

Das Kugelpackungsproblem

oder

„Das Runde muss ins Eckige“

Markus Faulhuber

Fakultät für Mathematik, Universität Wien

Didaktischer Vortrag, 01. März 2024

Das Kugelpackungsproblem ist ein klassisches Problem in der Geometrie und diskreten Mathematik:

Wie können gleich große (identische Kopien von) Kugeln möglichst effizient angeordnet werden?

1 Grundlagen

Wir betrachten stets den Euklidischen Raum \mathbb{R}^d als Vektorraum von Spaltenvektoren:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d.$$

Das Skalarprodukt in \mathbb{R}^d wird durch einen Punkt \cdot gekennzeichnet und ist gegeben durch

$$x \cdot y = x^T y = \sum_{k=1}^d x_k y_k, \quad x, y \in \mathbb{R}^d,$$

wobei x^T der transponierte Vektor von x ist (analog für Matrizen). Die Euklidische Norm ist gegeben durch

$$\|x\| = \sqrt{x \cdot x}.$$

Definition 1. Wir bezeichnen die offene Einheitskugel in \mathbb{R}^d mit Radius R und Mittelpunkt x mit

$$B_R(x) = \{y \in \mathbb{R}^d \mid \|x - y\| < R\}.$$

Definition 2. Eine Kugelpackung \mathcal{P} im Euklidischen Raum \mathbb{R}^d ist eine (abzählbare) Vereinigung von sich nicht berührenden Kugeln gleichen Radius, d.h.,

$$\mathcal{P} = \bigcup_{x \in X} B_R(x), \quad \text{sodass} \quad B_R(x) \cap B_R(y) = \emptyset, \quad \text{wenn } x \neq y, \quad X \subset \mathbb{R}^d \text{ abzählbar.}$$

Bemerkung. \mathcal{P} hängt zunächst von R , sowie der Menge X ab (und der Dimension d). Klarerweise muss für $x, y \in X$ auch gelten, dass

$$\|x - y\| \geq 2R, \quad \forall x, y \in X, \quad x \neq y.$$

Für eine Lebesgue-messbare Menge Ω schreiben wir

$$\text{vol}(\Omega) = \int_{\Omega} d\mu = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\Omega} d\mu.$$

Das Volumen der Einheitskugel ($R = 1$) ist gegeben durch

$$\text{vol}(B_R(0)) = \frac{2 \pi^{d/2}}{d \Gamma(d/2)}. \quad (\text{Volumsformel})$$

Wie üblich bezeichnet $\Gamma(x)$ die Eulersche Gammafunktion, definiert für $x > 0$ durch

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt.$$

Es sei angemerkt, dass es für die Gammafunktion eine Vielzahl von Identitäten gibt, von denen wir noch folgende (im Zusammenhang mit der Volumensformel der Kugel) erwähnen:

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad \text{and} \quad \Gamma(n) = (n-1)!, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Definition 3. Die Dichte einer Kugelpackung ist definiert als

$$\delta(\mathcal{P}) := \limsup_{R \rightarrow \infty} \frac{\text{vol}(\mathcal{P} \cap B_R(0))}{\text{vol}(B_R(0))}.$$

Für eine fixe Dimension d ist die Kugelpackungskonstante definiert als

$$\Delta_d := \sup_{\substack{\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^d \\ \mathcal{P} \dots \text{Kugelpackung}}} \delta(\mathcal{P}).$$

Kugelpackungsproblem: Für gegebenes d , was ist der exakte Wert von Δ_d ?

Aus Definition 3 wird klar, dass das Problem unabhängig von R ist, also invariant unter Skalierungen. Außerdem ist das Problem invariant unter Translationen, Rotationen und Reflexionen. Abgesehen vom exakten Wert Δ_d , ist man natürlich auch daran interessiert welches \mathcal{P} (im Bezug auf X) die dichteste Kugelpackung liefert.

