# Densité des Arrangements de Disques et de Sphères Aspects Théoriques et Computationnels de l'Approche de Densité Locale<sup>\*</sup>

Daria Pchelina

### 1 Des pièces de monnaie aux oranges et au-delà

Comment placer des pièces d'un euro,  $\bigcirc$ , (des disques identiques) sur une table (un espace de deux dimensions) sans chevauchement pour recouvrir le plus de surface ?<sup>1</sup> Après une brève réflexion, le lecteur est probablement tombé sur l'un de deux arrangements de la Figure 1. L'arrangement à gauche recouvre approximativement 78% de la surface alors que celui de droite, que l'on appelle *l'arrangement hexagonal*, couvre plus de 90% de la surface. L'arrangement hexagonal est la solution optimale qui est d'ailleurs utilisée par les abeilles depuis bien longtemps (Fig. 2).



Fig. 1: Deux façons d'arranger des pièces d'un euro. Fig. 2: Nid d'abeille.

Considérons la version tridimensionnelle de la même question : quel est l'empilement d'oranges <sup>2</sup> le plus compacte ? Pour trouver la réponse, il suffit de faire un tour au marché : les pyramides d'oranges que l'on y voit sur des étals sont optimales (Fig. 3). Kepler était le premier à émettre la conjecture que cet empilement, qu'il appelle celui des "balles de canon" dans un livret publié en 1611, soit optimal. Il le décrit comme une superposition des couches des arrangements de sphères posés sur un plan, représentées par la Figure 4. La conjecture de Kepler n'a été démontrée qu'en 1998 par une longue preuve assistée par ordinateur. Nous reparlerons de cette preuve dans la Section 3.

Ceux dont l'imagination n'est pas limitée par notre monde physique se posent les questions sur les empilements de boules dans des espaces de dimensions supérieures.

<sup>\*</sup>Vous trouverez mon manuscrit de thèse à cette adresse.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>La forme de la table peut avoir une influence, mais on s'intéresse au cas d'une table infinie.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Nos oranges sont parfaitement sphériques et sont tous de la même taille.



Fig. 3: Oranges sur un étal du marché.



Fig. 4: Illustrations de Kepler [Kep11].

En réalité, ce domaine très abstrait a des applications en cryptographie pour les codes correcteurs erreurs. Par ailleurs, la résolution du problème d'empilement de boules dans les dimensions 8 et 24 a apporté la médaille Fields à Marina Vyasovska en 2022.

L'autre généralisation du problème d'arrangement des pièces de monnaie sur une table c'est d'utiliser des pièces de deux tailles. Par exemple, la meilleure façon de recouvrir la table avec ces deux pièces de monnaie :



est donnée dans la Figure 5, à gauche. La solution varie selon le ratio entre les rayons des pièces ; ainsi, les arrangements représentés au centre et à droite de la Figure 5 sont chacun optimaux pour le ratio entre les rayons de leur paire de disques. L'optimalité de ces trois arrangements a été démontrée dans trois articles distinctes publiées entre 2003 et 2022 par des groupes des chercheurs différents. Nous parlerons de ces résultats en détail dans la Section 2.



Fig. 5: Des arrangements optimaux pour quelques paires de pièces de monnaies.

Augmenter la dimension de l'espace que l'on cherche à couvrir ou augmenter le nombre de boules différentes utilisables sont deux manières d'augmenter la combinatoire de ces problèmes d'empilement. Les premiers travaux de ma thèse considèrent le cas de trois disques. J'ai démontré, entre autres, l'optimalité des arrangements représentés par la Figure 17. Section 2.3 couvre ce résultat, ainsi que quelques autres.

Les seconds travaux de ma thèse envisagent de complexifier d'avantage le problème en augmentant à la fois la dimension et le nombre de sphères : 2 tailles de sphères en 3 dimensions. Nous sommes alors en face du problème de l'empilement le plus dense d'une paire de sphères. Par exemple, considérons l'empilement des oranges et de cerises de la Figure 6 : chaque cerise est pile de la bonne taille pour être insérée dans un trou entre six oranges. Cet empilement reproduit exactement la configuration des ions de sodium (oranges) et de chlore (cerises) dans la structure cristalline du chlorure de sodium appelée *halite* – la composante principale, une fois pilé, du sel de table.



Fig. 6: Comment insérer des cerises dans l'empilement des oranges (à gauche) pour obtenir la structure atomique d'un crystal de sel (à droite).

Cette remarque amène naturellement à l'application de ces types de problème : les chimistes s'intéressent à nos études sure les arrangements de disques et de sphères afin de concevoir éventuellement des matériaux compacts en utilisant des nanoparticules sphériques de tailles données [PDKM15, HST12]. Il s'avère que l'auto-assemblage de nanoparticules sphériques et cylindriques correspond souvent à des empilement de disques ou de sphères optimaux [CCMFT23]. Figure 7 représente une illustration des résultats expérimentaux provenant de [PDKM15]. J'ai eu l'opportunité de me familiariser avec ces applications lors de la conférence "Géométrie et Matériaux", dans le cadre du projet 80-Prime CNRS INS2I-INC "Assemblage de Supercristaux par Approche Prédictive" dirigé par Thomas Fernique et Simon Tricard, LPCNO.



Fig. 7: Les configurations auto-assemblés à partir de nanodisques et nanotiges colloïdaux dans [PDKM15] correspondent très précisément à des arrangements de disques optimaux.

Les questions typiques du domaine des empilements portent généralement sur des motifs réguliers (pour diverses définitions de la régularité) qui sont souvent optimaux (selon divers sens)<sup>3</sup>. La notion de motif peut également être définie de différentes manières : mon travail est dédié aux empilements (les sphères ne peuvent pas se chevaucher), tandis que l'on pourrait s'intéresser aux recouvrements (l'union des sphères doit recouvrir l'ensemble de l'espace).

