Problème de Thomson, ou équilibre de particules qui se repoussent sur une sphère

Plaçons N particules sur une sphère, et soumettons-les deux à deux à des forces en $1/r^2$, où r est leur distance de séparation respective, ces forces repoussant les particules. Il s'agit de trouver les positions d'équilibre stable de ces N particules. Ce problème a été posé en 1904 par J.J. Thomson, avec des électrons se repoussant mutuellement suivant la loi de Coulomb¹, l'équilibre étant obtenu pour une énergie potentielle² électrostatique minimale.

Comment traiter le problème de Thomson sur ordinateur? Il suffit de prendre N points sur la sphère unité, et de les soumettre à ces forces en $1/r^2$, en y ajoutant un frottement. Puis on laisse jouer la loi fondamentale de la dynamique, avec l'accélération égale à la force, à une constante près, ce qui provoque le déplacement des points, chacun étant soumis à la force créée par tous les autres³. Ce mouvement se ralentit progressivement à cause du frottement, et l'énergie potentielle diminue. Il suffit d'attendre que les points s'immobilisent, ce qui correspond à une énergie potentielle minimale. Les particules constituent les sommets d'un polyèdre, et quelles que soient les positions initiales des particules, on trouve toujours le même polyèdre final en équilibre stable, à une isométrie près.

Le système des particules est ainsi bloqué au fond d'un puits de potentiel, mais il peut s'agir d'un minimum local, un parmi d'autres, sans que l'on ait atteint le minimum global, celui que nous recherchons. Pour les faibles valeurs de N, la première fois où un équilibre stable est obtenu de deux façons, et non pas une seule, est pour N = 16 (voir figure ci-dessous).

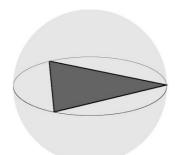
Les résultats obtenus sur ordinateur sont parfois surprenants. Il est logique d'obtenir un diamètre de la sphère pour N=2, un triangle équilatéral sur un grand cercle pour N=3. De même pour N=4, on trouve le tétraèdre régulier, pour N=6 l'octaèdre régulier, pour N=12 l'icosaèdre régulier. Par contre les deux autres polyèdres réguliers, le cube et le dodécaèdre, ne sont pas obtnuus. Pour N=8, au lieu du cube, on trouve un antiprisme carré, ayant deux bases carrées identiques mais tournées de 45° l'une par rapport à l'autre. On peut aussi constater que le cube constitue une position d'équilibre, mais celleci est instable, un très léger déplacement d'un sommet provoquant sa déformation jusqu'à l'obtention de l'antiprisme. Pour N=20, au lieu du dodécaèdre, on trouve une forme plus complexe.

Dans les dessins ci-dessous, on a représenté les faces visibles des polyèdres obtenus en équilibre stable, avec aussi parfois le squelette de ces polyèdres, ce qui permet d'observer une évolution harmonieuse de leur forme lorsque N augmente. Par exemple, pour N=5, entre le tétraèdre régulier pour N=4 (une pyramide à base triangulaire) et l'octaèdre régulier pour N=6 (une double pyramide à base carrée), on trouve une double pyramide à base triangulaire. Nous avons aussi représenté les cellules de Descartes-Voronoï correspondantes sur la sphère.

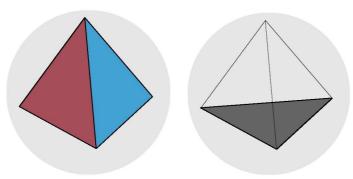
¹ Deux particules électrisées A et B distantes de AB = r, avec des charges e_1 et e_2 , sont soumises chacune à une force d'interaction de la forme $-e_1 e_2/r^2$ et portée par (AB). Pour des charges égales comme celles de deux électrons, elle est en $1/r^2$ à une constante près et elle est répulsive, tendant à séparer de plus en plus les deux électrons.

² Pour deux particules de même charge, l'énergie potentiellle est en 1/r. Pour N particules, avec r_{ij} distance entre les deux particules i et j, elle est de la forme $\sum_{i=1}^{r} 1/r_{ij}$

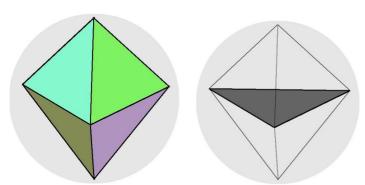
³ En fait nous avons appliqué une méthode légèrement différente, en suivant un mouvement par petits àcoups, que nous expliquons dans la rubrique *enseignements*, cours *graphisme et géométrie*, chapitre 4 : *géométrie 3d*.



