité, seuls les centres des sphères sont représentés : en fait les sphères voisines sont en contact ; de même, seule une petite partie de l'espace est montrée, l'empilement étant obtenu en juxtaposant un nombre infini de tels motifs élémentaires). Ces assemblages sont notamment ceux selon lesquels se disposent spontanément les atomes ou les molécules dans la plupart des cristaux. Il est facile de calculer la densité de ces empilements.

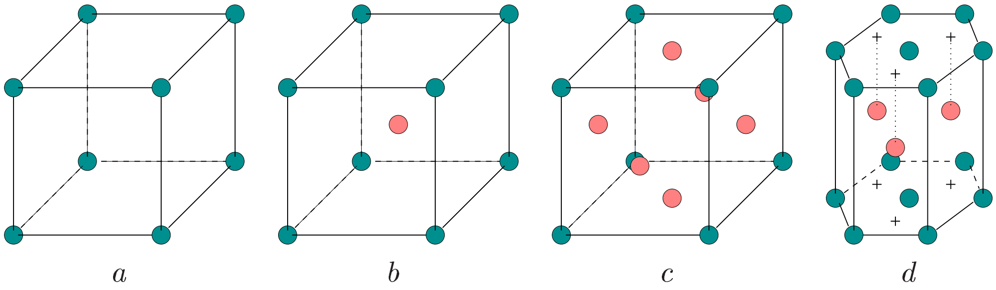


Figure 2 : empilements cubique simple (a), cubique centré (b), cubique à faces centrées (c), hexagonal compact (d).

Par exemple, l'assemblage *cubique simple*, dans lequel les sphères sont simplement empilées en couches successives dans lesquelles les sphères sont disposées en carré (voir la figure 2a), a une densité égale à $\frac{\pi}{6} \simeq 0,5236$: à peine plus de la moitié de l'espace est occupée par les sphères. En effet, chaque sphère est de rayon $\frac{a}{2}$ (demi-distance entre deux centres), donc de volume $\frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{8} = \frac{\pi a^3}{6}$. Comme chaque sphère est à cheval sur huit cubes, notre cube élémentaire contient exactement huit 1/8-ème de sphère, soit une volume de $\frac{\pi a^3}{6}$. La densité est bien de $\frac{\pi}{6}$.

Cette densité peut être grandement améliorée en espaçant légèrement les sphères de façon à pouvoir insérer une sphère supplémentaire au centre de chaque cube élémentaire : on obtient alors l'assemblage *cubique centré* (figure 2b), dont la densité est $\frac{\pi\sqrt{3}}{8} \simeq 0,6802$. Cette fois, le rayon r des sphères est en effet tel que la grande diagonale du cube soit égal à $4r$ (ou en l'exprimant autrement, la distance d'un sommet du cube à son centre est de $2r$). Or cette grande diagonale du cube est de $\sqrt{3}a$, les sphères sont donc de rayon $\frac{\sqrt{3}}{4}r$. D'autre part, les sphères centrées en les sommets du cube sont toujours à cheval sur huit cubes, mais celle du centre est toute entière contenue dans notre cube, qui contient donc l'équivalent de $1 + 8 \times 1/8 = 2$ sphères. D'où une densité de

$$\frac{2 \times \frac{4}{3}\pi\frac{\left(a\sqrt{3}\right)^3}{4^3}}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$$

Une méthode encore plus efficace pour améliorer l'empilement consiste à insérer des sphères supplémentaires non plus au centre des cubes, mais au centre de chacune des faces des cubes d'un empilement cubique simple (figure 2c). L'assemblage ainsi obtenu est dit *cubique à faces centrées*, et sa densité vaut $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 0,7405$: le cube unité contient en effet six demi-sphères (centrées au centre de chaque face) plus huit huitièmes de sphères (centrées aux sommets), soit le volume de 4 sphères. Là aussi, on calcule le rayon de ces sphères comme la demi-distance entre deux points les plus proches possibles, c'est-à-dire un sommet et le centre d'une face attenante. On trouve un rayon de $\frac{a\sqrt{2}}{4}$, d'où la densité annoncée.

