

Tas d'oranges, cristaux et empilements de sphères

Denis Auroux (CNRS - Ecole Polytechnique)

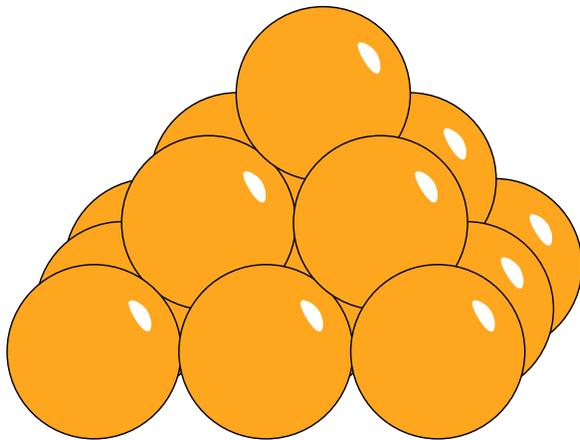
18 septembre 2000

Comment empiler efficacement des oranges ?

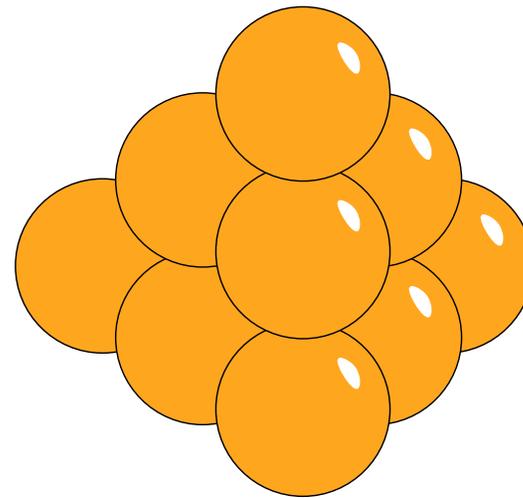
(ou tout autre fruit sphérique !)

Objectif: obtenir un tas occupant aussi peu de volume que possible.

Rectangulaire...

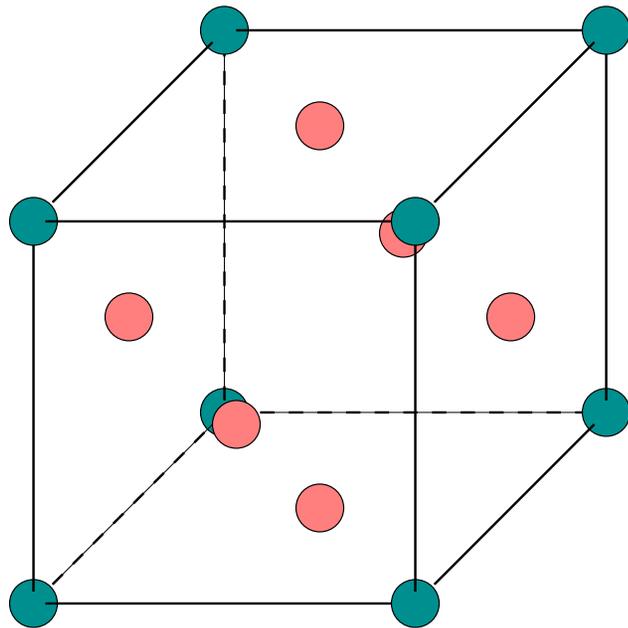


ou triangulaire ?

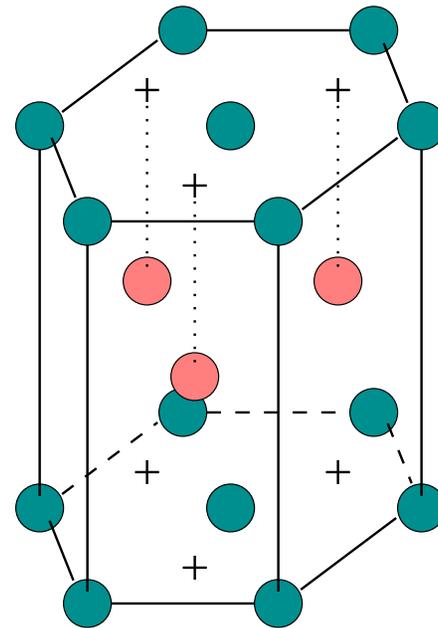


Comment s'empilent les atomes dans un cristal ?