Le domaine des empilements optimaux fait partie du royaume de "la géométrie intuitive" — le terme introduit par László Fejes Tóth pour décrire les problèmes de géométrie qui sont faciles à énoncer et extrêmement difficiles à résoudre, comme la conjecture de Kepler ou le théorème de quatre couleurs <sup>4</sup>. De nos jours, le terme "difficile" implique souvent le recours à une assistance informatique, comme cela s'est produit pour la démonstration de la conjecture de Kepler [HF06] et pour le théorème des quatre couleurs [AH89]. Les deux preuves partagent des idées similaires de "localisation" dont on parlera dans la Section 2. Les problèmes de ce genre se situent à la frontière du continu et du discret ; pour les résoudre, il faut combiner des outils théoriques (continus) et des calculs informatiques (discrets). Les deux sont essentiels : une base théorique solide doit être établie pour rendre les calculs informatiques réalisables en termes de coûts temps/mémoire.

## 2 Disques, triangulations et ciseaux

Soit S un ensemble de disques. Un arrangement de disques de S est une configuration des copies de disques de S sur le plan telle que les disques ne se chevauchent pas. Pour mesurer l'optimalité d'un arrangement de disques, on introduit la notion de la densité.

Soit P un arrangement de disques et X un ensemble compact du plan, la densité de P à l'intérieur de X notée par  $\delta|_X(P)$  est formallement défini comme

$$\delta(P,X) := \frac{A(X \cap P)}{A(X)},$$

où A(X) représente l'aire de X.

La densité de l'arrangement P, notée  $\delta(P)$ , est la proportion du plan couverte par les disques de l'arrangement.

$$\delta(P) := \limsup_{n \to \infty} \delta(P, B_n),$$

où  $B_n$  designe le disque de rayon n centré à l'origine.

Notre problème principal est le suivant : étant donné un ensemble de disques S, trouver la densité maximale d'un arrangement du plan avec ces disques. Nous désignons cette valeur par  $\delta_S$  et la définissons formellement comme suit :

$$\delta_S := \sup_{P \text{ est un arrangement par } S} \delta(P)$$

Tout arrangement qui atteint la densité maximale est appelé optimale.

Dans les sections qui suivent, on va d'abord découvrir la preuve de l'optimalité de l'arrangement hexagonal mentionné ci-dessous ; ensuite on parlera des arrangements optimaux à deux disques ; on va conclure par mes résultats sur les arrangements optimaux à trois disques.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>J'invite le lecteur à consulter le livre de László Fejes Tóth [FT64] pour en savoir plus sur les liens entre la régularité et l'optimalité.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Pour apprendre d'avantage sur l'histoire du problème de quartes couleurs et de sa résolution, le lecteur peut consulter le livre de Robert Wilson accessible au grand public [Wil13].

## 2.1

Revenons au sujet par lequel nous avons commencé : les arrangements de disques identiques (ou *arrangements à un disque*). Pour simplifier, nous considérons les arrangements de disques unitaires (i.e. de rayon 1) <sup>5</sup>. Comme mentionné dans la première section, l'arrangement hexagonal, représenté dans les Fig. 8 et 10a, est optimal dans ce cas là. Sa densité s'écrit comme

$$\delta_{\rm hex} := \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.9069 \approx 91\%$$

Son optimalité n'a été formellement démontré qu'en 1942 par Fejes Tóth [FT42]. Nous allons nous intéresser à une version simplifié de cette preuve qui comporte des idées sur lesquelles se reposent tous les résultats qui suivent <sup>6</sup>.

Notre but est de démontrer qu'aucun arrangement de disques unitaires n'est plus dense que l'arrangement hexagonale. Chaque arrangement étant un objet infini, on est donc obligé d'analyser un nombre infini d'objets infinis ... Pour faire cela, nous allons considérer un arrangement quelconque et le découper en petits morceaux pour ensuite démontrer qu'aucun de ces morceaux n'est plus dense que  $\frac{\pi}{2\sqrt{3}}$ .

Un arrangement P est appelé saturé s'il est impossible de placer un disque de plus sur le plan sans qu'il n'intersecte les disques de P. Désormais, nous ne considérons que des arrangements saturés : en effet, l'ajout des disques ne diminuant pas la densité, une borne supérieure sur la densité des arrangements saturés est une borne supérieure pour tous les arrangements. Fig. 8 et 9 représentent des arrangement saturés; des exemples d'arrangements non-saturés à 2 disques sont donnés par Fig. 12a et 12c.



Fig. 8: La cellule de Voronoï d'un disque de l'arrangement hexagonale.



Fig. 9: Un arrangement saturé et la cellule de Voronoï d'un de ces disques.

Soit P un arrangement saturé. Nous allons le découper en "petits" triangles dont les sommets seront les centres des disques. Pour faire cela, nous allons d'abord attribuer à chaque disque sa *cellule de Voronoï* — l'ensemble de points du plan qui sont plus proches du centre de ce disque que de ceux des autres disques (cf. Fig. 8, 9, en rouge). L'ensemble de cellules de Voronoï de tous les disques forment une partition du plan appelée le *Diagramme de Voronoï*; la Figure 10 présente les diagrammes de Voronoï (tracées en rouge) de deux arrangements. Nous allons dessiner le *graphe dual* du diagramme de Voronoï : ses sommets sont les centres des disques, deux centres de disques sont lié par une arête si et seulement si leurs cellules de Voronoï partagent

 $<sup>^5\</sup>mathrm{La}$  densité d'un arrangement ne change pas si on applique une homothétie.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Vous trouverez la version complète de la preuve dans [CW10]

un bord. Ce graphe, tracé en noir dans la Figure 10, s'appelle la triangulation de Delaunay  $^7.$ 



(a) Arrangement hexagonale.

(b) Un autre arrangement saturé.

Fig. 10: Diagrammes de Voronoï et triangulations de Delaunay.

Découpons chaque arrangement saturé en triangles suivant sa triangulation de Delaunay. Maintenant, à la place d'ensemble de tous arrangement saturés possibles, nous allons considérer l'ensemble de tous les triangles pouvant apparaître dans un arrangement saturé. Il se trouve, grâce aux propriétés des triangulations de Delaunay des arrangements saturés, que la densité d'un tel triangle ne dépasse jamais  $\frac{\pi}{2\sqrt{3}}$ , la densité de l'arrangement hexagonal. Ne présentant pas d'intérêt particulier, on omet la preuve de cet énoncé dans ce résumé ; vous la trouverez dans le papier d'origine [CW10] ainsi que dans mon manuscrit (Section 2.1.2, pages 22–23).

