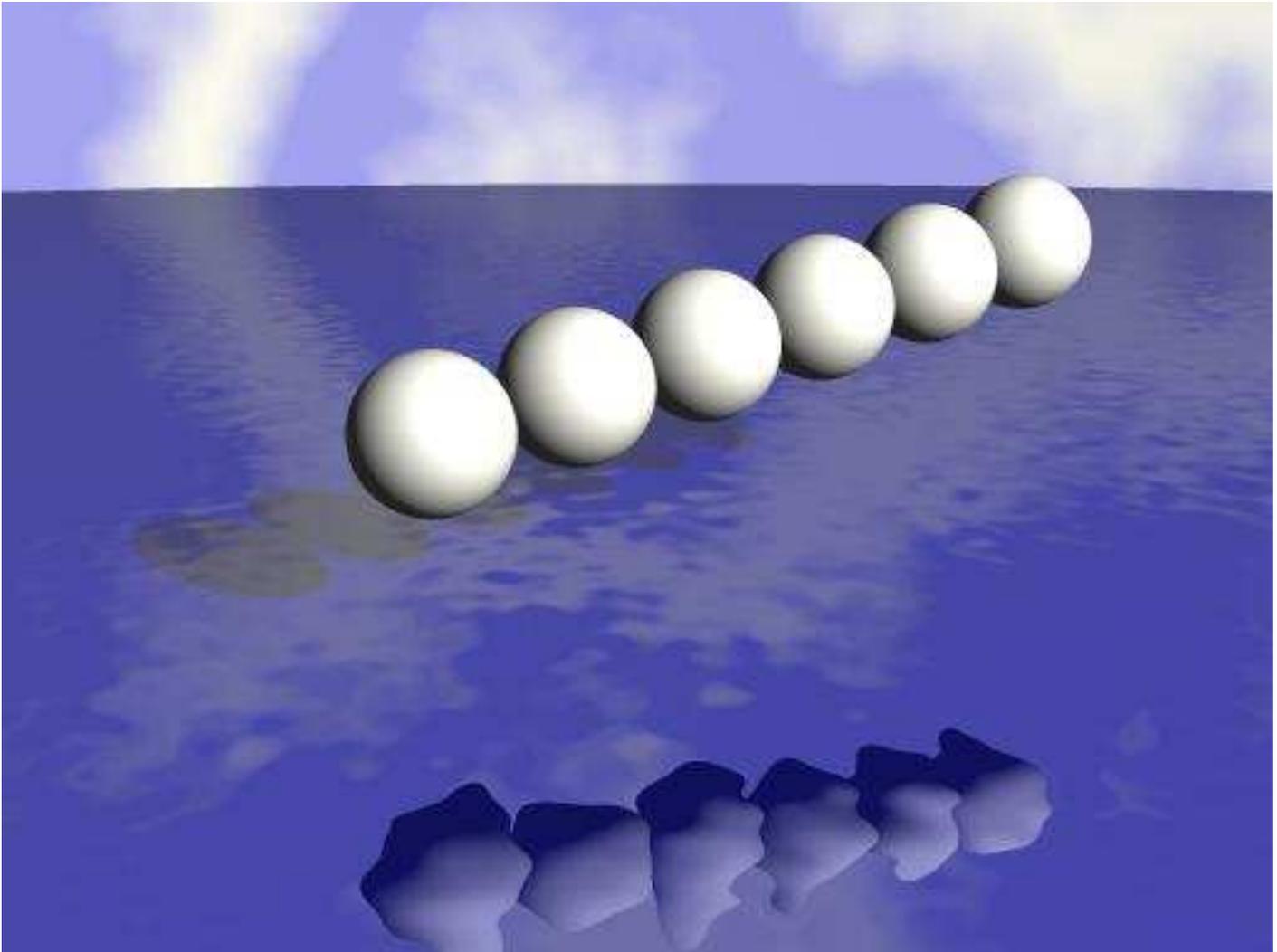


# Vorkurs Mathematik: Kugelpackungen

Andreas Knauf, Mathematisches Institut der Universität Erlangen-Nürnberg

[www.mi.uni-erlangen.de/~knauf](http://www.mi.uni-erlangen.de/~knauf)



Bildquelle: P. Scholl, Sphere packing database

**Kugelpackung:** Anordnung nicht überlappender Kugeln im Raum

# 1. Volumen von Kugeln

Kugel mit Radius  $R > 0$  und Mittelpunkt  $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$ :

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

Abstand von  $x$  und  $y$  im  $\mathbb{R}^3$ :

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

Kugel  $K_R^d$  mit Radius  $R > 0$  um  $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$ :

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

Abstand von  $x$  und  $y$  im  $\mathbb{R}^d$ :

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

- $d = 1$  : Kugeln sind Intervalle  $[x - R, x + R] \subset \mathbb{R}$
- $d = 2$  : Kugeln sind Kreisscheiben

$d$ -dimensionales Volumen  $\text{Vol}(M)$  von  $M \subset \mathbb{R}^d$

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

- $d = 1$  :  $\text{Vol}(K_1^1) = \int_{-1}^1 dx = 2$
- $d = 2$  : Substitution  $x_1 = \sin \alpha$   
$$\text{Vol}(K_1^2) = 2 \int_{-1}^1 \sqrt{1 - x_1^2} dx_1$$
$$= 2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\cos \alpha)^2 d\alpha = \pi$$

