

EMPILEMENTS DE DISQUES : APPROCHE PROBABILISTE D'UN PROBLÈME GÉOMÉTRIQUE

CHARLOTTE DOMBROWSKY, MYRIAM FRADON, AND SYLVIE RËLLE

RÉSUMÉ. Nous étudions les empilements planaires de disques de même taille qui ne se chevauchent pas, en cherchant à identifier en particulier ceux qui minimisent l'énergie quadratique. De façon surprenante, la géométrie exacte de ces empilements optimaux n'est connue que pour de très petits systèmes. Nous suggérons ici une méthode d'approximation probabiliste efficace pour des systèmes de toute taille.

INTRODUCTION

Depuis fort longtemps des ingénieurs militaires, des techniciens, des commerçants se sont demandés comment empiler de façon optimale dans l'espace toutes sortes de sphères de tailles égales, comme des boulets de canons, des billes, des oranges... Les uns et les autres souhaitant, pour des raisons claires, minimiser le volume occupé par ces sphères, soit encore maximiser la densité de la configuration obtenue, cf Figure 1.

Ce type de questions géométriques est déclinable sous de multiples aspects :

- Parle-t-on de segments (sphères en dimension 1), de disques (sphères en dimension 2), de boules (dimension 3) ou d'hypersphères (en dimension supérieure à 3) ?
- Le nombre de sphères à ordonner est-il fini ou infini ?
- S'il est fini (et donné) cherche-t-on à maximiser la proportion de volume occupé par les

ch.dombrowsky@gmx.de ETH Zürich, Suisse.

Myriam.Fradon@univ-lille1.fr U.F.R. de Mathématiques, CNRS UMR 8524, Université Lille 1, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France.

roelly@math.uni-potsdam.de Institut für Mathematik der Universität Potsdam, Karl-Liebknecht-Str. 24-25, 14476 Potsdam OT Golm, Allemagne.



FIGURE 1. Boulets de canons, Musée historique de Strasbourg

sphères au sein de l'enveloppe convexe définie par celles-ci ? ou à minimiser la surface de cette enveloppe convexe ? ou à maximiser le nombre de sphères touchées par chaque sphère de la configuration, le fameux *kissing number* ? ou à compactifier au maximum la configuration géométrique de telle sorte qu'une certaine énergie soit minimale ?

Le lecteur intéressé par ces différentes problématiques et leurs développements mathématiques pourra consulter la récente et très claire monographie [1].

Nous concentrerons nos efforts sur les configurations planaires de disques qui minimisent une certaine énergie quadratique tout en ne se chevauchant pas. Ces configurations ont des applications dans de très nombreux domaines, comme par exemple en chimie des clusters, où elles apparaissent comme des *agrégats atomiques*, cf [15] ; dans les problèmes d'encodage pour la transmission de signaux [5] ; en physique optique, pour concevoir des fibres optiques optimales, cf [12] ; ou encore en logistique, pour résoudre par exemple la question importante suivante : comment emballer le nombre maximum de saucisses de Frankfurt dans un bocal cylindrique ?

Notre but est double, théorique et appliqué.

Dans un premier temps nous analyserons des empilements de disques du point de vue de la géométrie discrète. Nous traiterons en particulier les configurations hexagonales qui ont des propriétés remarquables. Nous proposons le calcul explicite d'une de leurs grandeurs caractéristiques, dénommée *énergie quadratique*. Nous montrerons que les petites configurations hexagonales (celles dont le côté est inférieur ou égal à 7 disques) sont des empilements réticulaires optimaux, i.e. elles réalisent le minimum de l'énergie quadratique quand les disques sont placés sur le réseau triangulaire.

Cette propriété n'est cependant plus vraie pour de grands empilements. A la recherche d'indices vers la résolution de la question que Toth formula en 1967,

What is the shape of a cluster of n spheres with equal radii minimizing their quadratic energy, i.e. their 2nd moment about their center of mass ?

nous proposons alors une toute autre méthode, probabiliste cette fois-ci. Nous construisons une dynamique aléatoire des disques qui se stabilise, après une longue évolution, en des configurations "presque" optimales. En simulant ce mouvement (après avoir judicieusement choisi les paramètres), l'on peut raisonnablement argumenter en faveur de la conjecture :

les empilements de disques qui minimisent l'énergie quadratique sont circulaires et centrés sur le réseau triangulaire.

1. EMPILEMENT OPTIMAL DE DISQUES ET ÉNERGIE QUADRATIQUE

Nous soulevons ici la question de l'empilement optimal de disques (souvent appelés *pennies* dans la littérature anglo-saxonne), afin de minimiser son énergie quadratique, dénommée aussi second moment. Cette question semble simple et riche en applications, et pourtant elle est encore essentiellement ouverte, dès que le nombre de disques est supérieur à 7, comme nous allons le voir.

Dans les paragraphes qui suivent nous allons introduire les notions mathématiques nécessaires à notre analyse, proposer quelques calculs explicites d'énergie et souligner l'ampleur des questions restant sans réponse à ce jour.

1.1. L'énergie quadratique d'une configuration de disques. On appelle **configuration de n disques** une collection \mathbf{x} de n disques ouverts dans le plan euclidien, chacun de rayon unité et qui ne se chevauchent pas. Toute configuration est alors identifiable à la position des centres de ses disques :

$$\mathbf{x} \equiv \{x_1, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^2$$

qui vérifient bien sûr, pour tout $1 \leq i < j \leq n$, la condition $|x_i - x_j| \geq 2$, où $|\cdot|$ est la notation utilisée pour la norme euclidienne.

Définition 1. On appelle **énergie quadratique** de la configuration \mathbf{x} de n disques la somme des carrés des distances entre chaque paire de centres : $\sum_{1 \leq i < j \leq n} |x_i - x_j|^2$. L'**énergie quadratique moyenne** est alors définie par

$$\text{(énergie moyenne)} \quad \mathcal{E}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{1 \leq i < j \leq n} |x_i - x_j|^2.$$

Lemme 2. L'énergie quadratique moyenne de la configuration \mathbf{x} se calcule à l'aide des distances de chaque disque au centre de gravité de la configuration :

$$\text{(second moment)} \quad \mathcal{E}_n(\mathbf{x}) = \sum_{1 \leq i \leq n} |x_i - \bar{x}|^2 \quad \text{où} \quad \bar{x} := \frac{x_1 + \dots + x_n}{n}.$$

Démonstration. Pour tout couple de centres

$$|x_i - x_j|^2 = |(x_i - \bar{x}) + (\bar{x} - x_j)|^2 = |x_i - \bar{x}|^2 + |\bar{x} - x_j|^2 + (x_i - \bar{x}, \bar{x} - x_j)$$

et, par définition du centre de gravité, $\sum_{1 \leq j \leq n} (\bar{x} - x_j) = 0$ donc

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_n(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2n} \sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{1 \leq j \leq n} |x_i - x_j|^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n} |x_i - \bar{x}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq j \leq n} |\bar{x} - x_j|^2 = \sum_{1 \leq i \leq n} |x_i - \bar{x}|^2. \end{aligned}$$

□

Maintenant nous pouvons préciser le concept d'optimalité évoqué plus haut.

