

CHARLOTTE DOMBROWSKY

Date: 10 juin 2016.

Du 2 mai 2016 jusqu'au 10 juin 2016, j'ai fait un stage dans le laboratoire Paul Painlevé de l'université de Lille 1. Ce stage était inscrit dans le cadre de l'année de préparation et orientation dans les études d'ingénieurs ProTechnicale. J'avais donc passé le baccalauréat l'année précédente (en 2015), mais je n'avais pas encore commencé des études de mathématiques.

Ce rapport est le résultat de mon stage.

Je remercie Myriam Fradon pour son travail d'encadrement, pour avoir réussi de m'expliquer une équation mathématique qui était supérieur à mon niveau mathématique et pour avoir donné des innombrables conseils concernant le raisonnement de même que la rédaction. Je remercie aussi Sylvie Roelly qui a rendu ce stage possible et qui m'a aidé à élargir mon horizon mathématique. Je remercie finalement l'équipe de Probabilité et Statistique, surtout le directeur David Dereudre, pour le chaleureux accueil.

TABLE DES MATIÈRES

1. Particules en interaction attractive	3
1.1. L'empilement compact et le "Kissing Number"	3
1.2. La description mathématique du mouvement des particules	5
1.3. Ergodicité et niveau énergétique	8
2. Étude expérimentale	9
2.1. Recherches des conditions expérimentales optimales	9
2.2. Recherche expérimentale de l'énergie minimale de sept sphères	12
2.3. Recherche expérimentale de l'énergie minimale de dix-neuf sphères	13
2.4. Les réseaux hexagonaux	15
3. Configurations hexagonales	15
3.1. Niveau énergétique de configuration en hexagone de sept et dix-neuf particules	16
3.2. Etude du niveau énergétique du cas général	27
4. Conclusion	35
Références	40

1. PARTICULES EN INTERACTION ATTRACTIVE

1.1. L'empilement compact et le "Kissing Number".

 $L'empilement \ compact$. L'empilement compact est la manière d'empiler des sphères en essayant d'aboutir à la plus grande densité possible. En général, on parle de sphères de même rayon.



FIGURE 1. L'empilement de boulets de canons

Une première approche à ce sujet a été faite par le mathématicien Kepler, mieux connu pour ses découvertes en physique. En 1611, il fut demandé comment on peut empiler des boulets de canons le plus efficacement, c'est-à-dire le plus densément, possible (figure 1). Kepler ne pouvait pas le prouver, mais en comparant l'empilement hexagonal compact et l'empilement cubique à faces centrées, que nous allons expliquer plus loin, à d'autres structures d'empilement, il conjectura que ces façons étaient le plus efficace possible.

Deux façons "naturelles" existent d'empiler des sphères (voir 2) :

- l'empilement cubique à faces centrées
- -l'empilement hexagonal compact

Lorsqu'on place trois sphères se touchant sur un plan, on peut placer une quatrième sphère dans le creux formé par la première couche. Ainsi on peut obtenir deux couches de sphères. Pour la troisième, il existe deux possibilités : Soit, on la déplace par rapport à la première couche et crée ainsi un empilement A-B-C-A-B-C (c'est donc un empilement cubique à faces centrées) ; soit on place la troisième couche comme la première et crée ainsi un empilement A-B-A-B (c'est donc un empilement hexagonal compact). Peu importe l'empilement choisi, chaque sphère touche alors le nombre maximal d'autres sphères, soit douze, (le "Kissing number") et l'empilement a une densité de $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \cong 74,048\%$.



FIGURE 2. L'empilement cubique à faces centrées et l'empilement hexagonal compact

Il fut démontré par Carl Friedrich Gauss (1777 - 1855) que ces empilements étaient les plus denses empilements en réseau. En 1953, le mathématicien hongrois Laszlo Toth arriva à réduire le problème à un nombre très grand mais fini de cas d'empilement. En 1998, Thomas Hales publia une première preuve comprenant 250 pages et des banques de données de plus de 3GB de sauvegarde. Comme cette preuve se basait sur des calculs d'ordinateurs, la preuve ne fut pas acceptée entièrement par la communauté mathématique. Seulement en 2015, Hales a pu démontrer formellement la conjecture de Kepler.

Bien que ce problème ait été résolu, beaucoup d'autres questions liées à la densité existent. On étudie la différence entre la densité maximale d'un empilement au hasard ou bien la densité minimale qu'on réalise avec des sphères restant en contact. Et existe-t-il une formule qui calcule pour un cylindre de rayon r_1 et de hauteur h le nombre maximal de sphères de même rayon r_2 qu'on peut mettre dedans? Et quelle est la densité maximale qu'on peut atteindre avec d'autres corps comme des tétraèdres?

Même si on ne se pose plus ces questions pour empiler des boulets de canons, elles sont toujours en lien avec des secteurs appliqués, par exemple la logistique ou la transmission des signaux numériques dans l'espace.

Un autre domaine d'application est la configuration de particules. En étudiant celle-ci, il se pose plusieurs questions : Existe-il une ou plusieurs configurations plus stables que les autres configurations ? Cette configuration est-elle celle avec la plus grande densité ? Les particules prennent-elles cette position, venant de n'importe quelle position de départ ? Qu'est le niveau énergétique de cette configuration ?

Avant d'étudier le niveau énergétique de certaines configurations de particules, nous allons définir le "Kissing number".

Le "Kissing Number". Le "Kissing Number" est défini comme le nombre maximal de sphères non chevauchantes touchant en même temps une autre sphère dans une dimension donnée, comme on peut le voir sur la figure 3. Dans un empilement en réseau, ce nombre est pour toutes les sphères le même, mais il varie quant à un empilement au hasard. Pour toutes les dimensions jusqu'à 24, on a pu fixer un intervalle dans lequel il se trouve, pour les dimensions 1,2,3,4 8 et 24, on a trouvé un nombre exact.



FIGURE 3. "Kissing numbers" dans les dimensions d = 1 (2), d = 2 (6) et d = 3 (12)

1.2. La description mathématique du mouvement des particules. Nous allons par la suite modéliser le mouvement des particules, représentées par des sphères, par une équation publiée en 2016 par Patrick Cattiaux, Myriam Fradon, Alexei M. Kulik et Sylvie Roelly.

Consider *n* hard balls with radius *r* and centers $X_1, ..., X_n$ located in \mathbb{R}^d for some $d \ge 2$. They are moving randomly and when they meet, they are performing elastic collisions. We are interested in the long time behaviour of such dynamics, where the centers of the balls

are moving according to a Brownian motion in a Gaussian type pair potential. It is modelized by the following system of stochastic differential equations with reflections.

for
$$i \in \{1, \dots, n\}, t \in \mathbb{R}^+$$
,
 $X_i(t) = X_i(0) + W_i(t) - a \sum_{j=1}^n \int_0^t (X_i(s) - X_j(s)) ds + \sum_{j=1}^n \int_0^t (X_i(s) - X_j(s)) dL_{ij}(s),$
 $L_{ij}(0) = 0, \quad L_{ij} \equiv L_{ji} \quad \text{and} \quad L_{ij}(t) = \int_0^t \mathbb{1}_{|X_i(s) - X_j(s)| = 2r} dL_{ij}(s), \quad L_{ii} \equiv 0,$

where $W_1, ..., W_n$ are *n* independent standard Wiener processes. The local time L_{ij} describes the elastic collision (normal mutual reflection) between balls *i* and *j*. The parameter *a* is assumed to be non-negative. Therefore, the drift term derives from an attractive quadratic potential.

FIGURE 4. Equation mathématique décrivant le mouvement de particules en fonction du temps - Extrait de [1] Longtime behaviour of stochastic hard ball systems

En théorie, l'équation est définie dans toutes les dimensions. Or, si on fait des études en dimension 1, les particules ne peuvent pas changer d'ordre. Si un choc a lieu, alors les particules repartent dans des différentes directions, mais sans changer d'ordre comme on peut le voir sur la figure 5 à la page 6. Pour notre sujet, l'analyse des configurations, nous allons donc choisir une dimension plus élevée.

$$\underbrace{(1) \rightarrow \leftarrow (2) \qquad \leftarrow (3)}_{\leftarrow (1)} \underbrace{\leftarrow (1) (2) \rightarrow \leftarrow (3)}_{\leftarrow (3)}$$

FIGURE 5. Ordre et mouvement de trois particules en dimension 1 avant et après un choc entre la particule 1 et la particule 2

L'équation calcule un vecteur de position $X_i(t)$ de la particule *i* à l'instant *t*. L'équation calcule ce vecteur pour *n* particules.