- $d > 2$  : Substitution  $x = \sin \alpha$

$$\text{Vol}(K_1^d) = \text{Vol}(K_1^{d-1}) \int_{-1}^1 (\sqrt{1-x^2})^{d-1} dx$$

$$\begin{aligned} F_d &:= \int_{-1}^1 (\sqrt{1-x^2})^{d-1} dx = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\cos \alpha)^{d-1} \cos \alpha d\alpha \\ &= (\cos \alpha)^{d-1} \sin \alpha \Big|_{-\pi/2}^{\pi/2} - \\ &\quad \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (d-1)(\cos \alpha)^{d-2} (\sin \alpha)^2 d\alpha. \end{aligned}$$

Wegen  $\cos(\pm\pi/2) = 0$  und  $(\sin \alpha)^2 = 1 - (\cos \alpha)^2$  ergibt sich  $F_d = (d-1)(F_{d-2} - F_d)$  oder

$$F_d = \frac{d-1}{d} F_{d-2}.$$

$$\text{Vol}(K_1^d) = \text{Vol}(K_1^{d-1}) F_d = \dots = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)},$$

mit Gamma-Funktion  $\gamma$ . Diese setzt die Fakultät fort:

$\Gamma(n+1) = n! := n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot \dots \cdot 2 \cdot 1$  und

$\Gamma(n+1/2) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \prod_{i=1}^{n-1} (i+1/2)$ .

Endergebnis:  $\boxed{\text{Vol}(K_R^d) = R^d \cdot \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}}.$

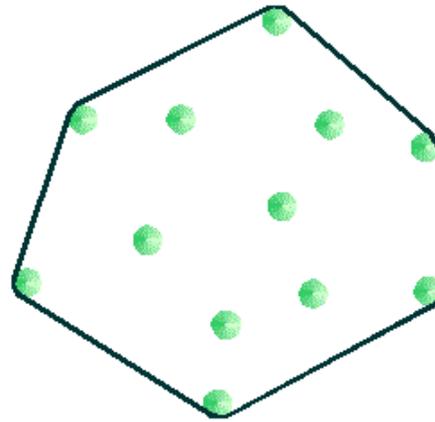
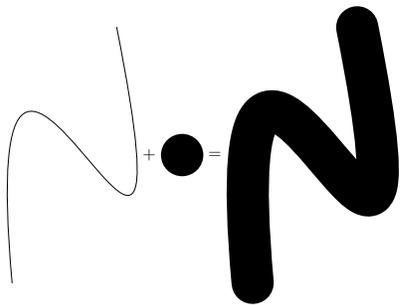
# 2. Dichte von Kugelpackungen

## 2.1 Endliche Packungen

**Annahme:** Radius 1.

Packung von  $n$  solchen Kugeln im  $\mathbb{R}^d$  durch Angabe ihrer Mittelpunkte  $x^{(1)}, \dots, x^{(n)} \in \mathbb{R}^d$  fixiert.

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



**Links:** *Minkowskisumme*  $A + B := \{a + b \mid a \in A, b \in B\}$   
zweier Teilmengen  $A, B$  des  $\mathbb{R}^d$

**Rechts:** *konvexe Hülle*  $\text{konv}(A)$  einer Teilmenge  $A$

Menge  $M := \{x^{(1)}, \dots, x^{(n)}\} \subset \mathbb{R}^d$  der Kugelmittelpunkte

Kugeln: Minkowskisumme  $M + K_1^d$

- genutztes Volumen

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

- benutztes Volumen

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

- *Packungsdichte*

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

Immer gilt  $0 < \delta(M) \leq 1$ .

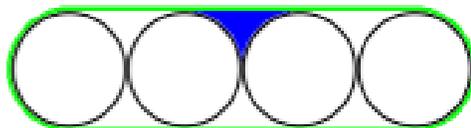
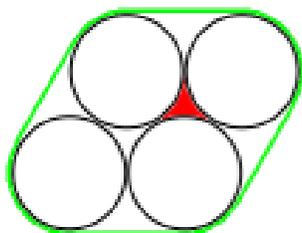
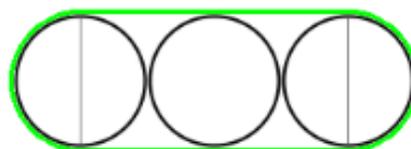
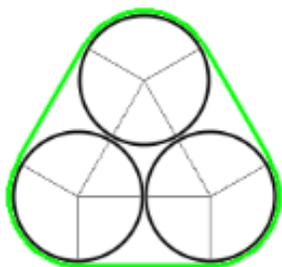
**Ziel:** Dichteste Packungen von  $n$  Kugeln im  $\mathbb{R}^d$

- *Wurstpackung*: Kugelmittelpunkte auf einer Geraden.  
Benutztes Volumen gleich  $\text{Vol}(K_1^d) + 2(n-1)\text{Vol}(K_1^{d-1})$ .

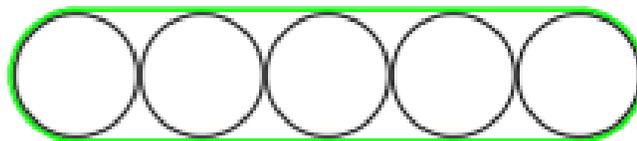
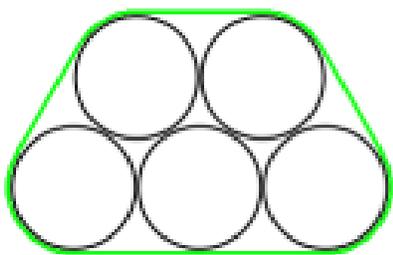
**Frage:** Gibt es dichtere Packungen von  $n$  Kugeln als die Wurstpackungen?