Empilements les plus compacts connus :



“cubique à faces centrées”

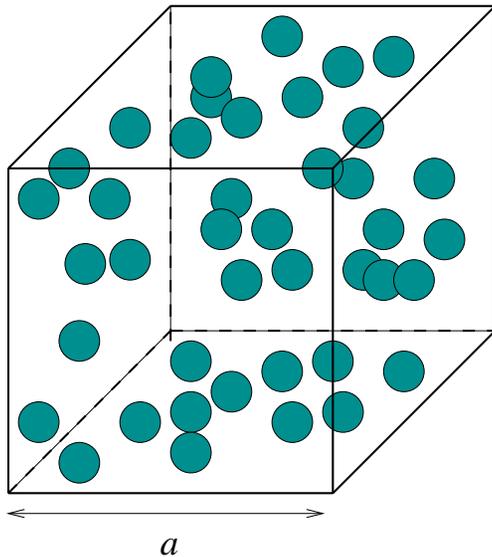


“hexagonal compact”

Formulation mathématique du problème

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

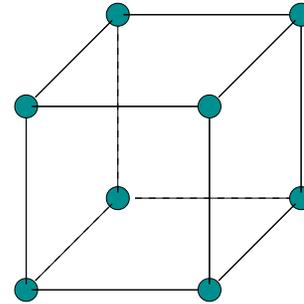
On définit la densité d'un empilement en considérant un cube dont le côté tend vers l'infini : c'est la proportion du volume à l'intérieur du cube occupée par les sphères.



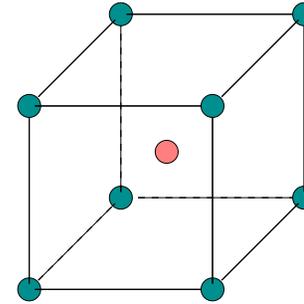
$$\delta = \frac{\text{volume des boules}}{\text{volume du cube}} \text{ lorsque } a \rightarrow +\infty.$$

Exemples :

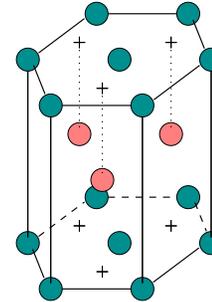
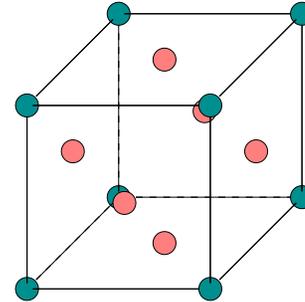
cubique simple : $\delta = \frac{\pi}{6} \simeq 0,5236$



cubique centré : $\delta = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \simeq 0,6802$



cubique faces centrées } $\delta = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 0,7405$
 hexagonal compact }

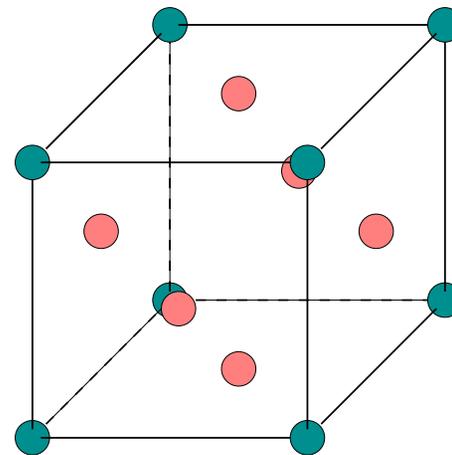


Diverses variantes du problème d'empilement

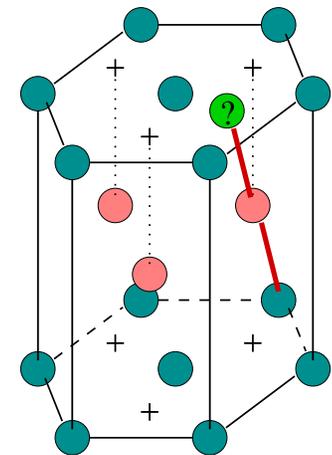
▷ en dimension quelconque : empiler des disques dans le plan, des sphères dans l'espace, des "hypersphères" en dimension 4, ...

▷ empilement fini : remplir une boîte de forme donnée, plutôt que tout l'espace. La réponse à ce problème est inconnue sauf dans quelques cas très particuliers (mais le remplissage d'un parallélépipède est toujours moins dense que pour l'espace entier).