Beispiel 4. Für $d = 1$, $R = 1/2$ (was keine Einschränkung ist), beträgt die Kugelpackungskonstante

$$\Delta_1 = 1.$$

Denn, wähle $B_{1/2}(x) = (x - 1/2, x + 1/2)$ und wähle $X = \mathbb{Z}$, dann gilt

$$\mathcal{P} = \bigcup_{k \in \mathbb{Z}} B_{1/2}(k) = \mathbb{R} \setminus (\mathbb{Z} + 1/2).$$

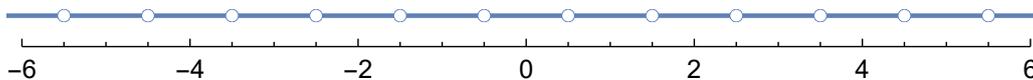


Abbildung 1: Optimale Kugelpackung in Dimension 1. Bis auf eine Menge vom Maß 0 wird die gesamte reelle Achse bedeckt.

Aber: $X_0 = \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ ist ebenfalls optimal, denn, sei $\mathcal{P}_0 = \mathcal{P} \setminus \{B_{1/2}(0)\}$, dann gilt

$$\frac{\text{vol}(\mathcal{P}_0 \cap B_R(0))}{\text{vol}(B_R(0))} = \frac{\max(0, 2R - 1)}{2R} \rightarrow 1, \quad \text{für } R \rightarrow \infty.$$

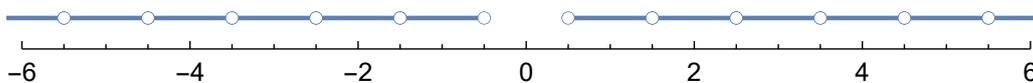


Abbildung 2: Die Entfernung einer Kugel aus der Kugelpackung ändert deren Dichte nicht.

Aus dem Beispiel können wir schließen, dass das Kugelpackungsproblem keine eindeutige Lösung X besitzt, da durch die Entfernung einer Kugel die Packungsdichte nicht geändert wird.

2 Periodische Konfigurationen

In der Folge werden wir uns nur mehr mit *periodischen* Kugelpackungen beschäftigen.

Definition 5. Ein Gitter $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ besteht aus ganzzahligen Linearkombinationen einer Basis von \mathbb{R}^d :

$$\Lambda = M\mathbb{Z}^d = \{k_1 v_1 + \dots + k_d v_d \mid k_1, \dots, k_d \in \mathbb{Z}\}, \quad M = (v_1 | \dots | v_d) \in GL_d(\mathbb{R}).$$

Es ist leicht zu sehen dass Λ eine diskrete Untergruppe von \mathbb{R}^d ist. Eine wichtige Kenngröße des Gitters ist das Volumen $\text{vol}(\Lambda)$ einer *fundamentalen Zelle*. Die fundamentale Zelle ist das von den Basisvektoren aufgespannte Parallelepipid. Es gilt also

$$\text{vol}(\Lambda) = |\det(M)|.$$

Alternativ wird als Kenngröße die Dichte $\rho(\Lambda)$ des Gitters genommen, welche die durchschnittliche Anzahl der Punkte pro Einheitsvolumen ist:

$$\rho(\Lambda) = \text{vol}(\Lambda)^{-1} = |\det(M)|^{-1}.$$

Dies ist von Bedeutung wenn man Konfigurationen vergleichen möchte, wo sich nicht auf natürliche Weise ein Volumen definieren lässt.

Wenn die Mittelpunkte der Kugeln in \mathcal{P} ein Gitter bilden, dann sprechen wir von einer *Gitterkugelpackung* oder einfach von einer *Gitterpackung* und schreiben auch \mathcal{P}_Λ . Im Falle einer Gitterpackung ergibt sich die Dichte als Verhältnis vom Volumen einer Kugel in \mathcal{P}_Λ zum Volumen des Gitters:

$$\delta(\mathcal{P}_\Lambda) = \frac{\text{vol}(B_R(0))}{\text{vol}(\Lambda)}$$

Wie man anhand der (Volumensformel) sehen kann, nimmt die Einheitskugel im Verhältnis zum Einheitswürfel immer weniger Raum ein, wodurch zu erwarten ist dass \mathbb{Z}^d im Allgemeinen nicht optimal sein kann. Dies stimmt schon für $d = 2$, wie das folgende Beispiel illustriert.

