

Vorkurs "Einführung in das Studium der Mathematik"

Andreas Knauf*

Wintersemester 2004/2005

Kugelpackungen

In der Schule haben Sie vermutlich die Mathematik als in sich abgeschlossenes Ideengebäude kennen gelernt. Trigonometrie, Integration, Vektorrechnung – was kann es da noch zu erforschen geben?

Tatsächlich wird man schnell feststellen, dass man nur etwas an der Oberfläche kratzen muss, um Unerforschtes zu entdecken. Eine solche Frage will ich mit Ihnen zusammen angehen. Umgangssprachlich lautet sie:

"Wie kann ich Kugeln möglichst platzsparend anordnen?"

Ein erster Schritt wird sein, diese Fragestellung zu mathematisieren, d.h. nach der genauen Bedeutung der in der Frage benutzten Wörter zu fragen.

1 Volumen von Kugeln

Beginnen wir mit der Frage: Was ist eine Kugel?

Lage und Form einer Kugel in unserem Anschauungsraum \mathbb{R}^3 werden durch Angabe von Radius $R > 0$ und Mittelpunkt $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$ festgelegt. Die Kugel ist dann die Menge

$$K = \{y \in \mathbb{R}^3 \mid \|y - x\| \leq R\}$$

*Mathematisches Institut, Universität Erlangen-Nürnberg, Bismarckstr. 1 $\frac{1}{2}$, D-91054 Erlangen, Germany. e-mail: knauf@mi.uni-erlangen.de

der Punkte $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$ des \mathbb{R}^3 , deren Abstand

$$\|y - x\| = \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + (y_3 - x_3)^2}$$

vom Mittelpunkt höchstens R beträgt.

Nichts hindert uns daran, diese Definition auf den d -dimensionalen Raum \mathbb{R}^d zu übertragen, wobei die Dimension d beliebig groß sein kann. Analog ist also eine Kugel K_R^d im \mathbb{R}^d mit Mittelpunkt $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$ und Radius $R > 0$ die Menge

$$K_R^d(x) = \{y \in \mathbb{R}^d \mid \|y - x\| \leq R\},$$

wobei diesmal der Abstand zwischen den Punkten x und y durch

$$\|y - x\| = \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + \dots + (y_d - x_d)^2}$$

gegeben ist.

Eindimensionale Kugeln sind also Intervalle $[x - R, x + R]$ auf der Zahlengerade, während $d = 2$ -dimensionale Kugeln Kreisscheiben in der Ebene sind.

Um das d -dimensionale Volumen $\text{Vol}(K_R^d)$ zu berechnen, können wir uns zunächst auf den Fall $R = 1$ (und den Kugelmittelpunkt 0) zurückziehen, denn

$$\text{Vol}(K_R^d) = R^d \text{Vol}(K_1^d). \quad (1.1)$$

Diese Formel ist anschaulich nahe liegend, sie muss aber wie alles in der Mathematik begründet werden. Offensichtlich hat sie etwas mit der Definition des d -dimensionalen Volumens Vol zu tun.

Betrachten wir z.B. einen Würfel $W_R^d := \left\{ \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d \mid 0 \leq y_i \leq R \right\}$ der Kantenlänge $R > 0$ im \mathbb{R}^d . Für $d = 1$ ist dies das Intervall $W_R^1 = [0, R]$, für $d = 2$ das Quadrat $[0, R] \times [0, R]$ und für $d = 3$ der gewohnte Würfel. Man wird eine Volumendefinition im \mathbb{R}^d nur dann vernünftig finden, wenn $\text{Vol}(W_R^d) = R^d$ ist. Denn ist R eine natürliche Zahl, dann können wir W_R^d aus R^d verschobenen Würfeln der Kantenlänge 1 zusammensetzen. Bei der Verschiebung sollte sich das Volumen nicht ändern, und beim Zusammensetzen endlich vieler Teile sollte sich deren Volumen addieren.

Wir stellen nun fest, dass wegen der Forderung der Konstanz des Volumens bei Verschiebungen

$$\text{Vol}(K_R^d(x)) = \text{Vol}(K_R^d(0))$$

gilt, und wir schreiben daher kurz K_R^d für die Kugel mit Mittelpunkt $0 \in \mathbb{R}^d$ und Radius R .

- Eine eindimensionale Kugel K_R^1 ist gleich dem Intervall $[-R, R] \subset \mathbb{R}$, und dessen Volumen ist gleich dem Integral

$$\int_{-R}^R dx = 2R.$$

- Betrachten wir die Kreisscheibe K_R^2 , dann ist deren Schnittmenge mit der Geraden $x_2 = c$ für $|c| > R$ leer, aber für $|c| < R$ das Intervall $[-\sqrt{R^2 - c^2}, \sqrt{R^2 - c^2}] = K_{\sqrt{R^2 - c^2}}^1$. Wir nähern nun die Fläche der Kreisscheibe durch die Summe der Flächen von Rechtecken der Form $K_{\sqrt{R^2 - c^2}}^1 \times [c - \varepsilon, c + \varepsilon]$ an und kommen im Limes $\varepsilon \searrow 0$ verschwindender Rechteckshöhe zu der Formel

$$\begin{aligned} \text{Vol}(K_R^2) &= \int_{-R}^R \text{Vol}\left(K_{\sqrt{R^2 - x^2}}^1\right) dx = \int_{-R}^R 2\sqrt{R^2 - x^2} dx \\ &= R \int_{-R}^R 2\sqrt{1 - (x/R)^2} dx = R^2 \int_{-1}^1 2\sqrt{1 - y^2} dy \\ &= R^2 \int_{-1}^1 \text{Vol}\left(K_{\sqrt{1 - y^2}}^1\right) dy = R^2 \text{Vol}(K_1^2). \end{aligned}$$

Wir haben also zweierlei erreicht:

- Das Skalierungsgesetz (1.1) wurde für $d = 1$ und $d = 2$ überprüft.
- Wir haben die Fläche der Kreisscheibe auf das Integral

$$\text{Vol}(K_1^2) = 2 \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^2} dy = 2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\cos \alpha)^2 d\alpha = \pi$$

zurückgeführt und (mit Hilfe der Substitution $y = \sin \alpha$) berechnet.