Un autre empilement très dense est l'assemblage *hexagonal compact*, obtenu en empilant des couches de sphères disposées en hexagone, chaque couche étant décalée par rapport à ses voisines (voir figure 2d). La densité de cet empilement est $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 0,7405$, la même que pour l'empilement cubique à faces centrées. Cette coïncidence n'est pas fortuite : en observant l'assemblage cubique à faces centrées de la figure 1c dans la direction d'une diagonale du cube, on peut voir qu'il est lui aussi composé d'un empilement de couches hexagonales (mais disposées différemment) ; nous y reviendrons plus loin. (On pourrait là aussi calculer la densité en comptant le nombre de sphères contenues dans le prisme hexagonal, et le rayon de ces sphères...)

N.B. Dans le cas des réseaux (cf plus loin), ou de manière plus générale dans le cas ou l'on peut définir des « mailles élémentaires » qui ont toutes exactement la même densité, et dont le volume est borné, cette densité est la densité de l'empilement. En effet, un grand cube se compose alors de beaucoup de petites mailles qui ont toutes même densité, plus des « morceaux de maille » aux bords. Mais le volume de ces morceaux devient négligeable devant le volume total lorsque l'on fait tendre le côté du cube vers l'infini. Et donc la densité asymptotique est égale à la densité d'une maille.

La conjecture de Kepler

Les problèmes d'empilement ne se limitent pas au cas de l'espace tridimensionnel : par exemple, au lieu d'empiler des sphères dans l'espace, on peut vouloir empiler des disques dans le plan, ou encore "hypersphères" dans un espace de dimension 4 (ou supérieure) !

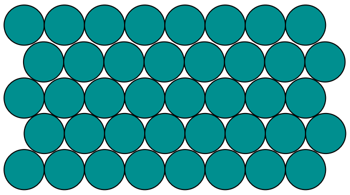


Figure 3 : empilement de disques dans le plan (densité $\frac{\pi}{2\sqrt{3}} \simeq 0,9069$).

Ainsi, pour un empilement de disques dans le plan, il est bien connu depuis la nuit des temps que la meilleure disposition est l'assemblage hexagonal (figure 3), dont la densité est $\frac{\pi}{2\sqrt{3}} \simeq 0,9069$. Ici, la maille élémentaire est un losange dont les sommets sont les centres de 4 disques voisins. Sa surface est de $(2r) \times (2r\frac{\sqrt{3}}{2}) = 2\sqrt{3}r^2$, et il contient l'équivalent d'un disque. La proportion de surface couverte est donc $\frac{\pi r^2}{2\sqrt{3}r^2} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}$. Toutefois, la preuve rigoureuse qu'il n'existe pas de meilleur empilement de disques n'a été obtenue qu'en 1910, par Thue.

Dans le cas d'un empilement de sphères dans l'espace, Kepler a formulé en 1610 la conjecture suivante :

Conjecture (Kepler, 1610) : *La densité maximale d'un empilement de sphères en dimension* 3 *est* $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 0,7405$*, c'est-à-dire la densité du réseau cubique à faces centrées.*

Après de nombreuses tentatives infructueuses, la conjecture de Kepler a enfin été démontrée par Thomas Hales en 1998.

On peut également s'intéresser au problème d'*empilement fini*, où il s'agit de remplir une boîte de forme donnée, plutôt que tout l'espace. Toutefois, la réponse à ce problème est inconnue sauf dans quelques cas très particuliers ; par exemple, on sait que la densité du remplissage d'un parallélépipède donné est nécessairement inférieure à celle d'un empilement infini, mais on ne sait pas construire le remplissage optimal.

La construction de réseaux denses

Le problème général d'empilement en dimension supérieure ou égale à 4 reste presque totalement ouvert, même si diverses conjectures ont été formulées. En revanche, de nombreux résultats ont été obtenus concernant un cas particulier, celui des *réseaux*. On dit qu'un empilement de sphères constitue un réseau si l'assemblage présente exactement le même aspect au voisinage de chacune des sphères, c'est-à-dire s'il est invariant par translations. Par exemple, l'empilement cubique à faces centrées (figure 2c) est un réseau, alors que l'empilement hexagonal compact (figure 2d), bien que très régulier, n'en est pas un.