Beispiel 6. Wir geben einige Beispiele von Gittern.

- \mathbb{Z} , $2\mathbb{Z}$, oder $\alpha\mathbb{Z}$ für $\alpha \neq 0$ sind Gitter in \mathbb{R} und erreichen alle die optimale Dichte $\Delta_1 = 1$. Auch $(2\mathbb{Z} + 1)$ erreicht diese Dichte, ist aber kein Gitter in \mathbb{R} , da $0 \notin (2\mathbb{Z} + 1)$.

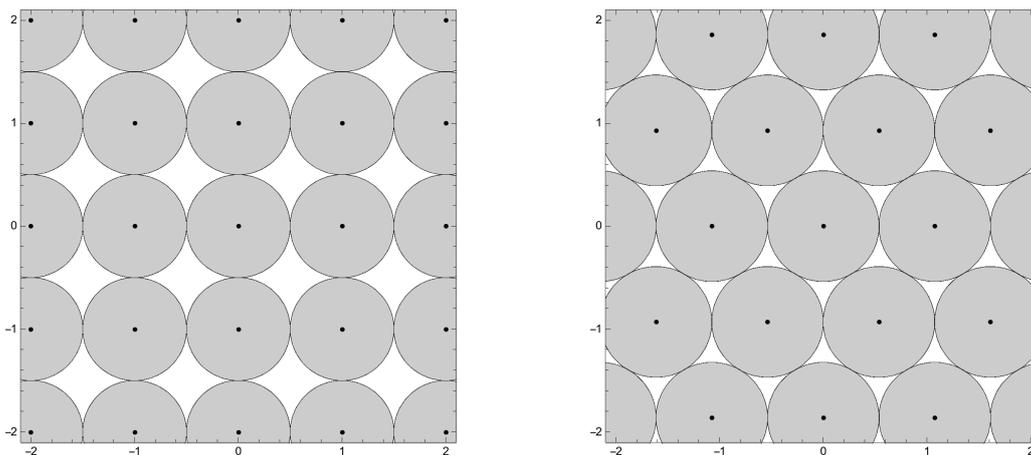


Abbildung 3: Kugelpackungen $\mathcal{P}_{\mathbb{Z}^2}$ (links) und \mathcal{P}_{Λ_2} (rechts).

- $\mathbb{Z}^2 = \{(k, l) \mid k, l \in \mathbb{Z}\}$ ist ein Gitter in \mathbb{R}^2 , genannt *quadratisches (ganzzahliges) Gitter*.
- Ein wichtiges Gitter in \mathbb{R}^2 , genannt *hexagonales Gitter (oder Dreiecksgitter)*, ist gegeben durch

$$\Lambda_2 = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}} \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \mathbb{Z}^2 = \left\{ \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}} \begin{pmatrix} k + l/2 \\ \sqrt{3} l/2 \end{pmatrix} \mid k, l \in \mathbb{Z} \right\}$$

- Das E_8 -Gitter, bezeichnet mit Λ_8 , ist gegeben durch $\Lambda_8 = \{x \in \mathbb{Z}^8 \cup (\mathbb{Z} + 1/2)^8 \mid \sum_{k=1}^8 x_k \in 2\mathbb{Z}\}$.
Es kann, z.B., auch durch die folgende Basis-Matrix definiert werden

$$\Lambda_8 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \mathbb{Z}^8.$$

Definition 7. Eine periodische Konfiguration Γ ist eine endliche Vereinigung von (Kopien von) einem verschobenen Gitter Λ der Art

$$\Gamma = \bigcup_{k=1}^N (\Lambda + x_k), \quad x_k - x_j \notin \Lambda, \quad k \neq j.$$

Bemerkung. Die Dichte der periodischen Konfiguration Γ ist gegeben durch $\rho(\Gamma) = N\rho(\Lambda)$.