Allgemein ergibt sich ähnlich für $d \geq 2$

$$\begin{aligned} \text{Vol}(K_R^d) &= \int_{-R}^R \text{Vol}\left(K_{\sqrt{R^2 - x^2}}^{d-1}\right) dx = R^d \int_{-1}^1 \text{Vol}\left(K_{\sqrt{1 - y^2}}^{d-1}\right) dy \\ &= R^d \text{Vol}(K_1^{d-1}) \int_{-1}^1 (1 - y^2)^{\frac{d-1}{2}} dy, \end{aligned}$$

also einerseits die Bestätigung des Skalierungsgesetzes (1.1), andererseits die Rekursion

$$\text{Vol}(K_1^d) = \text{Vol}(K_1^{d-1}) F_d \quad \text{mit} \quad F_d := \int_{-1}^1 (1-y^2)^{\frac{d-1}{2}} dy. \quad (1.2)$$

Wenn wir also die Integrale F_d berechnet haben, können wir daraus die gesuchte Volumenformel ableiten.

Mit der Substitution $y = \sin \alpha$ ergibt sich mittels partieller Integration und wegen $\sqrt{1 - \sin^2 \alpha} = \cos \alpha$

$$\begin{aligned} F_d &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\cos \alpha)^{d-1} \cos \alpha \, d\alpha \\ &= (\cos \alpha)^{d-1} \sin \alpha \Big|_{-\pi/2}^{\pi/2} + \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (d-1)(\cos \alpha)^{d-2} (\sin \alpha)^2 \, d\alpha. \end{aligned}$$

Nun ist $\cos(\pm\pi/2) = 0$ und $(\sin \alpha)^2 = 1 - (\cos \alpha)^2$, woraus sich für $d > 2$ $F_d = (d-1)(F_{d-2} - F_d)$ oder

$$F_d = \frac{d-1}{d} F_{d-2} \quad (1.3)$$

ergibt. Wir haben schon $F_1 = 2$ und $F_2 = \pi/2$ berechnet.

Aufgabe 1 (Kugelvolumen): Finden Sie – unter Verwendung von (1.1), (1.2) und (1.3) – eine Formel für F_d und für $\text{Vol}(K_R^d)$.

Eine Schlussbemerkung: Wegen des Skalierungsgesetzes (1.1) sitzt in hochdimensionalen Kugeln der größte Volumenanteil nahe an der Oberfläche.

Aufgabe 2 (Kugelvolumen in hohen Dimensionen): Ab welcher Dimension d_{\min} ist

$$\text{Vol}(K_{0.99R}^d) < 0.01 \text{Vol}(K_R^d)? \quad (1.4)$$

Benutzen Sie den Taschenrechner, um d_{\min} zu bestimmen und argumentieren Sie, dass (1.4) für alle $d \geq d_{\min}$ gilt.

Diese Tatsache ist in der statistischen Mechanik wichtig, in der geklärt wird, warum die ungeordnete Bewegung von z.B. $d = 10^{23}$ Molekülen zu deterministischen Relationen von Messgrößen wie Temperatur und Energie eines Glases Wasser führen kann.

2 Dichte von Kugelpackungen

2.1 Endliche Packungen

Wir wollen uns im Weiteren auf Packungen von n Kugeln von gleichem Radius R beschränken, und wir können annehmen, dass $R = 1$ ist.

Eine Packung von n solchen Kugeln im \mathbb{R}^d ist damit durch Angabe ihrer Mittelpunkte $x^{(1)}, \dots, x^{(d)} \in \mathbb{R}^d$ fixiert, und es muss gelten:

$$\|x^{(i)} - x^{(j)}\| \geq 2 \quad \text{für alle } i < j,$$

denn genau dann überlappen die Kugeln nicht!

Wir bezeichnen mit $M := \{x^{(1)}, \dots, x^{(n)}\} \subset \mathbb{R}^d$ die Menge der Kugelmittelpunkte. Dann füllen die Kugeln die Teilmenge $M + K_1^d$ des \mathbb{R}^d aus, wobei die *Minkowskisumme* zweier Teilmengen A, B des \mathbb{R}^d durch

$$A + B := \{a + b \mid a \in A, b \in B\}$$

definiert ist. Anschaulich heften wir an jeden Mittelpunkt eine Kugel.

Die Menge M der Kugelmittelpunkte ist die Formalisierung des Wortes "Anordnung" aus der Einleitung.

Aufgabe 3 (Minkowskisumme) Es sei

$$A := \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2 \mid \cos\left(\frac{2\pi k}{3}\right)x + \sin\left(\frac{2\pi k}{3}\right)y \geq -1 \quad \text{für } k = 0, 1, 2 \right\}$$

und $B := -A := \left\{ \begin{pmatrix} -x \\ -y \end{pmatrix} \mid \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in A \right\}$. Zeichnen Sie A , B und $A + B$.

