

La Plus Grande Sphère Inscrite entre Quatre Sphères

PAR MARCEL HOCQUEMILLER

Institut de Mathématiques, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, 34060 Montpellier Cédex, France

(Reçu le 31 mai 1976, accepté le 13 décembre 1976)

A complete matrix solution to find the largest sphere inscribed between four given spheres is described.

1. Présentation

Cette recherche a déjà fait l'objet de deux articles. La méthode de Mackay (1973) utilise un déterminant 6×6 et une résolution de polynôme par itérations successives qui nécessitent un ordinateur; elle ne donne pas de critère d'existence et il n'est pas sûr qu'elle donne toujours toutes les solutions: aussi, la possibilité de la perfectionner a suscité d'autres solutions.

La méthode de Sickafus & Mackie (1974) donne ou bien deux solutions ou bien une déclaration d'inexistence; elle consiste à calculer et combiner sept déterminants 3×3 et donc une petite calculatrice de poche y suffit. Par contre, elle ne traite pas le cas de quatre centres coplanaires dont l'éventualité, même faible, n'est pas à exclure en cristallographie (Figs. 2 et 3). De plus, comme les problèmes pratiques sont posés dans une maille cristalline et que leur solution est souhaitée dans cette maille, cette méthode, parce qu'elle utilise une base orthonormale, doit être précédée d'un changement d'axes pour traduire l'énoncé dans cette base et suivie du changement inverse pour traduire les solutions dans la maille; ces calculs supplémentaires d'aller et retour atténuent l'avantage initial de cette excellente méthode.

La méthode proposée ici diffère des précédentes par sa nature matricielle; elle a l'inconvénient de nécessiter l'inversion d'une matrice 4×4 . Par contre, elle est complète et utilise les coordonnées dans la maille, tant pour l'énoncé que pour les solutions. Enfin, sous sa forme vectorielle, elle est susceptible d'une généralisation à l'encastrement et au compactage.

2. Notations

Dans un espace euclidien à trois dimensions, on désigne par $B(W, r)$ la boule de centre W et de rayon r . Le nombre $P_{12} = (W_1 - W_2)^2 - (r_1 + r_2)^2$ est la puissance réciproque des deux sphères $B(W_1, r_1)$ et $B(W_2, r_2)$: il permet de mesurer l'éloignement des deux sphères bien qu'il ne soit pas une distance. En effet, les deux boules s'interpénètrent si P_{12} est négatif, sont tangentes extérieurement si P_{12} est nul, sont disjointes si P_{12} est positif et, d'autant plus éloignées que P_{12} est plus grand.

Si on choisit un repère $(O, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ constitué de l'origine O et de la base $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ (c'est-à-dire d'une maille cristalline), la puissance des deux sphères $B(W_1, r_1)$ et $B(W_2, r_2)$ est le nombre

$$P_{12} = {}^t(\mathbf{V}_1 - \mathbf{J}\mathbf{V}_2)\mathbf{E}(\mathbf{J}\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2)$$

avec les conventions suivantes:

$$\mathbf{V}_i = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \\ r_i \end{bmatrix} \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ca \cos \beta & 0 \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha & 0 \\ ca \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

a, b, c, α, β et γ sont les constantes habituelles de la maille cristalline, x_i, y_i, z_i sont les coordonnées de W_i dans la maille, ${}^t\mathbf{A}$ désigne la matrice transposée de la matrice \mathbf{A} .

La sphère $B(W_i, r_i)$ sera dorénavant représentée, dans le repère $(O, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$, par la matrice colonne \mathbf{V}_i , la quatrième coordonnée r_i de \mathbf{V}_i sera encore appelée rayon de \mathbf{V}_i ; de même la sphère $B(W, r)$ sera désignée par la matrice colonne \mathbf{V} de coefficients successifs x, y, z et r .

3. Énoncé du problème

On cherche les sphères \mathbf{V} tangentes aux quatre sphères $\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \mathbf{V}_3$ et \mathbf{V}_4 : on a donc les quatre équations:

$${}^t\mathbf{V}\mathbf{J}\mathbf{E}\mathbf{V} - 2{}^t\mathbf{V}_i\mathbf{E}\mathbf{V} + {}^t\mathbf{V}_i\mathbf{J}\mathbf{E}\mathbf{V}_i = 0.$$

On désigne alors par \mathbf{A} la matrice carrée ayant pour colonnes les matrices \mathbf{V}_i , par \mathbf{C} la matrice colonne ayant pour coefficients les nombres ${}^t\mathbf{V}_i\mathbf{J}\mathbf{E}\mathbf{V}_i$ et par \mathbf{D} la matrice colonne à coefficients tous égaux à 1. On obtient alors l'unique équation qui résume le problème:

$$2{}^t\mathbf{A}\mathbf{E}\mathbf{V} = \mathbf{C} + \mathbf{D}{}^t\mathbf{V}\mathbf{J}\mathbf{E}\mathbf{V}.$$

