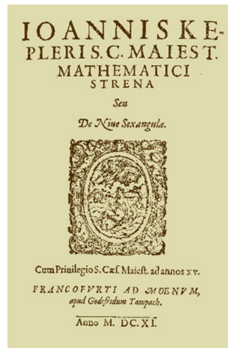
Endliche, unendliche Kugelpackungen und was sie mit Gittern zu tun haben

Dies ist die ausformulierte Fassung meines Vortrags *Endliche, unendliche Kugelpackungen und was sie mit Gittern zu tun haben* vom 13. Juni 2007 im Rahmen meiner Habilitation an der Universität Mainz.

1. Einführung, das Keplerproblem.

Jeder weiss wie man Orangen oder Kanonenkugeln stapelt (etwa in einer Pyramide), das ist ein erstes Beispiel einer Kugelpackung. Ein anderes Beispiel sind Tennisbälle, man kauft sie am besten in einer *wurstförmigen* Packung. Generell stellt sich also die Frage nach der günstigsten Wise, Kugeln zu packen.

Das Problem geht zurück auf Johannes Kepler. Im Jahr 1611 erschien sein Buch *Vom sechseckigen Schnee* (*De nive sexangula*)



IOANNIS KE-
PLERI S.C. MAIEST.
MATHEMATICI
STRENA
Seu
De Nive Sexangula.
Cum Privilegio S. Cæs. Maiest. ad annos xv.
FRANCOFVRTI AD MOENVM,
apud Godefridum Tampach.
Anno M. DC. XI.

Johannes Kepler und De nive sexangula

in dem er Formen und Muster der Natur untersucht, wie Schneeflocken, Bienenwaben und Kerne von Granatäpfeln. Kepler beobachtete, dass die Kerne im Anfangsstadium solange sie genug Raum zur Verfügung haben, die Form einer Kugel haben. Im weitern Wachstum, wenn die Frucht grösser wird, werden die Kerne zusammengeprest und entwickeln die Form von rhombischen Körper. Das führte Kepler zur Betrachtung der Packung von Kugeln im dreidimensionalen Raum: betrachtet man Kugeln in einer flächenzentrierten kubischen Packung (Fcc-Packung, ich werde gleich die genaue Definition angeben), in dem jede Kugel 12 weitere Kugeln berührt, und stellt man sich vor, dass die Kugeln weich sind, so erhält man durch Zusammendrucken bekommt man annährend rhombische Körper wie die Granatäpfelkerne. Kepler behauptete, dass es nicht möglich ist, eine dichtere Packung von Kugeln, als die Fcc-Packung zu erhalten. Dies ist die *Keplervermutung*. Das Problem, die beste Kugelpackung im dreidimensionalen Raum zu bestimmen, heisst *Keplerproblem*. Die Vermutung ist so wichtig, dass David Hilbert sie im Jahr 1900 als Teil seines 18. Problem in die Liste seiner 23 Hilbertschen Probleme aufnahm (Hilbert stellte die Liste in Paris beim 2. internationalen Mathematikerkongress vor).

2. Unendliche Kugelgitterpackungen.

Definition. 1. Gegeben seien linear unabhängige Vektoren $a_1, \ldots, a_n$ im $\mathbb{R}^n$, dann heisst die Menge

$$G = \mathbb{Z}a_1 + \ldots + \mathbb{Z}a_n$$

Gitter im $\mathbb{R}^n$.

2. Das *Fundamentalparallelotop* ist

$$F(G) = \{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i a_i ; 0 \leq \lambda_i \leq 1\} \subset \mathbb{R}^n$$

und es gilt

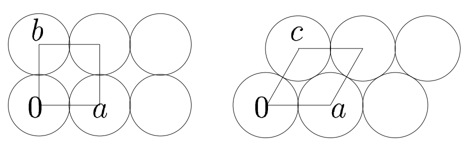
$$Vol(F(G)) = |det(a_1, \ldots, a_n)|$$

(wenn man die Basis für G ändert, ändert sich das Volumen des Fundamentalparallelotops nicht).