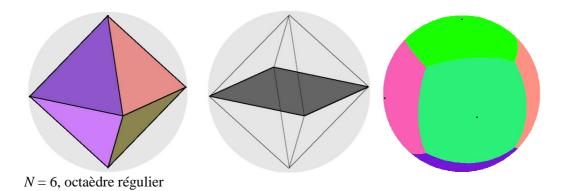
N = 3, triangle équilatéral sur un grand cercle de la sphère

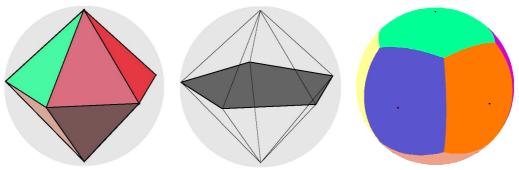


N = 4, tétraèdre régulier

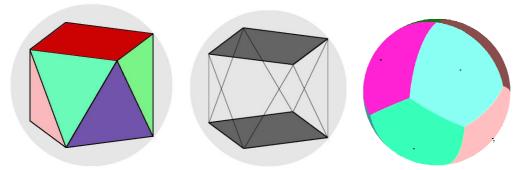


N = 5, double pyramide dont la base commune est un triangle équilatéral sur un grand cercle

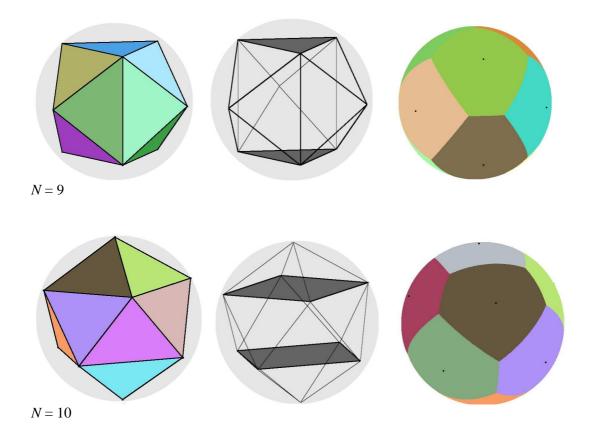


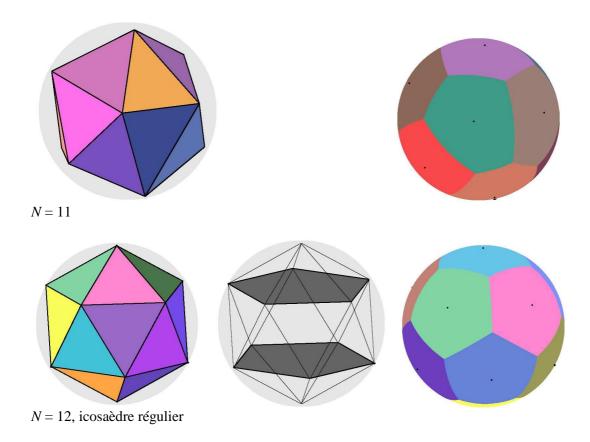


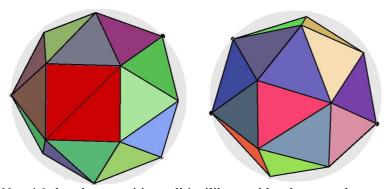
N = 7, double pyramide dont la base est un pentagone



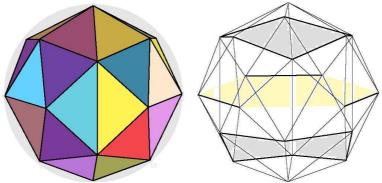
N=8, antiprisme à bases carrées tournées de 45° l'une par rapport à l'autre