Nous pouvons découper l'équation de la façon suivante :

$$\begin{cases} \text{for } i \in \{1, \cdots, n\}, t \in \mathbb{R}^+, \\ \text{position initiale} \quad \text{mouvement brownien} \\ X_i(t) = \underbrace{X_i(0)}_{k_i(0)} + \underbrace{W_i(t)}_{k_i(t)} - \underbrace{a \int_0^t \sum_{j=1}^n (X_i(s) - X_j(s)) ds}_{j=1} + \underbrace{\int_0^t \sum_{j=1}^n (X_i(s) - X_j(s)) dL_{ij}s}_{j=1} \\ L_{ij}(0) = 0, \quad L_{ij} \equiv L_{ji} \quad \text{and} \quad L_{ij}(t) = \int_0^t \mathbb{1}_{|X_i(s) - X_j(s)| = 2r} dL_{ij}(s), \quad L_{ii} \equiv 0, \end{cases}$$

Nous voyons donc que ces quatre parties ont une influence sur le mouvement des particules :

— La position initiale

- Le mouvement brownien
- La force d'attraction des autres particules
- La possibilité de choc avec d'autres particules

La position initiale. La position initiale est décrite par $X_i(0)$. Pour utiliser l'équation, on doit déclarer le nombre de particules qu'on veut observer et leurs positions.

Le mouvement brownien. Le mouvement brownien est un mouvement lié au hasard. C'est en même temps un phénomène naturel et un objet mathématique :

— En 1827, le botaniste Robert Brown, découvrit ce mouvement désordonné d'une particule en suspension dans un liquide/gaz. Ce mouvement décrit le fait qu'à chaque instant, la particule change spontanément la direction de son mouvement.

Le trajet qu'il peut générer en dimension 1 et 2 sont représenté par la figure 6. Ce mouvement dépend de la température : plus elle est chaud, plus la particule bouge.

— Gauss le décrit plus tard avec une fonction fractale, nulle part dérivable.



FIGURE 6. Mouvement brownien unidimensionnel en fonction du temps et mouvement brownien en deux dimensions

La force d'attraction des autres particules. Chaque particule est attirée par les autres particules. Pour chaque particule X_i à un instant s, la vitesse d'attraction due à une autre particule X_j est $F = a(X_i(s) - X_j(s))$ où a est le coefficient d'attraction. La somme des vitesses dues aux particules X_j est la force d'attraction totale sur X_i à l'instant s. Pour pouvoir calculer la force d'attraction à l'instant (t > s), nous additionnons les forces d'attraction précédentes, c'est-à-dire nous intégrons toutes les forces d'attraction des instants s. D'où l'expression $a \int_0^t \sum_{i=1}^n (X_i(s) - X_j(s)) ds$. Plus a, le coefficient de la force d'attraction, est

grand, plus la vitesse d'attraction est grande.

Ce phénomène peut être illustré par la figure 7.

FIGURE 7. Forces d'attractions de $X_2(s)$, $X_3(s)$ et $X_4(s)$ sur $X_1(s)$

La possibilité de choc avec les autres particules. L'éventuel choc de deux particules est décrit par l'expression :

$$\begin{cases} \int_0^t \sum_{j=1}^n (X_i(s) - X_j(s)) dL_{ij}(s) \\ L_{ij}(0) = 0, \quad L_{ij} \equiv L_{ji} \quad \text{and} \quad L_{ij}(t) = \int_0^t \mathbb{1}_{|X_i(s) - X_j(s)| = 2r} \, dL_{ij}(s), \quad L_{ii} \equiv 0 \end{cases}$$

Pour décrire le choc, l'équation utilise un temps local.

- Avant le début du mouvement, si t = 0, il n'y a pas de choc. Donc $L_{ij}(0) = 0$
- Si $X_i(s)$ a un choc avec $X_j(s)$, alors forcément $X_j(s)$ a aussi un choc avec $X_i(s)$. D'où $L_{ij} \equiv L_{ji}$
- Le fait que $L_{ij}(t) = \int_0^t \mathbb{1}_{|X_i(s) X_j(s)| = 2r} dL_{ij}$ signifie qu' il n'y a pas de choc si $|X_i X_j| > 2r$.

— Une particule ne peut entrer en choc avec elle-même : $L_{ii} \equiv 0$

Nous pouvons illustrer cette partie par la figure 8 à la page 8.



FIGURE 8. Trajets de deux particules après un choc

1.3. Ergodicité et niveau énergétique.

Definition 1. On appelle configuration x une collection finie de n particules dans l'espace euclidien.

$$x = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\} \in (\mathbb{R}^d)^n$$

Definition 2. L'ergodicité est une caractéristique des systèmes dynamiques. Dans notre cas, nous allons qualifier un système d'un nombre donné de particules comme ergodique, si au bout d'un certain temps, le système des particules a un comportement stable, indépendant de la configuration de départ.

Definition 3. On appelle énergie E(n) de la configuration x avec n particules la somme des carrés des distances entre chaque paire.

$$E(n) = \sum_{0 \le i \le j \le n} |x_i - x_j|^2$$

On appelle énergie moyenne \mathcal{E} l'énergie divisée par le nombre n de particules.

$$\mathcal{E}(n) = \frac{E(n)}{n}$$

On appelle interaction énergétique moyenne \mathfrak{E} l'énergie divisée par le nombre de paires de particules.

$$\mathfrak{E}(n) = \frac{E(n)}{(n \times (n-1)/2)}$$

A partir de maintenant nous allons travailler en dimension 2.

Patrick Cattiaux, Myriam Fradon, Alexei M. Kulik et Sylvie Roelly ont démontré dans leur publication l'ergodicité de deux et de trois particules vers des positions qu'on peut voir sur la figure 9. Ces positions sont celles où l'énergie est la plus petite possible.

L'énergie est
$$E(2) = 4r^2$$
 L'énergie est $E(3) = 12r^2$

FIGURE 9. Configuration finale de deux et de trois particules

Les chercheuses ont de plus pu démontrer qu'en effet, si un système est composé de plus de trois sphères, on peut le découper à chaque instant en plusieurs systèmes avec moins de trois sphères dont on pourra étudier la convergence par récurrence.

On connaît les configurations des particules avec une énergie minimale jusqu'à 7 particules.

Pour sept particules, il a été démontré que c'est la configuration en hexagone. Il est probable qu'elle l'est pour les nombres hexagonaux de particules. Comme, grâce à leur symétrie ces configurations sont faciles à étudier, nous allons par la suite nous intéresser aux configurations des nombres hexagonaux de particules.

Nous allons étudier le niveau énergétique de ces configurations en analysant particulièrement celui de 7 et 19 particules. Après avoir fait des expériences grâce à des simulations, nous allons calculer le niveau énergétique de 7 et 19 particules, puis celui de tous les hexagones.



FIGURE 10. L'héxagone régulier composé de sept cercles

2. Étude expérimentale

2.1. Recherches des conditions expérimentales optimales. Nous avons fait des simulations grâce à un programme, écrit par Myriam Fradon à partir de l'équation que nous avons décrite dans la première partie.

Le programme permet de faire des simulations de sphères, qui représentent les particules, en deux dimensions. Nous avons plusieurs paramètres, par exemple :

- le nombre de sphères
- la position de départ des sphères
- le rayon
- le coefficient de la force d'attraction
- l'écart-type de la distance par courue par unité de temps par sphère par le mouvement brownien, donc la racine de la température (\sqrt{T})
- la durée de l'expérience

Le programme affiche de plus l'interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(n)$.

Le but des expériences étaient de trouver une première approximation de l'énergie minimale de 7 et de 19 particules et de trouver la configuration à étudier.

Pour faire les expériences, nous avons fait des tests, afin de trouver les conditions expérimentales les plus adaptées pour trouver la configuration d'énergie minimale.

Nous avons fait d'abord varier le coefficient de la force d'attraction, puis le \sqrt{T} , comme on peut le voir sur les figures 11 et 12.



FIGURE 11. Test : Influence du coefficient de la force d'attraction sur l'interaction énergétique moyenne minimale de sept sphères - Nous avons fait varier le coefficient de la force d'attraction. Nous avons remarqué que plus ce coefficient est grand, plus l'énergie devient petite. Pour trouver l'énergie minimale, nous allons donc prendre un coefficient plus grand que 0, 1.



FIGURE 12. Test : Influence de \sqrt{T} sur l'interaction énergétique minimale de sept sphères - Nous avons fait varier \sqrt{T} pour tester comment l'énergie varie. Nous remarquons que \sqrt{T} a une plus grande influence sur l'énergie que le coefficient de la force d'attraction. Nous allons donc dans nos expériences faire varier \sqrt{T} .

Nous avons ensuite testé différentes positions de départ. Pour sept particules, l'influence de la position de départ est négligeable, elles se mettent toujours en configuration d'hexagone. Or, pour dix-neuf particules, la position de départ influence la configuration finale. En partant des configurations non symétriques ou avec une particule au milieu et les autres particules à distances variables autour, il ne se forme pas une configuration en hexagone au bout d'un temps de calcul de plusieurs heures.

