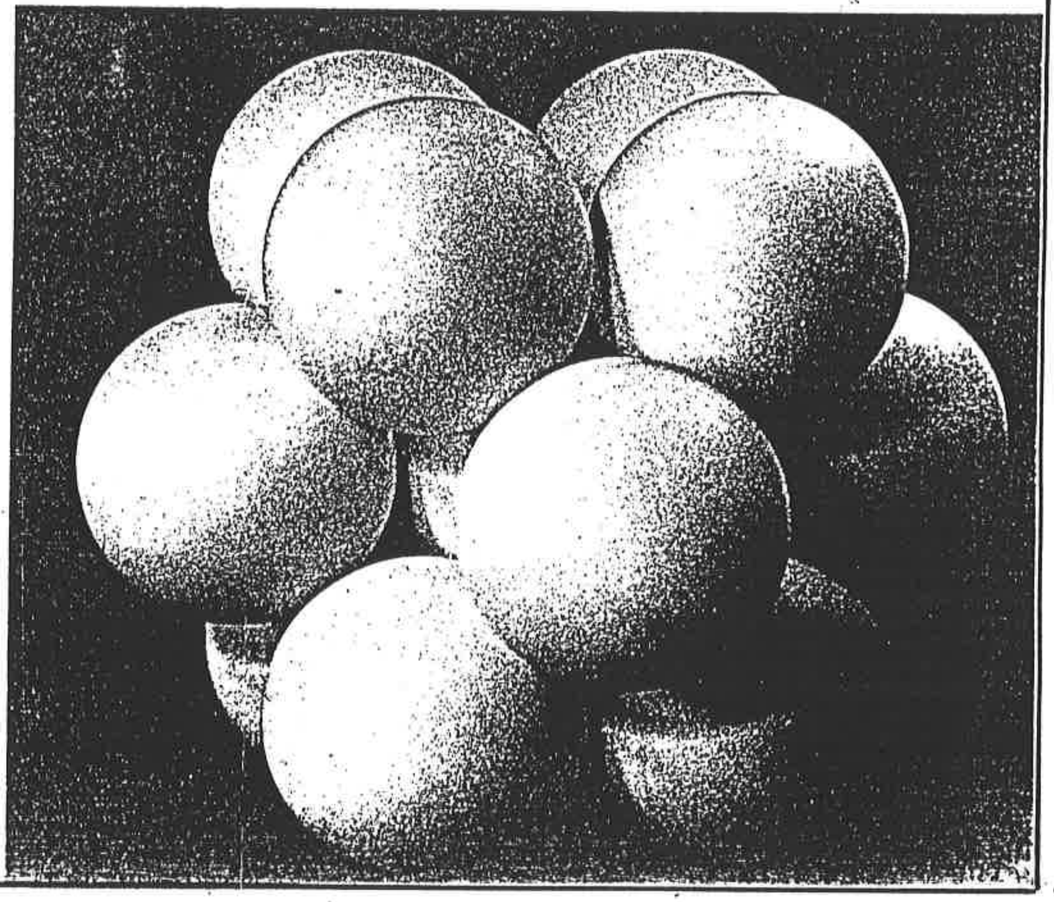
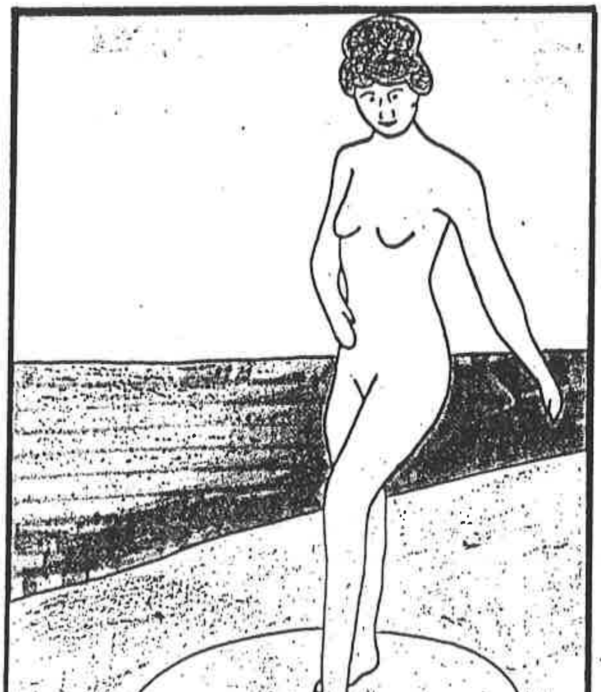
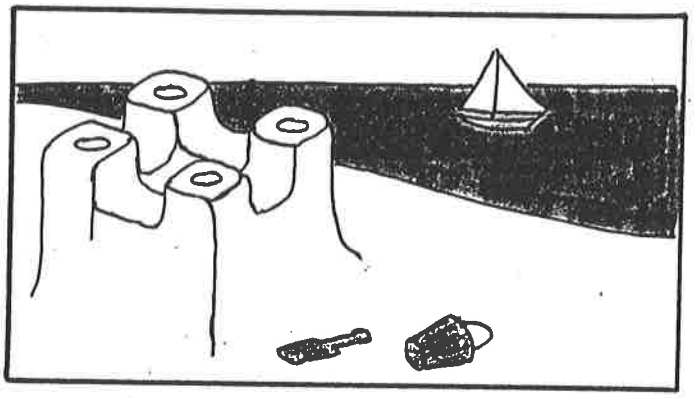
Empilements de sphères