Par conséquent, étant donné un arrangement saturé P, la densité d'aucun de ses triangles ne dépasse la densité de l'arrangement hexagonal ; donc la densité de l'intégralité de P ne peut pas dépasser cette valeur, ce qui conclu la preuve :



### 2.2

Maintenant que l'on connais l'arrangement optimal par des disques identiques, en plus de disques unitaires ( $\bigcirc$ ) rajoutons la possibilité d'utiliser des copies d'un deuxième, plus petit, disque ( $\bigcirc$ ) de rayon r < 1. La densité maximale des arrangements à 2 disques avec le disque unitaire et le petit disque de rayon r < 1 est notée  $\delta_r$ .

Pour certaines valeurs de r (seulement 9), l'arrangement optimal est connu : c'est le cas pour les arrangements représentés par la Figure 13. Nous reparlerons de ces arrangements dans la Section 2.2.1.

Quelquefois nous n'arrivons pas à trouver la densité maximale  $\delta_r$ , on essaiera alors d'en trouver des bornes. Par exemple, en utilisant qu'un seul des disques, nous pouvons toujours obtenir la densité de l'arrangement hexagonal  $\delta_{\text{hex}} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}$ ; cela nous donne une borne inférieure de la densité maximale quelque soit le rayon du petit disque. Cette borne est tracée en vert dans la Figure 11.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Plus précisément, on peut toujours obtenir une triangulation à partir du graphe dual, le lecteur trouvera plus de detail sur les triangulations de Delaunay dans mon manuscrit (Section 2.1.2, pages 20–21).

L'utilisation du deuxième disque permet potentiellement d'obtenir une densité supérieure à  $\delta_{\text{hex}}$ . Par exemple, si le petit disque s'insère dans le trou entre trois grands disques tangents deux à deux, placer un petit disque dans chaque trou de l'arrangement hexagonal augmente strictement la densité. Tout de même, si la taille du petit disque se rapproche de celle du grand, l'utilisation du deuxieme disque n'augmente pas la densite maximale.

Florian a utilisé le découpage en triangles de la section précédente pour obtenir une borne supérieure sur la densité maximale d'un arrangement à deux disques [Flo60]. Il a démontré que quelque soit l'arrangement, aucun triangle de sa triangulation <sup>8</sup> n'est plus dense que le triangle formé par deux petits disques et un grand disque mutuellement tangents : la Figure 11 (en bleu) représente la borne de Florian en fonction de la valeur de r.

9 ans plus tard, Blind a obtenu une autre borne en utilisant un autre règle de découpage : à la place de triangles de la triangulation de Delaunay, il utilisait les polygones de diagramme de Laguerre [Bli69]. Cela lui a permis de borner la densité maximale d'un arrangement par la densité de l'union d'un heptagone régulier circonscrit à un disque unitaire et d'un pentagone régulier circonscrit à un disque de rayon  $r^{9}$  La borne de Blind est tracée en rouge dans la Figure 11; remarquons que cette borne fourni une valeur  $q_B \approx 0.74$  (•) tel que pour tout r supérieur à  $q_B$ , l'arrangement le plus dense est l'arrangement hexagonale n'utilisant qu'une seul taille de disque.

#### 2.2.1 Arrangements triangulés

Obtenir une borne de densité précise pour tous les rayons de disques possibles est difficile. Commençons donc par l'autre bout : quels arrangements semblent très denses ? Nous avons démontré que pour les arrangements de disques identiques, l'arrangement hexagonal est optimal. Remarquons que la triangulation de cet arrangement se compose de triangles identiques formes par trois disques mutuellement tangents (Fig. 10a). La preuve de son optimalité se repose d'ailleurs sur le fait que de tels triangles sont les plus compactes parmi ceux qui risque d'apparaître dans des arrangements saturés. Nous allons généraliser cette propriété de l'arrangement hexagonale.

Premièrement, nous définissons le graphe de contact d'un arrangement comme un graphe dont les sommets sont les centres des disques et chaque arête correspond à une paire de disques tangents (Fig. 12c–12d représentent quatre exemples d'arrangements avec leurs graphes de contact). Appelons un arrangement triangulé si son graphe de contact est une triangulation, i.e. toutes ses faces sont triangulaires ; les Figures 12c, 12d présentent deux exemples d'arrangements triangulés avec leurs graphes de contact. Une définition informelle est que chacun des "trous" d'un arrangement triangulé est délimité par trois disques mutuellements tangents. Comme illustré par Fig. 12a–12d, les propriétés d'être triangulé ou saturé sont orthogonales.

Fejes Tóth dans [FT84] appelle les arrangements triangulés "compacts" : comme ils n'ont pas de "grands trous", ils semblent intuitivement être les plus compacts. De plus,

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>La définition de la triangulation de Delaunay se généralise assez naturellement au cas d'arrangements à plusieurs disques ; cette généralisation, introduit dans [FTM58], s'appelle la *triangulation FM*. Pour plus de détail, le lecteur peux consulter la Section 2.2.1, page 24 de mon manuscrit de thèse, ainsi que la chapitre VI du livre de Fejes Tóth [FT64]. Les lecteurs maîtrisant l'allemand peuvent également consulter le papier original [FTM58].

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Vous trouverez la définition des diagrammes de Laguerre ainsi que la version simplifié de la preuve de Blind dans la Section 2.2.2, pages 36–39 de mon manuscrit de thèse.



Fig. 11: Les bornes de Florian (en bleu) et de Blind (en rouge) ainsi que la densite de l'arrangement hexagonale (en vert). Le rayon  $q_B$  (•) est le valeur de r limites obtenu avec la borne de Blind à partir du quel l'arrangement hexagonale est optimale : i.e. l'utilisation du deuxieme disque n'augment pas la densite maximale.



autour de chaque disque, ses voisins forment une "couronne" de disques tangents qui semblent être la configuration localement optimale. Pour ces raisons, les arrangements triangulés saturés semblent être les meilleurs candidats pour maximiser la densité.

Nous appelons une valeur de r triangulée si elle permet des arrangements triangulés comprenant à la fois des disques unitaires et des disques de rayon r. Toutes les valeurs de r ne sont pas triangulées : pour comprendre cela, il suffit d'essayer d'assembler ensemble sur une table quelques pièces de monnaie de deux tailles de manière parfaitement triangulée <sup>10</sup>.