Nous avons donc finalement décidé, de fixer le coefficient de la force d'attraction à 0,3, afin qu'il ne soit ni trop petit, ni trop élevé et de faire varier \sqrt{T} de 1 à 0,1 avec des pas de 0,1. Pour chaque pas, nous avons lancé 10 simulations.

Les configurations de départ choisies seront précisées.

Avant d'étudier les dynamiques des système de 7 et 19 sphères, nous avons mesuré l'interaction énergétique moyenne, si on met sept ou dix-neuf particules l'une à côté de l'autre. Nous avons trouvé les résultats suivants :



FIGURE 13. Interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(7)=37,33r^2$ de sept particules une à côté de l'autre



FIGURE 14. Interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(7) = 253,333r^2$ de dix-neuf particules une à côté de l'autre

nombre de particules (n)	énergie $E(n)$	énergie moyenne $\mathcal{E}(n)$	interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(h)$
7	$783, 93r^2$	$111, 9r^2$	$37, 33r^2$
19	$43319, 43r^2$	$2279r^{2}$	$253, 33r^2$

2.2. Recherche expérimentale de l'énergie minimale de sept sphères. La position de départ des simulations avec 7 sphères est montrée par la figure 15. L'interaction énergétique moyenne est $\mathfrak{E}(7) = 933.333r^2$, soit une énergie de $E(7) = \frac{7\times 6}{2} \times 933.333r^2 = 19599, 93r^2$ et une énergie moyenne $\mathscr{E}(7) = \frac{19599,93r^2}{7} = 2799, 99r^2$ Nous remarquons que lorsque \sqrt{T} devient de plus en plus petit, l'interaction énergétique

Nous remarquons que lorsque \sqrt{T} devient de plus en plus petit, l'interaction énergétique moyenne se rapproche de plus en plus de $\mathcal{E}(7) = 2, 0 \times 4r^2$. L'interaction énergétique moyenne la plus basse a été celle qu'on voit sur la figure 16 . Soit une énergie de $E(7) = \frac{7 \times 6}{2} \times 8,087r^2 = 169,827r^2$ et une énergie moyenne de $\mathfrak{E}(7) = 24,261r^2$

Les résultats des éxperiences sont représentés par la figure 17.



FIGURE 15. Position de départ des simulations avec 7 particules - $\mathfrak{E}(7) = 933, 33r^2$



FIGURE 16. Interaction énergétique moyenne minimale expérimentale pour sept particules - $\mathfrak{E}(7) = 8,087r^2 = 2,02175 \times 4r^2$



FIGURE 17. Influence de \sqrt{T} sur l'interaction énergétique moyenne de sept particules

2.3. Recherche expérimentale de l'énergie minimale de dix-neuf sphères. La position de départ des simulations avec 19 particules est montrée par la figure 18. L'interaction énergétique moyenne est de $\mathfrak{E}(19) = 789,502$, soit une énergie de $E(19) = \frac{19 \times 18}{2} \times 789,502r^2 =$ $135004,842r^2$ et une énergie moyenne $\mathfrak{E}(19) = 7105,518r^2$

Nous remarquons que lorsque \sqrt{T} devient de plus en plus petit, l'interaction énergétique moyenne se rapproche de plus en plus de $\mathfrak{E}(19) = 5,454 \times 4r^2$. L'interaction énergétique moyenne la plus basse a été celle qu'on voit sur la figure 19. Soit une énergie de $E(19) = \frac{19 \times 18}{2} \times 21,816r^2 = 3730,536r^2$ et une énergie moyenne $\mathfrak{E}(19) = 196,344r^2$

Les résultats des simulations sont représentés par la figure 20.



FIGURE 18. Position de départ des simulations avec dix-neuf particules- $\mathfrak{E}(19) = 789,502r^2$



FIGURE 19. Interaction énergétiq
e moyenne minimale expérimentale pour dixneuf particules -
 $\mathfrak{E}(19)=21,816r^2=5,454\times 4r^2$



FIGURE 20. Influence de \sqrt{T} sur l'énergie moyenne de dix-neuf particules

2.4. Les réseaux hexagonaux. Nous remarquons que pour sept et dix-neuf sphères, les configurations finales sont hexagonales. En faisant des expériences avec plus de sphères, on retrouve des réseaux hexagonaux comme on peut le voir sur la figure 21. D'où l'intérêt d'étudier les configurations hexagonales.



FIGURE 21. Configuration obtenue après une simulation d'interaction attractive pour 441 sphères

3. Configurations hexagonales

Definition 4. Un nombre hexagonal centré est un nombre entier qui peut être représenté comme un hexagone régulier avec un point au centre et les autres forment des couches hexagonales concentriques. On peut voir ceci sur la figure 22. Les nombres hexagonaux sont donnés par la formule

$$\forall h \in \mathbb{N}^*$$
 $n(h) = h^3 - (h-1)^3 = 3h^2 - 3h + 1$



FIGURE 22. Représentations graphiques des nombres héxagonaux 1, 7, 19, 37

Definition 5. A partir de maintenant, nous allons noter l'énergie E(h), l'énergie moyenne $\mathcal{E}(h)$ et l'interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(h)$, pour la configuration hexagonale de sphères de rayon 1 en fonction du nombre h de sphères d'un côté de l'hexagone.

3.1. Niveau énergétique de configuration en hexagone de sept et dix-neuf particules. Par la suite, nous allons modéliser les particules par des cercles C_i de même rayon ret de centre x_i . Nous rappelons que l'énergie est donnée par :

$$E(h) = \sum_{1 \le i \le j \le n(h)} |x_i - x_j|^2$$

Méthode

Nous nous plaçons dans un repère orthonormé dont l'origine est le centre du cercle au milieu.

Nous allons d'abord démontrer un lemme, grâce auquel nous pourrons calculer la longueur de la plus grande diagonale d'un parallélogramme. Ceci nous sera utile pour calculer certaines distances. Pour chaque hexagone, nous allons utiliser la même méthode :

Nous allons grâce au lemme d'abord calculer pour chaque cercle C_i la distance aux centres respectifs de tous les autres cercles C_j . Puis nous allons additionner le carré de chaque distance.

Finalement, nous allons additionner toutes ces sommes, c'est-à-dire nous avons pour chaque couple de cercles le carré de la distance entre les centres des cercles. Pour avoir pour chaque paire la distance exactement une fois, nous allons diviser la somme obtenue par 2.

Nous allons dans un premier temps calculer la somme des carrés des distances entre le centre du cercle au milieu et les centres des cercles extérieurs, puis les distances respectives des centres des cercles extérieurs.

Pour la numérotation et les rangs voir dans chaque sous partie.

Lemma 6. Un parallélogramme est composé de $m \times l$ cercles de rayon r, avec l et m comme on le voit sur la figure 23.

Alors, la longueur de la plus longue diagonale est $H = 2r\sqrt{(l-1)^2 + (m-1)^2 + (l-1)(m-1)}$



FIGURE 23. Parallélogramme avec l = 3 et m = 2

Preuve du lemme 6 : Pour calculer la longueur H, nous allons utiliser le théorème de Pythagore (voir figure 24).



FIGURE 24. Illustration du théorème de Pythagore avec H en hypoténuse

Nous savons que $A^2 + B^2 = H^2 \Leftrightarrow \sqrt{A^2 + B^2} = H$ Nous devons donc calculer les longueurs A et B.

Pour tout parallélogramme, la longueur de B dépend de m. B est m-1 fois K, la distance entre deux centres de cercles de rangées juxtaposées. De nouveau grâce au théorème de Pythagore, nous pouvons calculer cette longueur. (Voir figure 25)

D'où $K^2 + r^2 = (2r)^2 \Leftrightarrow K = \sqrt{3}r$ Donc $B = (m-1)\sqrt{3}r$



FIGURE 25. Application du théorème de Pythagore pour calculer B

La longueur A dépend de m et de l. Comme on le voit sur la figure 26, la distance entre les centres du premier et du dernier cercle de la première rangée est de 2(l-1)r. Il s'y ajoute la valeur absolue de la différence entre les coordonnées d'abscisse du centre du dernier cercle de la première rangée et du centre du dernier cercle de la dernière rangée. Celle-ci peut être exprimée en fonction de m et est égal à (m-1)r. Car la différence entre les coordonnées de l'axe des abscisse d'une rangée à l'autre est de r.