Mit Hilfe von Symmetrien hat der Physiker und Chemiker A. Bravais (1811-1863) im Jahr 1848 alle zweidimensionalen und dreidimensionalen Gitter klassifiziert: es gibt fünf Bravais-Gitter in der Ebene und 14 Bravais-Gitter im Raum.
Geben wir nun die Definition der Kugelgitterpackung:
Definition. 1. Sei B^n eine offene Einheitskugel, G ein n-dimesionales Gitter. Sei $B^n_g := B^n + g$ für alle $g \in G$ eine verschobene Kopie der Einheitskugel. Falls $B^n_g \cap B^n_h = \emptyset$ für alle $g \neq h \in G$ dann heisst die Menge $GP(B^n, G) = \{B^n_g, g \in G\}$ eine *n-dimensionale infinite Kugelgitterpackung* (für Kugelgitterpackung werde ich die Abkurzung KGP benutzen).
2. Die *Dichte* einer infiniten KGP ist

$$\delta(B^n, G) = \frac{Vol(B^n)}{Vol(F(G))}$$

und es gilt $0 < \delta(B^n, G) \leq 1$.
Bemerkung. Es gilt $Vol(\cup_{g \in G}(B^n_g \cap F(G))) = Vol(B^n)$, so dass die Definition unserer Vorstellung entspricht.
Beispiele. Im $\mathbb{R}^2$ haben wir die quadratische-KGP und die hexagonale-KGP:



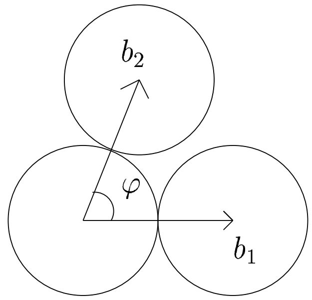
mit $0 = (0,0)$, $a = (2,0)$, $b = (0,2)$, $c = (1, \sqrt{3})$ und hier haben wir

$$\delta(B^2, G_{qu}) = \frac{\pi}{4} \sim 0,785, \;\; \delta(B^2, G_{hex}) = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \sim 0,907.$$

also $\delta(B^2, G_{qu}) < \delta(B^2, G_{hex})$.

2.1 Die Dimension 2.

Man will die dichteste KGP in der Ebene bestimmen, das ist äquivalent das Gitter mit einem Fundamentalparallelotop mit kleinster Fläche (das gilt auch in höheren Dimensionen) zu bestimmen.
Satz (Lagrange 1773). Im $\mathbb{R}^2$ gilt $\delta_{max} = \pi/(2\sqrt{3})$, und die hexagonale KGP erreicht als einzige dieses Maximum.
Beweis. Betrachten wir ein zweidimensionales Gitter, das von Vektoren b_1 und b_2 erzeugt wird. O.E. können wir annehmen, dass b_1 auf der x-Achse liegt (wir können das Gitter drehen), so dass $|b_1| \geq 2$ ist. Im Fall $|b_1| > 2$ berühren sich die Kreise nicht, also kann die KGP nicht optimal sein. Es ist also $b_1 = (2,0)$.

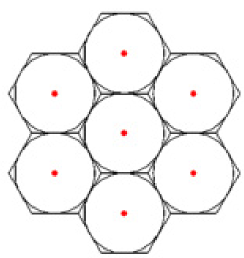


Auch benachbarte horizontale Kreisscheiben berühren sich, also $b_2 = 2(cos\varphi, sin\varphi)$, und da wir b_2 durch die y-Achse spiegeln können, können wir annehmen, dass $0 < \varphi \leq \pi/2$. Außerdem sind alle Kreise disjunkt, also $cos\varphi \leq 1/2$ und somit $\pi/2 \geq \varphi \geq \pi/3$. Also $Vol(F(G)) = |det(b_1, b_2)| = 4sin\varphi$ das ist minimal für $\varphi = \pi/3$, daraus folgt $sin\varphi = \sqrt{3}/2$ also $\delta_{max} = \pi/2\sqrt{3} = \delta_{hex}$. $\square$