En 2006, Kennedy a démontré qu'il n'y a que 9 valeur de r permettant des arrangements triangulés où les deux tailles de disque sont présents. Nous notons ces valeurs

 $<sup>^{10}</sup>$ En réalité, en utilisant les pièces de deux euros et 5 centimes, on peut se rapprocher d'un arrangement triangulé... Le lecteur motivé est invité à le retrouver.

 $r_1, \ldots, r_9$ ; Fig. 13 représente leurs arrangement triangulés respectifs maximisant la densité. Chacun de ces arrangements est *périodique*, c'est-à-dire qu'il existe deux vecteurs non colinéaires, appelés périodes, tels que le décalage par ces vecteurs conserve l'arrangement. Dans ces travaux, nous considérons toujours des arrangements de l'ensemble du plan, et puisque les arrangements triangulés que nous montrons ici et ci-dessous sont tous périodiques, il suffit de représenter leur domaine fondamental (un parallélogramme formé par les vecteurs de période, marqué en noir dans Fig. 13) pour voir comment le plan entier est arrangé.



Fig. 13: Arrangements binaires triangulés périodiques correspondant aux cas  $b_1, \ldots, b_9$ .

Ces arrangements ne sont pas les seuls arrangements triangulés correspondant aux rayons triangulés r. Il existe un nombre infini d'arrangements triangulés pour certains r, qui sont décrits dans [Ken06] et n'ont d'ailleurs pas tous la même densité.

Une paire de disques avec des rayons  $1, r_i, i \in \{1, \ldots, 9\}$  est appelée un *cas binaire*. Les cas binaires sont désignés par  $b_1, \ldots, b_9$ . Il s'avère que pour chacun des neuf cas binaires, la densité est maximisée par un arrangement binaire triangulé — l'un de ceux qui sont montrés dans la Figure 13. Heppes dans [Hep00] a montré que l'arrangement triangulé de  $b_4$  (représenté dans la Fig. 13), où  $r_4 = \sqrt{2} - 1$ , maximise la densité parmi tous les arrangements à 2 disques avec des disques de rayons 1 et  $r_4$ . Trois ans plus tard, Heppes a généralisé sa méthode pour montrer le même résultat pour 5 autres cas:  $b_1, b_3, b_6, b_7$  et  $b_8$  [Hep03]. Malgré de nombreux efforts d'écriture, sa preuve est difficile à comprendre en raison de l'analyse de cas complexe faite à la main; c'est la raison pour laquelle les résultats suivants dans le domaine ont été assistés par ordinateur. En effet, séparer la démonstration en une ligné d'idées claires lisible par l'homme du code informatique traitant l'énumération des cas permet à la fois une meilleure compréhension et une meilleure fiabilité. La prochaine avancée a été réalisée par Kennedy qui a introduit la méthode des *potentiels localisants*, inspirée par les potentiels de la mécanique statistique classique. Cette nouvelle approche lui a permis de traiter  $b_2$  [Ken05]. Enfin, la technique nécessaire pour aborder les 2 cas triangulés restants  $b_5, b_9$  a été fournie par Bedaride et Fernique [BF22].

En modifiant la méthode utilisée dans le dernier résultat, Fernique a obtenu de nouveaux bornes sur la densité qui nous fournissent une description quasi complète du comportement de la densité maximale en fonction de la taille de petit disque [Fer22]. Ces bornes sont représentées par la Figure 14



Fig. 14: Les bornes de Fernique.



L'utilisation de toujours plus de tailles de disques permet potentiellement d'augmenter la densité, mais complique l'étude en augmentant la combinatoire. Précédement, nous avons vu que l'arrangement hexagonale, i.e. le seul arrangement triangulé de disques identiques, est optimal. On a appris également que pour toutes les paires de disques ayants un arrangement triangulé, ce dernier était optimal. Ces résultats suggèrent la conjecture suivante formulée par Connelly lors de la *conférence pour le 60e anniversaire de Thomas C. Hales* en 2018 [CGSY18].

**Conjecture 1 (Connelly, 2018)** Si un ensemble fini de disques permet un arrangement saturé triangulé, alors la densité d'un arrangement utilisant ces disques est maximisée par un arrangement triangulé.

Comme l'énoncé ci-dessus est vrai pour les arrangements à un disque et à 2 disques, la prochaine étape dans l'étude de cette conjecture est de la vérifier pour les arrangements à 3 disques (ou *arrangements ternaires*).

Pour commencer, nous devons trouver les tailles de disques permettant des arrangements ternaires triangulés. Ce problème a été résolu en 2021 par Fernique, Hashemi et Sizova : il existe 164 paires (r, s) permettant des arrangements triangulés avec des disques de rayons 1, r, s, 1 > r > s [FHS21].

Ici et par la suite, le triplet de disques avec les rayons associés à chacune de ces paires est appelé un *triplet triangulé* (ou simplement un *triplet*). Les triplets triangulés sont indexés par des entiers positifs de 1 à 164, comme dans [FHS21]. Dans ma thèse, j'ai étudié des arrangements à ternaires les plus denses pour les triplets triangulés : plus précisément, je cherchais à déterminer si les arrangements triangulés étaient toujours optimaux, comme le dit la Conjecture 1.

Contrairement aux arrangements à un seul disque, un simple découpage en triangles ne suffit pas pour démontrer l'optimalité d'un arrangement à plusieurs disques. Ceci est due au fait que dans un arrangement à plusieurs tailles de disques, plusieurs type de triangles sont présents (Figure 15), dont certains plus denses que la densité de l'arrangement triangulé. Pour obtenir la preuve d'optimalité, nous utilisons une méthode appelée "cell balancing" par Heppes [Hep03] qui correspond à répartir la densité entre les cellules. Car en effet, même si certains triangles sont particulièrement denses, certains de leurs voisins le sont en général beaucoup moins comme illustré sur la Figure 16. Cette méthode se compose de deux étapes : tout d'abord, nous redistribuons localement la densité parmi certaines cellules en préservant la valeur de la densité globale. Ensuite, nous prouvons que la densité redistribuée de toute cellule de l'arrangement n'excède jamais la densité cible.





Fig. 15: La triangulation d'un arrangement triangulé et deux de ces triangles.

Fig. 16: Illustration de la redistribution de la densité.