Donc A = 2(l-1)r + (m-1)r = (2l+m-3)r



FIGURE 26. Influence de m et de l sur A

Nous pouvons finalement calculer H.

$$H = \sqrt{A^2 + B^2} = \sqrt{((2l + m - 3)r)^2 + ((m - 1)\sqrt{3}r)^2} = r\sqrt{(2l + m - 3)^2 + 3(m - 1)^2} = 2r\sqrt{(l - 1)((m - 1)^2 + (l - 1)(m - 1)^2)}$$

En particulier, nous allons utiliser les longueurs des diagonales suivantes.

m = 2 $l = 1$	H = 2r
m = 2 $l = 2$	$H = 2\sqrt{3}r$
m = 2 $l = 3$	$H = 2\sqrt{7}r$
m=2 $l=4$	$H = 2\sqrt{13}r$
m = 3 $l = 3$	$H = 4\sqrt{3}r$

Proposition 7. L'hexagone de taille h = 1 est composé de n(1) = 1 cercle. Son énergie E(1) = 0

Preuve de la proposition 7:

$$E(1) = \sum_{1 \le i \le j \le 1} |x_i - x_j|^2 = |x_1 - x_1|^2 = 0$$

FIGURE 27. Hexagone composé d'un cercle

Proposition 8. L'hexagone de taille h = 2 est composé de n(2) = 7 cercles. Son énergie est $E(2) = 168r^2 = 42 \times 4r^2$ Son énergie moyenne est $\mathcal{E}(2) = \frac{42 \times 4r^2}{7} = 6 \times 4r^2$ Son interaction énergétique moyenne est $\mathfrak{E}(h) = \frac{42 \times 4r^2}{(7 \times 6)/2} = 2 \times 4r^2$

Preuve de la proposition 8 : Par la suite, nous allons numéroter les cercles des façons suivantes en fonction de leur position et de leur rang :



FIGURE 28. Numérotation et rang de l'hexagone composé de 7 cercles

Etape 1 : Somme des carrés des distances entre le centre du cercle au milieu C_1 et les centres des cercles extérieurs

Nous cherchons ici \sum_{7-I} , la somme des carrés des distances entre le centre du cercle au milieu C_1 et les centres des autres cercles.



FIGURE 29. Distances entre le centre du cercle C_1 et les centres des autres cercles

Le cercle C_1 touche tous les cercles extérieurs. Donc $|x_1 - x_j| = 2r$ pour $j \in [2, 7]$ Il y a six cercles autour de C_1 :

$$\sum_{j=1}^{7} |x_1 - x_j|^2 = 6(2r)^2 = 24r^2$$

Nous pouvons donc écrire : $\sum_{7-I} = 24r^2$

Etape 2 : Somme des carrés des distances entre le centre d'un cercle extérieur et les centres des autres cercles

L'hexagone est régulier. En le tournant par $\frac{\pi}{3}$ radian, on obtient de nouveau l'hexagone initial. Il suffit de calculer une fois la somme \sum_{7-II} des carrés des distances entre le centre d'un cercle extérieur et le centre des autres cercles. Prenons comme exemple le cercle C_2 .



FIGURE 30. Distances entre le centre du cercle C_2 et les centres des autres cercles

Le cercle C_2 touche les cercles C_1 , C_3 et C_7 . D'où

$$|x_2 - x_1| = |x_2 - x_3| = |x_2 - x_7| = 2r$$

Les centres x_2 et x_5 des cercles C_2 et C_5 sont alignés par le centre x_1 du cercle C_1 . D'où

$$|x_2 - x_5| = 4r$$

 C_4 et le symétrique de C_6 par rapport à la droite passant par x_2 et x_5 . D'où $|x_2-x_4| = |x_2-x_6|$ Nous voyons que x_2x_4 forme la diagonale longue d'un parallélogramme avec l = 2 et m = 2. D'après le lemme, nous pouvons donc dire que $|x_2 - x_4| = |x_2 - x_6| = 2\sqrt{3}r$

Maintenant, nous pouvons calculer la somme des carrés des distances entre un cercle extérieur et les autres cercles.

$$\sum_{j=1}^{7} |x_2 - x_j|^2 = 3|x_2 - x_1|^2 + |x_2 - x_5|^2 + 2|x_2 - x_4|^2 = 3(2r)^2 + (4r)^2 + 2(2\sqrt{3}r)^2 = 12r^2 + 16r^2 + 24r^2 = 52r^2$$

D'où $\sum_{7-II} = 52r^2$

Etape 3 : Addition des différentes sommes intermédiaires

Il y a un cercle au milieu et six cercle à l'extérieur. D'où :

$$E(2) = \sum_{j>i} |x_i - x_j|^2 = \frac{\sum_{7-I} + 6\sum_{7-II}}{2} = \frac{24r^2 + 6 \times 52r^2}{2} = \frac{336r^2}{2} = 168r^2 = 42 \times 4r^2$$

Proposition 9. L'hexagone de taille h = 3 est composé de n(3) = 19 cercles. Son énergie est $E(3) = 3648r^2 = 912 \times 4r^2$

Son énergie moyenne est $\mathcal{E}(2) = \frac{912 \times 4r^2}{19} = 48 \times 4r^2$ Son interaction énergétique moyenne est $\mathfrak{E}(h) = \frac{912 \times 4r^2}{(19 \times 18)/2} = 21,33 \times 4r^2$

Preuve de la proposition 9 : Nous allons numéroter les cercles des façons suivantes en fonction de leur position et de leur rang (voir figure 31 à la page 21).

Les cercles au troisième rang peuvent prendre deux positions : soit il sont au milieu d'un côté, soit ils forment le coin. Nous allons en fonction de la numérotation appeler ce premier groupe *les cercles pairs*, le deuxième *les cercles impairs*. Dans chaque groupe, il y a six objets.

De plus, nous avons calculé les coordonnées des centres des cercles. Nous avons trouvé les coordonnées en utilisant le lemme et grâce à la symétrie.

20



FIGURE 31. Numérotation et rang de l'hexagone composé de 19 cercles

Cercle	Coordonnées du centre de cercle x_i
C_1	(0;0)
C_2	$(r;\sqrt{3}r)$
C_3	(2r; 0)
C_4	$(r; -\sqrt{3}r)$
C_5	$(-r; -\sqrt{3}r)$
C_6	(-2r;0)
C_7	$(-r;\sqrt{3}r)$
C_8	$(0; 2\sqrt{3}r)$
C_9	$(2r; 2\sqrt{3}r)$
C_{10}	$(3r;\sqrt{3}r)$
C_{11}	(4r;0)
C_{12}	$(3r; -\sqrt{3}r)$
C_{13}	$(2r; -2\sqrt{3}r)$
C_{14}	$(0; -2\sqrt{3}r)$
C_{15}	$(-2r;-2\sqrt{3}r)$
C_{16}	$(-3r;-\sqrt{3}r)$
C_{17}	(-4r;0)
C_{18}	$(-3r;\sqrt{3}r)$
C_{19}	$(-2r;2\sqrt{3}r)$

Etape 1 : Somme des carrés des distances entre le centre du cercle du milieu C_1 et les centres des autres cercles

Nous cherchons $\sum_{j=1}^{15} |x_1 - x_j|^2$ que nous allons nommer \sum_{19-I} .



FIGURE 32. Distances entre le centre du cercle C_1 et les centres des autres cercles

Nous savons déjà que $\sum_{j=1}^{7} |x_1 - x_j|^2 = 24r^2$. A cette somme, nous devons additionner $\sum_{j=8}^{19} |x_1 - x_j|^2$

Îl y a deux cas : x_j est le centre d'un cercle pair ou x_j est le centre d'un cercle impair.

Chacun des centres des six cercles impairs est aligné à x_1 avec l'intermédiaire du centre d'un seul autre cercle.

Donc

$$|x_1 - x_9| = |x_1 - x_{11}| = |x_1 - x_{13}| = |x_1 - x_{15}| = |x_1 - x_{17}| = |x_1 - x_{19}| = 4r$$

Pour les cercles pairs de l'extérieur, nous retrouvons un parallélogramme avec m = 2 et l = 2. Grâce au lemme, nous pouvons donc dire :

$$|x_1 - x_8| = |x_1 - x_{10}| = |x_1 - x_{12}| = |x_1 - x_{14}| = |x_1 - x_{16}| = |x_1 - x_{18}| = 2\sqrt{3}r$$

D'où

$$\sum_{j=8}^{19} |x_1 - x_j|^2 = 6(4r)^2 + 6(2\sqrt{3}r)^2 = 96r^2 + 72r^2 = 168r^2$$

Finalement, nous avons

$$\sum_{j=1}^{19} |x_1 - x_j|^2 = \sum_{j=1}^{7} |x_1 - x_j|^2 + \sum_{j=8}^{19} |x_1 - x_j|^2 = 24r^2 + 168r^2 = 192r^2$$

D'où $\sum_{19-I} = 192r^2$

Étape 2 : Somme des carrés des distances entre le centre d'un cercle du deuxième rang et les centres des autres cercles

Nous cherchons ici $\sum_{j=1}^{10} |x_i - x_j|^2$ pour $i \in \{2, 3, 4, 5, 6, 7\}$. Comme les cercles du deuxième rang ont par rapport aux autres cercles de l'hexagone la même position, cette somme prend

toujours la même valeur. Nous allons l'appeler \sum_{19-II} .

Prenons comme exemple C_2 .