Zur Lösung des Problems der dichtesten Kugelpackung(=KP) hat man:
Satz (A. Thue 1892). Eine beliebige KP in der Ebene hat höchstens die Dichte $\pi/(2\sqrt{3})$ und dieser Wert wird durch die hexagonale KGP erreicht.
Die Definition der Dichte für eine beliebige KP wird hier mit Hilfe von Grenzwerten angegeben. Die Idee des Beweises beruht auf dem Begriff der *Voronoi-Zelle*. Sei m der Mittelpunkt eines Kreises der KP dann

$$Vor(m) = \{x \in \mathbb{R}^n; d(x,m) \leq d(x,m') \text{ für alle weiteren Mittelpunkte der Kreise in der KP}\}$$

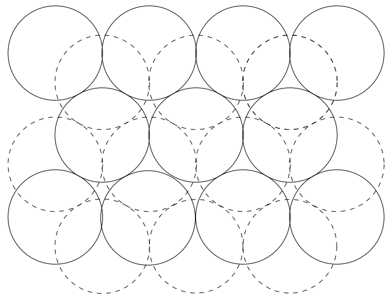
Zum Beispiel sehen die Voronoi-Zellen des hexagonalen KGP wie im folgenden Bild aus:



Bei einer KGP kann man die Dichte mit der Hilfe der Voronoi-Zellen definieren als das Verhältnis zwischen der Fläche eines Kreises und der Fläche der Voronoi-Zelle.
Es gibt einen sehr wichtigen Satz:
Satz. In einer Ebene KP hat jede Voronoizelle mindestens die Fläche $2\sqrt{3}$ (=Fläche der Voronoi-Zelle bei einer hexagonalen KGP).

2.2 Die Dimension 3: die Keplervermutung.

Im $\mathbb{R}^3$ können wir analog zu dem quadratischen Gitter die Kugeln so packen, dass die Mittelpunkte die Gitterpunkte eines kubischen Gitters $G = \mathbb{Z}(1,0,0) + \mathbb{Z}(0,1,0) + \mathbb{Z}(0,0,1)$ bilden. Interessanter ist das Fcc-Gitter (flächenzentriertes kubisches Gitter). Man kann es so konstruieren: betrachtet man eine erste Schicht Kugeln, wobei jede Kugel von weiteren sechs Kugeln berührt wird (es ist wie eine hexagonale Packung in der Ebene). Dann legen wir eine Kopie der Grundschicht darauf, so dass die Kugeln der oberen Schicht in den Lücken der unteren liegen. Also ist die zweite Schicht um einen Vektor t verschoben. So fährt man fort und man erhält das FCC-Kugelgitterpackung.



Mit Vektoren

$$A_3 := \mathbb{Z}(2,0,0) + \mathbb{Z}(1,\sqrt{3},0) + \mathbb{Z}(1,\sqrt{1/3},\sqrt{8/3})$$

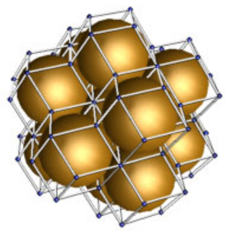
(der letzte ist der Vektor t). Die drei Vektoren zusammen mit $(0,0,0)$ bilden die Ecken eines regulären Tetraeders. Dieses Gitter wird deswegen auch Tetraeder-Gitter genannt. Für die Dichte gilt:

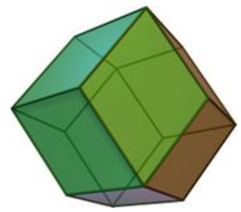
$$Vol(F(A_3)) = det((2,0,0),(1,\sqrt{3},0),(1,\sqrt{1/3},\sqrt{8/3})) = 4\sqrt{2}$$

Also

$$\delta(A_3) = \frac{4}{3}\pi/(4\sqrt{2}) = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \sim 0,740.$$