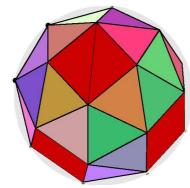




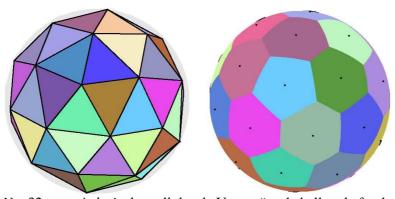
N=16, les deux positions d'équilibre stable obtenues, la première à gauche pour un potentiel localement minimal avec la présence de facettes carrées (on en voit une en rouge foncé, une autre se trouve derrière) en plus des facettes triangulaires, la deuxième à droite avec des facettes triangulaires seulement, pour le potentiel minimal global



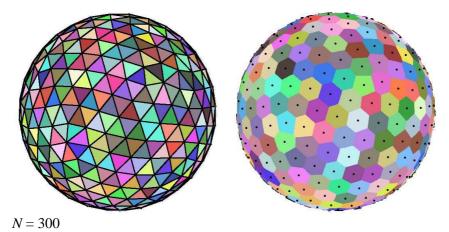
N=20, avec trois facettes presque carrées (on en voit une au centre de la *figure de gauche*). A droite, le squelette de la forme, avec deux sommets au pôle nord et au pôle sud, un hexagone central en jaune dont une arête sur deux seulement est aussi une arête du polyèdre, et aussi deux hexagones gauches (non plans) identiques en gris de part et d'autre



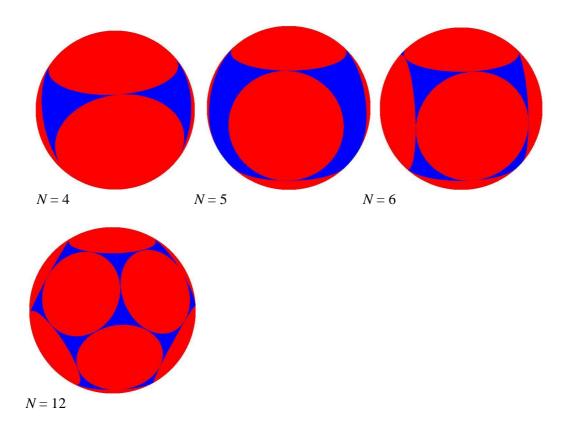
N = 24, avec la présence de quelques facettes carrées (au nombre de 6)



N = 32, avec à droite les cellules de Voronoï style ballon de football



A première vue, le problème de Thomson ressemble au problème de Tammes. Ce dernier consiste à placer sur la sphère N calottes sphériques égales (à une isométrie près) les plus grandes possibles, sans que celles-ci ne se chevauchent.⁴ On constate aussitôt que pour N=4, les centres de ces calottes sphériques sont les sommets d'un tétraèdre régulier inscrit dans la sphère, et c'est le même résultat qu'avec le problème de Thomson. De même pour N=5 et N=6 avec l'octaèdre régulier. Et aussi pour N=12 avec l'icosalèdre régulier. Mais pour N=8, le problème de Tammes donne un antiprisme carré régulier, avec deux bases carrées et des triangles latéraux qui sont équilatéraux. Ce n'est pas le même antiprisme carré que celui obtenu par le problème de Thomson, où les facettes latérales sont seulement isocèles (deux côtés égaux à 1,29391 et une base égale à 1,16672). Finalement les deux problèmes divergent, sauf pour les quelques valeurs de N que nous avons données précédemment, et visibles sur les dessins ci-dessous.



Cas où le problème de Thomson équivaut au problème de Tammes

Quelques références bibliographiques :

- K. Brown, Min-Energy Configurations of Electrons on a Sphere (2014)
- APMEP, Dans nos classes, le problème de Tammes avec des démonstrations dans quelques cas simples

⁴ Dans sa définition première, le problème de Tammes consiste à prendre toutes les configurations possibles de *N* points sur la sphère, et à chaque fois de déterminer la distance minimale *d* entre deux points pami toutes les distances entre deux points quelconques. Puis parmi ces configurations on choisit celle où cette distance *d* est la plus grande possible. Il a été démontré que cela équivaut au problème des calottes sphériques tel que nous l'avons exprimé.

• Site de Robert Ferréol, avec son *encyclopédie des formes remarquables*, notamment *les polyèdres*.

Pour la programmation de mouvements de particules, on pourra aussi consulter sur mon site, dans la rubrique Travaux complémentaires, graphisme et géométrie, chapitre 4: Particules qui se repoussent, disposées sur des courbes ou des surfaces.