Astérisque

JOSEPH OESTERLÉ

Densité maximale des empilements de sphères en dimension 3

Astérisque, tome 266 (2000), Séminaire Bourbaki,
exp. nº 863, p. 405-413

<http://www.numdam.org/item?id=SB_1998-1999__41__405_0>

Séminaire BOURBAKI
51ème année, 1998-99, n° 863

Juin 1999

DENSITÉ MAXIMALE DES EMPILEMENTS DE SPHÈRES EN DIMENSION 3 [d'après Thomas C. HALES et Samuel P. FERGUSON]

par **Joseph OESTERLÉ** (*)

Au nouvel an 1610, Johannes Kepler offre à son protecteur et ami Johannes Matthaüs Wackher von Wackenfels un opuscule d'une vingtaine de pages ([14]), intitulé *Strena seu de nive sexangula* (l'étrenne ou la neige sexangulaire). Il y médite sur l'origine de la forme des flocons de neige en étoile à six branches, ce qui l'amène à s'intéresser entre autres à la forme des alvéoles des abeilles, au dodécaèdre rhomboédrique, à la forme des grains de grenades et à l'empilement de sphères que nous appelons aujourd'hui *cubique à faces centrées*, et qui est par exemple celui suivant lequel les artilleurs empilent les boulets de canon. Kepler affirme qu'il n'est pas possible de trouver un empilement de sphères (toutes de même rayon) plus serré, assertion qui est devenue la fameuse *conjecture de Kepler.*

En 1997, T. Hales publie une stratégie pour démontrer la conjecture de Kepler, en la ramenant à un problème d'optimisation non linéaire en dimension finie. Il mène ce programme à bien, en collaboration avec son étudiant S. Ferguson, et l'achève en juillet 1998. Tant le choix du problème d'optimisation considéré que sa résolution s'appuient sur un usage intensif de l'ordinateur. Mais près de 4 siècles après avoir été formulée, la conjecture de Kepler est enfin démontrée :

THÉORÈME 1 (Hales – Ferguson). — *Tout empilement de sphères dans l'espace euclidien de dimension* 3 *a une densité au plus égale à la densité* $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ *de l'empilement cubique à faces centrées.*

Précisons le vocabulaire utilisé : Le mot *sphère* signifie ici sphère pleine, *i.e.* est synonyme de boule fermée. Un *empilement de sphères* est une famille de boules fermées, toutes de même rayon, d'intérieurs mutuellement disjoints. Soit B la réunion

(*) L'auteur remercie J. C. Lagarias de lui avoir communiqué ses notes personnelles sur le sujet.

de ces boules ; la *densité de l'empilement* est la limite supérieure de $\mathrm{vol}(B\cap\Omega)/\mathrm{vol}(\Omega)$, pour Ω un cube dont le côté tend vers l'infini.

On peut donner du th. 1 la formulation équivalente suivante, qui ne fait intervenir que des empilements finis :

THÉORÈME 1'. — *Une famille de boules disjointes, toutes de même rayon et contenues dans un parallélépipède Ω de l'espace euclidien de dimension 3, occupe une fraction du volume de Ω au plus égale à $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$.*

Le fait que le th. 1' implique le th. 1 résulte de la définition de la densité d'un empilement de sphères ; l'implication réciproque se déduit de ce que l'on peut paver l'espace par des translatés d'un parallélépipède.

L'empilement cubique à faces centrées est ainsi nommé car on l'obtient en plaçant les centres des sphères aux sommets et aux centres des faces des mailles d'un réseau cubique (le rayon des sphères étant choisi de façon à ce qu'elles soient tangentes à leurs plus proches voisines). En prenant pour verticale la direction soit d'un côté, soit d'une diagonale de la maille cubique, on peut voir cet empilement comme une superposition de couches horizontales de sphères réparties soit en réseau carré (chaque sphère étant tangente à 4 autres de la même couche), soit en réseau hexagonal (chaque sphère étant tangente à 6 autres de la même couche) ; chaque couche s'insère dans les trous les plus profonds de la précédente.

Remarque 1. — Lorsqu'on superpose des couches de sphères réparties comme ci-dessus en réseau hexagonal, chaque couche peut être posée de deux façons distinctes dans les trous les plus profonds de la précédente. Cela conduit à une infinité (non dénombrable) d'empilements de sphères différents, tous de même densité $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ que l'empilement cubique à faces centrées.