3 Obere Schranken

Wir werden uns nun mit den oberen Schranken für Kugelpackungen beschäftigen, wie sie von H. Cohn und N. Elkies aufgestellt wurden [1]. Dazu benötigen wir die Fouriertransformation, Fourierreihen und die Poisson Summationsformel als Werkzeuge. Wir verweisen an dieser Stelle auf [4, Kap. 1] oder [5] für vertiefende Lektüre.

Definition 8. Für eine Funktion $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ ist die Fouriertransformation gegeben durch

$$\mathcal{F}f(\omega) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-2\pi i x \cdot \omega} dx.$$

Theorem 9. Es sei f eine stetige, \mathbb{Z}^d -periodische Funktion, d.h., $f(x) = f(x + k)$, $k \in \mathbb{Z}^d$ mit

$$\int_{[0,1]^d} |f(x)| dx < \infty.$$

Dann hat f eine Fourierreihe der Form

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \hat{f}(k) e^{2\pi i k \cdot x}.$$

Die Koeffizienten $\hat{f}(k)$ sind die Fourierkoeffizienten und gegeben durch

$$\hat{f}(k) = \int_{[0,1]^d} f(x) e^{-2\pi i k \cdot x} dx.$$

Die Poisson Summationsformel bildet eine Brücke zwischen Fourierreihen und der Fouriertransformation auf \mathbb{R}^d . Dazu verwenden wir die *Periodisierung* Pf einer Funktion f :

$$Pf(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} f(x + k).$$

Wir erhalten folgendes Resultat.

Lemma 10. Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, dann gilt

$$\int_{\mathbb{R}^d} f(x) dx = \int_{[0,1]^d} \left(\sum_{k \in \mathbb{Z}^d} f(x + k) \right) dx.$$

Beweis. Der Beweis ist eine Schreibübung. Da $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ dürfen wir das Integral in Würfel aufteilen und dürfen dann die Summation und Integration vertauschen.

$$\int_{\mathbb{R}^d} f(x) dx = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \int_{[k, k+1]^d} f(x) dx = \int_{[0,1]^d} \left(\sum_{k \in \mathbb{Z}^d} f(x+k) \right) dx.$$

□

Proposition 11 (Poisson Summationsformel). *Seien f und $\mathcal{F}f$ stetig und für $C > 0$, $\varepsilon > 0$ gelte*

$$|f(x)| \leq \frac{C}{(1 + \|x\|)^{d+\varepsilon}} \quad (1)$$

$$|\mathcal{F}f(\omega)| \leq \frac{C}{(1 + \|\omega\|)^{d+\varepsilon}}. \quad (2)$$

Dann gilt die folgende Identität

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}^d} f(x+k) = \sum_{l \in \mathbb{Z}^d} \mathcal{F}f(l) e^{2\pi i l \cdot x}. \quad (\text{PSF})$$

Beweis. Setze $g(x) = Pf(x)$. Da $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ stetig ist und (1) gilt, folgt dass $g \in L^1([0,1]^d)$ stetig. Die Fourierkoeffizienten von g sind

$$\begin{aligned} \widehat{g}(l) &= \int_{[0,1]^d} g(x) e^{-2\pi i l \cdot x} dx = \int_{[0,1]^d} \left(\sum_{k \in \mathbb{Z}^d} f(x+k) \right) e^{-2\pi i l \cdot (x+k)} dx = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-2\pi i l \cdot x} dx \\ &= \mathcal{F}f(l). \end{aligned}$$

Dabei haben wir Lemma 10 benutzt. Nach Annahme (2) ist $(\widehat{g}(k))_{k \in \mathbb{Z}^d} \in \ell^1(\mathbb{Z}^d)$ und daher hat g eine absolut konvergente Fourierreihe, nämlich

$$g(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \widehat{g}(k) e^{2\pi i k \cdot x}.$$