La technique de redistribution de la densité accompagnée par une vaste assistance par ordinateur m'a permis de démontrer l'optimalité de 16 arrangements représentés dans la Figure 17. J'ai également démontré l'optimalité des arrangements triangulés à deux disques représentés par la Figure 13 pour 16 triplets de la Figure 18. Ce sont les cas où considérer une taille de disques supplémentaire (disque bleu) n'augmente pas la densité maximale. Enfin, j'ai fourni 45 contre-exemples à la conjecture. Un seul contreexemple aurait suffit, mais de par la nature énumérative et informatiquement assistées de nos techniques de preuves, ces 45 contre-exemples sont apparus naturellement.



Fig. 17: Arrangements optimaux à trois disques.



Fig. 18: Les cas ternaires où les arrangements optimaux utilisent que deux disques sur trois. Pour les cas 1 à 5, il s'agit de l'arrangement triangulé de  $b_8$  (Fig. 13); pour le cas 6 —  $b_4$ ; pour les cas 7 à 9 —  $b_7$ ; pour les cas 10 à 15 —  $b_9$ , pour le cas 19 —  $b_6$ .

#### Contre-exemples à la conjecture

Lorsque le ratio entre deux des trois disques est suffisamment proche de celui d'un arrangement binaire optimal, il est possible d'empiler ces trois disques d'une manière similaire (non triangulé) et toujours obtenir une haute densité.

En commençant à travailler sur la densité des arrangements triangulés ternaires, nous croyions que la conjecture de Connelly était vraie, c'est-à-dire que pour chacun des cas, un arrangement triangulé maximiserait la densité. Notre stratégie de preuve ayant échouée pour beaucoup de triplets, nous avons remis en question la conjecture. La densité des arrangements triangulés binaires (qui sont représentés par la Figure 13) dépasse souvent la densité de la majorité des arrangements triangulés ternaires, ce qui nous suggère de les utiliser afin de trouver des contre-exemples (c'est-à-dire des cas ayant un arrangement non triangulé qui est plus dense que tout arrangement triangulé).

Les paires de disques permettant des arrangements triangulés binaires sont désignées par  $b_1, \ldots, b_9$ , tandis que les triplets avec des arrangements triangulés ternaires sont indexés par des entiers positifs de 1 à 164. Illustrons notre méthode sur un exemple. Prenons le cas 73 ; son arrangement ternaire triangulé est montré dans la Figure 19, à droite. Remarquez que le rayon du petit disque ( $s_{73} \approx 0.264$ ) du cas 73 est proche du rayon du petit disque ( $r_{b_7} \approx 0.281$ ) du cas  $b_7$ .

Nous allons déformer l'arrangement binaire triangulé  $b_7$  (Figure 19, à gauche), en remplaçant le petit disque de  $b_7$  par le plus petit disque du cas 73. Nous choisirons une déformation qui rompt le moins de contacts entre les disques. La déformation est illustrée au centre de la Figure 19. Remarquez que le seul contact brisé est entre les deux petits disques : ils ne sont plus tangents. La densité de cette déformation est légèrement supérieure à la densité de l'arrangement ternaire triangulé, ceci est donc in contre-exemple. Pour plus de détail sur les contre-exemples, je vous invite de consulter la Section 3.6 de ma thèse.



Fig. 19: À gauche : un arrangement binaire triangulé du cas  $b_7$ . Au milieu : une déformation où les petits disques sont remplacés par les petits disques du cas 73. À droite : un arrangement périodique triangulé du cas 73, son domaine fondamental et sa description sont données dans [FHS21].

### 3 Sel de cuisine, tétraèdres et ordinateur

## 3.1

Jusqu'à récemment, la preuve de la conjecture de Kepler se démarquait comme le résultat le plus connu dans le domaine des empilements de sphères. Cette conjecture remonte à 1611 lorsque Kepler a affirmé que l'empilement de "balles de canon" maximisait la densité parmi les empilements de sphères [Kep11]. Cet empilement appartient à une famille d'*empilements compacts* qui peuvent être construits en superposant des couches de sphères placées comme dans l'empilement hexagonal (voir Fig. 21, 3). Ils ont tous la même densité,  $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74048$ . Il a fallu 400 ans pour prouver cette affirmation, qui a été incluse dans la liste des problèmes de Hilbert comme partie du 18<sup>ème</sup> problème [Hil02]. Hales et Ferguson ont finalement résolu la conjecture de Kepler en 1998. Leur preuve, composée de 6 articles et de dizaines de milliers de lignes de code informatique, a pris plusieurs années à être examinée par un groupe de 12 relecteurs. Après tout, les relecteurs ont exprimé une confiance "à 99 %" dans la justesse de la preuve et sa version révisée a finalement été publiée en 2006 [HF06]. Hales a lancé un projet appelé Flyspeck visant à transformer son résultat en une preuve formelle à l'aide de deux assistants de preuve, achevé en 2017 [HAB<sup>+</sup>17].

Nous évoquons la conjecture de Kepler non seulement pour sa renommée, mais plutôt parce que notre preuve de l'optimalité des empilements de disques triangulés partage certaines idées et suit des étapes similaires à la preuve de Hales et Ferguson. Cela nous assure que nous n'aurions pas à modifier radicalement notre approche lors de l'étude des empilements de sphères en 3D (les techniques de preuve appliquées aux empilements en dimensions élevées, comme [Via17,DLDOFV14], sont très différentes). D'autre part, les distinctions entre notre preuve et la preuve de la conjecture de Kepler nous guident dans les ajustements nécessaires à notre approche pour la faire fonctionner en 3D.



Fig. 20: Configurations locales CFC (à gauche) et HC (à droite) de sphères et leurs graphes de contact.