Nun definiert man

- das *genutzte* Volumen als

$$\text{Vol}(M + K_1^d) = n \text{Vol}(K_1^d)$$

- das *benutzte* Volumen als

$$\text{Vol}(\text{konv}(M + K_1^d)).$$

Dabei heißt eine Teilmenge A des \mathbb{R}^d *konvex*, wenn für alle Punkte $a, a' \in A$ stets auch die Strecke zwischen a und a' ganz in A enthalten ist, und die *konvexe Hülle* $\text{konv}(A)$ einer Teilmenge A ist die kleinste A enthaltende konvexe Menge.

Aufgabe 4 (Konvexität): Zeigen Sie, dass Kugeln konvex sind.

Im Fall von im Laden gekauften Apfelsinen ist also deren konvexe Hülle in etwa das vom Netz umschlossene Gebiet.

Ein Ziel der Kugelpacker ist es, Packungen M von n Kugeln zu finden, für die die *Packungsdichte*

$$\delta(M) := \frac{\text{Vol}(M+K_1^d)}{\text{Vol}(\text{konv}(M+K_1^d))} \quad (2.1)$$

möglichst groß wird. Dies ist die Formalisierung des Wortes "platzsparend" aus der Einleitung. Immer gilt $0 < \delta(M) \leq 1$.

Beispiel 2.1 Eine besonders wichtige endliche Packung ist die so genannte *Wurstpackung* von n Kugeln im \mathbb{R}^d . Eine solche liegt vor, wenn die Menge $M = \{x^{(1)}, \dots, x^{(n)}\}$ der Kugelmittelpunkte auf einer Geraden liegt. Die Wurstpackung ist offensichtlich dann am dichtesten, wenn sich die Nachbarkugeln auf der Geraden berühren, und wir nennen sie dann *dicht*. Das von ihr benutzte Volumen ist gleich

$$\text{Vol}(K_1^d) + 2(n-1)\text{Vol}(K_1^{d-1}). \quad (2.2)$$

Dies sieht man durch Aufteilung der Wurst in zwei Halbkugeln an den Enden und ein zylinderförmiges Mittelstück der Länge $2(n-1)$ mit einem Querschnitt der Form K_1^{d-1} .

Aufgabe 5 (Wurstpackung): Zeigen Sie unter Benutzung der Formeln (2.1) und (2.2), dass die Dichte der dichten Wurstpackung in d Dimensionen (unabhängig von der Zahl n der Kugeln) größer als $\frac{1}{2d}$ ist.

Frage: Gibt es dichtere Packungen von n Kugeln als die Wurstpackungen?

Antwort:

- In einer Dimension ist jede endliche Packung eine Wurstpackung, und die Dichte $\delta(M)$ erreicht den Maximalwert 1.
- In $d = 2$ Dimensionen sehen wir für drei Kreisscheiben, dass eine dichte Packung in Form eines gleichseitigen Dreiecks dichter ist als die dichte Wurstpackung. Denn die benutzte, aber nicht genutzte Fläche besteht in beiden Fällen aus vier Teilstücken, von denen eins für die Dreieckspackung kleineren Inhalt besitzt. Das Argument lässt sich auf beliebige Zahlen $n \geq 3$ von Kugeln verallgemeinern.

- In $d = 3$ Raumdimensionen konkurriert für $n = 3$ Kugeln wieder Dreieck mit Wurst. Wer gewinnt? Die Wurst!

Ist die dichteste Packung von $n = 4$ Kugeln die Tetraederpackung?

Nein, sondern wieder die Wurstpackung.

Tatsächlich sind wohl bis $n = 55$ Kugeln die Wurstpackung am dichtesten. Tennisbälle sind also ökonomisch verpackt (zumindest was das Volumen betrifft). Für hohe Zahlen n ist es aber günstiger, die Bälle zu einem Haufen zu packen.

- Auch für $d = 4$ Dimensionen siegt für kleine n die Wurstpackung, während sie für $n \geq 375\,370$ Kugeln nicht mehr die dichteste Packung ist (so genannte *Wurstkatastrophe*).

Wurstvermutung. Für $d \geq 5$ Dimensionen ist die Wurstpackung von n Kugeln immer am dichtesten.

Diese Vermutung wurde für $d \geq 42$ Dimensionen bewiesen.

2.2 Gitterpackungen

Hier packt man unendlich viele Kugeln im \mathbb{R}^d in Gitterform. Ein Gitter im \mathbb{R}^d kann man durch Angabe seiner sog. *Basis* festlegen. Diese besteht aus d Punkten $\ell_1, \dots, \ell_d \in \mathbb{R}^d$, und das zugehörige Gitter ist dann die Punktmenge

$$M := \{m_1\ell_1 + \dots + m_d\ell_d \mid m_i \in \mathbb{Z}\},$$

gebildet aus den ganzzahligen Linearkombinationen dieser Vektoren. Für eine Gitterpackung von Kugeln vom Radius 1 braucht man nur solche Gitter M zu betrachten, für die je zwei Punkte aus M Mindestabstand 2 haben. Wir gehen davon aus, dass die Vektoren ℓ_1, \dots, ℓ_d *linear unabhängig* sind, also kein Vektor ℓ_i eine Darstellung

$$\ell_i = x_1\ell_1 + \dots + x_{i-1}\ell_{i-1} + x_{i+1}\ell_{i+1} + \dots + x_d\ell_d$$

mit $x_k \in \mathbb{R}$ besitzt.