**Antwort:**

- $d = 1$ : Nein ( $\delta_{\max} = 1$ ).
- $d = 2$ : Ja, für alle  $n \geq 3$ :

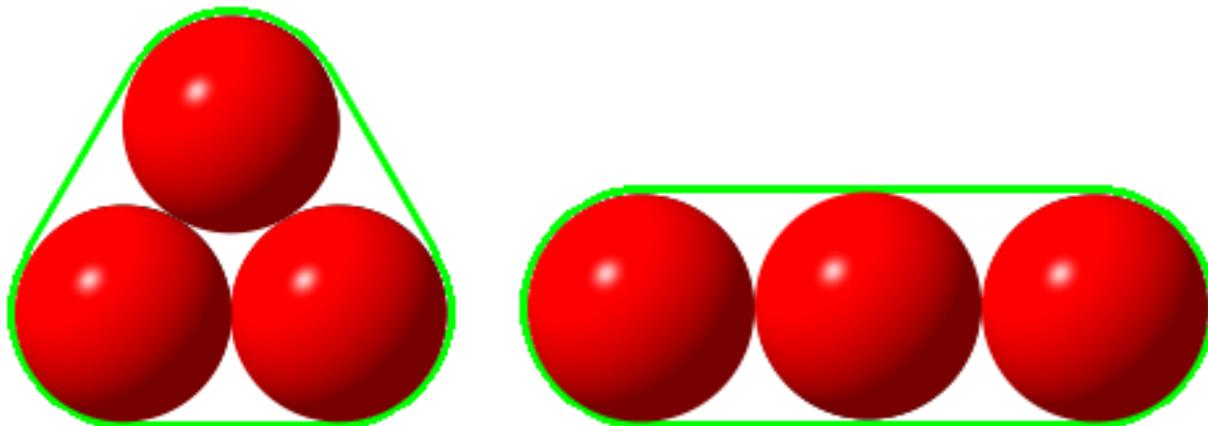


k ... kleine Fläche  
g ... große Fläche

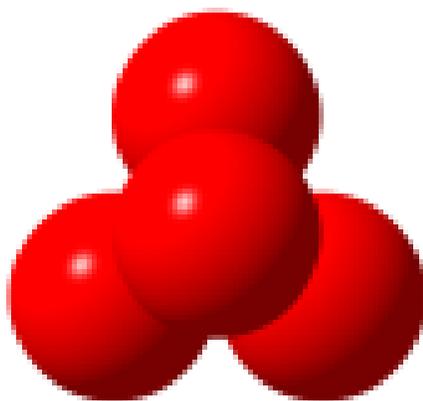


•  $d = 3$ :

—  $n = 3$  (Dreieckspackung versus Wurstpckung):



—  $n = 4$  (Tetraederpackung versus Wurstpckung):



—  $n \leq 55$ : Wurstpckung siegt!

—  $n$  groß: Wurstkatastrophe!

•  $d = 4$ :

— Kleine  $n$ : Wurstpackung siegt

—  $n \geq 375\,370$ : Wurstkatastrophe!

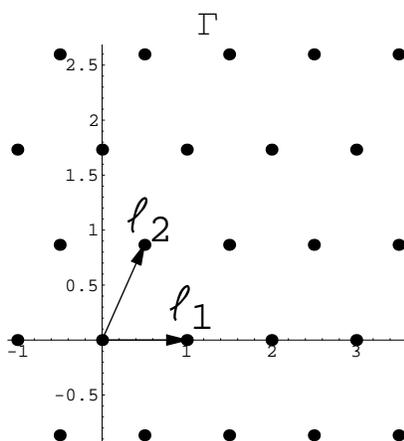
**Wurstvermutung.** Für  $d \geq 5$  Dimensionen ist die Wurstpackung von  $n$  Kugeln *immer* am dichtesten.

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

## 2.2 Gitterpackungen

**Gitter  $M$  im  $\mathbb{R}^d$  :** Basis  $\ell_1, \dots, \ell_d \in \mathbb{R}^d$ ,

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



## Annahmen:

- Vektoren  $l_1, \dots, l_d$  *linear unabhängig*, d.h. kein Vektor  $l_i$  besitzt eine Darstellung

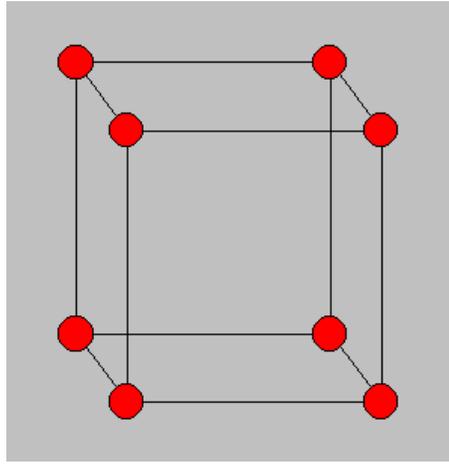
$$l_i = x_1 l_1 + \dots + x_{i-1} l_{i-1} + x_{i+1} l_{i+1} + \dots + x_d l_d.$$

- Mindestabstand 2 der Gitterpunkte

# Beispiele:

- (einfach) *kubisches* Gitter im  $\mathbb{R}^3$ :

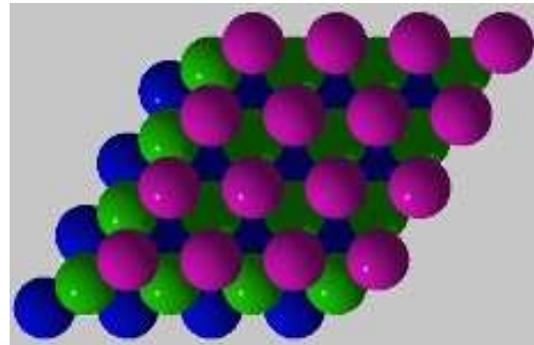
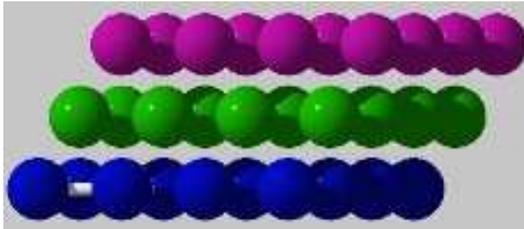
$$\ell_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \ell_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \ell_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$