FIGURE 33. Distances entre le centre du cercle C_2 et les centres des autres cercles

 C_2 touche les cercles C_1, C_3, C_7, C_8, C_9 et C_{10} , donc

$$|x_2 - x_1| = |x_2 - x_3| = |x_2 - x_7| = |x_2 - x_8| = |x_2 - x_9| = |x_2 - x_{10}| = 2\pi$$

 $[x_2x_4], [x_2x_6], [x_2x_{11}]$ et $[x_2x_{19}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 2. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_2 - x_4| = |x_2 - x_6| = |x_2 - x_{11}| = |x_2 - x_{19}| = 2\sqrt{3r}$$

 x_2 est aligné aux centres x_5 , x_{12} et x_{18} des cercles C_5 , C_{12} et C_{18} par l'intermédiaire du centre d'un autre cercle, donc

$$|x_2 - x_5| = |x_2 - x_{12}| = |x_2 - x_{18}| = 4r$$

 x_2 est aligné à x_{15} par l'intermédiaire du centre de deux cercles, donc

$$|x_2 - x_{15}| = 6r$$

 $[x_2x_{13}], [x_2x_{14}], [x_2x_{16}]$ et $[x_2x_{17}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 3. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_2 - x_{13}| = |x_2 - x_{14}| = |x_2 - x_{16}| = |x_2 - x_{17}| = 2\sqrt{7r}$$

On peut donc calculer la somme totale des carrés des distances entre le centre du cercle C_2 et les centres des autres cercles.

$$\sum_{j=1}^{19} |x_2 - x_j|^2 = 6(2r)^2 + 4(2\sqrt{3}r)^2 + 3(4r)^2 + (6r)^2 + 4(2\sqrt{7}r)^2 = 24r^2 + 48r^2 + 48r^2 + 36r^2 + 112r^2 = 268r^2$$

D'où $\sum_{19-II} = 268r^2$

Etape 3 : Somme des carrés des distances entre le centre d'un cercle du troisième rang et les centres des autres cercles

Etape 3.1 : Somme des carrés des distances entre le centre d'un cercle pair et les centres des autres cercles

Nous cherchons $\sum_{j=1}^{13} |x_i - x_j|^2$ pour $i \in \{8, 10, 12, 14, 16, 18\}$. Comme les cercles pairs du

troisième rang ont par rapport aux autres cercles de l'hexagone la même position, cette somme prend toujours la même valeur. Nous allons l'appeler $\sum_{19-IIIP}$.

Prenons comme exemple pour les cercles pairs le cercle C_8 .



FIGURE 34. Distances entre le centre du cercle pair C_8 et les centres des autres cercles

Le cercle C_8 touche les cercles C_2 , C_7 , C_9 et C_{19} . Donc

$$|x_8 - x_2| = |x_8 - x_7| = |x_8 - x_9| = |x_8 - x_{19}| = 2r$$

24

 $[x_8x_1]$, $[x_8x_{10}]$ et $[x_8x_{18}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 2. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_8 - x_1| = |x_8 - x_{10}| = |x_8 - x_{18}| = 2\sqrt{3}r$$

 x_8 et x_3 de même que x_8 et x_6 sont alignés par l'intermédiaire d'un centre de cercle, donc

$$|x_8 - x_3| = |x_8 - x_6| = 4r$$

 $[x_8x_4]$, $[x_8x_5]$, $[x_8x_{11}]$ et $[x_8x_{17}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 3. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_8 - x_4| = |x_8 - x_5| = |x_8 - x_{11}| = |x_8 - x_{17}| = 2\sqrt{7}r$$

Respectivement x_{12} et x_{16} , les centres des cercles C_{12} et C_{16} , et x_8 sont alignés par l'intermédiaire de deux centres de cercles au centre du cercle C_8 . Donc

$$|x_8 - x_{12}| = |x_8 - x_{16}| = 6r$$

 $[x_8x_{13}]$ et $[x_8x_{15}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 4. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_8 - x_{13}| = |x_8 - x_{15}| = 2\sqrt{13}r$$

 $[x_8x_{14}]$ est la diagonale longue d'un parallélogramme avec m=3 et l=3. Grâce au lemme, nous pouvons donc calculer

$$|x_8 - x_{14}| = 4\sqrt{3}r$$

D'où nous pouvons calculer la somme totale des carrés des distances entre le centre du cercle C_8 et les centres des autres cercles.

$$\sum_{j=1}^{19} |x_8 - x_j|^2 = 4(2r)^2 + 3(2\sqrt{3}r)^2 + 2(4r)^2 + 4(2\sqrt{7}r)^2 + 2(6r)^2 + 2(2\sqrt{13}r)^2 + (4\sqrt{3}r)^2$$
$$= 16r^2 + 36r^2 + 32r^2 + 112r^2 + 72r^2 + 104r^2 + 48r^2 = 420r^2$$

D'où $\sum_{19-IIIP} = 420r^2$

Etape 3.2 : Somme des carrés des distances entre le centre d'un cercle impair et les centres de autres cercles

Nous cherchons $\sum_{j=1}^{15} |x_i - x_j|^2$ pour $i \in \{9, 11, 13, 15, 17, 19\}$. Comme les cercles impairs du troisième rang ont par rapport aux autres cercles de l'hexagone la même position, cette somme prend toujours la même valeur. Nous allons l'appeler $\sum_{19-IIINP}$.

Nous allons prendre comme exemple des cercles impairs le cercle C_9 .



FIGURE 35. Distances entre le centre du cercle impair C_9 et les centres des autres cercles

Les cercles C_2 , C_8 et C_{10} touchent le cercle C_9 . Donc

$$|x_9 - x_2| = |x_9 - x_8| = |x_9 - x_{10}| = 2r$$

 x_9 est relié respectivement aux centres x_1 , x_{11} et x_{19} des cercles C_1 , C_{11} et C_{19} par l'intermédiaire du centre d'un seul autre cercle. Donc

$$|x_9 - x_1| = |x_9 - x_{11}| = |x_9 - x_{19}| = 4r$$

 $[x_9x_3]$ et $[x_9x_7]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 2. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_9 - x_3| = |x_9 - x_7| = 2\sqrt{3}r$$

 $[x_9x_4]$, $[x_9x_6]$, $[x_9x_{12}]$ et $[x_9x_{18}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 3. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_9 - x_4| = |x_9 - x_6| = |x_9 - x_{12}| = |x_9 - x_{18}| = 2\sqrt{7}r$$

Les centres x_5 et x_9 des cercles C_5 et C_9 sont alignés par l'intermédiaire de deux centres de cercles. Donc

$$|x_9 - x_5| = 6r$$

 $[x_9x_{13}]$ et $[x_9x_{17}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 3 et l = 3. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_9 - x_{13}| = |x_9 - x_{17}| = 4\sqrt{3}r$$

 $[x_9x_{14}]$ et $[x_9x_{16}]$ sont les diagonales longues d'un parallélogramme avec m = 2 et l = 3. Grâce au lemme, nous avons donc

$$|x_9 - x_{14}| = |x_9 - x_{16}| = 2\sqrt{13}r$$

Les centres x_{15} et x_9 des cercles C_{15} et C_9 sont alignés par trois centres de cercles intermédiaires. Donc

$$|x_9 - x_{15}| = 8r$$

D'où nous pouvons calculer la somme totale des carrés des distances entre le centre du cercle C_9 et les centres des autres cercles.

$$\sum_{j=1}^{19} |x_9 - x_j|^2 = 3(2r)^2 + 34r)^2 + 2(2\sqrt{3}r)^2 + 4(2\sqrt{7}r)^2 + (6r)^2 + 2(4\sqrt{3}r)^2 + 2(2\sqrt{13}r)^2 + (8r)^2 = 12r^2 + 48r^2 + 24r^2 + 112r^2 + 36r^2 + 96r^2 + 104r^2 + 64r^2 = 496r^2$$

D'où $\sum_{19-IIINP} = 496r^2$

Etape 4 : Addition des différentes sommes

Nous avons un cercle au milieu, 6 cercles au deuxième rang, 6 cercles pairs du troisième rang et 6 cercles impairs du troisième rang. D'où :

$$E(3) = \sum_{j>i} |x_i - x_j|^2 = \frac{\sum_{19-I} + 6\sum_{19-II} + 6\sum_{19-IIIP} + 6\sum_{19-IIIP} + 6\sum_{19-IIINP}}{2}$$
$$= \frac{192r^2 + 6 \times (268r^2) + 6 \times (420r^2) + 6 \times (496r^2)}{2} = \frac{7296r^2}{2} = 3648r^2 = 912 \times 4r^2$$

3.2. Etude du niveau énergétique du cas général.

Definition 10. Nous allons appeler le nombre de paires dans un hexagone $C_{n(h)}^2 = \frac{n(h)(n(h)-1)}{2}$

Le nombre de cercles dans un sixième de l'hexagone privé du cercle au milieu est $C_h^2 = \frac{n(h)-1}{6} = \frac{h(h-1)}{2}$.