En posant $\mathbf{U} = 2{}^t\mathbf{A}\mathbf{E}$ et $\delta = {}^t\mathbf{V}\mathbf{J}\mathbf{E}\mathbf{V}$, l'équation s'écrit plus simplement:

$$\mathbf{U}\mathbf{V} = \mathbf{C} + \delta\mathbf{D}. \quad (1)$$

Lors de la résolution, il est possible de trouver des sphères solutions à rayon négatif: ce sont des sphères circonscrites aux quatre sphères données; elles seront exclues parce qu'inintéressantes en cristallographie.

4. Résolution

Les six centres d'homothétie positive des quatre sphères deux à deux forment un quadrilatère complet (Figs. 1 et 2) (Hadamard, 1947): ils sont donc coplanaires, c'est-à-dire en général dans un plan *P*. En cas de dégénérescence du quadrilatère, ils sont alignés sur une droite *Q* (Fig. 3) ou parfois même confondus.

4.1. Cas général du quadrilatère non dégénéré

Si l'origine du repère est dans le plan *P*, la matrice **A** est de rang 3, et sinon elle est inversible. On fait donc, si nécessaire, un changement d'origine pour que **A** soit inversible, et on pose:

$$\mathbf{B} = \mathbf{U}^{-1} \quad \Gamma = \mathbf{BC} \quad \Delta = \mathbf{BD}.$$

Les solutions sont de la forme $\mathbf{V} = \Gamma + \delta\Delta$, ce qui conduit à calculer δ comme solution de l'équation suivante

$$\delta = {}^t(\Gamma + \delta\Delta)\mathbf{JE}(\Gamma + \delta\Delta)$$

c'est-à-dire comme racine du trinôme du second degré suivant

$$F\delta^2 + G\delta + H \tag{2}$$

avec

$$F = {}^t\Delta\mathbf{JE}\Delta \quad G = 2{}^t\Delta\mathbf{JE}\Gamma - 1 \quad H = {}^t\Gamma\mathbf{JE}\Gamma.$$

4.2. Cas particuliers de dégénérescence du quadrilatère

On exclut le cas facile de l'alignement des quatre centres. Le quadrilatère est donc dégénéré en droite *Q* et celle-ci ne contient aucun des quatre centres. Afin d'éviter que **A** soit de rang 2, on choisit l'origine hors de la droite *Q*: **A** est alors de rang 3. On choisit aussi cette origine hors du plan des quatre centres, pour que **D** soit dans l'image de **U**. Enfin, l'origine est choisie telle que **C** soit à la fois indépendant de **D** et dans l'image de **U**. Alors il existe trois vecteurs tous non nuls **K**, **S** et **N** (Queysanne, 1964) tels que:

$$\mathbf{UK} = \mathbf{C} \quad \mathbf{US} = \mathbf{D} \quad \mathbf{UN} = \mathbf{0}.$$

Les solutions cherchées sont alors $\mathbf{V} = \mathbf{K} + s\mathbf{S} + n\mathbf{N}$ avec la condition

$$s = {}^t(\mathbf{K} + s\mathbf{S} + n\mathbf{N})\mathbf{JE}(\mathbf{K} + s\mathbf{S} + n\mathbf{N}). \tag{3}$$

Il y a en général une infinité de solutions et le lieu géométrique des centres est une conique; cette conique est une parabole si les quatre sphères sont tangentes à *Q*, une hyperbole si aucune ne coupe *Q* (Fig. 3); dans le cas parabolique la sphère de rayon maximum est l'unique plan tangent aux quatre sphères; dans le cas hyperbolique, ce sont deux plans tangents.

Si les sphères coupent toutes quatre *Q*, la conique

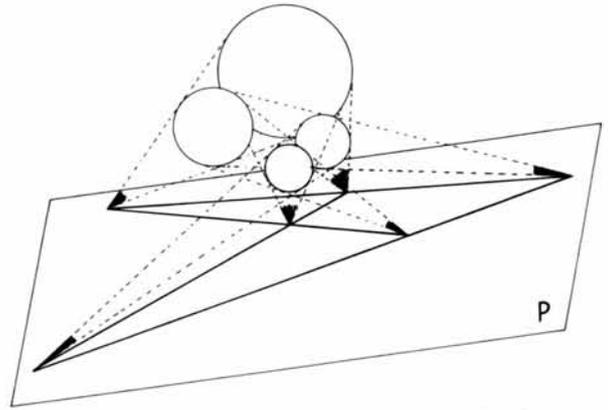


Fig. 1. Quadrilatère complet; centres non coplanaires.