1. Quelques mots sur l'histoire de la conjecture de Kepler

En 1831, dans son étude des formes quadratiques ternaires, C. F. Gauss ([6]) démontre le cas particulier suivant de la conjecture de Kepler : si les centres des sphères d'un empilement forment un réseau, la densité de l'empilement est $\leq \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$, avec égalité si et seulement si l'empilement est cubique à faces centrées. Ce résultat sera largement généralisé en dimension supérieure (cf. [1], [15]).

La conjecture de Kepler est reprise et généralisée par Hilbert dans son $18^{\text{ème}}$ problème.

En 1910, A. Thue ([18]) démontre l'analogue en dimension 2 de la conjecture de Kepler : *tout empilement de cercles dans le plan euclidien a une densité au plus égale* *à la densité* $\frac{\pi}{2\sqrt{3}}$ *de l'empilement hexagonal.*

En 1953, L. Fejes Tóth ([3]) propose un programme pour démontrer la conjecture de Kepler en la ramenant à un problème d'optimisation non linéaire en dimension finie. Ce problème, toujours ouvert, semble trop complexe pour être résolu avec les moyens de calcul actuels. Mais Fejes Tóth est le premier à deviner l'importance que le développement rapide des ordinateurs aura pour ce type de stratégie.

En 1958, C. A. Rogers ([16]) démontre que la densité supérieure d'un empilement de sphères dans un espace euclidien de dimension n est au plus égale à σ_n, portion du volume d'un simplexe régulier de côté 2 recouverte par les sphères unité centrées en ses sommets. Pour $n = 2$, cela fournit une nouvelle démonstration du théorème de Thue, car on peut paver le plan euclidien par des triangles équilatéraux.

L'espace euclidien de dimension 3 ne peut être pavé par des tétraèdres réguliers. La borne de Rogers, $\sigma_3 = 0,7796...$, est de ce fait moins bonne que celle prédite par la conjecture de Kepler, $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,7404...$. La phrase célèbre de Rogers : *Many mathematicians believe, and all physicists know, that the density cannot exceed* $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$, exprime mieux que toute autre la redoutable subtilité de la conjecture de Kepler, malgré son apparente simplicité.

La borne de Rogers pour la densité des empilements de sphères en dimension 3 sera améliorée par divers auteurs ; avant les travaux de Hales et Ferguson, la meilleure borne connue était 0,7731 (obtenue par D. J. Muder en 1993). Hales mentionne que les travaux de Muder ont influencé les siens.

Dans un article publié en 1993, Wu-yi Hsiang ([13]) affirme démontrer la conjecture de Kepler. Les spécialistes s'accordent à considérer que les preuves de nombreuses assertions n'y sont pas présentées avec suffisamment de détails pour être qualifiées de complètes. De ce fait, l'article de Hsiang est au mieux vu comme un plan d'attaque de la conjecture de Kepler. Je partage cette opinion. Les textes ultérieurs de Hsiang qui m'ont été communiqués, en particulier le manuscrit d'un livre en préparation, ne me semblent pas pour l'instant de nature à modifier ce point de vue.

2. La conjecture du dodécaèdre et le problème des 13 sphères

Considérons un empilement de sphères de rayon 1 dans un espace euclidien E. Soit S l'ensemble des centres des sphères. La *cellule de Voronoi* de s, notée $\mathrm{V}(s)$ se compose des points de E qui sont plus proches de s que des autres points de S. C'est un ensemble convexe fermé, localement polyédrique. Les cellules de Voronoi des points de S pavent l'espace E : autrement dit, elles recouvrent E et leurs intérieurs sont mutuellement disjoints. Chacune de ces cellules contient une unique sphère de l'empilement ; on en déduit facilement que si leur volume est minoré par v, la densité de l'empilement est majorée par b/v, où b est le volume de la boule unité.