L'empilement de "balles de canon" décrit par Kepler dans son manuscrit [Kep11], est aujourd'hui connu sous le nom d'*empilement cubique à faces centrées* (ou CFC). C'est un empilement régulier : les centres des sphères sont disposés aux sommets du réseau CFC, qui a donné son nom à l'empilement. La Fig. 20, à gauche, illustre la configuration locale de la CFC. Un empilement compact également dense généré par un autre réseau régulier, l'*empilement hexagonal compact* (ou HC), a été mentionné pour la première fois par Barlow en 1883 [Bar83] (Fig. 20, à droite). Il existe en fait une famille infinie d'empilements compacts, ayant tous la même densité  $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ , ils sont appelés les *empilements compacts*. Chaque empilement compact est construit en superposant les couches de sphères dont les centres forment un empilement hexagonal ; chaque nouvelle couche peut être placée de deux manières différentes par rapport aux deux couches précédentes (voir Fig. 21), nous obtenons donc un nombre non dénombrable d'empilements au final. Il existe cependant uniquement deux configurations locales autour d'une sphère, représentées par Figure 20, qui apparaissent dans les empilements compacts ; leurs deux cellules de Voronoï ont une densité de  $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ .



Fig. 21: Construction couche par couche des empilements compacts de sphères congruentes.

Gauss en 1831 [Gau31] a établi un lien entre les formes quadratiques et les réseaux qui implique que les empilements compacts maximisent la densité parmi les empilements de réseau. En 1993, ce résultat a été généralisé à la classe des empilements de chaînes parallèles de sphères par Bezdek, Kuperberg et Makai [BKMJ91].

Le résultat général s'est avéré beaucoup plus difficile. La conjecture de Kepler a même été incluse dans la liste des problèmes de Hilbert [Hil02] comme troisième partie du  $18^{\rm ème}$  problème en 1900. Les années suivantes, les chercheurs ont utilisé diverses approches pour obtenir des bornes supérieures de plus en plus serrées sur la densité maximale des empilements de sphères. Blichfeldt a obtenu les premières bornes supérieures (0.884 et 0.835) en 1919 et 1929 [Bli19, Bli29]. En 1958, Rogers a borné la densité d'un empilement par la densité à l'intérieur du tétraèdre formé par quatre sphères tangentes deux à deux (nous appelons de tels tétraèdres *tétraèdres serrés*), égal à  $\approx 0.7796$ , [Rog58]. La meilleure borne supérieure avant la résolution de la conjecture de Kepler était donnée par Muder [Mud93] et vaut  $\approx 0.773055$ .

La conjecture de Kepler est un problème d'optimisation continue (nous essayons de maximiser la fonction de densité sur l'ensemble de tous les empilements) avec un nombre infini de variables (il y a un nombre infini de sphères à empiler). László Fejes-Tóth a fait un grand pas vers la preuve de la conjecture de Kepler en proposant d'utiliser l'approche de densité locale [FT53]. Cette approche permet de réduire ce problème d'optimisation de dimension infinie à celui ayant un nombre fini de variables. De plus, il a été le premier à suggérer l'utilisation d'un ordinateur; dans son livre sur les figures régulières [FT64], il écrit :

Compte tenu de la complexité de cette fonction, nous sommes loin de tenter de déterminer le minimum exact. Mais, conscient du développement rapide de nos ordinateurs, il est imaginable que le minimum puisse être approximé avec une grande exactitude. L'approche initiale de Hales à la conjecture de Kepler [Hal92, Hal93] était basée sur la partition de Delaunay de l'espace et n'a pas abouti à une preuve complète. Par conséquent, il a adopté une partition hybride impliquant des simplex de Delaunay et des cellules de Voronoï modifiées. En collaboration avec Ferguson, Hales a achevé la première version de la preuve en 1997. Elle comprenait 6 prépublications et des dizaines de milliers de lignes de code informatique et, après plusieurs années de révision intensive par une équipe d'experts, la version améliorée a été publiée en 2006 [HF06]. Pendant ce temps, une version abrégée de cette preuve est parue dans Annals of Mathematics [Hal05].

En 2003, Hales a lancé un projet collaboratif mondial pour obtenir une preuve formelle de la conjecture de Kepler. Le projet a été nommé Flyspeck, qui est une expansion de "FPK", pour "the Formal Proof of the Kepler conjecture". Le but du projet était de construire une preuve formelle complète vérifiable par des assistants de preuve tels que HOL Light et Isabelle. Flyspeck a été achevé en 2014 ; trois ans plus tard, après un examen méticuleux par la communauté mathématique, la preuve formelle a été acceptée par le Forum of Mathematics [HAB<sup>+</sup>17].

Vous trouverez des informations détaillées sur l'histoire de la conjecture de Kepler et de sa preuve jusqu'en 2003 dans le livre de Szpiro destiné au grand public [Szp03].

## 3.2

En 2D, les seules bornes serrées sur la densité maximale des arrangements de disques ont été obtenues pour les cas où les arrangements triangulés maximisent la densité. En effet, avoir une structure combinatoire relativement simple du graphe de contact de l'arrangement optimal simplifie le problème. L'analogie tridimensionnelle des empilements triangulés sont les *empilements simpliciaux* c'est-à-dire ceux dont les graphes de contact se décomposent en tétrahèdres.

L'étude des empilements simpliciaux dans des dimensions supérieures est donnée dans [KM23] par Kikianty et Messerschmidt, généralisant le résultat bidimensionnel de [Mes23] à d'autres dimensions. Ils montrent que pour toute dimension d > 0 et tout nombre n > 0, l'ensemble des *n*-uplets  $r_1, \ldots, r_n$  tels que  $r_1 < \cdots < r_n = 1$  pour lesquels il existe un empilement simplicial de  $\mathbb{R}^d$  par des sphères de rayons  $r_1, \ldots, r_n$ (où des sphères de chacune des *n* tailles sont présentes), est fini.

Les empilements compacts ne sont pas simpliciaux : les graphes de contact des deux configurations locales autour d'une sphère, représentées dans la Figure 20, présentent des faces quadrilatérales. Par conséquent, des faces non triangulaires sont présentes dans le graphe de contact de tout empilement compact. Contrairement aux arrangements de disques, il n'y a pas d'empilement simplicial de sphères identiques en 3D.

Fernique a montré que la seule valeur de r permettant des empilements simpliciaux à 2-sphères est  $\sqrt{2} - 1$  [Fer21]. Les empilements simpliciaux des sphères de rayons 1 et  $\sqrt{2} - 1$ , que nous appelons *empilements halite*, sont construits en prenant un empilement compact et en remplissant ses trous octaédriques avec de petites sphères (un exemple est donné dans la Fig. 22), ceux sont les empilements par oranges et cerises de la première section (Fig 6). Nous appelons le couple de sphères de rayons 1 et  $\sqrt{2} - 1$ , les *sphères halite*.