Das ist nun aber äquivalent zu (PSF). □

Bemerkung. Durch den linearen Koordinatentausch $k \mapsto Mk = \lambda$, $M \in GL_d(\mathbb{R})$, erhalten wir

$$\sum_{\lambda \in \Lambda} f(\lambda + x) = \text{vol}(\Lambda)^{-1} \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} \mathcal{F}f(\lambda^*) e^{2\pi i \lambda^* \cdot x},$$

wobei $\Lambda = M\mathbb{Z}^d$, $\text{vol}(\Lambda) = |\det(M)|$, und

$$\Lambda^* = M^{-T}\mathbb{Z}^d$$

ist das *duale* Gitter zu Λ .

Wir wenden uns nun oberen Schranken für das Kugelpackungsproblem zu. Hierfür normalisieren wir die Dichte $\delta(\mathcal{P}_\Gamma)$ der Kugelpackung noch in folgender Weise:

$$\delta_0(\mathcal{P}_\Gamma) = \frac{\rho(\mathcal{P}_\Gamma)}{\text{vol}(B_R(0))} = \frac{N}{\text{vol}(\Lambda)}, \quad \mathcal{P}_\Gamma = \bigcup_{\gamma \in \Gamma} B_R(\gamma), \quad \Gamma = \bigcup_{k=1}^N (\Lambda + x_k), \quad x_k \neq x_j, \quad k \neq j.$$

Anstatt also die Dichte der Kugelpackung selber zu betrachten, sehen wir uns an wieviele Kugeln wir pro Einheitsvolumen haben. Wir wollen nun möglichst viele Kugeln pro Einheit unterbringe, was äquivalent zum Kugelpackungsproblem ist. Im Übrigen können wir annehmen dass $R = 1$ gilt, da das Problem invariant unter Skalierung ist. Das folgende Resultat mit Beweis findet man in [1].

Theorem 12. Sei f (nicht überall verschwindend) so dass es die Voraussetzungen von Lemma 11 erfüllt und zusätzlich gelte

$$f(x) \leq 0, \quad \forall |x| \geq 2, \quad (3)$$

$$\mathcal{F}f(\omega) \geq 0, \quad \forall \omega \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}. \quad (4)$$

Dann ist die normalisierte Packungsdichte (für fixes d) beschränkt durch

$$\delta_0(\mathcal{P}_\Gamma) \leq \frac{f(0)}{\mathcal{F}f(0)}.$$

Beweis. Für eine periodische Konfiguration

$$\Gamma = \bigcup_{k=1}^N (\Lambda + v_k), \quad v_k - v_j \neq \Lambda, \quad k \neq j$$

betrachten wir den folgenden Ausdruck:

$$\sum_{k,j=1}^N \sum_{\lambda \in \Lambda} f(\lambda + v_k - v_j) = \text{vol}(\Lambda)^{-1} \sum_{k,j=1}^N \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} \mathcal{F}f(\lambda^*) e^{2\pi i \lambda^* \cdot (v_k - v_j)}.$$

Gleichheit gilt hier auf Grund von (PSF). Nach den Voraussetzungen ist die Reihe absolut konvergent und wir dürfen die Reihenfolge tauschen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \text{vol}(\Lambda)^{-1} \sum_{k,j=1}^N \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} \mathcal{F}f(\lambda^*) e^{2\pi i \lambda^* \cdot (v_k - v_j)} &= \text{vol}(\Lambda)^{-1} \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} \mathcal{F}f(\lambda^*) \left(\sum_{k=1}^N e^{2\pi i \lambda^* \cdot v_k} \right) \left(\sum_{j=1}^N e^{-2\pi i \lambda^* \cdot v_j} \right) \\ &= \text{vol}(\Lambda)^{-1} \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} \mathcal{F}f(\lambda^*) \left| \sum_{k=1}^N e^{2\pi i \lambda^* \cdot v_k} \right|^2 \\ &\geq \frac{N^2}{\text{vol}(\Lambda)} \mathcal{F}f(0), \end{aligned}$$