Beispiel 2.2 1. Das durch $\ell_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\ell_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\ell_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$ aufgespannte (einfach) *kubische* Gitter im \mathbb{R}^3

2. Das durch $\ell_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$, $\ell_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$, $\ell_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$ aufgespannte *kubisch-flächenzentrierte* Gitter im \mathbb{R}^3

Die Dichte einer unendlichen Kugelpackung lässt sich nicht unmittelbar als Quotient von genutzten und benutzten Volumen definieren, denn beide sind unendlich. Im vorliegenden Fall von Gitterpackungen kann man sich aber wegen der Periodizität auf die Betrachtung einer *Elementarzelle* beschränken. Diese ist das durch die Gitterbasis aufgespannte Parallelepipid

$$E := \{x_1\ell_1 + \dots + x_d\ell_d \mid 0 \leq x_i \leq 1\} \subset \mathbb{R}^d.$$

Das gesamte in E genutzte Volumen ist gerade $\text{Vol}(K_1^d)$.

Aufgabe 6 (Elementarzelle): Das durch die Basisvektoren $\ell_1, \dots, \ell_d \in \mathbb{R}^d$ des Gitters \mathcal{L} aufgespannte Parallelepipid

$$E := \{x_1\ell_1 + \dots + x_d\ell_d \mid 0 \leq x_i \leq 1\} \subset \mathbb{R}^d$$

wird auch *Elementarzelle* genannt.

Zeigen Sie, dass das Gesamtvolumen $\text{Vol}(E \cap (\mathcal{L} + K_1^d))$ der in der Elementarzelle befindlichen Teilstücke von Kugeln gleich $\text{Vol}(K_1^d)$ ist.

Das benutzte Volumen $\text{Vol}(E)$ lässt sich durch

$$\text{Vol}(E) = |\det(\ell_1, \dots, \ell_d)|$$

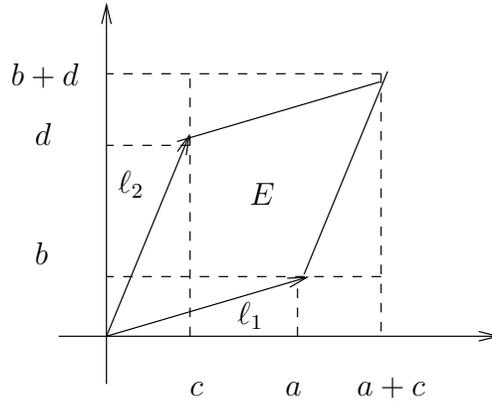
berechnen, wobei \det als Symbol für die so genannte Determinante steht. Damit ergibt sich die Packungsdichte

$$\delta(M) := \frac{\text{Vol}(K_1^d)}{\text{Vol}(E)} = \frac{\text{Vol}(K_1^d)}{|\det(\ell_1, \dots, \ell_d)|}. \quad (2.3)$$

2.2.1 Zwei Dimensionen

Ist in $d = 2$ Dimensionen $\ell_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ und $\ell_2 = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$, dann ist $\det(\ell_1, \ell_2) = \det \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} = ad - bc$. Der Betrag dieser Zahl ist aber gleich dem Flächeninhalt des Parallelogramms mit den Eckpunkten $0, \ell_1, \ell_2$ und $\ell_1 + \ell_2$.

Aus der folgenden Zeichnung können wir (für den Fall eines von ℓ_1 aus gesehen im Gegenuhrzeigersinn um einen Winkel $< \pi$ gedrehten Vektors ℓ_2) sehen, dass $\text{Vol}(E) = |\det(\ell_1, \ell_2)|$ ist.



Das Dreieck mit den Eckpunkten $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, ℓ_1 und $\begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}$ hat die Fläche $\frac{ab}{2}$, und entsprechend ist die Fläche des Dreiecks mit den Eckpunkten $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, ℓ_2 und $\begin{pmatrix} 0 \\ d \end{pmatrix}$ gleich $\frac{cd}{2}$. Beide Dreiecke tauchen aber in dem Rechteck mit den Seitenlängen $a + c$ und $b + d$ verschoben und außerhalb des Elementargebiets noch einmal auf. Es ergibt sich also

$$\text{Vol}(E) = (a + c)(b + d) - ab - cd - 2bc = ad - bc = \det(\ell_1, \ell_2).$$

Wir können in zwei Dimensionen leicht die Gitterpackung mit der größten Dichte finden:

- Zunächst müssen sich Kreisscheiben berühren. Andernfalls können wir die Dichte noch weiter erhöhen. Wir können also voraussetzen, dass $\ell_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ ist.
- Auch benachbarte horizontale Reihen von Kreisscheiben sollten sich berühren. Damit kann der zweite Gittervektor in der Form $\ell_2 = 2 \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}$ gewählt werden.
- Damit alle Kreisscheiben disjunkt sind, muss man verlangen, dass $|\sin \varphi| \leq 1/2$ ist, also o.B.d.A. $|\varphi| \leq 30^\circ$.
- Damit wird $\det(\ell_1, \ell_2) = 4 \cos \varphi$. Der minimale Wert $2\sqrt{3}$ wird für $\cos \varphi = \sqrt{3}/2$ angenommen, also für die hexagonale Gitterpackung.

Die maximale Dichte $\delta_{\max} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.907$ wird also nur für dieses Gitter erreicht.