Proposition 11. Un hexagone de taille h est composé de $n(h) = h^3 - (h-1)^3$ cercles. Son énergie est

$$E(h) = (h^3 - (h-1)^3)(h-1)h(5h(h-1)+2)r^2$$

= $(5n(h)+1)\frac{2}{9}C_{n(h)}^2r^2 = (6C_h^2+1)C_h^2(5C_h^2+1)4r^2$

Son énergie moyenne est $\mathcal{E}(h) = (h-1)h(5h(h-1)+2)r^2$ Son interaction énergétique moyenne est $\mathfrak{E}(h) = (5n(h)+1)\frac{2}{9}r^2$ Preuve de la proposition 11 :

Étape 1 : Simplification de l'expression $E(h) = \sum_{1 \le i < j \le n(h)} |x_i - x_j|^2$

$$E(h) = \sum_{1 \le i < j \le n(h)} |x_i - x_j|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n(h)} \sum_{j=1}^{n(h)} |x_j - x_i|^2$$
$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n(h)} \sum_{j=1}^{n(h)} \left(|x_i|^2 + |x_j|^2 + 2 \times x_i \cdot x_j \right) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n(h)} \left(\sum_{j=1}^{n(h)} |x_i|^2 + \sum_{j=1}^{n(h)} |x_j|^2 + \sum_{j=1}^{n(h)} 2 \times x_i \cdot x_j \right)$$

Or, comme l'hexagone est symétrique par rapport au centre du cercle du milieu, pour chaque point x_i , il existe un autre point x_j tel que $x_i = -x_j$. (Voir figure 36)



FIGURE 36. Symmétrie des vecteurs par rapport au centre du cercle au milieu

Donc
$$\sum_{j=1}^{n(h)} x_j = 0$$
 donc $\sum_{j=1}^{n(h)} 2 \times x_i \cdot x_j = 2 \times x_i \cdot \sum_{j=1}^{n(h)} x_j = 0$
De plus $\sum_{j=1}^{n(h)} |x_j|^2 = \sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2$, D'où
 $E(h) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{n(h)} \sum_{j=1}^{n(h)} |x_i|^2 + \sum_{i=1}^{n(h)} \sum_{j=1}^{n(h)} |x_j|^2 \right) = \frac{1}{2} \left(n(h) \sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2 + n(h) \sum_{j=1}^{n(h)} |x_j|^2 \right)$
 $= \frac{n(h)}{2} \left(2 \sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2 \right) = n(h) \sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2$

Il nous semble naturel de travailler par la suite avec l'énergie moyenne car

$$\mathcal{E}(h) = \frac{E(h)}{n(h)} = \frac{n(h)\sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2}{n(h)} = \sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2$$

Nous voulons trouver une formule de récurrence, nous allons donc exprimer $\mathcal{E}(h)$ en fonction de $\mathcal{E}(h-1)$.

$$\mathscr{E}(h) = \sum_{i=1}^{n(h)} |x_i|^2 = \sum_{i=1}^{n(h-1)} |x_i|^2 + \sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 = \mathscr{E}(h-1) + \sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2$$

Nous devons donc trouver une expression de $\sum_{i=(n(h-1)+1)}^{n(h)} |x_i|^2$ en fonction de h

Or $|x_i|^2$ correspond au carré de la distance entre l'origine du repère et le centre du cercle C_i . Le carré de la distance est $|x_i|^2 = (x_i^{(1)})^2 + (x_i^{(2)})^2$, où $x_i^{(1)}$ est l'abscisse et $x_i^{(2)}$ l'ordonnée de x_i .

Pour en calculer la somme, nous allons utiliser la symétrie de l'hexagone.

En effet, on peut "couper" l'hexagone en 12 parties dont la somme des carrés des distance entre les centres des cercles extérieurs de chaque partie et l'origine du repère sont égaux, comme en le voit sur la figure 37.

Il suffit donc de calculer une fois la somme des carrés des distances entre les centres des cercles d'une de ces 12 parties, puis de multiplier le résultat par 12. Pour les cercles qui sont coupés en deux (notamment les cercles aux coins), nous allons calculer pour chaque partie la moitié du carré de la distance entre le centre du cercle et l'origine du repère.

Comme exemple nous allons prendre par la suite la moitié droite du côté supérieur de l'hexagone. Par la suite, quand nous parlons de cercles, nous parlons des cercles extérieurs d'une des 12 parties.

En fonction de h, le nombre de cercles d'un côté, nous avons un ou deux cercles coupés en deux :

— Si h est pair, alors il y a un cercle coupé en deux.

— Si h est impair, alors il y a deux cercles coupés en deux.



FIGURE 37. Découpage des hexagones en 12 parties similaires

Étape 2 : Cas où h est pair

Nous rappelons notre but : Trouver une expression de $\sum_{i=(n(h-1)+1)}^{n(n)} |x_i|^2$ en fonction de h si

h est pair.

Pour illustrer notre raisonnement, nous allons utiliser les hexagones composés de 7 et de 37 cercles (figure 38).



FIGURE 38. Les hexagones réguliers composés de 7 cercles (h = 2) et de 37 cercles (h = 4)

Nous allons d'abord calculer la somme des carrés des distances pour tous les cercles d'une partie, puis nous allons en soustraire la moitié du carré de la distance pour le cercle au coin qui est le seul cercle coupé en deux.

Nous avons donc $\frac{h}{2}$ cercles dont nous cherchons $|x_i|^2 = (x_i^{(1)})^2 + (x_i^{(2)})^2$.

Nous voyons que la distance entre les centres des cercles et l'axe des abscisses ne varie pas, c'est-à-dire qu'il ont tous la même ordonnée $x_i^{(2)} = (h-1)\sqrt{3}r$ (Voir lemme 6 page 16, avec B = Y et m = h)

D'un cercle au prochain, la distance entre les centres du cercle varie de 2r. (Car les cercles se touchent.) Si h est pair, alors l'abscisse $x_i^{(1)}$ du cercle le plus proche du milieu est r.

D'où pour $k \in \{1, 2, \dots, \frac{h}{2}\}$ $x_i^{(1)}(k) = (2k - 1)r.$

D'où les coordonnées d'un cercle en fonction de h et de $k \in \{1, 2, \dots, \frac{h}{2}\}$ $((2k-1)r; (h-1)\sqrt{3}r)$

Nous allons maintenant calculer la moitié du carré de la distance entre l'origine du repère et le cercle au coin.

Comme pour tous les cercles $x^{(2)} = (h-1)\sqrt{3}r$.

Le cercle est le plus loin possible du milieu, k est donc le plus grand possible, c'est à dire $k = \frac{h}{2}$. D'où $x^{(1)} = (2 \times \frac{h}{2} - 1)r = (h - 1)r$.

30

Nous pouvons donc écrire

$$\begin{split} \sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 &= 12 \left(-\frac{((h-1)r)^2 + ((h-1)\sqrt{3}r)^2}{2} + \sum_{k=1}^{\frac{h}{2}} ((2k-1)r)^2 + ((h-1)\sqrt{3}r)^2 \right) \\ &= 12r^2 \left(-\frac{4(h-1)^2}{2} + \sum_{k=1}^{\frac{h}{2}} \left((2k-1)^2 + 3(h-1)^2 \right) \right) \right) \\ &= 12r^2 \left(-\frac{4(h-1)^2}{2} + \frac{h}{2} \times 3(h-1)^2 + \sum_{k=1}^{\frac{h}{2}} \left(4k^2 - 4k + 1 \right) \right) \\ &= 12r^2 \left(\frac{(h-1)^2(3h-4)}{2} + \frac{h}{2} + 4 \left(\sum_{k=1}^{\frac{h}{2}} k^2 - \sum_{k=1}^{\frac{h}{2}} k \right) \right) \\ Nous \text{ rappellons que } \sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \text{ et } \sum_{i=1}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2} \end{split}$$

Donc

$$4\left(\sum_{k=1}^{\frac{h}{2}}k^2 - \sum_{k=1}^{\frac{h}{2}}k\right) = 4\left(\frac{\frac{h}{2}(\frac{h}{2}+1)(h+1)}{6} - \frac{\frac{h}{2}(\frac{h}{2}+1)}{2}\right) = 4 \times \frac{(\frac{h}{2}+1)\frac{h}{2}}{2} \times \frac{2(\frac{h}{2}-1)}{3})$$
$$= 4 \times \frac{1}{3} \times \frac{h}{2}(\frac{h^2}{4}-1) = \frac{h}{6}(h^2-4)$$

D'où

$$\sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 = 12r^2 = \left(\frac{(h-1)^2(3h-4)}{2} + \frac{h}{2} + \frac{h}{6}(h^2-4)\right) = 4r^2 \left(\frac{3(h-1)^2(3h-4) + h^3 - h}{2}\right) = 4r^2 \frac{(h-1)(3(h-1)(3h-4) + h^2 + h)}{2} = 4r^2(h-1)(5h^2 - 10h + 6)$$

Étape 3 : Cas où h est impair

Nous rappelons notre but : Trouver une expression de $\sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2$ en fonction de h si h

est impair.