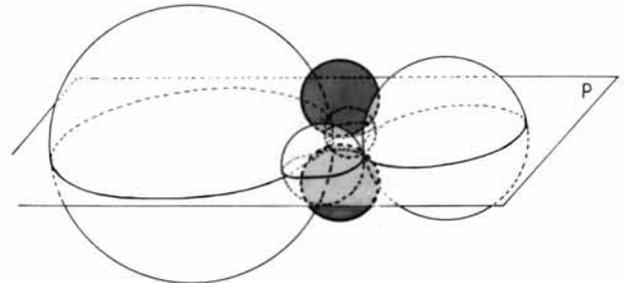


Fig. 2. Quadrilatère complet; centres coplanaires.

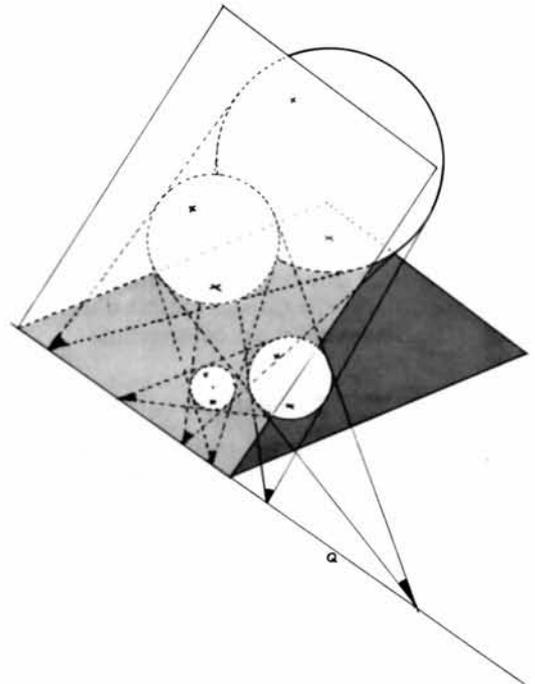


Fig. 3. Quadrilatère dégénéré; cas hyperbolique.

est une ellipse: les deux sphères de rayon extremum sont obtenues en éliminant s et n entre l'équation (3) ci-dessus et la suivante:

$$N_4 = 2'(K + sS + nN)JE(N_4S - S_4N); \quad (4)$$

S_4 est la quatrième coordonnée de la matrice colonne S ; de même N_4 pour N et K_4 pour K .

Si N_4 n'est pas nul, il est possible de choisir K et S tels que K_4 et S_4 soient nuls: alors l'équation (4) est simplifiée en la suivante:

$$1 = 2'(K + sS + nN)JES. \quad (4')$$

Si, au contraire, N_4 est nul, l'équation 4 se simplifie en

$$0 = S_4'(K + sS + nN)JEN. \quad (4'')$$

Enfin, on exprime, à partir de (4') ou (4'') selon le cas, s en fonction de n (ou l'inverse), puis on porte cette valeur dans l'équation (3) qui devient alors un trinôme du second degré en s (ou en n): les deux couples (s_1, n_1) et (s_2, n_2) définissent alors les deux sphères de rayon extremum: l'une d'elles peut être la plus grande sphère inscrite; l'autre, la plus petite, ne nous intéresse pas.

5. Exemples

Des cinq exemples suivants, seul le premier peut être traité par la méthode de Sickafus & Mackie (1974).

5.1. Les centres des quatre sphères ne sont pas coplanaires; la maille est triclinique

$$\begin{aligned} a=1 \quad \alpha=\pi/3 \\ b=2 \quad \beta=\pi/4 \\ c=3 \quad \gamma=\pi/6 \end{aligned} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} & 3\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{3} & 4 & 3 & 0 \\ 3\sqrt{2} & 3 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B} \approx \begin{bmatrix} 0,55619 & -0,28503 & -0,13551 & 0,10510 \\ -0,19002 & 0,13905 & 0,027778 & -0,042852 \\ -0,067754 & 0,020833 & 0,041199 & -0,024377 \\ 0 & 0 & 0 & 0,12500 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 35 \\ 60 \\ 72 \\ -16 \end{bmatrix} \quad \Gamma \approx \begin{bmatrix} -9,0735 \\ 4,3778 \\ 2,2350 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\Delta \approx \begin{bmatrix} 0,24075 \\ -0,06605 \\ -0,03010 \\ 0,12500 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} F &\approx -0,00596 & \delta_1 &\approx 32,066 \\ G &\approx -0,90072 & \delta_2 &\approx -183,19 \\ H &\approx 35,011 \end{aligned} \quad \mathbf{V}(\delta_1) \approx \begin{bmatrix} -1,3537 \\ 2,2599 \\ 1,2698 \\ 2,0082 \end{bmatrix}$$

La solution $\mathbf{V}(\delta_2)$ est une sphère circonscrite.