Aufgabe 7 (Gitterpackungen ($d = 2$)):

- a) Welche Fläche besitzt ein reguläres die Kreisscheibe K_1^2 umschreibendes Sechseck?
- b) Welche Packungsdichte besitzt demnach die hexagonale Scheibenpackung?

2.2.2 Drei Dimensionen

Bei der Berechnung der Determinante einer 3×3 -Matrix gilt die (Ihnen vielleicht schon aus dem Mathematikunterricht vertraute) *Regel von Sarrus*: Um $\det(A)$ für die Matrix $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ zu berechnen, schreibt man zunächst die beiden ersten Spalten von A hinter A , sodass sich folgendes Schema ergibt:

$$\begin{array}{cccccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{11} & a_{12} & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{21} & a_{22} & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32} & \end{array}$$

Sodann summiert man die Produkte aus der "Hauptdiagonalen" von A und ihren beiden Parallelen und subtrahiert davon das Produkt der "Nebendiagonalen" von A und ihrer beiden Parallelen:

$$\begin{aligned} \det(A) &= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ &- a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33}. \end{aligned}$$

Aufgabe 8 (Determinante): Zeigen Sie, dass für das von ℓ_1, ℓ_2 und $\ell'_3 := \ell_3 + c_1\ell_1 + c_2\ell_2$ aufgespannte gescherte Parallelotop E' tatsächlich das gleiche Volumen $\text{Vol}(E') = |\det(\ell_1, \ell_2, \ell'_3)|$ herauskommt wie für das von ℓ_1, ℓ_2 und ℓ_3 aufgespannte Parallelotop E .

Aufgabe 9 (kubisch-flächenzentriertes Gitter):

- a) Zeigen Sie, dass die Basisvektoren $\ell_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$, $\ell_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$, $\ell_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$ des kubisch-flächenzentrierten Gitters tatsächlich linear unabhängig sind.
- b) Berechnen Sie das Volumen der von ihnen aufgespannten Elementarzelle $E = \{x_1\ell_1 + x_2\ell_2 + x_3\ell_3 \mid 0 \leq x_i \leq 1\} \subset \mathbb{R}^3$.
- c) Was ist die Packungsdichte dieser Gitterpackung?

Aufgabe 10 (kubische Gitterpackung): Betrachten Sie das kubische Gitter

$$\mathcal{L} \text{ im } \mathbb{R}^d \text{ mit Basis } \ell_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \ell_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \ell_d = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Welche Packungsdichte besitzt die Gitterpackung mit dem Gitter \mathcal{L} ?

In drei Dimensionen ist das kubisch flächenzentrierte Gitter optimal, mit einer Packungsdichte $\delta_{\max} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$.

Nur bis einschließlich $d = 8$ und für $d = 24$ sind die dichtesten Kugelgitterpackungen bekannt, Letzteres erst seit diesem Jahr [PZ].

2.3 Die Keplervermutung

Sind die dichtesten Gitterpackungen auch unter *allen* unendlichen Packungen optimal? Um diese Frage zu beantworten, wird man die Dichte δ einer unendlichen Packung zunächst als Quotient von genutztem und benutztem Volumen in einem großen Würfel im Limes unendlicher Kantenlänge definieren. Es ergibt sich folgendes Bild:

- Der Fall einer Dimension besitzt die dichteste Gitterpackung die Dichte $\delta = 1$, was nicht zu übertreffen ist.
- Für $d = 2$ Dimensionen ist die hexagonale Packung an Dichte nicht zu übertreffen.
- Dass in drei Dimensionen die kubisch-flächenzentrierte Packung optimal ist, wurde von Kepler in seiner 1611 erschienen Schrift "Neujahrsgabe oder über den sechseckigen Schnee" vermutet.
- In höheren Dimensionen ist vermutlich nicht immer (z.B. nicht für $d = 10$) die maximale Dichte durch eine Gitterpackung realisiert, sondern durch eine unregelmäßigere Anordnung der Kugeln.

Der Beweis der Optimalität der hexagonalen Scheibenpackung ist im Prinzip sehr einfach, wenn man so genannte Voronoizellen benutzt.

Definition 2.3 Es sei $M \subset \mathbb{R}^d$ eine Punktmenge und $x \in M$. Dann ist die Voronoizelle von x gleich

$$V(x) := \{y \in \mathbb{R}^d \mid \|y - x'\| \geq \|y - x\| \text{ für alle } x' \in M\},$$

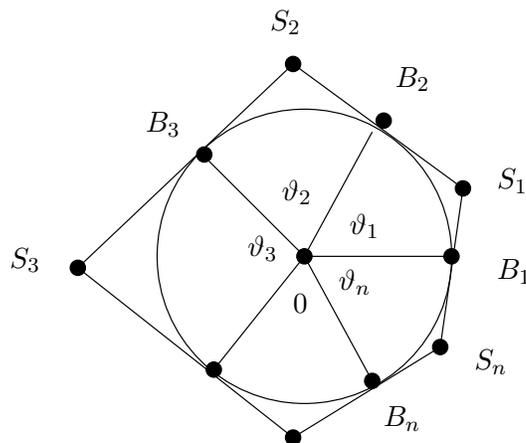
also die Menge aller Punkte y des \mathbb{R}^d , die x näher als allen anderen Punkten von M sind.