Définition 3. Une configuration \mathbf{x}_{min} de n disques est dite **optimale** si son énergie quadratique est minimale au sein des configurations de n disques :

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{x}_{min}) = \min\{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}); \mathbf{x} \text{ configuration de } n \text{ disques}\}$$

On notera \mathcal{C}_{min} l'ensemble des configurations optimales, modulo rotations et translations planaires.

La question de Toth restreinte au plan euclidien s'exprime alors, pour tout $n \geq 2$, de la façon suivante :

- (1) calculer l'énergie quadratique minimale d'une configuration de n disques
- (2) expliciter l'ensemble \mathcal{C}_{min} des configurations atteignant cette énergie minimale.



FIGURE 2. Configuration optimale de deux (resp. trois) disques et leurs énergies moyennes respectives.

Pour $n = 2$ et $n = 3$, la situation est triviale et les réponses aux questions (1) et (2) sont données en Figure 2. L'ensemble \mathcal{C}_{min} des configurations optimales se réduit à une unique configuration.

Le cas $n = 4$ est plus subtil. L'énergie moyenne est minimale pour une infinité de configurations distinctes : $\text{card } \mathcal{C}_{min} = +\infty$. Elles sont en forme de losange, obtenues en faisant rouler les deux disques supérieurs sur les deux disques inférieurs de telle sorte que le nombre de points de contact reste au moins égal à 4, cf Figure 3.

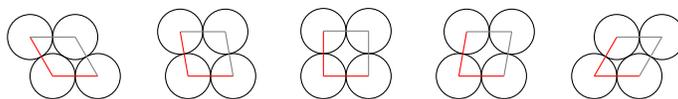


FIGURE 3. Exemples de configurations optimales de quatre disques : $\mathcal{E}_4(\mathbf{x}_{min}) = 8$

A rotation et translation près, ces configurations sont paramétrées par l'angle θ entre les segments rouges. En prenant l'origine du plan cartésien en le centre du disque inférieur de gauche, l'on obtient

$$\mathcal{C}_{min} = \left\{ \{(0, 0), (2, 0), 2(\cos \theta, \sin \theta), 2(1 + \cos \theta, \sin \theta)\} , \theta \in \left[\frac{\pi}{3}; \frac{2\pi}{3} \right[\right\}.$$

On vérifie par le calcul explicite que l'énergie moyenne est constante sur cet ensemble :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_4(\mathbf{x}_{min}) &= \frac{1}{4} \left(4 \times 2^2 + |2(1 + \cos \theta, \sin \theta)|^2 + |2(\cos \theta, \sin \theta) - (1, 0)|^2 \right) \\ &= 2^2 + (2 + 2 \cos \theta) + (2 - 2 \cos \theta) = 8. \end{aligned}$$

Pour $n = 5$ ou $n = 6$ la réponse n'est pas évidente. Les configurations optimales, dessinées en Figure 4, peuvent s'interpréter comme des sous-ensembles de la marguerite, la configuration optimale pour $n = 7$. Ceci fut exposé dans le travail géométrique remarquable et méconnu (car rédigé en hongrois) [16] que la chercheuse A. Temesvári a publié en 1974. Remarquons que ces configurations optimales sont obtenues par empilement de disques dont les centres sont des points voisins au sein du réseau triangulaire, que nous noterons dorénavant \mathcal{T} .

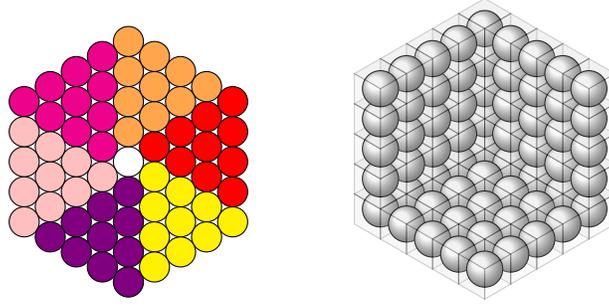


FIGURE 5. Décomposition d'un nombre hexagonal $n(h)$ en six pétales (première expression de (5)), ou en différence de deux cubes consécutifs (dernière expression de (5)).

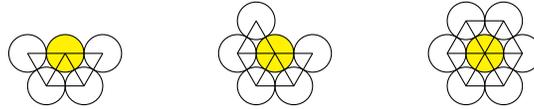


FIGURE 4. Les uniques configurations optimales de 5 (resp. 6 ou 7) disques, en marguerite dont il manque resp. 1 ou 2 pétales. Les centres des disques appartiennent au réseau \mathcal{T} .

Pour $n > 7$ la réponse est encore incomplète à ce jour. Le résultat le plus abouti a été obtenu par Chow [3] qui ne parvient à minimiser l'énergie quadratique qu'au sein des configurations **réticulaires**, c'est-à-dire dont les centres des disques appartiennent à \mathcal{T} .

Remarquons que la marguerite est une configuration hexagonale, ce qui n'est pas un hasard car le nombre 7 est le premier *nombre hexagonal centré* non trivial. Nous allons donc concentrer maintenant notre attention sur des configurations de disques dont le cardinal est un de ces nombres remarquables.

1.2. Beauté et utilité des nombres hexagonaux centrés. Rappelons tout d'abord leur définition algébrique.

Définition 4. *Un nombre hexagonal centré n est un nombre entier qui peut se décomposer de la façon suivante :*

$$(5) \quad n(h) = 1 + 6 \frac{h(h-1)}{2} = 3h^2 - 3h + 1 = h^3 - (h-1)^3$$

pour un certain entier h .

Il correspond au nombre de disques semblables que l'on peut empiler en hexagone régulier sur un réseau triangulaire \mathcal{T} autour d'un disque centré en le centre de gravité \bar{x} de la configuration. Le nombre h représente alors le nombre de disques alignés sur chaque côté de l'hexagone, ou encore le nombre de couches dans l'hexagone, cf la preuve graphique donnée par la figure 5. L'on vérifie aisément que chacun des six pétales colorés est composé de $\frac{h(h-1)}{2}$ disques.