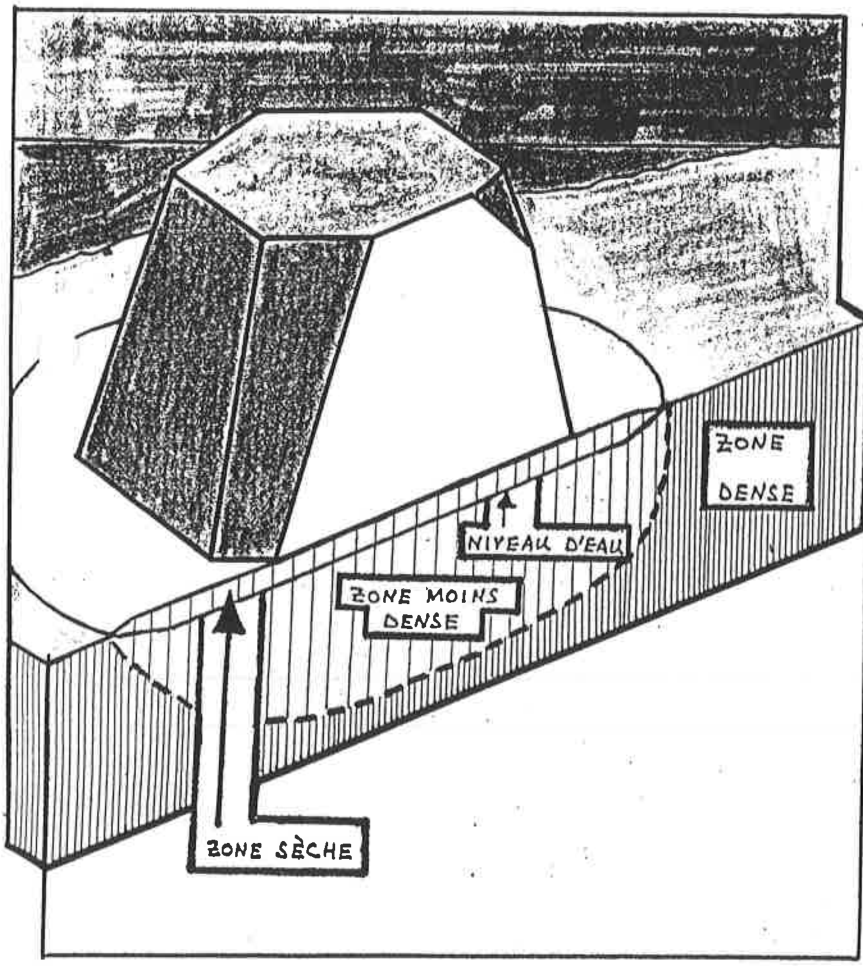


En appuyant du pied sur le sable humide, cette baigneuse voit se former autour d'elle une auréole caractéristique. Ce curieux phénomène, facile à observer au bord de la mer, possède une explication inattendue : la pression du pied perturbe légèrement l'agencement des grains de sable, en provoquant ainsi un desserrement de l'empilement. L'eau occupe l'espace ainsi libéré, et son niveau baisse dans le sable. La couche superficielle s'assèche et devient mate, comme un miroir qui se ternit.