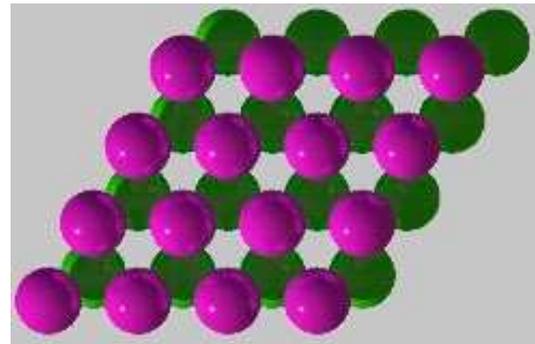
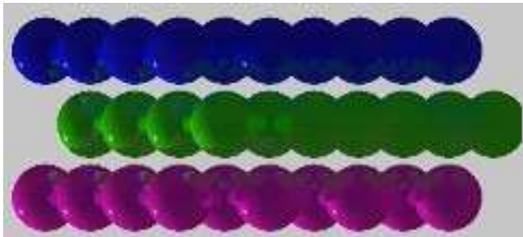
- *kubisch-flächenzentriertes* Gitter im  $\mathbb{R}^3$ :

$$\ell_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \ell_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}, \ell_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

fcc:



hcp:



- *Elementarzelle* : Parallelepiped

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

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

### **Beispiel:**

- $d = 2$ : Für  $\ell_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  und  $\ell_2 = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ , ist

$$\det(\ell_1, \ell_2) = \det \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} = ad - bc.$$

Der Betrag dieser Zahl ist gleich dem Flächeninhalt des Parallelogramms mit den Eckpunkten

$$0, \ell_1, \ell_2 \quad \text{und} \quad \ell_1 + \ell_2.$$

• Wir können in  $d = 2$  Dimensionen leicht die Gitterpackung mit der größten Dichte finden:

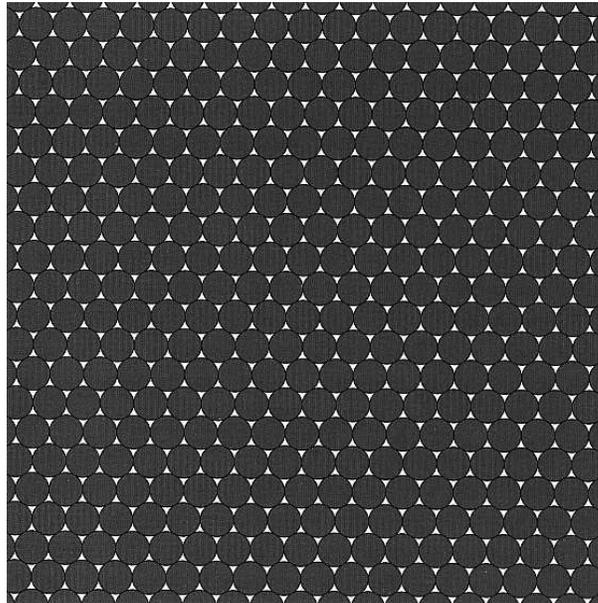
- Kreisscheiben berühren sich. Setze also  $l_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ .

- Auch benachbarte horizontale Reihen von Kreisscheiben berühren sich. Damit  $l_2 = 2 \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}$ .

- Alle Kreisscheiben disjunkt, also  $|\sin \varphi| \leq 1/2$ .  
O.B.d.A.  $|\varphi| \leq 30^\circ$ .

- Damit wird  $\det(l_1, l_2) = 4 \cos \varphi$ . 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.



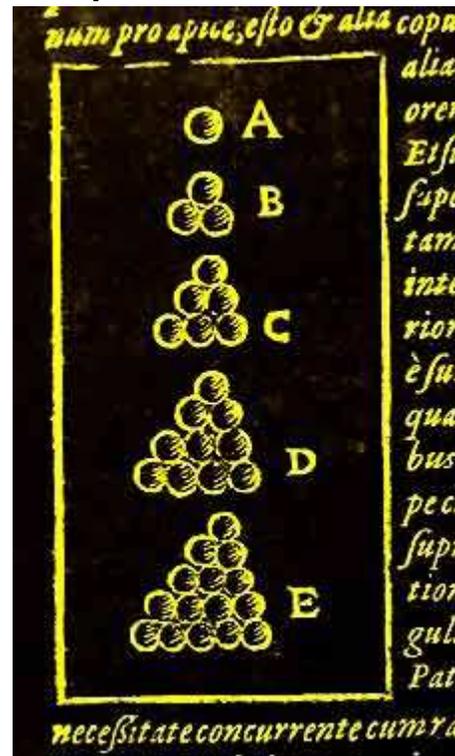
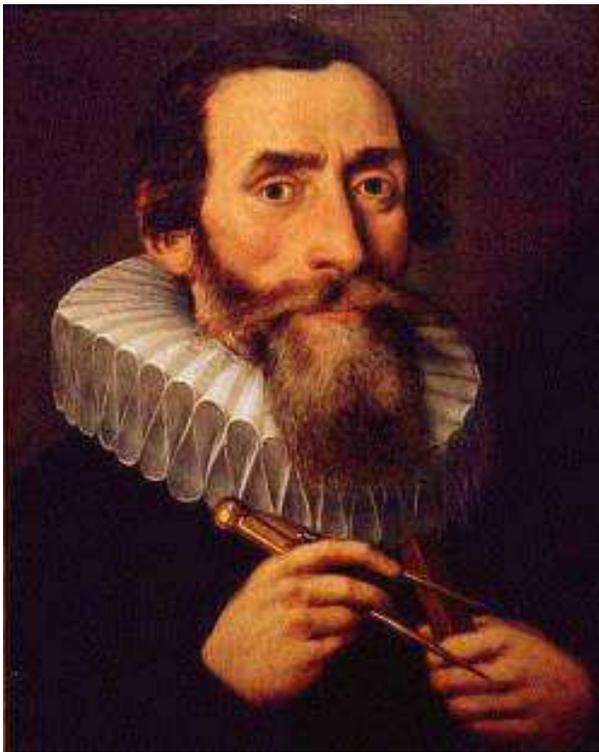
• In  $d = 3$  Dimensionen ist das kubisch flächenzentrierte Gitter optimal, mit einer Packungsdichte