Sur la figure 6 sont représentées graphiquement les configurations hexagonales de côté $h = 1, 2, 3$ et 4.

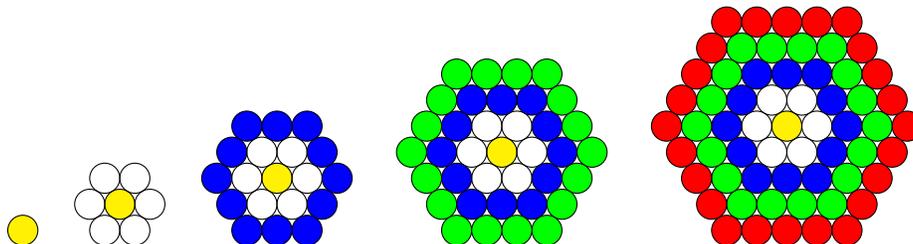


FIGURE 6. Représentation des configurations hexagonales $\mathbf{x}_{hex}(1)$, resp. $\mathbf{x}_{hex}(2)$, $\mathbf{x}_{hex}(3)$, $\mathbf{x}_{hex}(4)$ et $\mathbf{x}_{hex}(5)$, de cardinal $n(1) = 1$ resp. $n(2) = 7$, $n(3) = 19$, $n(4) = 37$ et $n(5) = 61$.

1.3. Calcul de l'énergie quadratique moyenne d'une configuration hexagonale.

Pour simplifier, notons $E(h)$ l'énergie quadratique moyenne de la configuration hexagonale $\mathbf{x}_{hex}(h)$ de côté h , et de cardinalité $n(h)$:

$$E(h) := \mathcal{E}_{n(h)}(\mathbf{x}_{hex}(h))$$

1.3.1. *Les configurations de petite taille.* Dans cette section nous allons traiter le cas des deux plus petites configurations hexagonales non triviales.

Commençons par la marguerite, de côté $h = 2$. On numérote d'abord ses disques suivant ses 2 couches en commençant par le centre. Utilisons maintenant l'expression du second moment

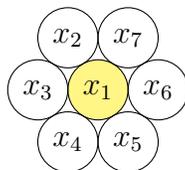


FIGURE 7. Numérotation de la configuration hexagonale de côté $h = 2$ comprenant $n(2) = 7$ disques

pour calculer l'énergie quadratique de cette configuration. Puisque le centre du disque central, noté x_1 , est égal au centre de gravité de cette configuration, on obtient pour son énergie une somme de six termes égaux :

$$E(2) = \sum_{i=2}^7 |x_i - x_1|^2 = 6 \cdot 2^2 = 24.$$

Calculons maintenant l'énergie d'une configuration hexagonale de côté $h = 3$.

Ici encore, nous utilisons l'expression du second moment faisant intervenir le centre de gravité x_1 et l'énergie précédemment calculée pour exprimer l'énergie quadratique moyenne

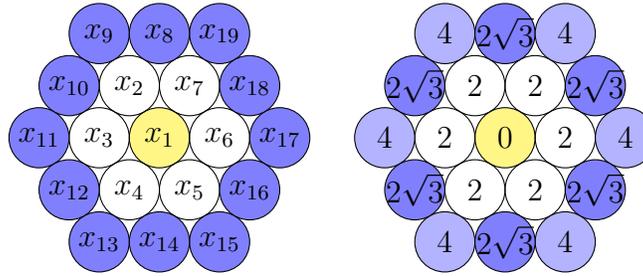


FIGURE 8. Numérotation de la configuration hexagonale $\mathbf{x}_{hex}(3)$ et de ses 3 couches ; distance des centres des disques au centre de gravité $\bar{x} = x_1$



FIGURE 9. Editha et Othon, Magdeburg, 1245 ; Photo Wikipedia Chris 73

de cette configuration.

$$\begin{aligned}
 E(3) &= \sum_{i=2}^7 |x_i - x_1|^2 + \sum_{i=8}^{19} |x_i - x_1|^2 \\
 &= E(2) + 6 \cdot (|x_8 - x_1|^2 + |x_9 - x_1|^2) \\
 &= 24 + 6 \cdot ((2\sqrt{3})^2 + 4^2) \\
 &= 192.
 \end{aligned}$$

Évoquons deux situations très différentes dans lesquelles un empilement de $n(3)$ disques apparaît. Une sculpture de la cathédrale de Magdeburg datant du XIII^{ème} siècle représente le premier empereur germanique, Othon Ier et son épouse Editha. Il tient fièrement dans ses mains une configuration hexagonale à 19 disques, dont l'interprétation reste à ce jour un mystère (et donc un sujet de discorde entre historiens !)

D'autre part, les ingénieurs savent de façon empirique depuis longtemps que la géométrie hexagonale génère une résistance optimale. Elle est ainsi utilisée, par exemple, dans la construction des câbles : ceux du pont de Brooklyn, inauguré en 1883, sont formés de $19 = n(3)$ brins, chacun composé de $331 = n(11)$ fils métalliques de diamètre $1/8$, cf Figure 10.

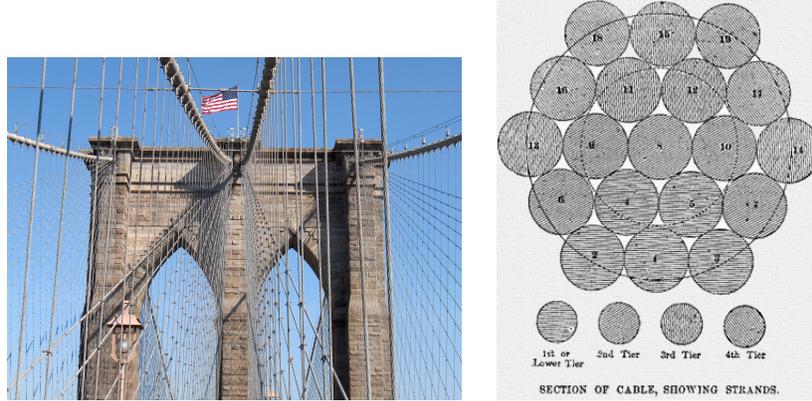


FIGURE 10. Pont de Brooklyn. (Photo Par I, FoxCompany2, CC BY-SA 3.0 et Pinterest Brooklyn Bridge Construction)

1.3.2. *Énergie d'une configuration hexagonale de taille quelconque.* Nous proposons maintenant une formule explicite, dont la preuve s'appuie sur l'expression du second moment ainsi que sur la remarquable invariance par rotation de $\pi/3$ de toute configuration hexagonale illustrée par la figure 5.