Cette observation conduit naturellement au problème suivant : *quel est le volume minimal des cellules de Voronoi des empilements de sphères de rayon* 1 *?*

En dimension 2, le problème a été résolu par Fejes Tóth en 1943 ([2]) : l'aire d'une cellule de Voronoi d'un empilement de cercles de rayon 1 est $\geq 2\sqrt{3}$, avec égalité si et seulement si la cellule est un hexagone régulier circonscrit à un cercle de rayon 1. Cet énoncé implique le théorème de Thue relatif à la densité des empilements de cercles.

En dimension 3, le problème a été résolu par Hales et Mc Laughlin en novembre 1998, par des techniques analogues à celles utilisées pour prouver la conjecture de Kepler. Ils démontrent ainsi la *conjecture du dodécaèdre*, formulée par Fejes Tóth en 1943 (et démontrée par lui dans le cas particulier où les cellules de Voronoi n'ont que 12 faces au plus) :

THÉORÈME 2 (Hales – Mc Laughlin). — *Le volume d'une cellule de Voronoi d'un empilement de sphères de rayon* 1 *dans l'espace euclidien de dimension* 3 *est* $\geq 10\sqrt{130-58\sqrt{5}}$*, avec égalité si et seulement si la cellule est un dodécaèdre régulier circonscrit à une sphère de rayon* 1*.*

Notons que ce théorème implique que la densité d'un empilement de sphères en dimension 3 est majorée par 0,7547, une borne nettement meilleure que celles obtenues avant que ne soit démontrée la conjecture de Kepler.

Remarque 2. — Pour démontrer le théorème 2, on peut supposer que l'empilement considéré est saturé (*i.e.* maximal). Dans ce cas, pour tout $s \in \mathrm{S}$, la cellule de Voronoi $\mathrm{V}(s)$ est contenue dans la boule de centre s et de rayon 2. Sa forme, et donc son volume, ne dépendent que des points de S dont la distance à s est ≤ 4, et le nombre de ces points est majoré par une constante absolue. La conjecture du dodécaèdre est donc un problème d'optimisation non linéaire : il s'agit de trouver le maximum de la fonction volume sur un espace de configurations qui est une partie compacte d'un espace vectoriel de dimension finie. Une des difficultés vient du fait que cette dimension est de l'ordre de 150 : en effet, on sait seulement que le nombre de faces de $\mathrm{V}(s)$ est ≤ 49 et on connait des exemples où il est 44.

En 1694, une controverse oppose Isaac Newton et l'abbé Gregory. Newton pense qu'on ne peut placer qu'au plus 12 sphères identiques (ne s'interpénétrant pas) au contact d'une sphère centrale de même rayon, Gregory pense qu'il est possible d'en placer 13. Cette alternative, le *problème des 13 sphères*, ne sera tranchée qu'en 1953, par Schütte et Van der Waerden ([17]) : ils donnent raison à Newton. Ils exhibent par ailleurs un arrangement de 13 sphères de rayon 1 tangentes à une sphère centrale de rayon $r = 1,0911\dots$. On pense que ce rayon est le plus petit possible, mais cela n'a pour l'instant été démontré. Peut-être les techniques de Hales et Ferguson permettront-elles de le faire.

3. Principe d'attaque de la conjecture de Kepler

Pour majorer la densité des empilements de sphères dans un espace euclidien E de dimension 3, il suffit de considérer les empilements de sphères de rayon 1 qui sont saturés (*i.e.* maximaux). Choisissons donc un tel empilement. Notons B la réunion des boules qui le composent, et S l'ensemble de leurs centres : les distances mutuelles des points de S sont ≥ 2, et tout point de E est à une distance < 2 de S.

Si A est une partie de E, notons χ_{A} sa fonction caractéristique. Supposons que, pour des nombres réels a, b, c tels que $a > \frac{3c}{4\pi}$, on puisse écrire

$$a\chi_{\mathrm{B}} - b\chi_{\mathrm{E}} = \sum_{s\in\mathrm{S}} \phi_s \qquad \text{(presque partout)}, \tag{1}$$

où ϕ_s est une fonction intégrable dont la norme L^1 est majorée par une constante indépendante de s, dont le support est contenu dans une boule de centre s et de rayon indépendant de s, et dont l'intégrale satisfait la relation