$$\delta_{\max} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.7405.$$

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

## 2.3 Die Keplervermutung

**Frage:** Sind die dichtesten Gitterpackungen auch unter *allen* unendlichen Packungen optimal?



Johannes Kepler: De nive sexangula

**1998** Thomas Hales: Ja!

**2003** MacPherson an Hales: "*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.*"

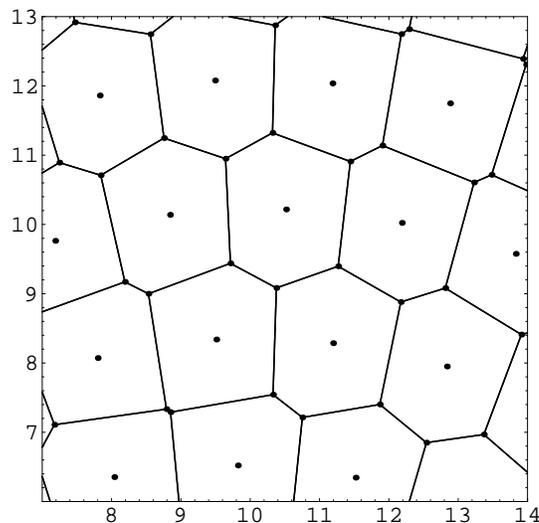
# 2003 Thomas Hales: *Flyspeck*-Projekt

(automatisierter Beweis der Keplervermutung,  
erwartete Laufzeit 20 Jahre)

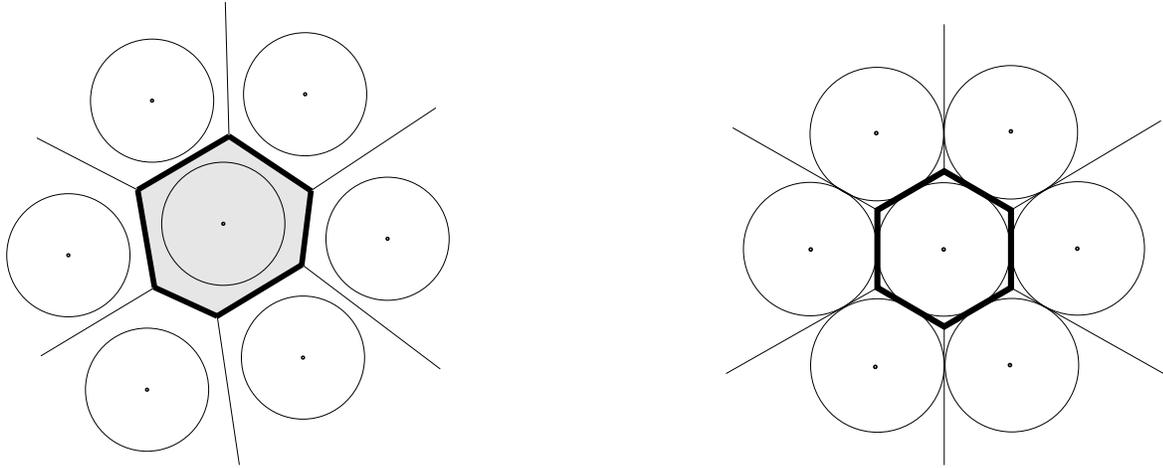
**Frage:** Warum ist die Keplervermutung so schwierig zu beweisen?

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

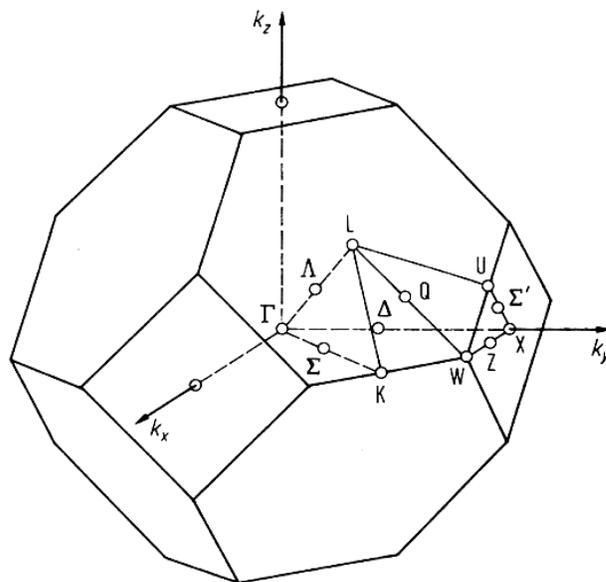
$$V(x) := \{y \in \mathbb{R}^d \mid \|y-x'\| \geq \|y-x\| \forall x' \in M\}.$$



- Die Voronoizelle der hexagonalen Packung besitzt minimales Volumen:



- Das Volumen der Voronoizelle der kubisch-flächenzentrierten Packung ist *nicht* minimal:



# 3 Anwendungen

## 3.1 Kristalle



**Frage:** Was sind Kristalle?

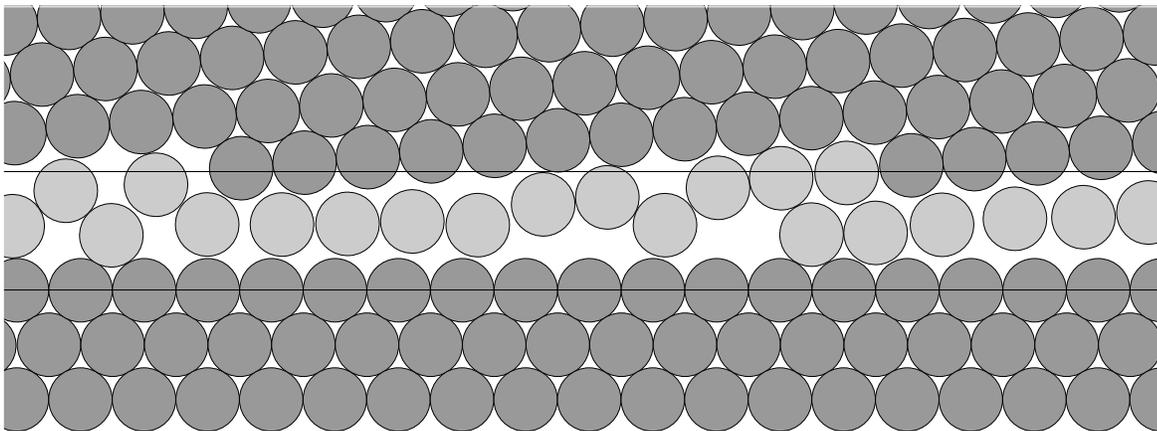
**Antwort:** Festkörper mit langreichweitiger, gitterförmiger Atomordnung.

**Beispiel:** Edelmetalle und Edelgase kristallisieren kubisch-flächenzentriert.

**Frage:** Warum existieren Kristalle?

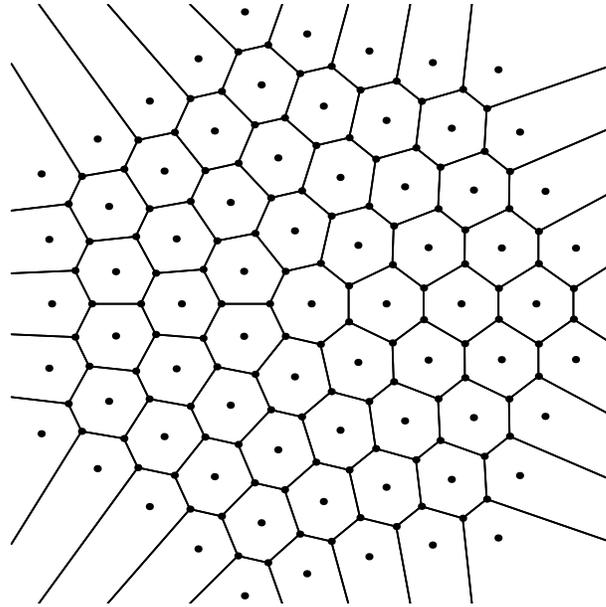
**Antwort** Dichteste Packung garantiert geringste Energie. Diese wird bei niedrigen Temperaturen bevorzugt.

**Problem:** Es gibt viele Kugelpackungen maximaler Dichte, deren Atome *nicht* alle langreichweitig geordnet sind, z.B. *Korngrenzen*:

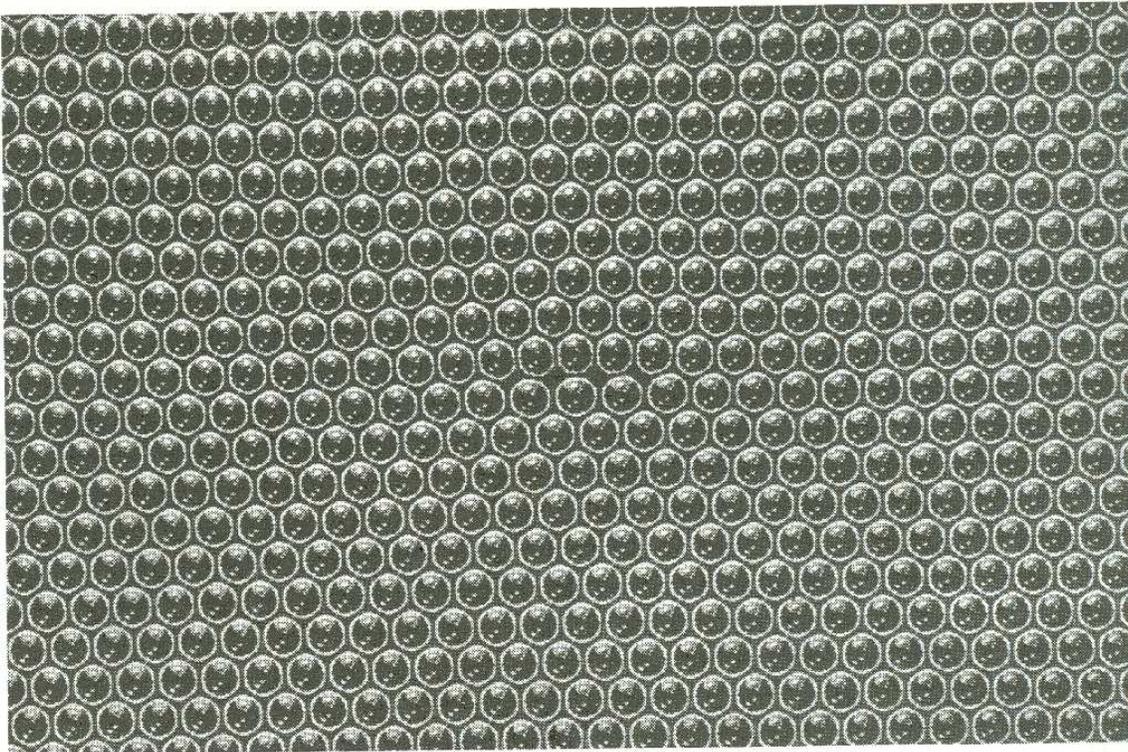


# Theorie der Defekte

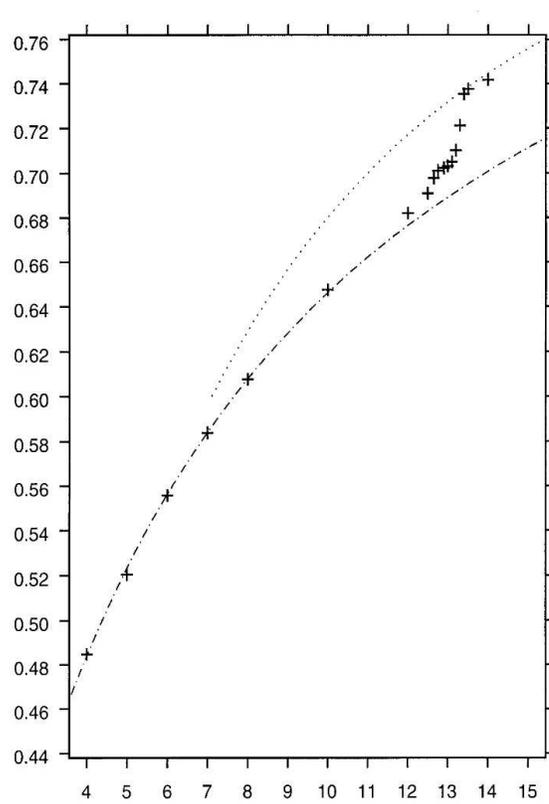
- Disklinationen



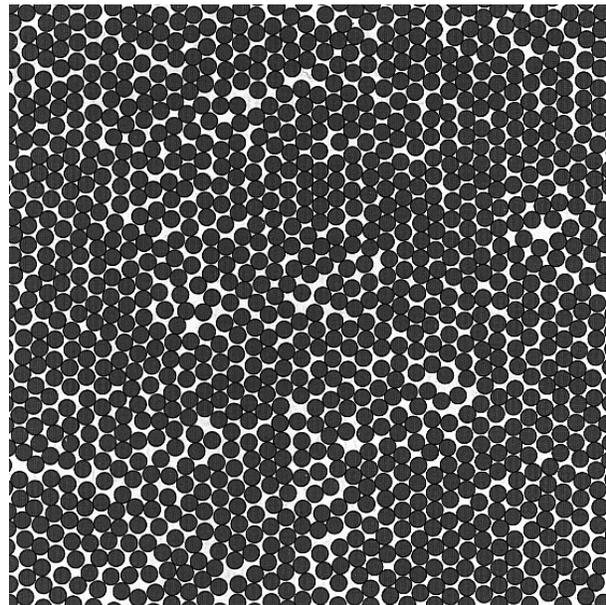
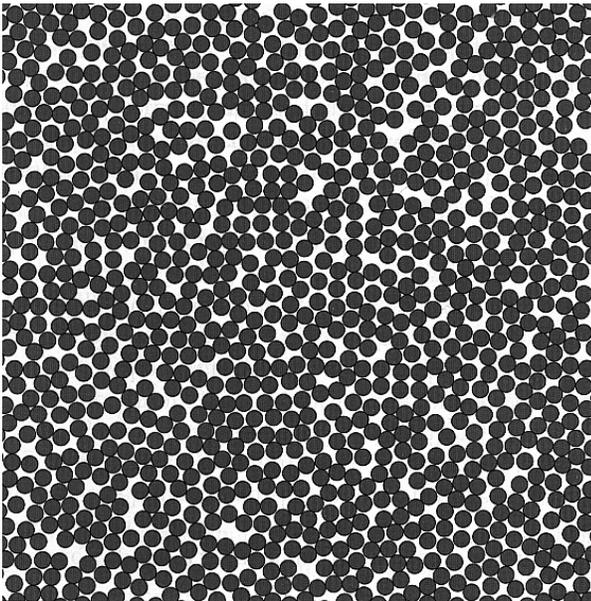
- Dislokationen



**Figure 5** A dislocation in a two-dimensional bubble raft. The dislocation is most easily seen by turning the page by  $30^\circ$  in its plane and sighting at a low angle. (Courtesy of W. M. Lomer, after Bragg and Nye.)



Dichte des Scheibenmodells als Funktion der Drucks zeigt Phasenübergang



## 3.2 Codierungstheorie

- Ein *Bit*  $B = \{0, 1\}$
- Menge aller 0 – 1–Folgen der Länge  $d$

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

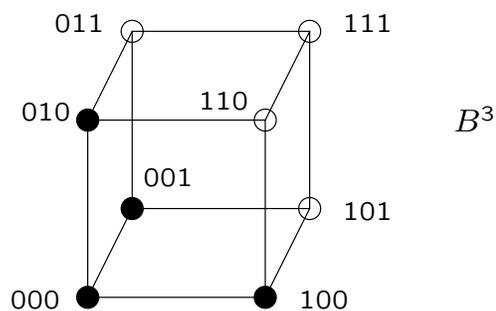
- Teilmenge  $C \subset B^d$  von *Codewörtern*