Satz (Gauß 1831). Eine KGP im $\mathbb{R}^3$ hat höchstens die Dichte $\pi/\sqrt{18}$ und dieser Wert wird nur durch die Fcc-KGP erreicht.
Für den Beweis des Satzes, wie im zweidimensionalen Fall, benutzt man die Elementargeometrie. Es bleibt nur das Problem der dichtesten KP, also der Beweis der Keplervermutung. Ein erster Beweis wurde im Jahr 1990 vom Wu-Yi Hsiang, Berkeley, vorgeschlagen. Aber es zeigte sich schnell, dass er falsch war. Dann im Jahr 1998 gab der Mathematiker Thomas Hales von der Universität Michigan einen neuen Beweis an. Der Beweis besteht aus 250 Seiten, basiert auf Rechnungen mit dem Computer und ist sehr kompliziert. Die Editoren der mathematischen Zeitschrift Annals of Mathematics forderten Hales auf, den Beweis zur Veröffentlichung einzureichen. Nach vier Jahren sagte der Referee Fejes Toth, dass der Beweis zu 99 Prozent als richtig gilt, aber dass alle Referees (12 insgesamt) nicht in der Lage waren, alle Details zu überprüfen. Heutzutage gilt die Keplervermutung als bewiesen. Im Jahr 2003 formulierte Hales das *Flyspeck-Project*, um einen automatisierten Beweis der Keplervermutung zu finden. Die erwartete Laufzeit des Projekts beträgt 20 Jahre!
Warum ist die Vermutung so schwierig zu beweisen? Ein Grund liegt an den Voronoi-Zellen: Das Volumen der Voronoi-Zelle der Fcc-KGP ist nicht minimal, also ein Beweis wie im zweidimensionalen Fall kann nicht funktionieren.





Die Voronoi-Zellen sind beim Fcc-Gitter die Rhombendodekaeder (wie im Bild) und ein Dodekaeder hat zum Beispiel ein kleineres Volumen. Hierbei muss man bemerken, dass das nicht der Keplervermutung widerspricht, da man mit Dodekaedern den Raum nicht parkettieren kann. Man vermutet, dass die Dodekaeder unter alle möglichen Voronoi-Zellen das kleinste Volumen haben, also müssen die Nachbarzellen ein grösseres Volumen haben.

2.3 Höhere Dimensionen.

Man kennt die besten Kugelpackungen nur für $n = 1, 2, 3$ und sie sind KGP (falls $n = 1$ ist das Problem trivial, die Kugeln sind Intervalle der Länge 2).

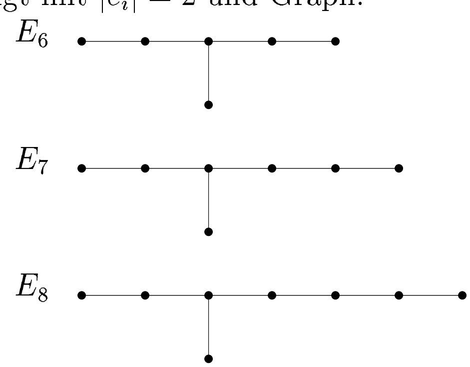
Man kennt die beste KGP nur für $n \leq 8$ und $n = 24$. Für $n = 2, 3$ haben wir das Gitter $A_2 = G_{hex}$, weiter haben wir das Fcc-Gitter A_3, das man mit einer anderen Konstruktion als Gitter

$$D_3 := \{z = (z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{Z}^3; z_1 + z_2 + z_3 \text{ gerade}\}$$

beschreiben kann. Dieses Gitter kann man zu

$$D_n := \{z = (z_1, \ldots, z_n) \in \mathbb{Z}^n; z_1 + \ldots + z_n \text{ gerade}\}$$

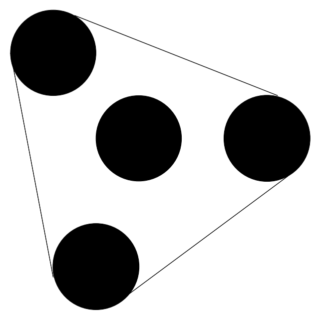
verallgemeinern. Die Gitter D_4 und D_5 liefern die besten KGP in Dimension vier und fünf (Korkine und Zolotareff 1872-1877). Für $n = 6, 7, 8$ haben wir die Gitter E_6, E_7, E_8 (Blichfeldt 1925-1934). Sie heissen *Wurzelgitter* und werden von Elementen $e_1, \ldots, e_n \in \mathbb{R}^n$ erzeugt mit $|e_i| = 2$ und Graph:



wobei die Ecken die $e_i's$ darstellen und zwischen ihnen gibt es eine Kante falls das Skalarprodukt $(e_i, e_j) = -1$ ist. Für $n = 24$ hat man das Leech-Gitter (es ist kein Wurzelgitter, es enthält keine Vektoren der Länge zwei), die Maximalität der Kugelgitterpackung zum Leech-Gitter wurde im Jahr 2004 von Cohn und Kumar bewiesen.