Pour illustrer notre raisonnement, nous allons utiliser les hexagones composés de 19 et de 61 cercles (figures 39).



FIGURE 39. Les hexagones réguliers composé de 19 cercles (h = 3) et 61 cercles (h = 5)

Nous allons d'abord calculer la somme des carrés des distances pour tous les cercles d'une partie, puis nous allons en soustraire la moitié des carrés des distances entre l'origine du repère et respectivement le cercle au coin et le cercle au milieu, qui sont coupés en deux.

Nous avons donc $\frac{h+1}{2}$ cercles dont nous cherchons $|x_i|^2 = (x_i^{(1)})^2 + (x_i^{(2)})^2$.

Nous voyons que la distance entre les centres des cercles et l'axe des abscisse ne varie pas, c'est-à-dire qu'il ont tous la même ordonnée $x_i^{(2)} = (h-1)\sqrt{3}r$ (Voir lemme 6 page 16 , avec B = Y et m = h)

La distance entre deux cercles les plus proches est de 2r. (Car les cercles se touchent.) Si h est impair, la coordonnées d'abscisse $x_i^{(1)}$ du cercle le plus proche au milieu est 0. D'où pour $k \in \{0, 1, \ldots, \frac{h-1}{2}\}$ $x_i^{(1)}(k) = (2k)r$.

D'où les coordonnées d'un cercle en fonction de h et de $k \in \{0, 1, \dots, \frac{h-1}{2}\}$ $(2kr; (h-1)\sqrt{3}r)$

32

Nous allons maintenant calculer la moitié des carrés des distances entre l'origine du repère et respectivement le cercle le plus proche au milieu et le cercle au coin. Comme pour tous les cercles $x_i^{(2)} = (h-1)\sqrt{3}r$.

- Le cercle au milieu : Le cercle est le plus proche possible du milieu, c'est à dire k est le plus petit possible : k = 0. D'où $x_i^{(1)} = (2 \times 0)r = 0$.
- Le cercle au coin : Le cercle est le plus loin possible du milieu, c'est à dire k est le plus grand possible : $k = \frac{h-1}{2}$. D'où $x_i^{(1)} = (2 \times \frac{h-1}{2})r = (h-1)r$.

Nous pouvons donc écrire

$$\begin{split} \sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 \\ &= 12 \left(-\frac{(((h-1)r)^2 + ((h-1)\sqrt{3}r)^2 + 0^2 + ((h-1)\sqrt{3}r)^2}{2} + \sum_{k=0}^{h-1} ((2k)r)^2 + ((h-1)\sqrt{3}r)^2 \right) \\ &= 12r^2 \left(-\frac{7(h-1)^2}{2} + \sum_{k=0}^{h-1} ((2k)^2 + 3(h-1)^2) \right) \\ &= 12r^2 \left(-\frac{7(h-1)^2}{2} + \frac{h+1}{2} \times (3(h-1)^2) + 4\sum_{k=0}^{h-1} k^2 \right) \\ &\text{Nous rappellons que } \sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \text{ Donc } \sum_{k=0}^{h-1} k^2 = \frac{h-1}{2} \times \frac{h+1}{2} \times h = \frac{h^2-1}{4}h}{6} \\ &\sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 = 12r^2 \left(\frac{(h-1)^2(3h-4)}{2} + \frac{(h^2-1)h}{6} \right) = 4r^2 \left(\frac{3(h-1)^2(3h-4) + h^3 - h}{2} \right) \\ &= 4r^2(h-1)(5h^2 - 10h + 6) \end{split}$$

Etape 4 : Recherche d'une formule explicite

 $\sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 \text{ est indépendant de la parité de } h.$

Nous pouvons ainsi compléter la formule de l'étape 1 :

$$\mathcal{E}(h) = \mathcal{E}(h-1) + \sum_{i=n(h-1)+1}^{n(h)} |x_i|^2 = \mathcal{E}(h-1) + 4r^2 \times (h-1)(5h^2 - 10h + 6)$$

Nous allons trouver une formule explicite de $\mathcal{E}(h)$.

Soit
$$P(p)$$
 la propriété que $\mathscr{E}(p) = 4r^2 \sum_{k=1}^{p} \left(4r^2(k-1)(5k^2-10k+6)\right)$
Initialisation $\mathscr{E}(1) = \frac{0}{1} = 0$ et $4r^2 \sum_{k=1}^{1} (4r^2(1-1)(5\times 1^2-10\times 1+6)) = 0$
Donc $P(1)$ est vrai.

Donc P(1) est vrai. Hérédité Supposons qu'il existe un rang p tel que P(p) soit vrai.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(p+1) &= \mathcal{E}(p) + 4r^2(p+1-1)(5(p+1)^2 - 10(p+1) + 6) \\ &= 4r^2 \left(\sum_{k=1}^p (k-1)(5k^2 - 10k + 6) \right) + 4r^2 \left(\sum_{k=p+1}^{p+1} (k-1)(5k^2 - 10k + 6) \right) = \\ &\quad 4r^2 \left(\sum_{k=1}^{p+1} (k-1)(5k^2 - 10k + 6) \right) \end{aligned}$$

Donc si
$$P(p)$$
 est vrai, alors $P(p+1)$ l'est aussi.
Conclusion Comme $P(1)$ est vrai et nous avons demontré l'hérédité de cette propriété,
alors $\forall h \in \mathbb{N}^* \quad \mathcal{E}(h) = 4r^2 \left(\sum_{k=1}^h (k-1)(5k^2 - 10k + 6) \right) = 4r^2 \sum_{k=1}^h (k-1)(5(k-1)^2 + 1).$
Donc $E(h) = n(h)\mathcal{E}(h) = n(h)4r^2 \sum_{k=1}^h (k-1)(5(k-1)^2 + 1)$
Nous posons $j = k - 1$
 $E(h) = n(h)4r^2 \sum_{j=0}^{h-1} j(5j^2 + 1) = (h^3 - (h-1)^3)4r^2 \left(5\sum_{j=0}^{h-1} j^3 + \sum_{j=0}^{h-1} j \right)$
Nous rappellons que $\sum_{i=1}^n i^3 = \frac{n^2(n+1)^2}{4}$ et $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$
Donc
 $E(h) = (h^3 - (h-1)^3)4r^2 \left(5 \times \frac{(h-1)^2h^2}{4} + \frac{(h-1)h}{2} \right)$

$$E(h) = (h^{3} - (h - 1)^{3})4r^{2} \left(5 \times \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\right)$$

= $(h^{3} - (h - 1)^{3})r^{2}(h - 1)h(5h(h - 1) + 2) = (h^{3} - (h - 1)^{3})(h - 1)h(5h(h - 1) + 2)r^{2}$
Nous pouvons transformer l'écriture de $E(h)$. Nous rappelons que $h(h-1) = h^{2} - h = \frac{n(h) - 1}{3}$

$$\mathfrak{E}(h) = \frac{r^2 n(h)(h-1)h(5h(h-1)+2)}{(n(h)(n(h)-1))/2} = \frac{r^2 \frac{n(h)-1}{3} \times (5h(h-1)+2)2}{(n(h)-1)} \\ = \frac{10h^2 - 10h + 4}{3}r^2 = (\frac{10}{9}n(h) + \frac{2}{9})r^2$$

D'où $E(h) = (5n(h)+1)\frac{2}{9}C_{n(h)}^2r^2$

34

Nous rappelons que $C_n^2 = \frac{n(h)-1}{6} \Leftrightarrow n(h) = 6C_n^2 + 1$

$$\begin{split} E(h) &= r^2 n(h)(h-1)(5h^2(h-1)+2h) = r^2 n(h)(5h^2(h-1)^2+2h(h-1)) \\ &= r^2 n(h) \left(5 \left(\frac{n(h)-1}{3} \right)^2 + 2 \frac{n(h)-1}{3} \right) = r^2 \frac{n(h)(n(h)-1)}{3} (5 \frac{n(h)-1}{3} + 2) \\ &= 4r^2 n(h) \frac{(n(h)-1)}{6} (5 \frac{n(h)-1}{6} + 1) = 4r^2 n(h) C_h^2 (5C_h^2 + 1) = 4r^2 (6C_h^2 + 1) C_h^2 (5C_h^2 + 1) \\ & \Box \end{split}$$

4. CONCLUSION

Nous pouvons finalement comparer les résultats que nous avons trouvé grâce aux simulations et grâce aux calculs.

h	n(h)	Origine du résultat	configuration	énergie	énergie moyenne	interaction énergétique
2	7	Simulation	ligne droite	$783, 93r^2$	$111, 9r^2$	$37, 33r^2$
2	7	Simulation	hexagone	$169,817r^2$	$24,261r^2$	$8,087r^{2}$
2	7	Calcul	hexagone	$168r^{2}$	$24r^2$	$8r^2$
3	19	Simulation	ligne droite	$43319, 43r^2$	2279	$253, 33r^2$
3	19	Simulation	hexagone	$3730, 536r^2$	$196, 344r^2$	$21,816r^2$
3	19	Calcul	hexagone	$3648r^{2}$	$192r^{2}$	$21, 33r^2$

Les résultats trouvés par calculs confirment les résultats théoriques. Nous pouvons de plus comparer la perte d'énergie de la configuration en hexagone par rapport à une configuration en ligne droite. Pour sept particules, l'interaction énergétique moyenne de la configuration en hexagone est $\frac{37,33}{8} = 4,7$ fois plus petite que l'interaction énergétique moyenne de la configuration en ligne, pour dix-neuf particules, elle est même $\frac{253,33}{21,33} = 11,9$ fois plus petite. La perte d'énergie moyenne est donc très grande.