$$\int \phi_s \leq c. \tag{2}$$

Démontrons que la densité δ de l'empilement satisfait alors l'inégalité

$$(a - \frac{3c}{4\pi})\delta \leq b \tag{3}$$

En intégrant (1) sur un cube Ω de côté r, on obtient lorsque r tend vers l'infini

$$a\mathrm{vol}(\mathrm{B}\cap\Omega) - b\mathrm{vol}(\Omega) \leq c\,\mathrm{Card}(\mathrm{S}\cap\Omega) + \mathrm{O}(r^2) \leq \frac{3c}{4\pi}\mathrm{vol}(\mathrm{B}\cap\Omega) + \mathrm{O}(r^2).$$

d'où $(a - \frac{3c}{4\pi})\frac{\mathrm{vol}(\mathrm{B}\cap\Omega)}{\mathrm{vol}(\Omega)} \leq b + \mathrm{O}(r^{-1})$; l'inégalité (3) s'en déduit par passage à la limite supérieure.

Exemples. — 1) La relation (1) est satisfaite lorsque l'on prend $a = 0$, $b = -1$ et $\phi_s = -\chi_{\mathrm{V}(s)}$, où $\mathrm{V}(s)$ est la cellule de Voronoi de s ; cette cellule est contenue dans la boule de centre s et de rayon 2, puisque l'empilement est supposé saturé. La relation

(2) est satisfaite en prenant $c = -v$, où v est un minorant du volume des cellules de Voronoi. La relation (3) donne l'inégalité $\delta \leq \frac{4\pi}{3v}$ que nous avions rencontrée au n° 2.

2) Soit r un nombre réel > 2. Disons que deux points distincts de S sont voisins si leur distance est $\leq r$. Fejes Tóth propose pour démontrer la conjecture de Kepler de prendre le plus grand r qui garantisse que tout point de S a au plus 12 voisins (probablement 2,0534...), et de poser $\phi_s = -\frac{12-m}{12}\chi_{\mathrm{V}(s)} - \frac{1}{12}\sum \chi_{\mathrm{V}(t)}$, où t parcourt les voisins de s et m est leur nombre. La relation (1) est dans ce cas satisfaite avec $a = 0$ et $b = -1$, mais la détermination de la constante c optimale dans (2) apparaît totalement hors d'atteinte.

3) On appelle *décomposition de Delaunay* associée à l'empilement une décomposition de l'espace E en tétraèdres, dont les sommets appartiennent à S, et dont les boules circonscrites n'ont pas de point intérieur dans S. Il existe au moins une telle décomposition ; celle-ci est unique lorsqu'aucun point de E n'appartient à plus de 4 cellules de Voronoi (ce qui est le cas générique), et est dans ce cas duale de celle de Voronoi. Fixons une décomposition de Delaunay associée à l'empilement et appelons *étoile* de s la réunion $\mathrm{D}(s)$ des simplexes de la décomposition contenant s. Posons $\phi_s = \chi_{\mathrm{B}\cap\mathrm{D}(s)} - \delta_{oct}\chi_{\mathrm{D}(s)}$, où δ_{oct} est la portion du volume d'un octaèdre régulier de côté 2 recouverte par les boules unités centrées en ses sommets. La première tentative de Hales pour démontrer en 1992 la conjecture de Kepler revenait à utiliser ces fonctions ϕ_s, avec $a = 4$ et $b = 4\delta_{oct}$. Mais il s'aperçut que pour certaines étoiles (les prismes pentagonaux), l'intégrale de ϕ_s était trop grande pour conclure.

4. Articulation de la démonstration de Hales et Ferguson

La démonstration de Hales et Ferguson de la conjecture de Kepler se compose de 8 articles, totalisant environ 300 pages, dont l'ordre logique est le suivant :

An overview of the Kepler conjecture, de T.C. Hales ([7]).
A formulation of the Kepler conjecture, de S. Ferguson et T.C. Hales ([5]).
Sphere packings I, de T.C. Hales ([8]).
Sphere packings II, de T.C. Hales ([9]).
Sphere packings III, de T.C. Hales ([10]).
Sphere packings IV, de T.C. Hales ([11]).
Sphere packings V, de S. Ferguson ([4]).
The Kepler conjecture (Sphere packings VI), de T.C. Hales ([12]).