Ist $M \subset \mathbb{R}^2$ die Menge der Mittelpunkte einer Scheibenpackung, dann stellt sich heraus, dass der Flächeninhalt $\text{Vol}(V(x))$ immer $\geq 2\sqrt{3}$ ist, und Gleichheit gilt nur für Voronoizellen $V(x)$, die die Form eines regulären Sechsecks besitzen.

Da die Voronoizellen (volumenmäßig) gerade den Raum überdecken, wird dadurch klar, dass das hexagonale Gitter optimal ist. Wie können wir verstehen, dass die Voronoi-Zelle minimalen Flächeninhalts die Form eines regulären Hexagons hat, die die Kreisscheibe umschreibt? Ein Beweis dieser Tatsache wurde 1944 von B. Segre und K. Mahler in der Fachzeitschrift "American Mathematical Monthly" veröffentlicht. Er ist mit Schulkenntnissen verständlich, und Sie können ihn in unserer Bibliothek lesen. Allerdings ist er zu lang, um ihn im Vorkurs vorzuführen. Stattdessen werde ich eine Teilfrage behandeln.

Beh.: Wir betrachten ein dem Einheitskreis umschriebenes n -Gon (Polygon, bestehend aus $n \geq 3$ Kanten). Dann ist seine Fläche größer oder gleich dem eines regulären n -Gons (mit lauter gleichen Kantenlängen und gleichen Winkeln).

Bew.: Die Berührungspunkte des Polygons P mit dem Einheitskreis seien mit B_1, \dots, B_n



bezeichnet, und zwar z.B. im Gegenuhrzeigersinn nummeriert. Die Winkel zwischen aufeinanderfolgenden Berührungspunkten B_i, B_{i+1} (mit $B_{n+1} := B_1$) sollen ϑ_i heißen, und es gilt $0 < \vartheta_i < \pi$ (warum?). Dann ist die Fläche $V(P)$ des Polygons

P gleich

$$V(P) = \sum_{i=1}^n \tan\left(\frac{\vartheta_i}{2}\right),$$

wie man durch Betrachtung der Fläche der rechtwinkligen Dreiecke mit den Ecken $0, B_i$ und S_i und ihrer Partner mit den Ecken $0, B_{i+1}$ und S_i sieht. Es gilt nun $\sum_{i=1}^n \vartheta_i = 2\pi$. Beim regulären n -Gon ist damit $\vartheta_i = \frac{2\pi}{n}$. Die Behauptung folgt aber aus der folgenden Aufgabe, denn $\tan\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\vartheta_i}{2}\right) = \tan\left(\frac{\pi}{n}\right)$ ist ein n -tel der Fläche des regulären n -Gons. \square

Aufgabe 11 Zeigen Sie die Ungleichung

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \tan\left(\frac{\vartheta_i}{2}\right) \geq \tan\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\vartheta_i}{2}\right).$$

Diese Ungleichung ist die so genannte *Jensen-Ungleichung*, die Sie in diesem Semester kennen lernen werden. Sie gilt allgemein für Funktionen mit positiver zweiter Ableitung wie hier den Tangens auf dem Intervall $(0, \pi/2)$.

Offensichtlich wird die Fläche $n \tan\left(\frac{\pi}{n}\right)$ des regulären Polygons umso kleiner, je größer n wird und strebt für $n \rightarrow \infty$ gegen die Fläche π des Einheitskreises.

Allerdings können nur für $n = 3, 4, 5$ oder 6 die Polygone als Voronoizellen auftreten, denn sonst würde der Winkel $\vartheta_i = \frac{2\pi}{n}$ kleiner als der Winkel eines gleichseitigen Dreiecks mit Kantenlänge 2 , also Abstand der Kugelmittelpunkte zwei.

Hier deutet sich schon an, dass das reguläre den Einheitskreis umschreibende Hexagon die für eine Voronoizelle minimale Fläche besitzt.

In drei Dimensionen besitzt die Voronoizelle des kubisch-flächenzentrierten Gitters dagegen nicht das minimal mögliche Volumen aller Voronoizellen (wohl aber der Voronoizellen aller Gitterpackungen). Daher ist die Keplervermutung so schwer zu beweisen. Jahrhundertlang versuchten sich die besten Mathematiker vergebens daran.

Am 8. August 1998 schickte Thomas Hales eine E-Mail an seine Kollegen, in der er einen Beweis ankündigte. Dieser basierte auf raffinierten Techniken der diskreten Mathematik, kombiniert mit massivem Computereinsatz.

Die Arbeit wurde daraufhin von Hales bei der Fachzeitschrift *Annals of Mathematics* eingereicht. Ein Dutzend Mathematiker versuchten ihre Richtigkeit zu überprüfen. Das Ergebnis mehrjähriger Bemühungen fasste der *Annals*-Redakteur

MacPherson mit den folgenden Worten an Hales zusammen:

"Die Nachrichten der Referees sind schlecht. Sie waren nicht in der Lage, die Richtigkeit des Beweises festzustellen, und werden auch in Zukunft nicht dazu in der Lage sein. Sie sind mit ihrer Energie am Ende."

Der Artikel wurde zwar zur Veröffentlichung angenommen, aber ohne Richtigkeitsgarantie – ein einmaliger Vorgang. Damit gab sich Hales aber noch nicht geschlagen. Er gründete das *Flyspeck*-Projekt, das einen automatisierten Beweis der Keplervermutung zum Ziel hat. Die Laufzeit des Projektes schätzt er auf 20 Jahre [Ha].