Une expression de l'énergie est $E(h) = 4r^2(6C_h^2 + 1)C_h^2(5C_h^2 + 1)$. Cette écriture montre bien que E(h) est toujours un multiple de $4r^2$, c'est-à-dire du diamètre des sphères au carré.

Nous pouvons de plus, grâce à la formule générale, analyser l'évolution du niveau énergétique sous différents points de vue.

L'énergie, l'énergie moyenne et l'interaction énergétique moyenne des quarante premiers nombres hexagonaux E(h), $\mathcal{E}(h)$ et $\mathfrak{E}(h)$ pour r = 1 sont représentée sur le tableau 40. A partir de ces données, nous avons fait les courbes aux pages 37 jusqu'à 39. Toutes les courbes montrent que l'énergie augmente par rapport à h et n(h) avec une vitesse polynomiale.

Sur la figure 41 à la page 37, on remarque une croissance de l'énergie E(h) très rapide en h^6 .

Sur la figure 46 à la page 39, on remarque une proportionnalité entre l'interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(h)$ et le nombre de particules n(h).

h	n(h)	l'énergie $E(h)$	l'énergie moyenne $\mathcal{E}(h)$	l'interaction énergétique $\mathfrak{E}(h)$
1	1	0	/	0
2	7	168	24	8
3	19	3648	192	21,33
4	37	27528	744	41,33
5	61	124440	2040	68
6	91	414960	4560	101,33
7	127	1130808	8904	141,33
8	169	2668848	15792	188
9	217	5655888	26064	241,33
10	271	11024280	40680	301,33
11	331	20098320	60720	368
12	397	34691448	87384	441,33
13	469	57214248	121992	521,33
14	547	90793248	165984	608
15	631	139400520	220920	701,33
16	721	207994080	288480	801,33
17	817	302669088	370464	908
18	919	430819848	468792	1021,33
19	1027	601312608	585504	1141,33
20	1141	824669160	722760	1268
21	1261	1113261240	882840	1401,33
22	1387	1481515728	1068144	1541,33
23	1519	1946130648	1281192	1688
24	1657	2526301968	1524624	1841,33
25	1801	3243961200	1801200	2001,33
26	1951	4124023800	2113800	2168
27	2107	5194648368	2465424	2341,33
28	2269	6487506648	2859192	2521,33
29	2437	8038064328	3298344	2708
30	2611	9885872640	3786240	2901,33
31	2791	12074870760	4326360	3101,33
32	2977	14653699008	4922304	3308
33	3169	17676022848	5577792	3521,33
34	3367	21200867688	6296664	3741,33
35	3571	25292964480	7082880	3968
36	3781	30023106120	7940520	4201,33
37	3997	35468514648	8873784	4441,33
38	4219	41713219248	9886992	4688
39	4447	48848445048	10984584	4941,33
40	4681	56973012720	12171120	5201,33

FIGURE 40. L'énergie, l'énergie moyenne et l'interaction énergétique moyenne des quarante premiers nombres hexagonaux



FIGURE 41. L'énergie E(h) en fonction du nombre de cercles d'un côté h



FIGURE 42. L'énergie E(h) en fonction de h et du nombre de particules n(h)



FIGURE 43. L'énergie moyenne $\overset{}{\mathcal{E}}(h)$ en fonction du nombre de cercles d'un côté h



FIGURE 44. L'énergie moyenne $\mathcal{E}(h)$ en fonction de h et du nombre de particules n(h)



FIGURE 45. L'interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(h)$ en fonction du nombre de cercles d'un côté h



FIGURE 46. L'interaction énergétique moyenne $\mathfrak{E}(h)$ en fonction du nombre de particules n(h)

Références

- [1] Longtime behaviour of stochastic hard ball systems; Patrick Cattiaux, Myriam Fradon, Alexei M. Kulik et Sylvie Roelly; Bernoulli, Vol. 22 (2016)
- [2] The Hard Core of Soft Matter : Kugelsysteme in der weichen Materie; Gerd E. Schröder-Turk; Mitteilungen der Deutschen Mathematiker Vereinigung (MDMV), vol 23 (2015)
- [3] Definition de brownien, brownienne; http://www.larousse.fr/dictionnaires/francais/brownien_ brownienne/11442 (12.05.2016)
- [4] Le mouvement brownien et son histoire; Jean-Pierre Kahane; http://images.math.cnrs.fr/ Le-mouvement-brownien-et-son.html (15.10.2006)
- [5] Configuration http://mathworld.wolfram.com/Configuration.html (07.06.2016)
- [6] Ergodizität https://de.wikipedia.org/wiki/Ergodizit%C3%A4t (07.06.2016)
- [7] Théorie ergodique https://fr.wikipedia.org/wiki/Th%C3%A9orie_ergodique (07.06.2016)
- [8] Definition ergodique http://dictionary.reverso.net/french-definition/ergodique (07.06.2016)
- [9] Definition ergodicity http://www.thefreedictionary.com/ergodicity (07.06.2016)
- [10] Hex Number http://mathworld.wolfram.com/HexNumber.html (09.06.2016)
- [11] Centered hexagonal numbers https://en.wikipedia.org/wiki/Centered_hexagonal_number (09.06.2016)
- [12] Zentrierte Sechseckszahl https://de.wikipedia.org/wiki/Zentrierte_Sechseckszahl (09.06.2016)
- [13] Nombre hexagonal centré https://fr.wikipedia.org/wiki/Nombre_hexagonal_centr%C3%A9 (09.06.2016)
- [14] Kissing number https://en.wikipedia.org/wiki/Kissing_number_problem (09.06.2016)
- [15] Kusszahl https://de.wikipedia.org/wiki/Kusszahl (09.06.2016)
- [16] Sphere packaging http://mathworld.wolfram.com/SpherePacking.html (09.06.2016)
- [17] Sphere packaging https://en.wikipedia.org/wiki/Sphere_packing (09.06.2016)
- [18] Kugelpackung https://de.wikipedia.org/wiki/Dichteste_Kugelpackung (09.06.2016)
- [19] Empilement compact https://fr.wikipedia.org/wiki/Empilement_compact (09.06.2016)
- [20] Close-packaging of equal spheres https://en.wikipedia.org/wiki/Close-packing_of_equal_ spheres (09.06.2016)
- [21] Kepler's Sphere Packing Problem Solved; Keith Devlin; https://www.maa.org/external_archive/ devlin/devlin_9_98.html (09.06.2016)
- [22] Sphere packing https://brilliant.org/wiki/sphere-packing/ (septembre 1998)
- [23] Kepler Conjecture http://mathworld.wolfram.com/KeplerConjecture.html (09.06.2016)
- [24] Kepler Conjecture https://en.wikipedia.org/wiki/Kepler_conjecture (09.06.2016)
- [25] A New Tool to Help Mathematicians Pack; Natalie Wolchover; https://www.quantamagazine.org/ 20131220-nudging-spheres-closer-little-by-little/ (20.12.2013)
- [26] Empiler les tétraèdres; Günter M. Ziegler; http://images.math.cnrs.fr/Empiler-des-tetraedres (26.08.2011)

Source des images

- [27] Figure 1 : L'empilement de boulets de canons http://edocet.naukas.com/2013/12/05/ breve-historia-de-la-cristalografia-iv-atomos-y-balas-de-canon (03.06.2016)
- [28] Figure 2 : L'empilement cubique à faces centrées et l'empilement hexagonal compact https://en. wikipedia.org/wiki/Kepler_conjecture#/media/File:Closepacking.svg (03.06.2016)
- [29] Figure 3 : "Kissing numbers" en dimension d = 3 (12) https://en.wikipedia.org/wiki/Kissing_ number_problem#/media/File:Kissing-3d.png (03.06.2016)
- [30] Figure 6 : Mouvement brownien unidimensionnel en fonction du temps et mouvement brownien en deux dimension http://images.math.cnrs.fr/Le-mouvement-brownien-et-son.html (09.06.2016) https: //commons.wikimedia.org/wiki/File:BrownianMotion.svg?uselang=fr (19.05.2016)