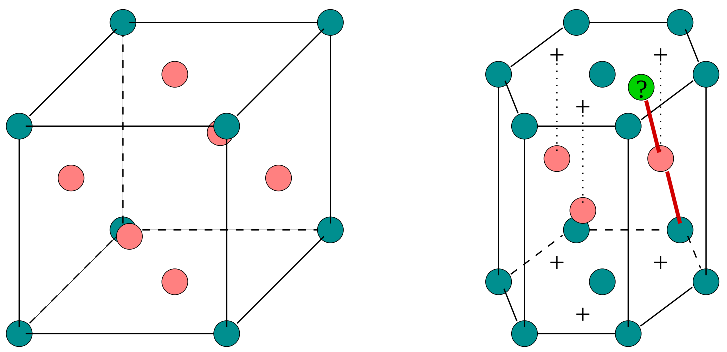


Figure 4 : L'empilement cubique face centrée est invariante par translation, c'est un réseau. Ce n'est pas le cas de l'empilement hexagonal compact.

En dimension 2 et 3, les densités optimales décrites ci-dessus sont réalisées par des réseaux. Pour de nombreuses valeurs de la dimension, les réseaux fournissent également les meilleurs empilements connus à l'heure actuelle (mais il n'est pas impossible que des empilements plus denses restent à découvrir) ; toutefois, cela n'est pas toujours vrai, par exemple en dimension 10, 11 ou 13 les meilleurs empilements connus ne sont pas des réseaux.

Les réseaux ont été abondamment étudiés, et leurs propriétés d'empilement sont relativement bien comprises en petite dimension : par exemple, la densité maximale réalisable par un réseau est connue jusqu'en dimension 8, et toutes les dimensions jusqu'à 48 ont fait l'objet de recherches poussées. Le cas des très grandes dimensions reste toutefois mystérieux : des arguments non constructifs prouvent l'existence de réseaux bien plus denses que tous ceux que l'on sait effectivement construire !

En petite dimension, un procédé extrêmement efficace pour construire des réseaux très denses consiste à empiler des couches successives constituées de réseaux dans un espace comportant une dimension de moins, chaque couche étant placée dans les "creux" de la précédente (les réseaux ainsi obtenus sont dits “laminés”). C’est ainsi que sont construits les réseaux les plus denses jusqu’en dimension 8 ; ce procédé fournit également les meilleurs empilements connus à ce jour dans de nombreuses dimensions jusqu’à 26 (au-delà, d’autres constructions plus compliquées deviennent plus efficaces).

Par exemple, dans le plan, le réseau de la figure 3 est obtenu en empilant des couches horizontales successives ; chaque couche est décalée d’une demie position par rapport à la précédente.

Dans l’espace, la situation est plus intéressante : en partant d’une couche plane (“A”) disposée comme sur la figure 3, on peut ajouter une seconde couche dont les sphères viennent se placer dans les creux de la première (“B”, cf. figure 5). Toutefois, lorsque l’on tente d’ajouter une troisième couche au-dessus des deux précédentes, deux possibilités se présentent : on peut choisir de disposer les sphères de cette troisième couche soit directement au-dessus de celles de la première couche (empilement “ABA” de la figure 5), soit dans une position décalée par rapport aux deux premières couches (empilement “ABC”).

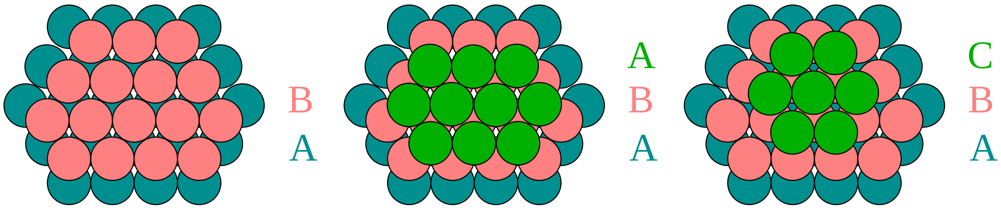
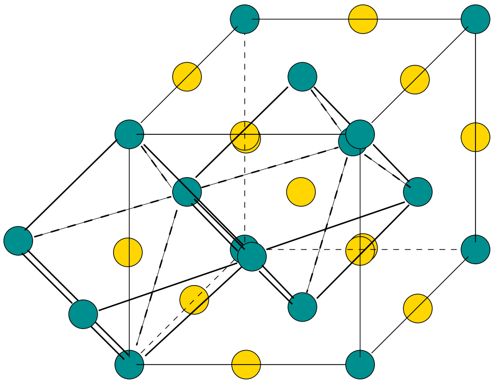


Figure 5 : empilement de couches hexagonales successives dans l’espace.