wobei die letzte Ungleichung durch die Annahme (4) zustande kommt. Sehen wir uns Annahme (3) nochmals genauer an, so erhalten wir

$$Nf(0) \geq \sum_{k,j=1}^N \sum_{\lambda \in \Lambda} f(\lambda + v_k - v_j),$$

da wir annehmen dass $\lambda + v_k - v_j = \gamma \in \Gamma$ die Mittelpunkte einer Kugelpackung mit Radius 1 sind und somit $\|\gamma\| > 2$, außer für $\gamma = 0$. Insgesamt erhalten wir also

$$Nf(0) \geq \frac{N^2}{\text{vol}(\Lambda)} \mathcal{F}f(0) \quad \iff \quad \frac{f(0)}{\mathcal{F}f(0)} \geq \frac{N}{\text{vol}(\Lambda)} = \delta_0(\Gamma).$$

□

Mit Hilfe dieser anmutend simplen Methode, wurde in [1] eine Verbesserung der bis dahin existierenden oberen Schranken für Kugelpackungen erzielt (siehe [3, Kap. 1, S. 14, Abb. 1.5]). Numerisch schienen die Schranken in Dimension 8 und 24 mit der Dichte der besten bekannten Kugelpackungen überein zu stimmen. Dies führte zur Vermutung der Existenz von „magischen Funktionen“: angenommen es existiert ein f welches die Voraussetzungen von Theorem 12 erfüllt und zusätzlich

$$f(\lambda) = 0, \quad \lambda \in \Lambda \setminus \{0\} \quad \text{and} \quad \mathcal{F}f(\lambda^*) = 0, \quad \lambda^* \in \Lambda^* \setminus \{0\},$$

dann löst Λ das Kugelpackungsproblem, denn die normalisierte Packungsdichte von Λ ($\|\lambda_1 - \lambda_2\| \geq 2, \lambda_1 \neq \lambda_2$) ist

$$\delta_0(\mathcal{P}_\Lambda) = \frac{f(0)}{\mathcal{F}f(0)}.$$

Dies folgt da sämtliche Abschätzungen im Beweis von Theorem 12 scharf werden, sprich aus allen Ungleichungen werden Gleichungen.