D'autres expériences confirment l'explication donnée. Des fakirs plongent, plusieurs fois de suite, un couteau dans une jarre de riz bien tassée. Après une douzaine de coups, la jarre reste suspendue au couteau.
Plus près de nous, chacun peut, à l'aide d'un cure-dents et d'une salière, réussir un tour très spectaculaire.

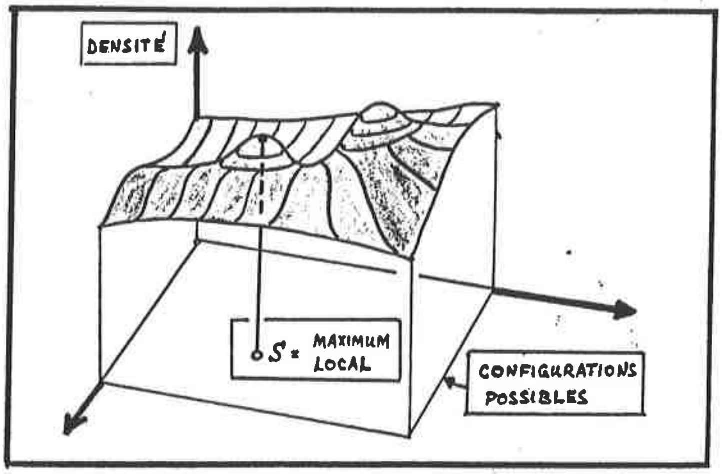
Tous les matériaux granuleux ou pulvérisés présentent un comportement mécanique analogue, mais l'observation directe du phénomène est plus difficile. Le sable offre un avantage précieux : l'eau n'en modifie pas l'empilement. Du sable que l'on mouille ne gonfle pratiquement pas. Inversement, les châteaux de sable ne se contractent pas lorsqu'ils sèchent.



Cette explication, schématisée ci-contre, fut fournie pour la première fois en 1885, lors d'un congrès scientifique à Aberdeen. Elle émerveilla à ce point le physicien Kelvin que, vingt ans plus tard, celui-ci se serait exprimé, dans une conférence donnée à Baltimore, à peu près en ces termes :

" Les milliards d'êtres humains qui ont marché sur le sable depuis le commencement du monde n'auraient jamais cru, avant le congrès de 1885 à Aberdeen, que le sable ne se comprime pas lorsqu'on y marche".

On appelle densité d'empilement la portion de l'espace occupée par les grains. Le phénomène observé correspond à la notion mathématique de <u>maximum local</u> : une faible perturbation ne peut que diminuer la densité. Dans le croquis ci-contre, on observe qu'à un point proche de S, correspond une densité inférieure à la densité en S. Mais on remarque aussi que la densité en S n'est pas la plus grande qu'il soit possible d'obtenir.



Toutes les observations relatives aux empilements rendent plausible l'existence d'une densité pour les empilements aléatoires de sphères. Deux sachets d'un kilogramme de sable ont même volume. Deux sachets de café moulu, même à des finesses de grain différentes, ont aussi même volume. Les différences de densité observées sont dues à la forme des grains. Du sable se tasse mieux que du riz, qui lui se tasse mieux que des billes d'acier. Et pourtant :

Les mathématiques ne sont actuellement pas à même de démontrer l'existence d'une telle densité "universelle".

Métal :	Argent	Aluminium	Or	Cuivre		Sodium	Potassium	Chrome	Fer
Masse spécifique solide	10,49	2,69	19,4	8,95		0,95	0,87	7,22	7,92
〃 liquide	9,33	2,39	17,3	7,95		0,93	0,82	6,46	7,05
Densité d'empilement solide	74%	74%	74%	74%		68%	68%	68%	68%
liquide	66%	66%	66%	66%		67%	64%	61%	61%