Les premiers articles rédigés furent *Sphere packings I* et *Sphere packings II*. Ils ont été publiés en 1997. Les autres articles sont pour l'instant des prépublications électroniques, disponibles sur la page personnelle de T. Hales.

Dans *Sphere packings I*, Hales décrit sa stratégie pour démontrer la conjecture de Kepler. Le problème d'optimisation qu'il considère est de même nature que celui considéré dans l'exemple 3 du n° 3, mais s'appuie sur une décomposition de l'espace hybride entre la décomposition de Voronoi et celle de Delaunay. À l'étoile $\mathrm{D}(s)$ d'un point s pour cette décomposition, Hales associe un nombre réel qu'il appelle *le score* de $\mathrm{D}(s)$ et qui est l'intégrale de la fonction ϕ_s dans l'approche du n° 3.

L'ensemble $\mathcal{D}$ des étoiles possibles, pour $s = 0$, a une structure naturelle d'espace compact et le score est une fonction continue sur $\mathcal{D}$. Les étoiles qui proviennent de l'empilement cubique faces centrée et de ses variantes décrites dans la remarque 1 forment deux orbites $\mathcal{D}_0$ et $\mathcal{D}'_0$ sous l'action du groupe orthogonal. Pour démontrer la conjecture de Kepler, il suffit de démontrer que le maximum du score est atteint sur $\mathcal{D}_0 \cup \mathcal{D}'_0$. Pour des raisons de commodité, Hales note $8pt$ la valeur prise par le score sur cet ensemble.

Chaque étoile possède une structure combinatoire, décrite par une carte sphérique. Dans *Sphere packings II*, Hales démontre une propriété forte de maximum local : les étoiles ayant même structure combinatoire que celles de $\mathcal{D}_0 \cup \mathcal{D}'_0$ ont un score $\leq 8pt$, avec égalité si et seulement si elles appartiennent à $\mathcal{D}_0 \cup \mathcal{D}'_0$.

La stratégie consiste alors à démontrer que pour les autres structures combinatoires, le score est $< 8pt$. Les difficultés techniques rencontrées, en particulier dans l'étude des prismes pentagonaux, conduisent Ferguson et Hales à modifier le problème d'optimisation initial, en proposant une nouvelle décomposition de l'espace et une nouvelle fonction score, plus compliquées apparemment mais mieux adaptées à l'étude numérique envisagée. C'est ce qu'ils font dans *A formulation of the Kepler conjecture*, en prenant soin de vérifier que les résultats de *Sphere packings I* et *Sphere packings II* restent valables dans ce nouveau cadre.

Dans *Sphere packings III*, Hales démontre que le score (nouvelle version) de D est $< 8pt$ si la carte associée n'a que des faces triangulaires ou quadrilatérales, et ne provient pas d'un prisme pentagonal (ni de $\mathcal{D}_0$ et $\mathcal{D}'_0$) ; le cas des prismes pentagonaux est traité par Ferguson dans *Sphere packings V*, celui des cartes possédant des faces à 5 côtés ou plus par Hales dans *Sphere packings IV* et *Sphere packings VI.*

Au total, ce sont environ 5000 cartes, recensées par ordinateur, qui interviennent dans le problème. Des méthodes générales de programmation linéaire permettent de se ramener à n'examiner qu'une centaine de cas ; ceux-ci sont traités un à un. Beaucoup des problèmes d'optimisation non linéaires rencontrés sont remplacés par des problèmes d'optimisation linéaires qui les dominent, que l'on sait résoudre par les méthodes de programmation linéaire. Au total, ce sont près de 100000 problèmes linéaires, en 100 à 200 variables, avec 1000 à 2000 contraintes, qu'il a fallu traiter pour achever la démonstration. Les calculs ont été effectués en utilisant une *arithmétique des intervalles* : chaque nombre réel r est représenté par un couple (a, b) de nombres rationnels qui l'encadrent, de manière à garantir que les erreurs d'arrondis cumulées n'entachent pas la validité des résultats obtenus.

5. La conjecture de Kepler est-elle démontrée ?

La situation n'est pas sans rappeler celle du théorème des 4 couleurs, dont la démonstration par K. Appel et W. Haken en 1977 avait nécessité l'examen de quelques milliers de configurations par ordinateur.