**Beispiel:** *Wiederholungscode*

$$C = \{(0, 0, 0), (1, 1, 1)\} \subset B^3$$

Decodierung erfolgt durch Mehrheitsentscheid, z.B.

$$(0, 1, 0) \longrightarrow (0, 0, 0) \longrightarrow 0.$$



- *Hammingabstand* zweier Bitfolgen

$$b = (b_1, \dots, b_d) \quad \text{und} \quad b' = (b'_1, \dots, b'_d) \in B^d :$$

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

- Kugel vom Radius  $R$ , um die Bitfolge  $b \in B^d$ :

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

**Beispiel** (Wiederholungscode):

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

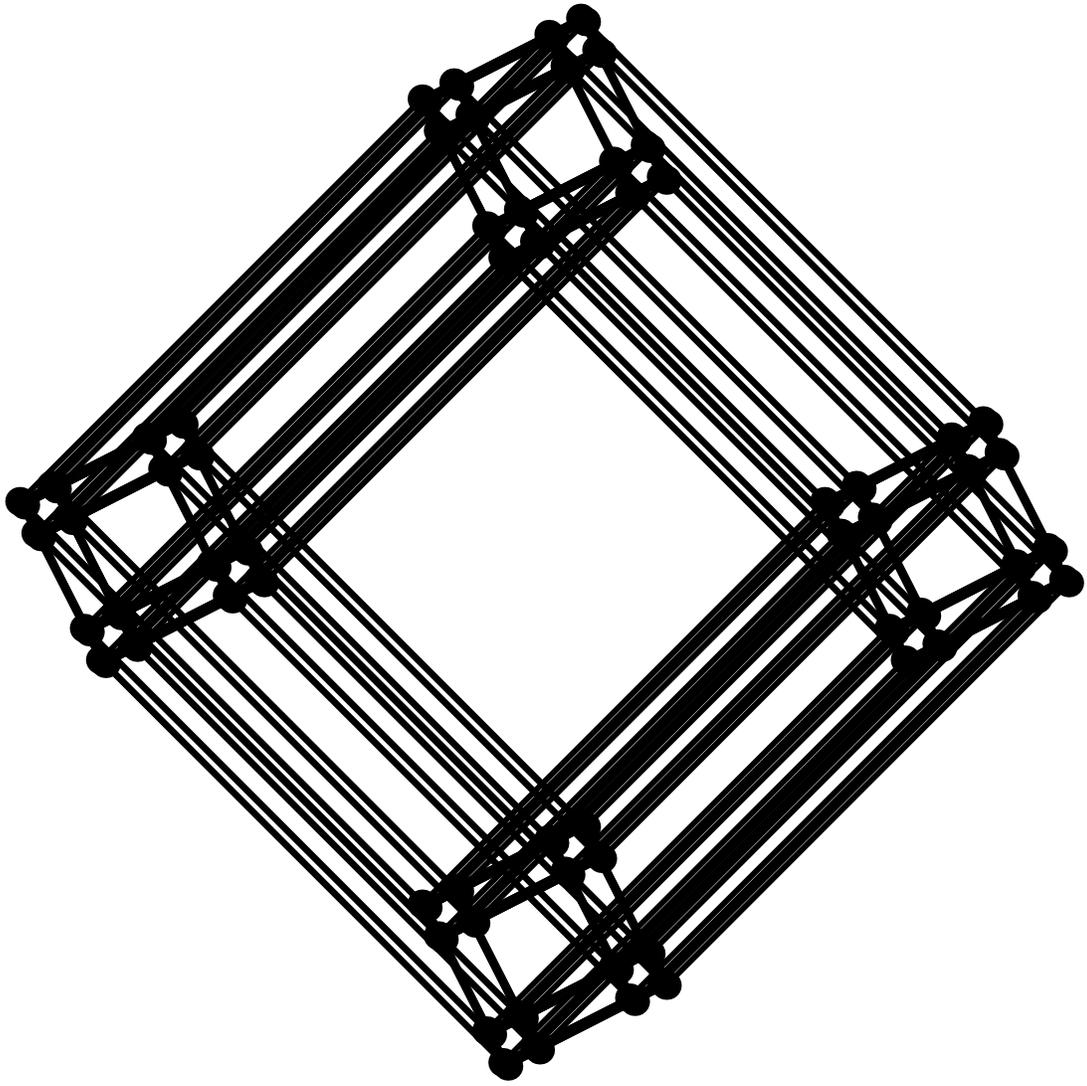
$$K_1((1, 1, 1)) = \{(1, 1, 1), (0, 1, 1), (1, 0, 1), (1, 1, 0)\}.$$

**Definition:** Eine Code  $C \subset B^d$  heißt *perfekt*, wenn alle Bitfolgen  $b \in B^d$  in genau einer Kugel um ein Codewort aus  $C$  liegen.

**Beispiele:** • Wiederholungscode

- Hammingcode,  $C \subset B^7$  aufgespannt durch

$$\{(1101001), (0101010), (1001100), (1110000)\}.$$



Der Hyperkubus  $B^7$

## 4. Literatur

M. Leppmeier: Kugelpackungen von Kepler bis heute.  
Vieweg, 1997

Florian Pfender and Günter M.Ziegler: Kissing Numbers, Sphere Packings, and Some Unexpected Proofs.  
Notices of the AMS, September 2004

[www.ams.org/notices](http://www.ams.org/notices)

Albrecht Böttcher: Die Wurstvermutung.

[www-user.tu-chemnitz.de](http://www-user.tu-chemnitz.de)

Thomas Hales: The Flyspeck Project Fact Sheet.

[www.math.pitt.edu/~thales/flyspeck](http://www.math.pitt.edu/~thales/flyspeck)