Proposition 6. *L'énergie quadratique moyenne de la configuration hexagonale $\mathbf{x}_{hex}(h)$ est donnée par*

$$(7) \quad E(h) = h(h-1)(5h(h-1) + 2) = \frac{(n(h) - 1)(5n(h) + 1)}{9}$$

Remarque : Ainsi, l'énergie $E(h)$ est une fonction de $\frac{h(h-1)}{2} = \binom{h}{2}$, qui n'est autre que le cardinal de chaque pétale de la configuration hexagonale de côté h .

Cette formule se généralise immédiatement à des disques de rayon r quelconque :

$$E(h) = (2r)^2 \binom{h}{2} \left(5 \binom{h}{2} + 1 \right).$$

Démonstration. : En numérotant les disques par couches, comme précédemment, on obtient la formule itérative :

$$(8) \quad E(h+1) = E(h) + \sum_{i=n(h)+1}^{n(h+1)} |x_i - x_1|^2.$$

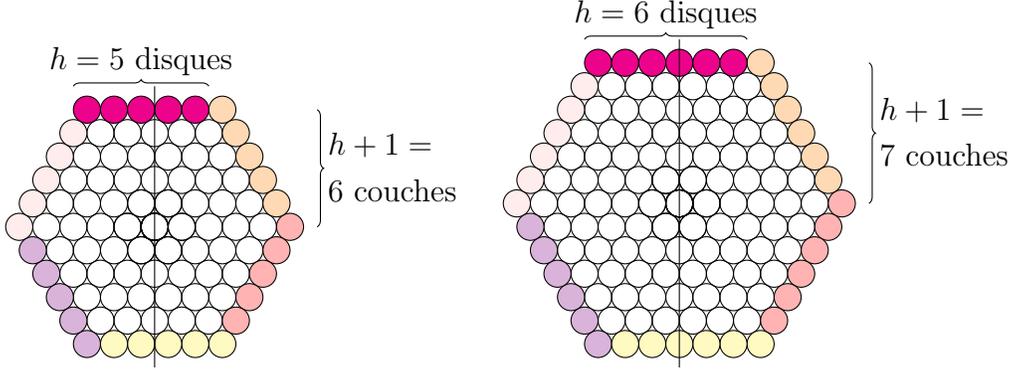


FIGURE 11. En rose, les disques extérieurs d'un pétale, qui contribuent à $1/6$ de l'accroissement de l'énergie moyenne $E(h+1) - E(h)$.

Grâce à la décomposition des hexagones en six pétales identiques illustrée en Figure 5, l'accroissement de l'énergie moyenne $E(h+1) - E(h)$ est égal à 6 fois la contribution des disques roses de la Figure 11. Si l'on fixe l'origine en $\bar{x} = x_1$, tous ces disques ont la même ordonnée, égale à $\frac{\sqrt{3}}{2}2h = \sqrt{3}h$. Leurs abscisses croissent de 2 en 2 à partir de $-h$ jusqu'à $h-2$. L'abscisse du disque orange, qui ne fait pas partie du pétale, vaut h . Nous pouvons ainsi écrire

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=n(h)+1}^{n(h+1)} |x_i - x_1|^2 &= 6 \left((-h)^2 + (-h+2)^2 + \dots + (h-2)^2 + h(\sqrt{3}h)^2 \right) \\
 &= 6 \left(\sum_{k=0}^{h-1} (-h+2k)^2 + 3h^3 \right) \\
 &= 6 \left(4 \sum_{k=0}^{h-1} k^2 - 4h \sum_{k=0}^{h-1} k + h^3 + 3h^3 \right).
 \end{aligned}$$

Puisque $\sum_{k=1}^m k^2 = \frac{m(m+1)(2m+1)}{6}$ et $\sum_{k=1}^m k = \frac{m(m+1)}{2}$, l'on obtient

$$\sum_{i=n(h)+1}^{n(h+1)} |x_i - x_1|^2 = 24 \left(\frac{(h-1)h(2h-1)}{6} - h \frac{(h-1)h}{2} + h^3 \right) = 4h (5h^2 + 1).$$

La formule (8) complétée par le résultat précédent implique :

$$E(h) = \sum_{l=0}^{h-1} 4l (5l^2 + 1) = 20 \sum_{l=1}^{h-1} l^3 + 4 \sum_{l=1}^{h-1} l.$$

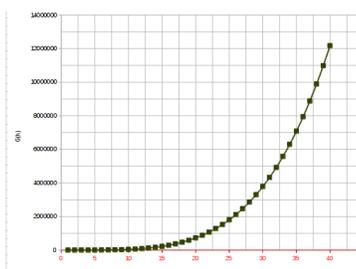
Puisque $\sum_{l=1}^m l^3 = \frac{m^2(m+1)^2}{4}$ et que $(h-1)h = \frac{n(h)-1}{3}$,

$$\begin{aligned} E(h) &= 20 \sum_{l=1}^{h-1} l^3 + 4 \sum_{l=1}^{h-1} l = 5(h-1)^2 h^2 + 2(h-1)h \\ &= (h-1)h(5h^2 - 5h + 2) \\ &= \frac{(n(h)-1)(5n(h)+1)}{9}. \end{aligned}$$

□

TABLE 1. L'énergie moyenne des quarante premières configurations hexagonales en fonction de la taille du côté de l'hexagone

h	$n(h)$	$E(h)$	h	$n(h)$	$E(h)$
1	1	0	21	1261	882840
2	7	24	22	1387	1068144
3	19	192	23	1519	1281192
4	37	744	24	1657	1524624
5	61	2040	25	1801	1801200
6	91	4560	26	1951	2113800
7	127	8904	27	2107	2465424
8	169	15792	28	2269	2859192
9	217	26064	29	2437	3298344
10	271	40680	30	2611	3786240
11	331	60720	31	2791	4326360
12	397	87384	32	2977	4922304
13	469	121992	33	3169	5577792
14	547	165984	34	3367	6296664
15	631	220920	35	3571	7082880
16	721	288480	36	3781	7940520
17	817	370464	37	3997	8873784
18	919	468792	38	4219	9886992
19	1027	585504	39	4447	10984584
20	1141	722760	40	4681	12171120



1.4. **Les grandes configurations hexagonales sont-elles encore optimales?** Revenons à la recherche de l'ensemble \mathcal{C}_{min} des configurations qui sont optimales du point de vue de l'énergie quadratique.