Je ne prétends pas avoir vérifié l'intégralité de la démonstration de Hales et Ferguson, et encore moins les programmes informatiques utilisés. Je ne pense pas que quiconque à part les auteurs l'ait fait.

Ma conviction personnelle que les travaux de Hales et Ferguson fournissent effectivement une preuve de la conjecture de Kepler repose sur les arguments suivants :

— Ni erreurs substantielles, ni points obscurs n'ont été relevés jusqu'à présent par les spécialistes ayant examiné ces travaux.

— Dans toutes les parties du travail que j'ai pris la peine de lire en détail, j'ai trouvé des démonstrations claires et complètes.

— Le recours à l'intuition géométrique, dangereux dans ce type de problème, est réduit au minimum et remplacé par des inégalités précises.

— Les algorithmes employés sont décrits avec soin, et les codes rédigés sont disponibles pour vérification. L'arithmétique des intervalles tient compte des erreurs commises dans l'approximation des nombres réels.

— Si d'aventure, on s'apercevait ultérieurement qu'un cas à examiner a échappé à la sagacité des auteurs, il est vraisemblable que leurs techniques permettraient de le traiter sans devoir introduire d'idées nouvelles.

BIBLIOGRAPHIE

[1] J. H. CONWAY, N. J. A. SLOANE – *Sphere packings, lattices and groups*, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften **290**, Springer Verlag, 1988.

[2] L. FEJES TÓTH – *Über die dichteste Kugellagerung*, Math. Z. **48** (1943), 676-684.

[3] L. FEJES TÓTH – *Lagerungen in der Ebene, auf der Kugel und im Raum*, Springer, Berlin, 1953.

[4] S. P. FERGUSON – *Sphere packings V*, thèse, Université du Michigan, 1997.

[5] S. P. FERGUSON, T. C. HALES – *A formulation of the Kepler conjecture*, prépublication.

[6] C. F. GAUSS – *Untersuchungen über die Eigenschaften der positiven ternären quadratischen Formen von Ludwig August Seber*, Göttingische gelehrte Anzeigen, 1831, Juli 9 (= Werke, vol 2, Königlische Gesellschaft der Wissenschaften, Göttingen, 1876, 188-196).

[7] T. C. HALES – *An overview of the Kepler conjecture*, prépublication.

[8] T. C. HALES – *Sphere packings I*, Disc. Comp. Geom. **17** (1997), 1-51.

[9] T. C. HALES – *Sphere packings II*, Disc. Comp. Geom. **18** (1997), 135-149.

[10] T. C. HALES – *Sphere packings III*, prépublication.

[11] T. C. HALES – *Sphere packings IV*, prépublication.

[12] T. C. HALES – *The Kepler conjecture (Sphere packings VI)*, prépublication.

[13] W-Y. HSIANG – *On the sphere packing problem and the proof of Kepler's conjecture*, Intern. J. Math. **93** (1993), 739-831.

[14] J. KEPLER – *Strena seu de nive sexangula*, Frankfurt, Tampach, 1611, 24 pages. (Traduction allemande de F. Rossmann, *Neujahrsgabe*, Berlin, 1943 ; traduction anglaise de C. Hardie, *The six-cornered snowflake*, Oxford, 1966 ; traduction française de R. Halleux, *L'étrenne ou la neige sexangulaire*, librairie J. Vrin et éditions du CNRS, Paris, 1975.)

[15] J. OESTERLÉ – *Empilements de sphères*, Séminaire Bourbaki 1989-90, exposé n° 727, Astérisque **189-190** (1990), 375-397.

[16] C. A. ROGERS – *The packing of equal spheres*, Proc. London Math. Soc. **8** (1958), 609-620.

[17] K. SCHÜTTE, B. L. VAN DER WAERDEN – *Das Problem der dreizehn Kugeln*, Proc. London Math. Ann. **125** (1953), 325-334.

[18] A. THUE – *Über die dichteste Zusammenstellung von kongruenten Kreisen in einer Ebene*, Norske Vid. Selsk. Skr.**1** (1910), 1-9.

Joseph OESTERLÉ

Institut Henri Poincaré
11, rue Pierre et Marie Curie
F-75005 PARIS
Adresse électronique : oesterle@ihp.jussieu.fr