Le nom choisi pour cette classe d'empilements vient de la chimie : l'halite est le nom minéral du chlorure de sodium et sa structure cristallographique correspond à un empilement cubique centré sur les faces d'ions chlorure dont les trous octaédriques



Fig. 22: Un exemple d'un empilement halite.

sont remplis d'ions sodium. Cette structure est courante parmi les cristaux à deux éléments [Sei40].

Tous les empilements halite ont la même densité, notée  $\delta_h$ ,

$$\delta_h := \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \left( 5\sqrt{2} - 6 \right) \approx 1.071 \cdot \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.7931048.$$

Nous conjecturons que cette densité est optimale :

**Conjecture 2** Les empilements halite maximisent la densité parmi les empilements par sphères de rayons 1 et  $\sqrt{2} - 1$ .

Cette conjecture semble un projet très complexe prenant en compte l'effort nécessaire pour prouver la conjecture de Kepler. Afin d'approcher ce résultat, j'ai commencé par chercher une borne supérieure (non serrée) à la densité maximale. Pour cela, je me suis inspirée de la borne de Florian mentionné dans la Section 2.2. Florian bornait la densité de l'arrangement par la densité du plus dense triangle, nous voudrions faire de même avec la densité du plus dense tétrahèdre. La généralisation de la triangulation dans 3D, appelée partition simpliciale, est illustrée par les Figures 23, 24.

Nous avons pas seulement retrouvé le tétrahèdre le plus dense, mais les tétrahèdres les plus denses pour chaque quadruplet de sphères (dont au plus deux diffèrent en taille), comme indiqué dans la conjecture ci-dessous.

Conjecture 3  $r = \sqrt{2} - 1$ 

Chacun des tétrahèdres suivants sont de densité maximale parmi ceux composés des mêmes sphères:



La preuve de cette conjecture étant un travail en cours nous avons tout de même réussi à démontrer l'optimalité de ces tétrahèdres dans une sous classe de tétrahèdres nommé "tétrahèdres étoilés" : ceux où une sphère est en contact avec trois autres. Pour obtenir ces résultats, nous avons eu besoin de l'utilisation d'outils théoriques ainsi que d'assistance par ordinateur.



Fig. 23: Limites des cellules de Voronoi d'une configuration de trois sphères.

Fig. 24: Intersection de cette configuration avec le plan passant par les centres des sphères.

### 4 Conclusion

Les principales contributions de ma thèse, à part de fournir des démonstrations alternatives pour des résultats déjà connus qui apparaissent principalement dans le Chapitre 2, comprennent l'étude de la densité des arrangements triangulés à 3-disques (Chapitre 3) et des empilements à 2 sphères (Chapitre 4). Le Théorème 3.1<sup>11</sup> fournit les densités d'arrangements optimales, réalisées par des empilements triangulés pour 32 triplets de tailles de disques représentés dans les Figures 17, 18, tandis que le Théorème 3.2 prouve pour 45 autres triplets que la densité optimale n'est jamais atteinte par un empilement triangulé. Le Théorème 4.1<sup>12</sup> donne des bornes serrées détaillées sur la densité locale à l'intérieur d'une cellule d'une partition simpliciale d'un empilement de 2-sphères. Les tétraèdres maximisant la densité parmi une classe de tétraèdres d'étoile sont représentées dans ce texte dans la Conjecture 3.

L'étude de la densité des arrangements de disques et des sphères demande une maitrise de techniques variés de la géometrie et de l'informatique, illustrés dans les Figures 25, 26.

Les problèmes ouverts soulevé dans mon manuscrit sont nombreux <sup>13</sup>. Des bornes sur la densite maximale des arrangement a trois disques pourraient e tre obtenue en combinant les resultat de Fernique pour 2 tailles de disques avec nos resultats sure les arrangements ternaires. Une borne superieur a la densite d'un empilement pour les autres paires de spheres pourrait etre obtenu en ameliorant nos methodes. Le probleme le plus ambetieux et important est la Conjecture 2, que l'on peut appeler la conjecture de Kepler à deux spheres; je donne dans mon manuscrit <sup>14</sup> quelques indices sur une possible approche.

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Chapitre 3, page 49.

 $<sup>^{12}</sup>$ Chapitre 4, page 117.

 $<sup>^{13}</sup>$ Capitre 5

 $<sup>^{14}</sup>$ Chapitre 5, page 134



(a) Propriétés des triangulations (b) ... et "tétraédrisations" (c) Géométrie différentielle

Fig. 25: Illustrations des méthodes géométriques utilisées dans ma thèse.



Fig. 26: Illustrations des types d'assistance informatique utilisées dans ma thèse.

## References

[AH89]	K. I. Appel and W. Haken. <i>Every Planar Map is Four Colorable</i> . Con- temporary mathematics - American Mathematical Society. American Mathematical Society, 1989.
[Bar83]	W. Barlow. Probable nature of the internal symmetry of crystals. <i>Nature</i> , 29:186–188, 1883.
[BF22]	N. Bedaride and T. Fernique. Density of binary disc packings: The nine compact packings. <i>Discrete &amp; Computational Geometry</i> , 67:1–24, 2022.
[BKMJ91]	A. Bezdek, W. Kuperberg, and E. Makai Jr. Maximum density space packing with parallel strings of balls. <i>Discrete &amp; Computational Geometry</i> , 6:227–283, 1991.
[Bli19]	H. F. Blichfeldt. Report on the theory of the geometry of numbers. Bulletin of the American Mathematical Society, $25(10)$ :449 – 453, 1919.
[Bli29]	H. F. Blichfeldt. The minimum value of quadratic forms, and the closest packing of spheres. <i>Mathematische Annalen</i> , 101:605 – 607, 1929.
[Bli69]	G. Blind. Über Unterdeckungen der Ebene durch Kreise. Journal für die Reine Angewandte Mathematik, pages 145–173, 1969.
[CCMFT23]	Clémence Chinaud-Chaix, Nataliia Marchenko, Thomas Fernique, and Simon Tricard. Do chemists control plane packing, i.e. two-dimensional

self-assembly, at all scales? New Journal of Chemistry, 47(15):7014–7025, April 2023. Publisher: The Royal Society of Chemistry.