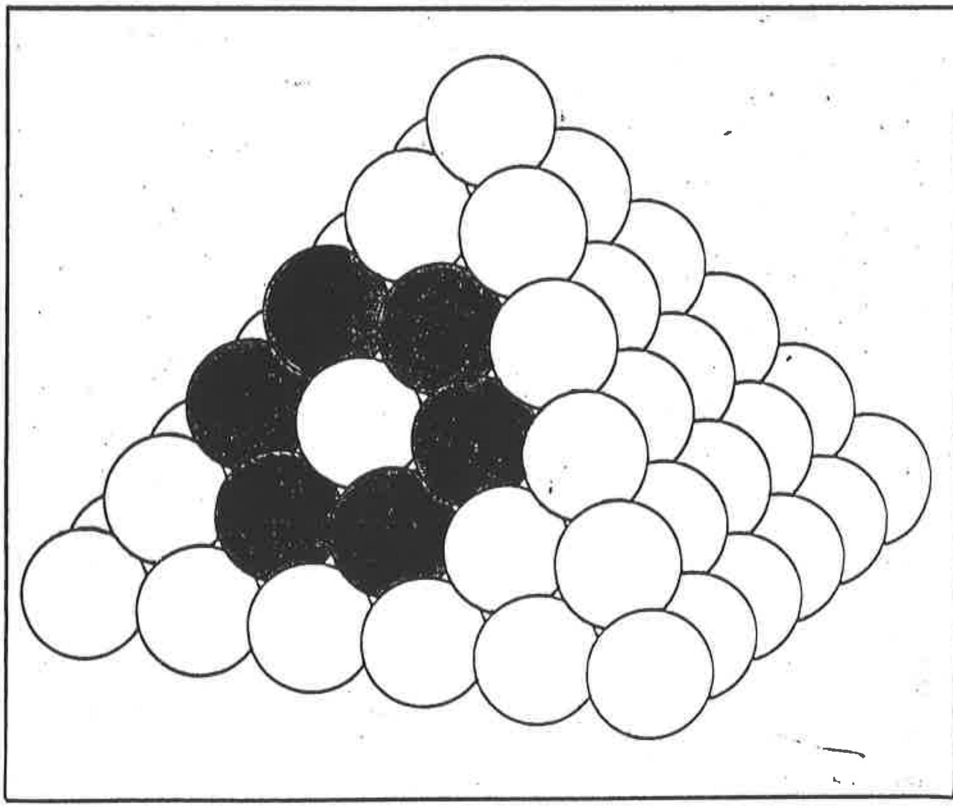
D'ingénieux procédés ont été utilisés pour analyser la ucture géométrique des empilements de sphères. On a par exemple coulé de la paraffine dans un récipient contenant des billes d'acier. Après durcissement, la configuration a été analysée par épluchage. Selon le tassement préalable effectué (ce phénomène est difficile à contrôler ; pour le sable, il y a la patience des marées !), la densité d'empilement passe de 60% à 63%.

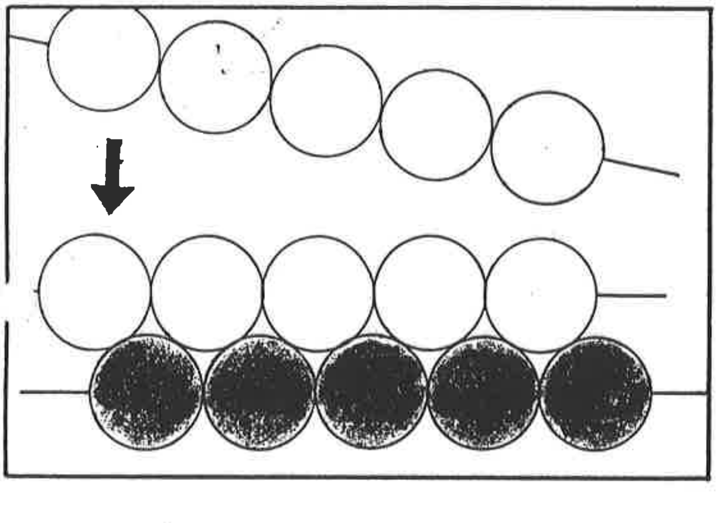
Les mesures de la masse spécifique des métaux au voisinage de leur point de fusion fournissent une comparaison intéressante. A l'état solide, les structures sont cristallines et bien connues. L'empilement de sphères cristallin correspondant a une densité de 74% ou 68% selon le métal. Si l'on transcrit alors la masse spécifique de l'état liquide en densité d'empilement (dernière ligne du tableau), on obtient des valeurs généralement voisines de 66%. On peut penser que les variations observées sont dues au fait que les atomes métalliques n'ont pas la symétrie spatiale suffisante pour être assimilés à des sphères. Cette explication est corroborée par de très délicates mesures qui ont été effectuées avec les gaz rares, qui possèdent des atomes remarquablement sphériques. Dans chaque cas (néon, argon, krypton, xénon), la valeur de la densité d'empilement de l'état liquide est très voisine de 64%.