D'après les travaux de Temesvári [16], la marguerite $\mathbf{x}_{hex}(2)$, plus petite configuration hexagonale non triviale, est effectivement l'unique configuration qui minimise l'énergie quadratique au sein de *toutes* les configurations à $n(2) = 7$ disques : $\mathcal{C}_{min} = \{\mathbf{x}_{hex}(2)\}$. Mais qu'en est-il de la configuration hexagonale de côté $h = 3$? Est-elle optimale au sein des configurations à

19 disques ? Et les autres configurations hexagonales plus grandes ?

Nous répondrons à ces questions dans la proposition ci-dessous. La réponse est affirmative quand les configurations hexagonales sont assez *petites* ($h \leq 7$), si l'on se restreint à ne considérer que les configurations centrées sur le réseau \mathcal{T} . Pour les *grandes* configurations hexagonales ($h \geq 8$), nous exhiberons des contre-exemples qui infirment cette hypothèse.

Proposition 9. *L'empilement hexagonal de côté h est optimal au sein des configurations réticulées, si $h \leq 7$:*

$$E(h) := \mathcal{E}_{n(h)}(\mathbf{x}_{hex}(h)) = \min\{\mathcal{E}_{n(h)}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \subset \mathcal{T} \text{ configuration de } n(h) \text{ disques}\}.$$

Cela n'est plus vrai dans les autres cas : pour $h \geq 8$, $\mathbf{x}_{hex}(h) \notin \mathcal{C}_{min}$, car

$$E(h) > \min\{\mathcal{E}_{n(h)}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \text{ configuration de } n(h) \text{ disques}\}.$$

Pour démontrer cette proposition, prouvons d'abord que l'empilement hexagonal $\mathbf{x}_{hex}(h)$ est circulaire (dans un sens que nous préciserons) si et seulement si il est suffisamment petit, c'est-à-dire pour $3 \leq h \leq 7$. Puis nous utiliserons le résultat puissant de Chow qui identifie les configurations réticulaires optimales comme étant circulaires.

Définition 10. *Une configuration réticulaire de n disques, $\mathbf{x} \subset \mathcal{T}$, est appelée **circulaire** s'il existe un rayon $R > 0$ tel que tous les points du réseau triangulaire qui sont à distance plus petite que R du centre de gravité \bar{x} de la configuration appartiennent à celle-ci. Autrement dit, \mathbf{x} est circulaire si*

$$\mathbf{x} = \{x_i \in \mathcal{T}, |x_i - \bar{x}| \leq R\} \quad \text{où} \quad \bar{x} := \frac{x_1 + \cdots + x_n}{n}.$$

Lemme 11. *La configuration hexagonale de côté h est circulaire si et seulement si $h \leq 7$.*

Démonstration. Remarquons que toute configuration hexagonale est réticulaire, quelque soit sa taille : $\mathbf{x}_{hex}(h) \subset \mathcal{T}$.

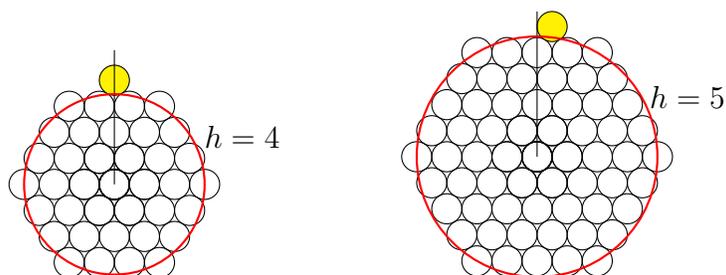
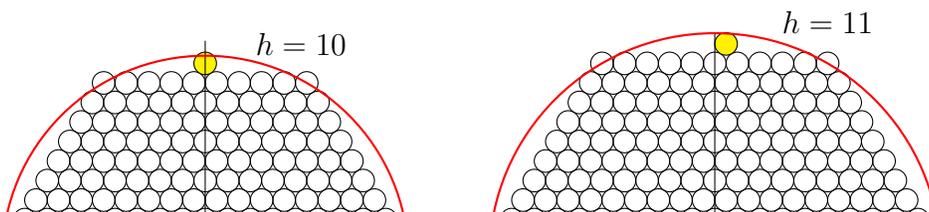
Considérons la configuration hexagonale $\mathbf{x}_{hex}(h)$ et supposons pour simplifier les notations que $x_1 = \bar{x} = 0$. Le rayon de la plus petite boule centrée en $\bar{x} = 0$ et contenant tous les centres des disques $x_2, \dots, x_{n(h)}$, est égal à $2(h-1)$. On en déduit que $\mathbf{x}_{hex}(h)$ est une configuration circulaire si et seulement si les seuls points du réseau \mathcal{T} appartenant à cette boule $B(0, 2(h-1))$ sont les points $x_1, x_2, \dots, x_{n(h)}$. Il faut distinguer deux cas, illustrés par les figures 12 et 13.

Cas où h est pair : si $B(0, 2(h-1)) \cap \mathcal{T} \neq \emptyset$, c'est que l'on peut poser un disque au milieu de chacun des côtés de telle sorte que son centre soit dans la boule $B(0, 2(h-1))$. Cela revient à dire que le point de coordonnées $(0, h\sqrt{3})$ est dans cette boule, soit :

$$\begin{aligned} |(0, h\sqrt{3})| \leq 2(h-1) &\Leftrightarrow 4(h-1)^2 - 3h^2 \geq 0 \\ &\Leftrightarrow h^2 - 8h + 4 \geq 0 \\ &\Leftrightarrow h \geq \frac{2}{2 - \sqrt{3}} \approx 7,46. \end{aligned}$$

En conclusion, h doit être au moins égal à 8.

Cas où h est impair : si $B(0, 2(h-1)) \cap \mathcal{T} \neq \emptyset$, c'est que l'on peut poser sur le côté supérieur

FIGURE 12. Configurations hexagonales circulaires, $h \leq 7$.FIGURE 13. Configurations hexagonales non circulaires, $h \geq 8$.

de l'hexagone un disque centré en $(1, h\sqrt{3})$ de telle sorte que ce centre soit encore dans la boule $B(0, 2(h-1))$:

$$\begin{aligned} |(1, h\sqrt{3})| \leq 2(h-1) &\Leftrightarrow 4(h-1)^2 - 3h^2 - 1 \geq 0 \\ &\Leftrightarrow h^2 - 8h + 3 \geq 0 \\ &\Leftrightarrow h \geq 4 + \sqrt{13} \approx 7,6. \end{aligned}$$

Cela signifie que h doit être au moins égal à 9. \square

Pour finir de prouver la proposition 9, on s'appuie sur la caractérisation des empilements réticulaires optimaux, donnée et prouvée par Chow en Proposition 3 de l'article [3]. Ceux-ci sont circulaires (en anglais : *circular cluster*). Ainsi, pour $3 \leq h \leq 7$, l'empilement hexagonal est circulaire et donc optimal au sein des réticulaires.