Il est facile de vérifier que l’assemblage hexagonal compact correspond à un empilement de couches dans l’ordre ABABABABA... Le réseau cubique à faces centrées, quant à lui, correspond à un empilement de type ABCABCABC... Enfin, il existe une infinité d’empilements irréguliers, par exemple ABABCACBA... Tous ces empilements ont bien entendu la même densité, mais seul l’assemblage cubique à faces centrées est un réseau.

Passons maintenant au cas de la dimension 4 : à partir d’un empilement cubique à faces centrées, on cherche à placer des sphères dans les creux du réseau pour former une nouvelle couche. Observons un motif élémentaire du



1$^{\text{ère}}$ couche :

(0,0,0,0)	(0,1,1,0)	(1,0,1,0)	(1,1,0,0)
(2,0,0,0)	(2,1,1,0)	(3,0,1,0)	(3,1,0,0)
(0,2,0,0)	(0,3,1,0)	(1,2,1,0)	(1,3,0,0)
(0,0,2,0)	(0,1,3,0)	(1,0,3,0)	(1,1,2,0)
...			

2$^{\text{ème}}$ couche :

(1,0,0,1)	(0,1,0,1)	(0,0,1,1)	(1,1,1,1)
(3,0,0,1)	(2,1,0,1)	(2,0,1,1)	(3,1,1,1)
(1,2,0,1)	(0,3,0,1)	(0,2,1,1)	(1,3,1,1)
(1,0,2,1)	(0,1,2,1)	(0,0,3,1)	(1,1,3,1)
...			

Figure 6 : sites octaédriques du réseau cubique à faces centrées, et réseau laminé en dimension 4.

réseau cubique à face centrées : les six sphères situées aux centres des faces forment un octaèdre régulier, au centre duquel se trouve un “site octaédrique” du réseau (voir figure 6). Ces sites jouent un rôle important en chimie, car ce sont les lieux où s'insèrent naturellement des atomes que l'on ajoute à un cristal cubique à faces centrées. D'autres sites octaédriques se trouvent au milieu de chaque arête du cube ; en fait, les sites octaédriques forment un nouveau réseau cubique à faces centrées, décalé par rapport au premier, où il va être possible de placer les sphères de la seconde couche afin de construire un empilement en dimension 4.

En choisissant des coordonnées de telle sorte que le motif élémentaire soit un cube de côté 2, les centres des sphères de l'empilement cubique à faces centrées sont les points de coordonnées $(0,0,0)$, $(0,1,1)$, $(1,0,1)$, $(1,1,0)$, ainsi que tous les points dont les coordonnées diffèrent de celles-ci par des multiples de 2. On obtient ainsi les positions des centres des sphères de la première couche dans l'empilement en dimension 4, en fixant la valeur 0 pour la quatrième coordonnée que l'on peut interpréter comme une distance par rapport à la première couche (voir figure 6). Les sites octaédriques, quant à eux, se trouvent aux points de coordonnées $(1,0,0)$, $(0,1,0)$, $(0,0,1)$, $(1,1,1)$ ainsi que ceux dont les coordonnées diffèrent de celles-ci par des multiples de 2. En fixant la valeur 1 pour la quatrième coordonnée, on obtient ainsi la seconde couche de l'empilement en dimension 4 (cf. figure 6). La troisième couche est alors obtenue en décalant les points de la première couche de $(0,0,0,2)$, et ainsi de suite. On vérifie que l'empilement ainsi obtenu est un réseau de densité $\frac{\pi^2}{16} \simeq 0,6168$: c'est le réseau le plus dense en dimension 4.

Application aux codages informatiques

Un *codage informatique* est le choix de certaines suites de 0 et de 1 de longueur n (parmi les 2^n possibles), de sorte que l'on puisse détecter, et parfois corriger, une erreur de transmission. Lorsqu'une erreur se produit, un code valide devient invalide, ce qui permet de détecter l'erreur ; et s'il n'existe qu'un seul code valide qui soit suffisamment similaire au code invalide reçu, il est possible de retrouver quelle était la valeur correcte sans devoir transmettre les données à nouveau. Les applications des codages informatiques en matière de télécommunications sont donc extrêmement importantes.