On peut donc espérer qu'un modèle mathématique des empilements de sphères, qui reste à trouver, améliorera notre connaissance de l'état liquide de la matière.

La densité de 74% des structures métalliques montre que la nature elle-même offre des exemples de densité bien supérieure à celle du sable. La structure cristalline s'appelle réseau cubique à faces centrées.

Une excellente illustration de cet empilement est fournie par les piles de boulets de canon que l'on trouve dans les monuments militaires.
Les sections horizontales sont en réseau carré, alors que les faces latérales présentent le réseau hexagonal bien connu (alvéoles des abeilles).
Posée sur une face latérale, la pyramide explique un phénomène remarquable: contrairement à l'intuition, il revient au même, si l'on veut ranger des billes dans une boîte, de superposer des couches successives en réseau hexagonal ou en réseau carré.

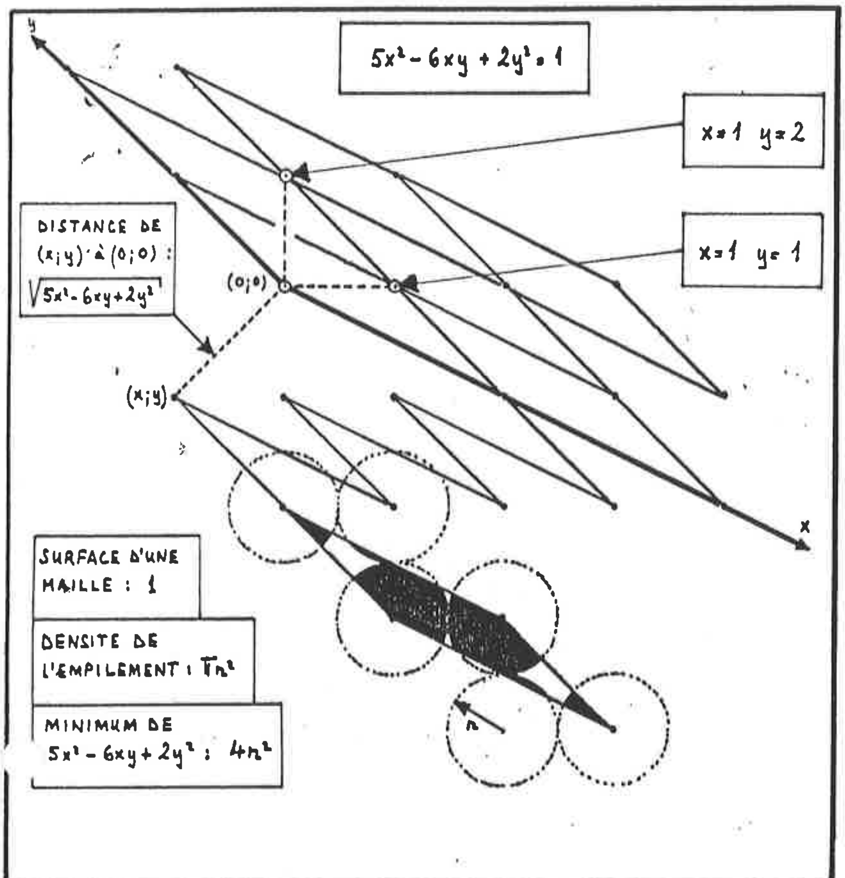




C'est Carl Friedrich Gauss qui démontra en 1831 que le réseau cubique à faces centrées est, parmi tous les réseaux cristallins, celui qui fournit la plus grande densité d'empilement. La démonstration est illustrée ci-contre dans le cas (plus simple) de la dimension deux. Il est facile de prouver que la superposition de deux couches donne la meilleure densité lorsque l'empilement devient hexagonal. La densité est alors $\pi/\sqrt{12} \sim 0,907$. A trois dimensions, on obtient $\pi/\sqrt{18} \sim 0,740$.