Pour $h \geq 8$, la preuve constructive du lemme 11 nous montre que l'hexagone dont on "arondit" le profil en plaçant les disques des coins au milieu des faces extérieures a une énergie plus petite que l'hexagone de départ. La (ou les) configuration(s) optimale(s) de cardinal $n(h)$ ne peu(ven)t donc pas être hexagonale(s).

POINT SUR LA SITUATION.

Puisque $\mathbf{x}_{hex}(h)$ n'est pas optimale si h est supérieur à 7, quelle est donc la forme des grandes configurations optimales, c'est-à-dire formées de n disques pour $n > n(7) = 127$? Cette question aujourd'hui sans réponse complète, a donné lieu à de nombreuses conjectures. Entre autres, Graham et Sloane ont proposé dans [11] trois méthodes différentes de placement progressif des disques visant à limiter au maximum l'accroissement d'énergie généré par l'addition d'un disque supplémentaire. Chow [3] a développé leur algorithme, qui est partiellement aléatoire dans le sens où l'emplacement du disque rajouté à la couche précédente peut être choisi au hasard parmi plusieurs possibilités, selon une loi uniforme.

Toutes ces tentatives ingénieuses sont cependant limitées à la construction de configurations réticulaires. Puisqu'il semble hors d'atteinte aujourd'hui d'imaginer un algorithme semblable qui générerait des configurations optimales non réticulaires, nous proposons dans la deuxième partie de cet article une approche probabiliste fondamentalement différente.

2. DYNAMIQUE ALÉATOIRE DE DISQUES ET LEUR ÉTAT D'ÉQUILIBRE

Dans cette partie nous allons approximer les grandes configurations optimales de disques - de géométrie typiquement non hexagonales - via une dynamique aléatoire de ces disques. Ce mouvement complexe se stabilise en temps long, par construction, sur des configurations d'énergie proche de la minimale. Cette méthode, introduite dans [2], nous libère ainsi de la contrainte de géométrie réticulaire inhérente aux précédentes méthodes quasi-déterministes.

2.1. Mouvement aléatoire de disques s'attirant mutuellement. Considérons n disques, avec n grand. Chaque disque oscille indépendamment dans le plan de façon aléatoire et très chaotique, tout en étant soumis à une force d'attraction de la part de chacun des $(n-1)$ autres disques. De plus, quand deux disques entrent en collision, ne pouvant pas se chevaucher, ils vont se repousser selon les lois usuelles de la physique régissant une collision élastique.

Chacun des centres des n disques $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^2$ va donc évoluer en fonction du temps t selon une certaine trajectoire planaire aléatoire. Plus précisément, les fonctions $t \mapsto x_i(t)$, $1 \leq i \leq n$, vont satisfaire le système suivant d'équations intégrales stochastiques :

$$(*) \left\{ \begin{array}{l} x_i(t) = \underbrace{x_i(0)}_{\text{position initiale}} + \underbrace{W_i(t)}_{\text{oscillation}} + \overbrace{a \int_0^t \sum_{j=1}^n (x_j(s) - x_i(s)) ds}^{\text{attraction des autres disques}} + \overbrace{\sum_{j=1}^n \int_0^t (x_i(s) - x_j(s)) dL_{ij}(s)}^{\text{répulsion due aux chocs}}, \\ L_{ij}(0) = 0, \quad L_{ij} \equiv L_{ji}, \quad L_{ii} \equiv 0, \quad \text{et} \quad \int_0^t \mathbb{1}_{|x_i(s) - x_j(s)| \neq 2} dL_{ij}(s) = 0, \\ \text{pour tout } i \in \{1, \dots, n\} \text{ et } t \geq 0. \end{array} \right.$$

Examinons l'effet des 4 termes ci-dessus.

2.1.1. Position initiale. La position des n disques à l'instant 0 est déterminée par celle de leurs centres $x_1(0), \dots, x_n(0)$ qui satisfont $|x_i(0) - x_j(0)| \geq 2$ pour toute paire $i \neq j$. Elle forme une configuration initiale $\mathbf{x}(0)$.

2.1.2. Oscillation aléatoire brownienne. L'oscillation que chaque disque effectue au cours du temps est un mouvement aléatoire appelé *brownien* en l'honneur du botaniste R. Brown, qui découvrit en 1828 au bout du microscope le mouvement totalement désordonné effectué par des grains de pollen en suspension dans un liquide. Ce mouvement ne fut expliqué et étudié mathématiquement que bien plus tard, en particulier par Einstein, Smoluchowsky puis Wiener (d'où l'utilisation de la lettre "W" pour le noter). A tout instant, chaque disque change spontanément la direction de son mouvement, sans préférence de cap et indépendamment des autres disques. Ainsi sa "vitesse" est de facto infinie et sa trajectoire est une fonction fractale, nulle part dérivable, cf Figure 14.

5. *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen;*
von A. Einstein.

In dieser Arbeit soll gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten „Brownischen Molekularbewegung“ identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

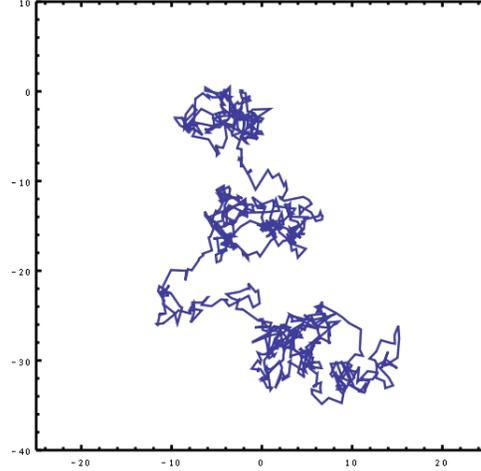


FIGURE 14. Article d’Albert Einstein sur le mouvement brownien (1905); à droite, simulation d’une trajectoire possible du mouvement brownien planaire.