3. Endliche Kugelpackungen

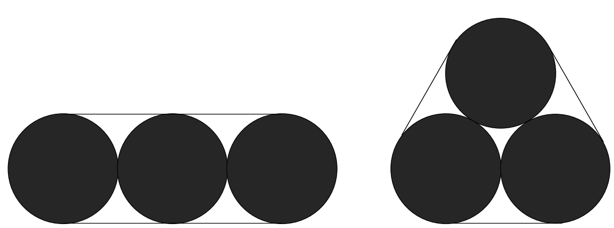
Dieses Problem wurde erst im zwanzigsten Jahrhundert betrachtet: gegeben seien N Kugeln in $\mathbb{R}^n$, welche ist die günstigste Weise sie zu packen, so dass die Dichte maximal wird?
Wir brauchen zuerst einige Definitionen:
Definition. Sei B^n eine offene Einheitskugel im $\mathbb{R}^n$, sei $C_N = \{c_1, \dots, c_N\}$ eine Menge von Vektoren im $\mathbb{R}^n$. Sei $B_i = B^n + c_i$, falls $B_i \cap B_j = \emptyset$ dann heisst die Menge $P(B^n, C_N) = \{B_i; 1 \leq i \leq N\}$ eine *finite Kugelpackung*.
Definition. Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ eine endliche Untermenge, dann ist die *konvexe Hülle* von M, die kleinste konvexe Menge, die M als Teilmenge enthält.



Weiter sagen wir, dass eine finite KP eine *finite KGP* ist, falls ein Gitter G existiert mit $conv(C_N) \cap G = C_N$.
Man definiert die Dichte:
Definition. Sei $P(B^n, C_N)$ eine finite KP, dann heisst:

$$d(B^n, C_N) = \frac{N \cdot Vol(B^n)}{Vol(conv(B^n + C_N))}$$

die *finite Kugelpackungsdichte*. Hier $B^n + C_N = \cup_{i=1}^N (B^n + c_i) = \cup_{i=1}^N B_i$.
Es gilt $0 < d(B^n, C_N) \leq 1$. Die maximale Dichte zu finden ist äquivalent, eine finite KP mit $conv(B^n + C_N)$ von minimalem Volumen zu finden.
Beispiel. Bei einer *Wurstpackung* liegen die Mittelpunkte der Kugeln auf einer Gerade (diese ist insbesondere eine finite KGP)



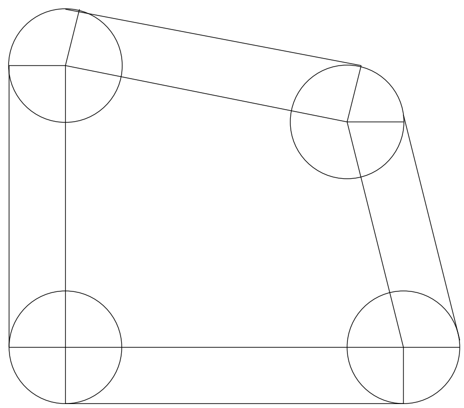
und es gilt $Vol(conv(B^n + S_N)) = Vol(B^n) + 2(N-1)Vol(B^{n-1})$ (hier ist S_N die Menge der Mittelpunkte), also im Fall $n = 2, N = 3$ gilt $Vol(conv(B^2 + C_3)) = Vol(B^2) + 2 \cdot 2 \cdot 2 = \pi + 8$. Es gilt also

$$d(B^2, S_3) = \frac{3\pi}{\pi + 8} \sim 0,846$$

Betrachten wir jetzt die *hexagonale Clusterpackung* (die Mittelpunkte der Kugeln sind Punkte der hexagonalen Gitter, wie im Bild) dann

$$d(B^2, C_3^{hex}) = \frac{3\pi}{\pi + \sqrt{3} + 2 \cdot 3}$$

also $d(B^2, C_3^{hex}) > d(B^2, S_3)$.
Für mehrere Kugeln benötigen wir die *Formel von Stein.* Zerlegen wir die konvexe Hülle wie im Bild:



Dann lautet die Formel:

$$F(conv(B^2 + C_N)) = F(conv(C_N)) + U(conv(C_N)) + \pi$$

Hier ist $U(conv(C_N))$ der Umfang der konvexen Hülle von C_N. Also für vier Bälle:

$$F(conv(B^2 + C_4^{hex}) = \pi + 8 + 2\sqrt{3}$$
$$F(conv(B^2 + S_4)) = \pi + 12$$

also wieder $d(B^2, C_4^{hex}) > d(B^2, S_4)$. Man kann es anschaulich so begründen: bei einer hexagonalen Packung gibt es Löcher zwischen den Kugeln die weniger Volumen als die Löcher zwischen den Kugel der Wurstpackung haben. Im Allgemeinen gilt:

Satz. Für $N \geq 3$ gibt es eine Clusterpackung $P(B^2, C_N^{hex})$ mit $d(B^2, C_N^{hex}) > d(B^2, S_N)$.

Das allgemeine Problem bleibt aber ungelöst, d.h. gegeben eine Anzahl N von Einheitskugeln, gesucht ist diejenige finite Packung $P(B^2, C_N)$ deren Packungsdichte maximal ist. Darüber gibt es Arbeiten von Wegner aus den Jahren 1984, 1986, in denen die Grömerpackungen vorgestellt werden. Sie sind gute Kandidaten für die maximale Packungsdichte. Diese Packungen sind *reguläre sechseckige Schnitte* der hexagonalen KGP.

3.1 Höhere Dimensionen

Im $\mathbb{R}^3$: Für $N \geq 56$ gibt es eine Clusterpackung $P(B_3, C_N)$ die dichter als die Wurstpackung ist: Hier haben wir die *Wurstkatastrophe*! Der Beweis ist von Gandini und Willis im Jahr 1992, sie konstruieren spezielle Clusterpackungen.
Im $\mathbb{R}^4$: Wieder die Wurstkatastrophe, für $N \geq 375370$ gibt es eine Clusterpackung, die dichter als die Wurstpackung ist. Gandini und Zucco konstruierten im Jahr 1992 eine spezielle Clusterpackung mit Hilfe der 24-Zelle.
Im $\mathbb{R}^n$, $n \geq 5$: Hier ändert sich die Situation drastisch, und wir haben:

Wurstvermutung (L.F. Toth, 1975). Im $\mathbb{R}^n$, $n \geq 5$ ist die Wurstpackung von N Kugeln am dichtesten.

Plausibilitätsbetrachtung in den Dimensionen $n = 5, 6, 7, 8$:
Sei $P(B^n, C_N)$ eine finite KGP mit dichtestem Gitter $G = \Lambda_n$, $n = 5, 6, 7, 8$. Dann gilt es

$$\lim_{N\to\infty} d(B^n, C_N) = \delta(B^n, \Lambda_n).$$

Für die Wurstpackung

$$d(B^n, S_N) = \frac{N \cdot Vol(B^n)}{Vol(B^n) + 2(N-1)Vol(B^{n-1})}$$

und für $N \to \infty$ bekommen wir

$$d(B^n, S_\infty) = \frac{Vol(B^n)}{2Vol(B^{n-1})}.$$

Es gilt

$$d(B^5, S_\infty) \sim 0,533 > \delta(B^5, \Lambda_5) \sim 0,465,$$
$$d(B^6, S_\infty) \sim 0,49 > \delta(B^6, \Lambda_6) \sim 0,373$$

und im Allgemeinen $d(B^n, S_\infty) > \delta(B^n, \Lambda_n)$ für $n = 5, 6, 7, 8$. Diese Abschätzungen gelten nicht in den Dimensionen $2, 3, 4$, z.B. $d(B^4, S_\infty) \sim 0,589 < \delta(B^4, \Lambda_4) \sim 0,617$. Also bei der Dimension fünf passiert etwas!
Im Jahr 1997 haben Betke und Henk einen Beweis des Satzes für die Dimensionen $n \geq 42$ gegeben. Der Beweis benutzt die Voronoi-Zellen und Ergebnisse der Geometrie und Analysis.