Les empilements cristallins de sphères peuvent être définis en toute dimension. Ils permettent de transcrire géométriquement la théorie algébrique des formes quadratiques réelles définies. La densité est liée, par une relation facile à établir, à la valeur minimale d'une forme quadratique unimodulaire lorsque les variables sont entières et ne sont pas toutes nulles.

Le simple fait que la densité d'empilement est inférieure ou égale à 100 % se traduit par un résultat algébrique fondamental. Cette observation de Minkowski fonda la géométrie des nombres. C'est un éclair de génie d'une importance historique considérable.



Un bel échantillon d'application de la géométrie des nombres est le résultat suivant : " On donne trois entiers a, b, c satisfaisant $a>0$ et $ac - b^2 = 1$. Alors l'équation $ax^2 + 2bxy + cy^2 = 1$ a toujours une solution entière."

La preuve, géométrique, est illustrée ci-contre dans le cas particulier $a=5 \quad b=-3 \quad c=2$:

Il existe un système de coordonnées obliques tel que la distance à l'origine du point (x,y) soit $\sqrt{ax^2+2bxy+cy^2}$. En outre, la maille fondamentale est de surface 1. On prend alors l'empilement de sphères centrées aux points à coordonnées entières, de rayon maximal. Le carré $4r^2$ du diamètre de la sphère est un <u>entier</u> : c'est la valeur minimale de $ax^2+2bxy+cy^2$ lorsque x et y sont entiers. La densité d'empilement est $\pi r^2 \leq 1$. Donc $4r^2 \leq \frac{4}{\pi} = 1{,}27\ldots$ et par conséquent $4r^2 = 1$. Ce qu'il fallait démontrer.

L'énumération des entiers qui peuvent s'écrire comme somme de deux carrés est un problème d'arithmétique bien connu.

C'est le résultat de la page précédente qui permet de franchir le seul passage délicat :

" Soit b un entier quelconque. Alors tout diviseur de b^2+1 est une somme de deux carrés ".

Preuve : Si a divise b^2+1, il existe c tel que $ac - b^2 = 1$. Alors (page précédente) $ax^2 + 2bxy + cy^2 = 1$ possède une solution entière. On en déduit successivement :

$$(ax+by)^2 + y^2 =$$
$$a^2x^2 + 2abxy + (b^2+1)y^2 =$$
$$a^2x^2 + 2abxy + acy^2 =$$
$$a(ax^2 + 2bxy + cy^2) =$$
$$a.$$

Ce qu'il fallait démontrer.

SOMMES DE DEUX CARRÉS

PREMIERS	1789	$= 5^2 + 42^2$
	1993	$= 12^2 + 43^2$
COMPOSÉS	1985	$= 7^2 + 44^2 = 31^2 + 32^2$
	1989	$= 15^2 + 42^2 = 30^2 + 33^2$

Le point final de l'investigation concerne les nombres premiers. C'est : " Soit p un nombre premier tel que $\frac{p-1}{2}$ soit un nombre pair. Alors p est une somme de deux carrés."

Preuve : Tout nombre premier impair divise

$$1 + (-1)^{\frac{p-1}{2}} \left(\frac{p-1}{2}!\right)^2$$

C'est une propriété facile à établir et que l'on appelle le "théorème de Wilson". La conclusion suit immédiatement du résultat précédent.

DIMENSION	DENSITÉ CRISTALLINE MAXIMALE EXACTE	APPROXIMATIVE	DATE
2	$\pi / 2\sqrt{3}$	0,9069	1773
3	$\pi / 3\sqrt{2}$	0,7404	1831
4	$\pi^2 / 16$	0,6168	1872
5	$\pi^2 / 15\sqrt{2}$	0,4652	1877
6	$\pi^3 / 48\sqrt{3}$	0,3729	1925
7	$\pi^3 / 105$	0,2952	1926
8	$\pi^4 / 384$	0,2536	1934
9	$\geqslant 2\pi^4 / 945\sqrt{2}$	$\geqslant$ 0,1457	1946

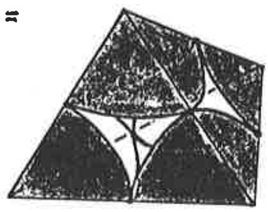
La densité maximale des empilements en réseau est connue jusqu'et y compris la dimension 8. Il paraît actuellement plausible que certains réseaux construits en dimension 9, 12 et 24 soient de densité maximale, mais la question n'a pas progressé depuis une vingtaine d'années.
C'est en dimension 10 que les informaticiens, à l'aide de la théorie des codes, ont produit un empilement de sphères non cristallin qui est plus dense que tous les empilements en réseau connus.
On se perd actuellement en conjectures sur cette éventuelle malformation.
Peut-être est-elle l'effet de notre ignorance...