- [CGSY18] R. Connelly, S. Gortler, E. Solomonides, and M. Yampolskaya. Circle packings, triangulations, and rigidity. Oral presentation at the conference for the 60th birthday of Thomas C. Hales, 2018.
- [CW10] H. Chang and L. Wang. A simple proof of thue's theorem on circle packing. https://arxiv.org/abs/1009.4322, 2010.
- [DLDOFV14] D. De Laat, F. M. De Oliveira Filho, and F. Vallentin. Upper bounds for packings of spheres of several radii. Forum of Mathematics, Sigma, 2:e23, 2014.
- [Fer21] T. Fernique. Compact packings of space with two sizes of spheres. Discrete & Computational Geometry, 65(4):1287–1295, 2021.
- [Fer22] T. Fernique. Density of binary disc packings: Lower and upper bounds. Experimental Mathematics, pages 1–12, 2022.
- [FHS21] T. Fernique, A. Hashemi, and O. Sizova. Compact packings of the plane with three sizes of discs. *Discrete & Computational Geometry*, 66(2):613–635, 2021.
- [Flo60] A. Florian. Ausfüllung der Ebene durch Kreise. Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo, 9:300–312, 1960.
- [FT42] L. Fejes Tóth. Über die dichteste Kugellagerung. Math. Z., 48:676–684, 1942.
- [FT53] L. Fejes Tóth. Lagerungen in der Ebene, auf der Kugel und im Raum. Springer, Berlin, Heidelberg, 1953.
- [FT64] L. Fejes Tóth. Regular Figures, volume 48 of International Series of Monographs on Pure and Applied Mathematics. Macmillan, 1st edition, 1964.
- [FT84] L. Fejes Tóth. Compact packing of circles. Studia Sci. Math. Hungar., 19:103–107, 1984.
- [FTM58] L. Fejes Tóth and J. Molnár. Unterdeckung und Uberdeckung der Ebene durch Kreise. Mathematische Nachrichten, 18:235–243, 1958.
- [Gau31] C. F. Gauss. Untersuchungen über die Eigenschaften der positiven ternären quadratischen Formen von Ludwig August Seber. *Göttingische* gelehrte Anzeigen, 1831.
- [HAB<sup>+</sup>17] T. C. Hales, M. Adams, G. Bauer, D. T. Dang, J. Harrison, T. L. Hoang, C. Kaliszyk, V. Magron, S. McLaughlin, T. T. Nguyen, T. Q. Nguyen, T. Nipkow, S. Obua, J. Pleso, J. Rute, A. Solovyev, A. H. T. Ta, T. N. Tran, D. T. Trieu, J. Urban, K. K. Vu, and R. Zumkeller. A formal proof of the Kepler conjecture. *Forum of Mathematics, Pi*, 5:e2, 2017.

[Hal92]	T. C. Hales. The sphere packing problem. <i>Journal of Computational and Applied Math</i> , 44:41–76, 1992.
[Hal93]	T. C. Hales. Remarks on the density of sphere packings in three dimensions. <i>Combinatorica</i> , 13(2):181–197, 1993.
[Hal94]	T. C. Hales. The status of the Kepler conjecture. <i>The Mathematical Intelligencer</i> , 16(3):47–58, 1994.
[Hal05]	T. C. Hales. A proof of the Kepler conjecture. Annals of Mathematics, 162(3):1065–1185, 2005.
[Hep00]	A. Heppes. On the densest packing of discs of radius 1 and $\sqrt{2} - 1$ . Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica, 36:433–454, 2000.
[Hep03]	A. Heppes. Some densest two-size disc packings in the plane. <i>Discrete</i> & Computational Geometry, 30:241–262, 2003.
[HF06]	T. C. Hales and S. P. Ferguson. The Kepler conjecture. Discrete & Computational Geometry, $36(1)$ :1–269, 2006.
[Hil02]	D. Hilbert. Mathematical problems. Bulletin of the American Mathematical Society, 8(10):437 – 479, 1902.
[HST12]	A. B. Hopkins, F. H. Stillinger, and S. Torquato. Densest binary sphere packings. <i>Phys. Rev. E</i> , 85:021130, 2012.
[Ken05]	T. Kennedy. A densest compact planar packing with two sizes of discs. https://arxiv.org/abs/math/0412418, 2005.
[Ken06]	T. Kennedy. Compact packings of the plane with two sizes of discs. Discrete & Computational Geometry, 35(2):255–267, 2006.
[Kep11]	J. Kepler. Strena Seu de Niue Sexangula. 1611. Translated by Hardie, C. in J. Kepler, The Six-Cornered Snowflake, Oxford University Press, 1966.
[KM23]	E. Kikianty and M. Messerschmidt. On compact packings of Euclidean space with spheres of finitely many sizes. <i>https://arxiv.org/abs/2305.00758</i> , 2023.
[Mes23]	M. Messerschmidt. The number of configurations of radii that can occur in compact packings of the plane with discs of $n$ sizes is finite. Discrete & Computational Geometry, 2023.
[Mud93]	D. J. Muder. A new bound on the local density of sphere packings. Discrete & Computational Geometry, 10(4):351–375, 1993.
[PDKM15]	T. Paik, B. T. Diroll, C. R. Kagan, and C. B. Murray. Binary and ternary superlattices self-assembled from colloidal nanodisks and nanorods. <i>Journal of the American Chemical Society</i> , 137(20):6662–6669, 2015.

[Rog58]	C. A. Rogers. The packing of equal spheres. <i>Proceedings of the London Mathematical Society</i> , s3-8(4):609–620, 1958.
[Sei40]	F. Seitz. <i>The Modern Theory Of Solids</i> . International Series in Physics. New York McGraw-Hill Book Co., Inc., 1940.
[Szp03]	G. G. Szpiro. Kepler's Conjecture: How Some of the Greatest Minds in History Helped Solve One of the Oldest Math Problems in the World. Wiley, 2003.
[Via17]	M. Viazovska. The sphere packing problem in dimension 8. Annals of Mathematics, 185(3), 2017.
[Wil13]	R. Wilson. Four Colors Suffice: How the Map Problem Was Solved: Revised Color Edition. Princeton University Press, Princeton (N. J.), revised édition edition, November 2013.