3 Anwendungen

3.1 Kristalle

Im Gegensatz zu Festkörpern wie Gläsern oder Kunststoffen weisen die Atome in Kristallen eine langreichweitige Ordnung auf. Sie sind näherungsweise gitterperiodisch angeordnet. Stoffe wie die Edelmetalle und die Edelgase besitzen eine kubisch-flächenzentrierte Kristallstruktur. Andere Stoffe, die wegen der Struktur ihrer Elektronenhülle reaktionsfreudiger sind, kristallisieren auch in weniger dichten Gitterstrukturen.

Ein Argument für das Auftreten von insbesondere kubisch-flächenzentrierten Kristallen ist deren hohe Dichte, die zu einer niedrigen Gesamtenergie führen sollte. Bei niedrigen Temperaturen werden niederenergetische Zustände der Materie bevorzugt.

Leider ist diese Argumentation vom mathematischen Standpunkt aus noch nicht stichhaltig. Denn selbst wenn wir von der Richtigkeit des Beweises der Keplervermutung ausgehen, gibt es doch viele Kugelpackungen maximaler Dichte, deren Atome nicht alle langreichweitig geordnet sind. Es könnten ja z.B. zwei gegeneinander verkantete Gitterpackungen entlang einer Grenzfläche aufeinander stoßen. Da im \mathbb{R}^3 das Volumen einer Kugel vom Radius R wie R^3 wächst, der in ihr liegende Teil der Grenzfläche aber nur wie R^2 , fällt bei der Definition der Packungsdichte der Dichteverlust entlang der Grenzfläche nicht ins Gewicht.

Solche Grenzflächen – Korngrenzen genannt – sind in der Kristallographie wohl bekannt.

Die Frage ist, warum trotz dieser Phänomene makroskopische Kristalle existieren.

Selbst in dem im Folgenden dargestellte Modell ist diese Frage seit 50 Jahren mathematisch ungelöst.

Im *Scheibenmodell* betrachtet man n nicht überlappende Kreisscheiben mit Radius 1 in einem Quadrat der Kantenlänge L . Die Dichte ist damit

$$\delta_{L,n} = \frac{n\pi}{L^2}.$$

Nun kann man, falls $\delta_{L,n} < \delta_{\max} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}$ ist, die Scheiben in sehr verschiedenen Konfigurationen anordnen. Die Frage ist nun, ob sich *typischerweise* eine langreichweitige Ordnung einstellt, wenn man die Kantenlänge L und die Teilchenzahl n so gegen unendlich gehen lässt, dass $\delta_{L,n}$ gegen eine Dichte ρ strebt. Dies ist für kleine Dichten ρ nachweisbar nicht der Fall, und die Scheiben verhalten sich dann typischerweise wie ein Gas.

Für hohe Dichten $\rho \lesssim \delta_{\max}$ dagegen beobachtet man in numerischen Simulationen eine langreichweitige Ordnung. In ihrer 2003 abgeschlossenen Dissertation [Di] hat Tanja Dierkes diese untersucht.

Gehen wir zurück zu der Struktur der Voronoizellen. Im hexagonalen Fall besitzen diese alle sechs Seiten, und diese Eigenschaft bleibt auch bei kleinen Verformungen erhalten.

Was geschieht aber, wenn es Voronoizellen gibt, deren Seitenzahl ungleich sechs ist?

Dann besitzt der Kristall eine *Fehlstelle*. Bei einer isolierten, nicht sechszähligen Voronoizelle spricht man von einer *Disklination*. Sie führt zu einer sichtbaren globalen Verzerrung. Es gibt aber auch subtilere Fehlstellen, so genannte *Dislokationen*. Diese kann man wie folgt erkennen. Geht man im hexagonalen Gitter z.B. vier Stellen nach rechts, dreht sich um 60° , geht dann vier Waben weiter, dreht sich wieder um 60° usw., dann ist man nach sechs Drehungen an seinem Ausgangspunkt angelangt. Wie das nachfolgende Bild (Luftblasen) zeigt, ist dies bei Vorhandensein von Dislokationen anders. Erstaunlich ist aber, dass beide Typen von isolierten Fehlstellen einen divergierenden Bedarf an ungenutzter (benutzter minus genutzter) Fläche nach sich ziehen. Damit wird ihr Auftreten bei hoher Dichte unwahrscheinlich. Ob dies so unwahrscheinlich ist, dass eine langreichweitige Ordnung erhalten bleibt, wird in Zukunft zu erforschen sein.

Aufgabe 12 (Endliche Packungen): Es sollen n Kreisscheiben mit Radius 1 so in der Ebene gepackt werden, dass ihre Mittelpunkte auf Gitterpunkten des Quadratgitters $\mathcal{L} = \left\{ \binom{2m_1}{2m_2} \mid m_i \in \mathbb{Z} \right\}$ liegen. Welche Packungsdichte lässt sich erreichen?

3.2 Codierungstheorie

Ein *Bit*, die Grundeinheit der Informationstheorie, ist eine zweielementige Menge, z.B. $B = \{0, 1\}$. Entsprechend ist für eine natürliche Zahl d das d -fache kartesische Produkt

$$B^d := \{(b_1, \dots, b_d) \mid b_i \in B\}$$

die Menge aller 0 – 1-Folgen der Länge d . Solche Folgen werden nachrichtentechnisch gespeichert und übertragen, z.B. mit CDs und Handies. Bei der Übertragung treten Fehler auf. Solche Fehler zu erkennen und möglichst zu korrigieren, ist ein Ziel der Codierungstheorie. Dabei verschlüsselt man mit einer Teilmenge $C \subset B^d$ von Codewörtern.