Un empilement de sphères, quelle que soit sa régularité, ne peut atteindre la densité de 100 %.
En 1958, le mathématicien britannique C.A. Rogers a donné, grâce à une idée très ingénieuse, une limite supérieure de densité qui est la meilleure estimation connue.
En dimension trois, cette limite est donnée par la densité d'occupation des sphères centrées aux sommets d'un tétraèdre régulier, comme l'illustre la figure ci-contre.
La valeur exacte de la limite obtenue est $\sqrt{2}\,(3 \arccos 1/3 - \pi)$, presque 78 %.
Cette densité est cependant inaccessible, pour une raison géométrique bien connue : il est impossible d'empiler des tétraèdres réguliers de façon serrée. Les petits récipients contenant de la crème à café, tétraèdrigues, se prêtent particulièrement bien à une expérience directe.

VOLUME OCCUPÉ PAR LES SPHÈRES DANS LE TÉTRAÈDRE RÉGULIER DE VOLUME 1 :

$$\sqrt{2}\left(3 \arccos \frac{1}{3} - \pi\right) =$$

0,7797...



La densité de la sphère inscrite dans un dodécaèdre régulier est légèrement supérieure à 75 %. On a affirmé que cette valeur constitue une limite supérieure de densité, mais la démonstration est hélas incomplète.

La question reste irritante à cause du réseau cubique à faces centrées, de densité 74 %. C'est le record du monde, mais est-ce le record absolu ?

La question est si ouverte que même les spécialistes sont divisés. Sous forme d'énigme, elle peut s'énoncer ainsi :

" Un récipient, de capacité un litre,

est savamment rempli de grains

d'un matériau inconnu. Le poids

net est 750 grammes.

Est-il possible que, déversé

dans l'eau, ce matériau flotte ? "

Il serait dommage de traduire les deux phrases suivantes, l'une canadienne, l'autre anglaise, qui résument les doutes et les espoirs des mathématiciens.

H. S. M. Coxeter (1951) :

"It is conceivable that some irregular packing might be still denser"

C. A. Rogers (1958) :

" Many mathematicians believe, and all physicists know, that the density cannot exceed $\pi/\sqrt{18} = 0,7404..$ "

Trois mathématiciens du siècle passé méritent mention, car leur contribution fut essentielle.

Carl Friedrich Gauss (1777 - 1855)

Ses Disquisitiones arithmeticae, écrites à l'âge de 23 ans, sont l'une des oeuvres mathématiques les plus importantes de tous les temps.
Une extraordinaire prémonition apparait au chapitre 277, consacré aux formes quadratiques à trois variables. Gauss dit s'arrêter à la dimension trois, et ajoute, à propos des dimensions supérieures (traduction) :

> " Il suffira d'avoir recommandé ce vaste champ à l'attention des géomètres, où ils pourront trouver un très beau sujet d'exercer leurs forces..."

Charles Hermite (1822 - 1901)

Lança l'étude des formes quadratiques à n variables. Les résultats décisifs (en particulier le théorème de finitude) découlent de ses recherches. Le plus grand minimum d'une forme unimodulaire à n variables est une mesure de la densité cristalline maximale. On le note γ_n : c'est la constante d'Hermite, connue aujourd'hui pour $n \leq 8$.

Hermann Minkowski (1864 - 1909)

Reçut le Grand prix de l'Académie des Sciences à 18 ans, pour un remarquable travail consacré aux valeurs prises par les formes quadratiques entières. La géométrie des nombres, qu'il conçut et affina en étudiant les travaux d'Hermite, est considérée à juste titre comme l'une des idées mathématiques les plus fertiles et les plus profondes.