Trouver un “bon” codage informatique, c'est trouver de nombreux points de l'espace à n dimensions $\{0,1\}^n$, suffisamment éloignés les uns des autres. En effet, le nombre de points (le nombre de codes valides différents) conditionne directement la quantité de données “utiles” qu'il sera possible d'envoyer parmi les n bits qui seront transmis pour chaque élément ; en outre, la distance entre les codes valides est directement liée au nombre minimal d'erreurs de transmission qui risque de transformer un code valide en un autre code valide. Il y a donc un compromis à rechercher entre la robustesse du code (sa capacité à corriger de nombreuses erreurs) et sa capacité à transmettre les données de façon efficace (sans trop allonger les messages).

Lorsque l'on dispose de points dans l'espace à n dimensions dont les coordonnées sont toutes 0 ou 1, un procédé de *périodisation*, consistant à y ajouter tous les points dont les coordonnées diffèrent de celles-ci par des multiples de

2, permet d'obtenir une famille infinie de points de l'espace à n dimensions, relativement éloignés les uns des autres. En plaçant des sphères aussi grosses que possible en chacun de ces points, on obtient un empilement ; en règle générale, plus le codage considéré présente des performances intéressantes et plus l'empilement de sphères correspondant est dense.

Par exemple, le réseau cubique à faces centrées en dimension 3 est associé au codage composé des 4 mots binaires $000, 011, 101, 110$. Ce code permet d'envoyer, dans un message composé de 3 bits, deux bits de données (par exemple les deux premiers), et un bit "de parité" permettant de détecter une erreur de transmission (si l'on modifie un seul chiffre dans un code valide, on obtient toujours un code invalide).

De même, le réseau optimal en dimension 4 décrit ci-dessus correspond au codage composé des 8 mots binaires $0000, 0011, 0101, 0110, 1001, 1010, 1100, 1111$. Dans un message de 4 bits, ce code permet d'envoyer 3 bits de données, le dernier bit permettant de détecter une erreur de transmission.

Toutefois, ces deux codages ne permettent que de détecter les erreurs de transmission et pas de les corriger, car certains codes valides ne diffèrent que par deux chiffres (par exemple, 0011 et 0101 dans le second codage) : si une erreur de transmission provoque la réception du code invalide 0001, il sera impossible de retrouver quel code a été envoyé. Un exemple de codage permettant de *corriger* des erreurs est le *code de Hamming parfait* (7,4,3), composé des 16 mots de 7 bits suivants :

0000000, 0001110, 0010101, 0011011, 0100011, 0101101, 0110110, 0111000
1000111, 1001001, 1010010, 1011100, 1100100, 1101010, 1110001, 1111111

Dans ce code, les 7 bits transmis permettent de coder 4 bits de données de telle sorte que deux codes valides quelconques présentent au moins trois différences ; ceci permet de corriger une erreur lorsqu'un seul chiffre a été modifié (par exemple, le code invalide 1011110 peut être corrigé en 1011100 sans risque d'ambiguïté).

Mentionnons enfin, pour achever ce rapide survol des problèmes d'empilement, le réseau de Leech dans l'espace de dimension 24 : ce réseau remarquable, extrêmement dense, permet de construire les meilleurs empilements connus dans les dimensions voisines (par section ou par entassement de couches successives) ; il intervient aussi en théorie des groupes finis. L'une des méthodes pour le construire fait intervenir un code (24,12,8) particulier (c'est-à-dire un codage permettant de transmettre 12 bits de données dans un message de longueur 24 bits, tel que deux codes valides quelconques diffèrent en au moins 8 emplacements).

Bibliographie

– J. H. Conway, N. J. A. Sloane, *Sphere Packings, Lattices and Groups*, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften **290**, Springer-Verlag, 1988.

– J. Oesterlé, *Empilements de sphères*, Séminaire Bourbaki n° 727, juin 1990.

– J. Oesterlé, *Densité maximale des empilements de sphères en dimension 3, d'après Thomas C. Hales et Samuel P. Ferguson*, Séminaire Bourbaki n° 863, juin 1999.

– N. J. A. Sloane, *The Sphere Packing Problem*, Documenta Math., Extra Volume ICM 1998, III, 387–396.