Beispiel 3.1 Der *Wiederholungscode*. Hier will man ein einzelnes Bit übertragen, wiederholt es aber sicherheitshalber dreimal. Es gibt also zwei Codewörter: $C = \{(0, 0, 0), (1, 1, 1)\} \subset B^3$.

Die Decodierung erfolgt durch Mehrheitsentscheid. Empfängt man also z.B. $(0, 1, 0) \in B^3$, dann geht man davon aus, dass nur das zweite Bit falsch übertragen wurde, also das ursprüngliche Codewort $(0, 0, 0) \in C$ ist. Die ursprüngliche Nachricht ist also die Null.

Schauen wir uns den Wiederholungscode geometrisch an. Allgemein kann man den Abstand zweier Bitfolgen $b = (b_1, \dots, b_d)$ und $b' = (b'_1, \dots, b'_d) \in B^d$ durch

$$\|b - b'\| := \#\{i \mid b_i \neq b'_i\}$$

definieren, also als die Zahl der Stellen, an denen b nicht mit b' übereinstimmt (sog. *Hammingabstand*).

Betrachtet man nun die acht Elemente von B^3 als Punkte und verbindet man Punkte b und b' , falls $\|b - b'\| = 1$ ist, die Codewörter sich also nur in einem Bit unterscheiden, dann können wir B^3 als die Menge der Ecken eines Würfels darstellen. Benachbarte Bitfolgen werden durch Kanten verbunden.

Wir definieren jetzt abstrakt eine Kugel vom Radius R , um die Bitfolge $b \in B^d$ durch

$$K_R(b) := \{b' \in B^d \mid \|b' - b\| \leq R\}.$$

Im Beispiel ist die Kugel vom Radius $R = 1$ um das Codewort $(0, 0, 0) \in B^3$ von der Form

$$K_1(0, 0, 0) = \{(0, 0, 0), (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}.$$

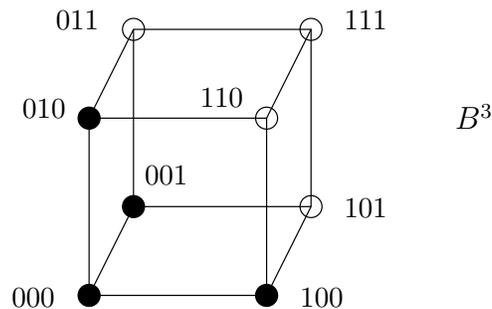
Umgekehrt ist die Kugel um das Codewort $(1, 1, 1)$ durch

$$K_1(1, 1, 1) = \{(1, 1, 1), (0, 1, 1), (1, 0, 1), (1, 1, 0)\}$$

gegeben. Die beiden Kugeln überlappen nicht. Man korrigiert allgemein auf den Kugelmittelpunkt, also das Codewort.

Codes mit nicht überlappenden Kugeln vom Radius $K \in \mathbb{N}$ lassen die Korrektur von K Bits zu. Aus Gründen der Übertragungsgeschwindigkeit ist man für gegebene Länge d der Bitfolge und Zahl K korrigierbarer Bits an möglichst großen Teilmengen $C \subset B^d$ von Codewörtern interessiert. Ideal ist von diesem Gesichtspunkt aus der Wiederholungscode, denn er ist *perfekt*: alle Bitfolgen $b \in B^d$ liegen in genau einer Kugel um ein Codewort aus C .

Dass dies auch für größere d möglich ist, zeigen die sog. *Hammingcodes*. Z.B. sind dessen Codewörter der Länge 7 durch die Linearkombinationen von $\{(1101001), (0101010), (1001100), (1110000)\}$ gegeben.



Die Codes der Codierungstheorie werden zur Konstruktion von Gitterpackungen und anderen infiniten Packungen von Kugeln in \mathbb{R}^d benutzt [Zo].

4 Schlussbemerkungen

Wer sich eingehender mit der Frage von Kugelpackungen beschäftigen will, sei auf das leicht lesbare Buch [Le] von Max Leppmeier verwiesen, das im Semesterapparat der Bibliothek zu finden ist.

Wenn Sie Ihr Schulwissen auffrischen wollen, empfehle ich das Buch [1] von Scharlau.

Zur Einführung in mathematische Teilgebiete eignet sich [2].

Literatur

- [Bo] Albrecht Böttcher: Die Wurstvermutung. www-user.tu-chemnitz.de
- [Di] T. Dierkes: Statistical Mechanics of Disk Packings. Dissertation, Erlangen 2003
- [Ha] Thomas Hales: The Flyspeck Project Fact Sheet.
www.math.pitt.edu/~thales/flyspeck
- [Le] M. Leppmeier: Kugelpackungen von Kepler bis heute. Vieweg, 1997
- [PZ] Florian Pfender and Günter M.Ziegler: Kissing Numbers, Sphere Packings, and Some Unexpected Proofs. Notices of the AMS, September 2004
www.ams.org/notices
- [1] Winfried Scharlau: Schulwissen Mathematik: Ein Überblick. Vieweg 1995,
- [2] Eberhard Zeidler (Herausgeber): Teubner-Taschenbuch der Mathematik. Teubner. Teil I (EUR 34,90) und II (EUR 44,90). *Nicht zu verwechseln mit dem beim Verlag Harri Deutsch erschienenen gleichnamigen Titel*
- [Zo] C. Zong: Sphere packings. Springer, 1999