2.1.3. *Force d’attraction entre les disques.* A chaque instant s , le disque i est attiré par chacun des autres disques j avec une force qui est proportionnelle au vecteur $x_j(s) - x_i(s)$ qui les sépare, cf Figure 15. Le coefficient de proportionalité a est appelé coefficient d’attraction. Il jouera un grand rôle dans ce qui suit.

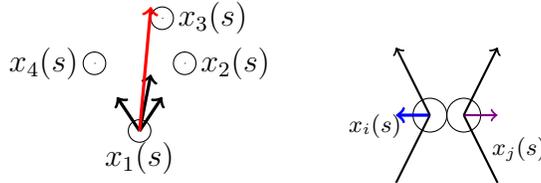


FIGURE 15. A gauche, forces d’attractions exercées à l’instant s par chacun des disques $x_2(s)$, $x_3(s)$ et $x_4(s)$ sur $x_1(s)$; en rouge, leur somme. A droite : mouvements de $x_i(s)$ et $x_j(s)$ juste avant et juste après leurs chocs. En bleu, la force de collision élastique qui éloigne x_i de x_j .

2.1.4. *Effet des chocs entre les disques.* Si, à l’instant s , le disque i se rapproche du disque j à tel point qu’il le touche, $|x_i(s) - x_j(s)| = 2$, il est immédiatement repoussé par lui afin que les disques ne se chevauchent pas. Cette force de répulsion, suivant les lois d’une collision élastique, est colinéaire au vecteur $x_i(s) - x_j(s)$ (en bleu dans la figure 15). Elle est modélisée globalement par le terme additif $\int_0^t (X_i(s) - X_j(s)) dL_{ij}(s)$. Son intensité sera liée au nombre et aux instants (aléatoires) de chocs entre i et j , ce qui justifie que l’intégrand soit un processus aléatoire croissant, noté $L_{ij}(t)$ et appelé *temps local de collision*. La mesure associée dL_{ij} n’a pas de densité par rapport à la mesure de Lebesgue, elle ne charge que les instants où les disques i et j se touchent :

$$\int_0^t \mathbb{1}_{|x_i(s) - x_j(s)| \neq 2} dL_{ij}(s) = 0.$$

La condition initiale $L_{ij}(0) = 0$ est arbitraire. La symmétrie $L_{ij} \equiv L_{ji}$ est dans la nature même du problème : le choc entre x_i et x_j a un impact symétrique sur le comportement de x_i et sur celui de x_j . (Dans la figure 15, les flèches rose et bleue sont opposées). Enfin, puisqu'une particule ne peut entrer en choc avec elle-même, $L_{ii} \equiv 0$.

L'existence d'une solution au système (*) n'est pas un problème simple, à cause de la présence des temps locaux de collision, qui sont eux-mêmes des inconnues. Le premier résultat certifiant l'existence d'une telle dynamique aléatoire de n boules sans attraction mutuelle ($a = 0$) a été montré par Saisho et Tanaka en 1986, dans [13]. Les auteures M.F. et S.R. ont amélioré et étendu leur méthode, permettant ainsi de traiter le cas d'un système *infini* de boules en interaction très générale, cf. [9].

2.2. Stabilisation sur des empilements quasi-optimaux. La dynamique (*) est remarquable à bien des égards.

Tout d'abord, remarquons que la force d'attraction instantannée entre les disques peut être interprétée (à un coefficient près) comme la dérivée de l'énergie quadratique puisque

$$a \sum_{j=1}^n (x_j - x_i) = -\frac{an}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{E}_n(\mathbf{x}).$$

La dynamique (*) est ainsi une dynamique dite *gradient*, dont on connaît quelques propriétés temporelles. En particulier, la seconde auteure a prouvé dans le Théorème 3.3 de [7] que si l'on prend des positions initiales aléatoires $x_1(0), \dots, x_n(0)$ distribuées selon une loi μ_a judicieusement choisie, le mouvement des disques montre un comportement stationnaire, c'est-à-dire que sa loi à chaque instant est la même. De fait, μ_a est la mesure uniforme sur l'ensemble des configurations de n disques, biaisée par un facteur de *densité* égal à $\exp(-an \mathcal{E}_n(\mathbf{x}))$. En d'autres termes, la position (aléatoire) des disques de loi μ_a est un état d'équilibre sous la dynamique (*).

A ce point de notre raisonnement, deux questions s'imposent, liées aux deux paramètres, le temps t et l'intensité de l'attraction a .

— Est-on en droit d'espérer que si l'on fixe les positions initiales des disques de façon quelconque déterministe $\mathbf{x}(0) = \{x_1(0), \dots, x_n(0)\}$, le système de disques évolue au bout d'un temps t très long vers l'état d'équilibre identifié plus haut ?

Autrement dit, y a-t-il stabilisation de la dynamique aléatoire de disques vers la répartition aléatoire μ_a .

— Les configurations \mathbf{x} les plus probables pour la loi μ_a sont celles pour lesquelles la densité $e^{-an \mathcal{E}_n(\mathbf{x})}$ est maximale, c'est-à-dire celles appartenant à \mathcal{C}_{min} , celles dont l'énergie $\mathcal{E}_n(\mathbf{x})$ est minimale. Peut-on espérer atteindre les configurations de \mathcal{C}_{min} en augmentant le coefficient d'attraction a , de telle sorte que la probabilité de toute configuration suboptimale deviendrait négligeable ?

Nous répondons positivement à ces deux questions :

fixons une configuration initiale quelconque du système de n disques. L'on peut toujours choisir un coefficient d'attraction a suffisamment grand pour qu'au bout d'une évolution temporelle suffisamment longue selon la dynamique (*), ce système soit, avec une probabilité aussi grande que l'on souhaite, dans une configuration aussi proche que l'on veut d'une

configuration optimale. Cela est formalisé dans l'énoncé qui suit. La distance qui y apparaît est mesurée par l'écart entre l'énergie de la configuration $\mathbf{x}(t)$ et l'énergie minimale.