5.2. Quadrilatère non dégénéré; les centres des quatre sphères sont coplanaires (Fig. 2), la maille est cubique c'est-à-dire: $a=b=c=1$ et $\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 6 & 6 & 10 & 0 \\ -1 & 2,5 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1,5 & 3 & 5 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 37 \\ 41 \\ 92 \\ -24 \end{bmatrix} \quad \mathbf{B} = \frac{1}{186} \begin{bmatrix} -5 & -2 & 13,5 & -6,5 \\ -23 & 28 & 3 & -2 \\ 125 & 50 & -105 & 23 \\ -25 & -10 & 21 & 14 \end{bmatrix}$$

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Gamma = \frac{1}{186} \begin{bmatrix} 1,131 \\ 69 \\ -3,537 \\ 261 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} F &= \frac{1}{4} \\ G &= -1 - \frac{3537}{186} \\ H &= (1/186^2)(1131^2 + 69^2 + 3537^2 - 261^2) \end{aligned}$$

$$\mathbf{V} = \frac{1}{186} \begin{bmatrix} 1131 \\ 69 \\ 186 \pm \sqrt{134\,559} \\ 261 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 6,081 \\ 0,371 \\ 1 \pm 1,972 \\ 1,403 \end{bmatrix}$$

Les deux sphères solutions sont symétriques par rapport au plan des quatre centres.

5.3. Quadrilatère dégénéré; cas hyperbolique (Fig. 3); maille cubique

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 4 & 4 \\ -1 & 1 & -3 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 22 \\ 22 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -9 \\ 10 \end{bmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

Les solutions sont centrées sur l'hyperbole:

$$y=0; \quad 8(x-4)^2 - (z-1)^2 = 9; \quad (r=10-3x).$$

Les sphères inscrites sont telles que $x \leq 4 - 3/2\sqrt{2} \approx 2,94$.

5.4. *Quadrilatère dégénéré*; cas elliptique; maille cubique

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & -6 & 6 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 25 \\ 25 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 23 \\ 0 \\ -21 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{N} = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Les solutions (toutes inscrites) sont centrées sur l'ellipse:

$$y=0; \quad \frac{8}{9}(x + \frac{11}{6})^2 + (z-1)^2 = \frac{697}{32}; \quad \left(r = \frac{23}{6} - \frac{x}{3} \right).$$

La plus grande sphère inscrite est obtenue avec $s+4n=23$; c'est

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} -5,64 \\ 0 \\ 1 \\ 5,71 \end{bmatrix}.$$

5.5. *Quadrilatère dégénéré*; cas parabolique; maille cubique

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & -4 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 17 \\ 17 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 15 \\ 0 \\ -13 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{N} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Les solutions (toutes inscrites) sont centrées sur la parabole:

$$y=0; \quad x = \frac{281}{60} - \frac{(z-1)^2}{15}; \quad \left(r = \frac{15}{2} - x \right).$$

Références

HADAMARD, J. (1947). *Leçons de Géométrie Élémentaire*. Paris: Armand Colin.

MACKAY, A. L. (1973). *Acta Cryst.* A **29**, 308-309.

QUEYSANNE, M. (1964). *Algèbre*, Ch. 10. Paris: Armand Colin.

SICKAFUS, E. N. & MACKIE, N. A. (1974). *Acta Cryst.* A **30**, 850-851.

Acta Cryst. (1977). A **33**, 588-592

A Simple Method of Estimating the Effects of Series Termination and Thermal Smearing on Peak Heights

BY C. SCHERINGER

Fachbereich Geowissenschaften der Universität Marburg, D-3550 Marburg/Lahn, Germany (BRD)

(Received 13 September 1976; accepted 4 February 1977)

The extent to which the peak heights of difference maps are reduced by termination of the Fourier series and by thermal smearing has been investigated. For this purpose, the peaks are represented by Gaussian distributions. Series termination and thermal smearing can be considered as convolution operations which can be reversed by corresponding deconvolution operations to reconstruct the true peaks. Deconvolution for thermal smearing can be exactly performed with three-dimensional Gaussian distributions. With respect to peak heights, deconvolution for series termination can be exactly performed with the spherically symmetric, and approximately performed with any Gaussian distributions. With five hypothetical peaks the expected deconvolution effects have been examined, and with four peaks of published $X-N$ maps, it is shown how the peak heights can be approximately corrected for the two convolution effects.

Introduction

As a rule, the molecule at rest, *i.e.* the electron density distribution of the equilibrium configuration of the nuclei, is the object of quantum-chemical calculations

of molecular density distributions. Experimental investigations of molecular density distributions, performed by means of X-ray diffraction on crystals, have the same object, but the densities obtained experimentally and represented by Fourier synthesis are im-