4. Kodierungstheorie

Kugelpackungen finden eine Anwendung in der Kodierungstheorie. Dichte unendliche KGP zu finden ist wichtig, um Nachrichten effizient (d.h. mit weniger Energie) und sicher zu senden. Hier eine etwas genauere Erklärung:
Definition. Ein *Code* der Länge n ist eine echte Untermenge von $\mathbb{F}_q^n$ ($\mathbb{F}_q$ ist ein endlicher Körper mit q Elemente).
Betrachten wir hier den Fall eines binäres Code ($q = 2$) der Länge 8. Wir wollen eine Nachricht senden, dann wird jedes Wort der Nachricht durch eine Kette (ein *Codewort*) wie z.B. $c = (1,1,1,1,1,1,1,1)$ oder $(1,0,0,1,1,1,0,1)$ dargestellt. Bei der Übertragung kann das Signal gestört werden, es wird also z.B. c gesendet aber $b = (1,1,0,1,1,1,1,1)$ empfangen. Der Code sollte also so gestaltet sein, dass er das Wort b nicht enthält, so dass man b zu c korrigieren kann. Dass heisst die Codewörter sollen einen minimalen Abstand haben. Andererseits wollen wir möglichst viele Wörter zur Verfügung haben. Deswegen stellt sich die Frage nach der dichtesten Kugelpackung in Dimension acht, und somit ist die Verbindung zwischen Codierungstheorie und Kugelpackungen klar.

6. Das Kusszahlproblem

In der Ebene wird ein Kreis von höchstens sechs weiteren Kreise berührt (so eine Konfiguration hat man in der hexagonalen KGP), also ist die *Kusszahl* $k_2 = 6$. Im Raum wurde das Problem im Jahr 1694 von Newton und Gregory gestellt. Der eine behauptete, dass es höchstens 12 Kugeln gibt, die eine Kugel berühren. Der andere behauptete, dass 13 möglich sind. Das Newton-Gregory-Problem wurde im Jahre 1953 von Schütte und van der Waerden gelöst: Die richtige Zahl ist $k_3 = 12$, etwas später wurde gezeigt, dass $k_8 = 240$, eine solche Konfiguration findet man in der E_8-KGP. Im Jahr 1979 zeigten Sloane und Odlyzko, dass $k_{24} = 196.560$, diese Konfiguration findet man in der Leech-KGP. Dann zuletzt im Jahr 2003 zeigte Musin, dass $k_4 = 24$ und eine solche Konfiguration findet man in der D_4-KGP.

Literatur

[1] J.H.Conway, N.J.A Sloane, *Sphere packings, lattices and groups*, Springer 1999.
[2] K. Devlin, *Muster der Mathematik*, Spektrum Akademischer Verlag 1994.
[3] W. Ebeling, *Lattices and Codes*, Vieweg 1994.
[4] Th. Hales, *The Flyspeck project Fact Sheet*, www.math.pitt.edu/~thales/flyspeck.
[5] M. Henk, G. Ziegler, *Kugeln im Computer-Die Keplervermutung*, in M. Aigner, Eh. Behrends (Hrsg.), *Alles Mathematik*, Vieweg 2000.
[6] A. Knauf, *Vorkurs Mathematik:Kugelpackungen*, www.mi.uni-erlangen.de/~ knauf.
[7] M. Leppmeier, *Kugelpackungen, von Kepler bis heute*, Vieweg 1997.
[8] F. Pfender, G. Ziegler, *Kissing numbers, Sphere Packings and some unexpected proofs*, Notices of the AMS, September 2004 (www.ams.org/notices).