Théorème 12. *Soit $\mathbf{x}(0)$ une configuration initiale quelconque.*

Pour tout $\varepsilon, \eta > 0$ il existe $A > 0$ et $T > 0$ tels que, pour tout $a > A$ et $t > T$,

$$\text{Proba} \left(\exists \mathbf{x}_{\min} \in \mathcal{C}_{\min}, \text{dist}(\mathbf{x}(t), \mathbf{x}_{\min}) \leq \eta \right) \geq 1 - \varepsilon.$$

Démonstration. Grossissons légèrement l'ensemble \mathcal{C}_{\min} en y incluant les configurations η -optimales :

$$\mathcal{C}_{\min}^{\eta} := \{\mathbf{x} ; \mathcal{E}_n(\mathbf{x}) \leq \mathcal{E}_n(\mathbf{x}_{\min}) + \eta\}.$$

Pour simplifier, on note $\underline{\mathcal{E}}_n := \mathcal{E}_n(\mathbf{x}_{\min})$.

$$\begin{aligned} \mu_a((\mathcal{C}_{\min}^{\eta})^c) &= \frac{\int e^{-\frac{an}{2} \mathcal{E}_n(\mathbf{x})} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) > \underline{\mathcal{E}}_n + \eta} d\mathbf{x}}{\int e^{-\frac{a}{2} n \mathcal{E}_n(\mathbf{x})} d\mathbf{x}} \\ &\leq \frac{\int e^{-\frac{an}{2} (\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) - \underline{\mathcal{E}}_n - \eta)} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) > \underline{\mathcal{E}}_n + \eta} d\mathbf{x}}{\int e^{-\frac{an}{2} (\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) - \underline{\mathcal{E}}_n - \eta)} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) \leq \underline{\mathcal{E}}_n + \eta} d\mathbf{x}} \\ &\leq \frac{1}{\int \mathbb{1}_{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) \leq \underline{\mathcal{E}}_n + \eta} d\mathbf{x}} \int e^{-\frac{an}{2} (\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) - \underline{\mathcal{E}}_n - \eta)} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) > \underline{\mathcal{E}}_n + \eta} d\mathbf{x} \end{aligned}$$

Ceci tend vers 0 quand a tend vers l'infini. Donc, pour a suffisamment grand, la probabilité de $\mathcal{C}_{\min}^{\eta}$ sous μ_a est aussi grande que l'on souhaite.

D'autre part, pour toute configuration initiale $\mathbf{x}(0)$ et pour toute attraction a fixée, la loi au temps t du système des n disques converge, quand t tend vers l'infini, vers μ_a . Ce résultat de stabilisation, très délicat même s'il est naturel, a été démontré dans [2] pour $n = 3$ disques. Sa généralisation à un nombre n quelconque de disques est le sujet de l'article [10] en cours de rédaction par les auteures M.F. et S.R. On a donc

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \text{Proba} \left(\mathbf{x}(t) \in \mathcal{C}_{\min}^{\eta} \right) = \mu_a(\mathcal{C}_{\min}^{\eta}).$$

L'on obtient le résultat final en utilisant la continuité de l'énergie, qui implique que l'ensemble $\mathcal{C}_{\min}^{\eta}$ des configurations η -optimales se rapproche de \mathcal{C}_{\min} quand η tend vers 0. \square

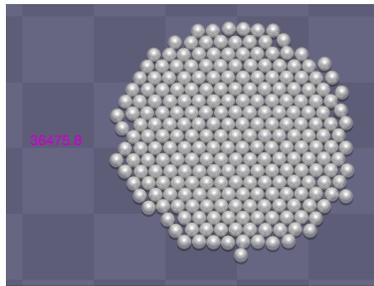


FIGURE 16. Configuration quasi-optimale de $n = 250$ disques

Les lecteurs intéressés par la visualisation dynamique de cette convergence sont invités à visiter la page web http://mfradon.plil.fr/empilements_de_disques.html où des simulations illustrent notre propos.

Remerciements La première auteure a effectué en mai-juin 2016 un stage au laboratoire de recherche mathématique Paul Painlevé de l'Université de Lille, qui s'inscrivait dans le cadre de sa première année d'études d'ingénieurs ProTechnicale. Certains des résultats présentés dans cet article sont le fruit de ce stage. L'équipe de Probabilité et Statistiques qui l'accueillit est ici chaleureusement remerciée.

RÉFÉRENCES

- [1] K. Böröczky : Finite packing and covering. *Cambridge tracts in mathematics* 154, Cambridge University Press (2004).
- [2] P. Cattiaux, M. Fradon, A.M. Kulik et S. Roelly : Longtime behaviour of stochastic hard ball systems. *Bernoulli* **22-2** (2016), 681–710
- [3] T. Y. Chow : Reflecting Penny-packings with minimal second moments. *Combinatorica* **15** (1995), 151-158
- [4] J.H. Conway et N.J.A. Sloane : Sphere Packings, Lattices and Groups *Grundlehren der math. Wiss.* 290, Springer-Verlag, Berlin-New-York third ed. (1993).
- [5] J.H. Conway et N.J.A. Sloane : A fast encoding method for lattice codes and quantizers. *IEEE Transactions on Information Theory* **58-7** (2012), 4645-4659
- [6] P. Diaconis, G. Lebeau et L. Michel : Geometric analysis for the Metropolis Algorithm on Lipschitz Domains. *Inventiones mathematicae* **185** (2011), 239-281
- [7] M. Fradon : Brownian dynamics of globules. *Electronic Journal of Probability* **15-6** (2010), 142-161
- [8] M. Fradon et S. Roelly : Infinitely many Brownian globules with Brownian radii. *Stochastics and Dynamics* **10-4** (2010), 591-612
- [9] M. Fradon et S. Roelly : Infinite system of Brownian balls with interaction : the non-reversible case. *ESAIM : Probability and Statistics* **11** (2007), 55-79
- [10] M. Fradon et S. Roelly : Brownian dynamics as approximation of the finite packing problem. *En cours de rédaction* (2017)
- [11] R.L. Graham et N.J.A. Sloane : Penny-packing and two-dimensional codes. *Discrete and Computational Geometry* **5** (1990), 1-11
- [12] J. Karout, E. Agrell, K. Szczerba et M. Karlsson : Optimizing constellations for single-subcarrier intensity-modulated optical systems. *IEEE Transactions on Information Theory* **58-7** (2012), 4645-4659
- [13] Y. Saisho et H. Tanaka : Stochastic Differential Equations for Mutually Reflecting Brownian Balls. *Osaka Journal of Mathematics* **23** (1986), 725-740
- [14] N.J.A. Sloane, R.H. Hardin, T.D.S. Duff et J.H. Conway : Minimal-Energy Clusters of Hard Spheres. *Discrete and Computational Geometry* **14** (1995), 237-259
- [15] N.J.A. Sloane et B.K. Teo : Theta series and magic numbers for close-packed spherical clusters. *Journal of Chemical Physics* **83** (1985), 6520-6534
- [16] A. H. Temesvári : Távolságok hatványösszegének extrémumáról. (Sur les extrema de sommes de puissances de distances). *Matematikai Lapok* **25** (1974), 329-342 (en hongrois).