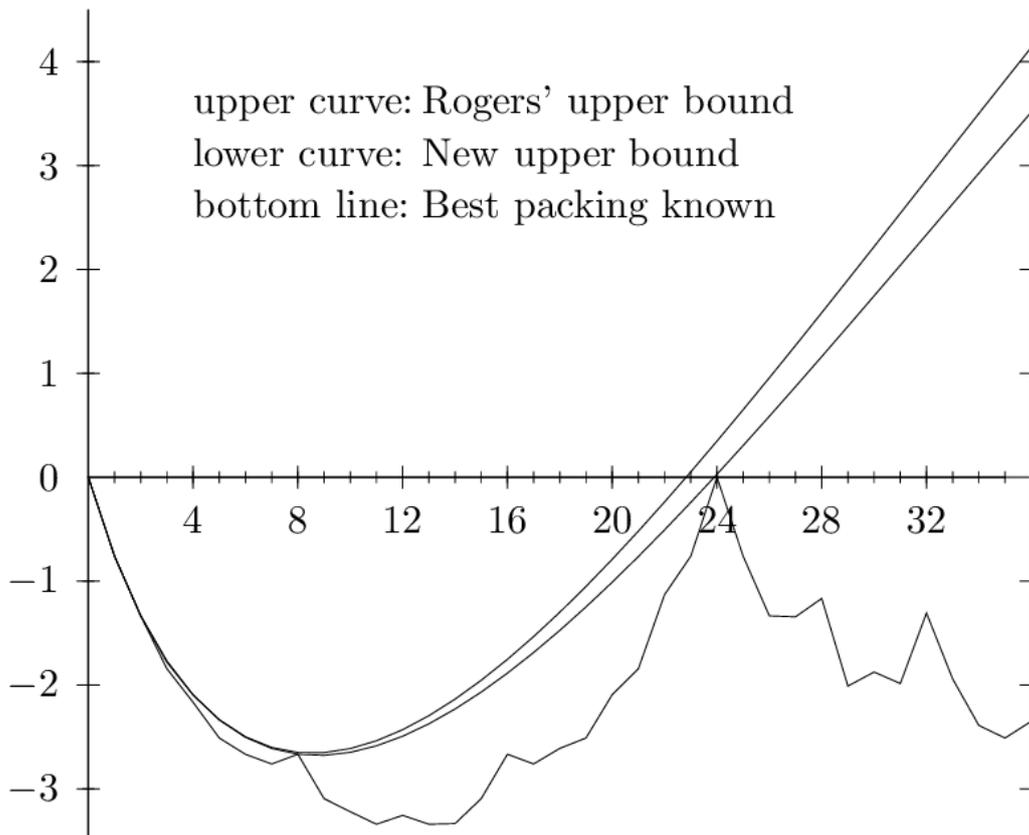


Abbildung 4: Bekannte Schranken an Kugelpackungen aus [1, Fig. 1] (vgl.[3, Kap. 1, S. 14, Fig. 1.5]). Gezeigt wird $\log_2(\delta_0) + d(24 - d)/96$.

Beispiel 13. Als Beispiel dass solche Funktionen existieren, betrachten wir $d = 1$. Nehmen wir

$$f(x) = (1 - |x|) \cdot \mathbf{1}_{[-1,1]}(x) = (\mathbf{1}_{[-1,1]} * \mathbf{1}_{[-1,1]})(x),$$

wobei $*$ die Faltung von Funktionen bezeichnet, dann ist, nach dem Faltungstheorem für die Fouriertransformation (siehe [4, Kap. 1], [5, Kap. 5.1]),

$$\mathcal{F}f(\omega) = \mathcal{F}(\mathbf{1}_{[-1,1]})(x) \cdot \mathcal{F}(\mathbf{1}_{[-1,1]})(x) = \frac{\sin(\pi\omega)^2}{(\pi\omega)^2}.$$

Damit haben wir die „magische Funktion“ in Dimension 1 gefunden und bewiesen dass $2\mathbb{Z}$, und auf Grund der Skalierungsinvarianz $\alpha\mathbb{Z}$, $\alpha \neq 0$, die beste Kugelpackung in \mathbb{R} liefert.

So leicht wie in diesem Beispiel ist es dann aber für $d > 1$ nicht mehr. Erst 2017 konnte M. Viazovska die „magische Funktion“ in Dimension 8 konstruieren [6] und kurz darauf gelang dies auch in Dimension 24 durch H. Cohn, A. Kumar, S. Miller, D. Radchenko und M. Viazovska [2]. Dieser Durchbruch war ein Grund für die Vergabe der *Fields Medaille* an M. Viazovska im Jahr 2022.

Literatur

- [1] H. Cohn and N. Elkies. New upper bounds on sphere packings I. *Ann. of Math. (2)*, 157(2):689–714; 2003. 10.4007/annals.2003.157.689
- [2] H. Cohn, A. Kumar, S. D. Miller, D. Radchenko, and M. S. Viazovska. The sphere packing problem in dimension 24. *Ann. of Math. (2)*, 187(3):1035–1068, 2017. 10.4007/annals.2017.185.3.8
- [3] J. H. Conway and N. J. A. Sloane. *Sphere Packings, Lattices and Groups*, 3. edition. Vol 290 of Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, Springer, 1998. 10.1007/978-1-4757-6568-7.
- [4] K. Gröchenig. *Foundations of Time-Frequency Analysis*. Birkhäuser, Boston, MA, 2001. 10.1007/978-1-4612-0003-1
- [5] E. Stein and R. Shakarchi. *Fourier Analysis: An Introduction*. Princeton Lectures in Analysis, Princeton University Press, 2003.
- [6] M. S. Viazovska. The sphere packing problem in dimension 8. *Ann. of Math. (2)*, 187(3):991–1015, 2017. 10.4007/annals.2017.185.3.7.