▷ cas particulier des **réseaux** :
lorsque l'empilement présente le même aspect au voisinage de chaque sphère
(invariance par translation)



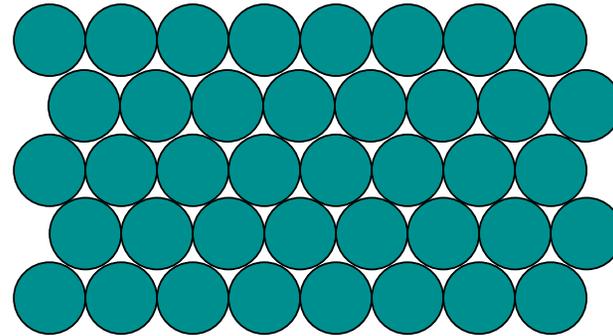
réseau



pas un réseau

Conjecture de Kepler

La densité maximale est connue pour un empilement de disques dans le plan : c'est $\frac{\pi}{2\sqrt{3}} \simeq 0,9069$ (démontré par Thue, 1910)



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

La conjecture de Kepler a été démontrée par Thomas Hales en 1998.

En dimension 4, 5, 6, 7, 8, on ne connaît la réponse que dans le cas des réseaux. Au-delà rien n'est certain ! Les meilleurs empilements connus sont souvent des réseaux, mais dans certaines dimensions (par exemple 10, 11, 13) ce n'est pas le cas.

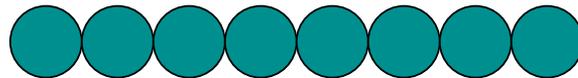
Le cas des très grandes dimensions reste mystérieux (des arguments non constructifs prouvent l'existence de réseaux bien meilleurs que ceux que l'on sait construire !)

Construire des réseaux très denses

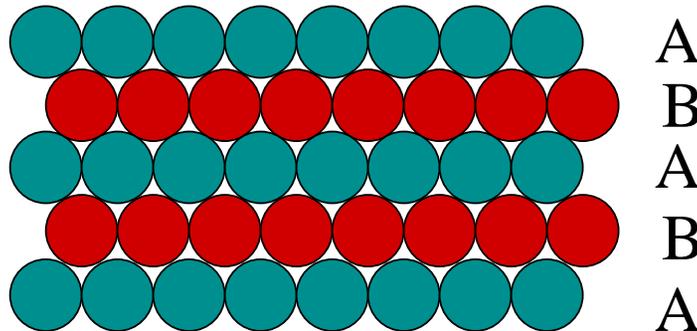
Idee : pour construire un réseau dense en dimension n , empiler des couches constituées de réseaux en dimension $n-1$; placer chaque couche dans les “creux” de la précédente.

Jusqu'en dimension 8, c'est ainsi que sont construits les réseaux les plus denses.

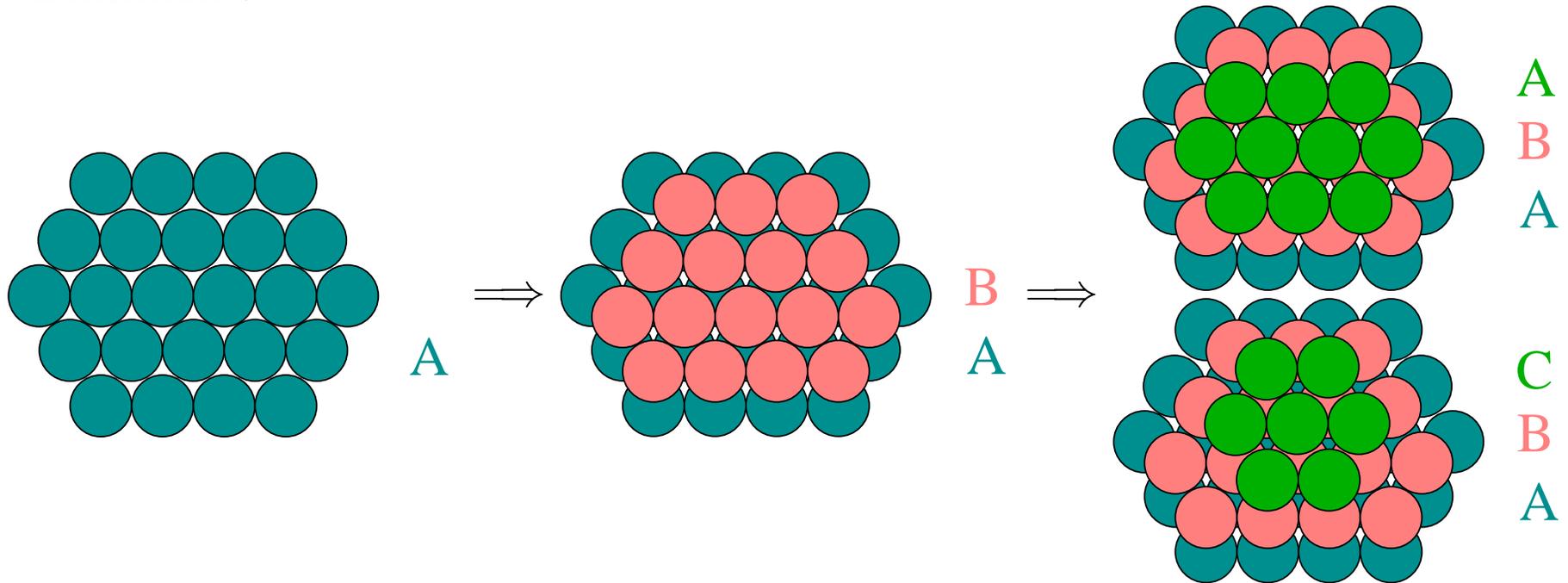
▷ dimension 1 ($\delta = 1$)



▷ dimension 2 ($\delta \simeq 0,9069$)



▷ dimension 3 :

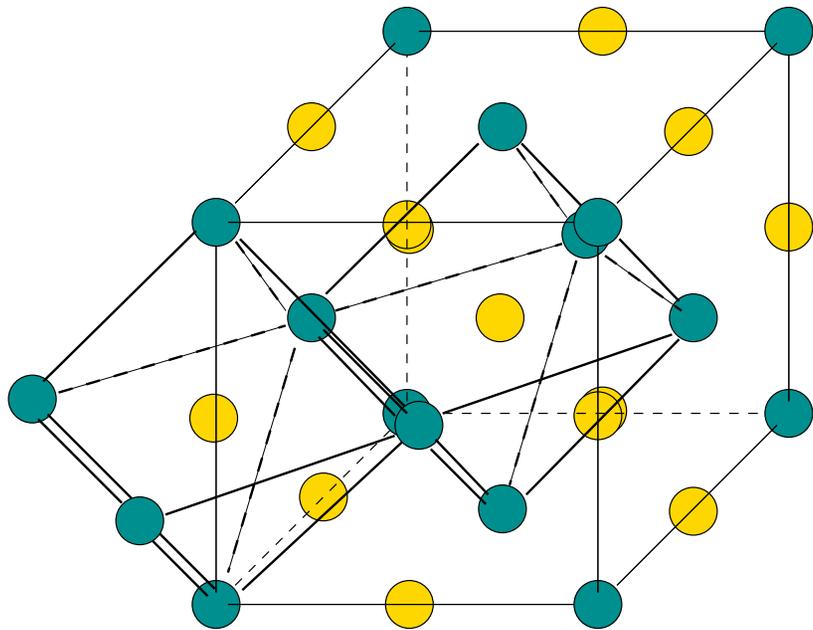


hexagonal compact : ABABABABA...

cubique à faces centrées : ABCABCABC... (seul réseau)

empilements irréguliers : par exemple ABABCACBA...

▷ dimension 4 : à partir d'un réseau cubique à faces centrées, on place des sphères dans les creux du réseau pour former une nouvelle couche.



“sites octaédriques”
(lieux naturels d’insertion d’atomes
dans un cristal *c.f.c.*)

1^{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^{ème} couche :

$(1,0,0,1)$	$(0,1,0,1)$	$(0,0,1,1)$	$(1,1,1,1)$
$(3,0,0,1)$	$(2,1,0,1)$	$(2,0,1,1)$	$(3,1,1,1)$
$(1,2,0,1)$	$(0,3,0,1)$	$(0,2,1,1)$	$(1,3,1,1)$
$(1,0,2,1)$	$(0,1,2,1)$	$(0,0,3,1)$	$(1,1,3,1)$

...

3^{ème} couche = 1^{ère} couche + $(0,0,0,2)$

Application aux codages informatiques

Codage informatique : choisir 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 (un code valide devient invalide).

“Bon” codage informatique \iff trouver de nombreux points de l'espace à n dimensions $\{0, 1\}^n$, éloignés les uns des autres \iff (périodisation) bon empilement de sphères (avec contraintes: période 2, coordonnées entières).

Exemples :

▷ dimension 3, réseau c.f.c : 000,011,101,110

(3 bits = 2 bits de données + 1 bit permettant de détecter une erreur)

▷ dimension 4, réseau optimal : 0000,0011,0101,0110,1001,1010,1100,1111

(4 bits = 3 bits de données + 1 bit permettant de détecter une erreur)

▷ dimension 7 : “code de Hamming parfait” (7,4,3) :

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

(7 bits = 4 bits de données + 3 bits permettant de corriger une erreur ;
deux codes valides ont au moins 3 chiffres différents)

▷ dimension 24, réseau de Leech : ce réseau remarquable, extrêmement dense, permet de construire les meilleurs réseaux connus dans les dimensions voisines (par section ou par empilement) ; il intervient aussi en théorie des groupes finis. L'une des méthodes pour le construire fait intervenir un code (24,12,8) particulier.