Zeitschrift: Elemente der Mathematik

Herausgeber: Schweizerische Mathematische Gesellschaft

Band: 74 (2019)

Heft: 2

Artikel: Packungen aus Kreisscheiben : wie eine

wahrscheinlichkeitstheoretische Sichtweise eine geometrische Analyse

vervollständigen kann

Autor: Dombrowsky, Charlotte / Fradom, Myriam / Rœlly, Sylvie

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-869232

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 29.11.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Elemente der Mathematik

Packungen aus Kreisscheiben

Wie eine wahrscheinlichkeitstheoretische Sichtweise eine geometrische Analyse vervollständigen kann

Charlotte Dombrowsky, Myriam Fradon und Sylvie Rœlly

Charlotte Dombrowsky schloss ihre Schulausbildung 2015 ab, und absolvierte anschliessend ein Orientierungsjahr (ProTechnicale). Seit zwei Jahren studiert sie Mathematik an der ETH Zürich.

Myriam Fradon promovierte in Paris bei Patrick Cattiaux. Zu ihren Forschungsthemen gehören reflektierende Diffusionen und zufällige Dynamiken harter Kugeln. Seit 1996 ist sie Maitre de Conférences an der Université de Lille.

Sylvie Rœlly promovierte in Paris, wo sie auch habilitierte. Seit 2003 ist sie Professorin für Wahrscheinlichkeitstheorie an der Universität Potsdam. Ihre Forschungsinteressen sind zufällige interagierende Systeme und Diffusionsprozesse. Sie engagiert sich auch im Bereich der Schülerförderung, insbesondere im Rahmen des Projektes MATh.en.JEANS.

Einführung

Schon immer fragten sich Ingenieur*innen, Techniker*innen, Händler*innen, wie man am besten gleichgrosse Kugeln im Raum stapelt, zum Beispiel Kanonenkugeln, Orangen oder

Der englische Seefahrer Sir Walter Raleigh fragte sich einst, wie er in seinem Schiffsladeraum möglichst viele Kanonenkugeln stapeln könnte. Johannes Kepler entwickelte daraufhin 1611 eine Vermutung über die optimale Anordnung der Kugeln. Diese Vermutung sollte sich als eine der härtesten mathematischen Nüsse der Geschichte erweisen. Selbst in der Ebene sind dichteste Packungen kongruenter Kreise eine Herausforderung. 1892 und 1910 veröffentlichte Axel Thue (kritisierte) Beweise, dass die hexagonale Kreispackung optimal sei. Erst 1940 lieferte László Fejes Tóth schliesslich einen wasserdichten Beweis für diese Tatsache. Eine Variante des Problems verlangt, Packungen mit endlich vielen kongruenten Kugeln zu finden, die eine gewisse quadratische Energie minimieren: Diese spannende geometrische Aufgabe wurde 1967 von Tóth gestellt. Sie ist auch heute noch nicht vollständig gelöst. In diesem Beitrag schlagen die Autorinnen eine originelle wahrscheinlichkeitstheoretische Methode vor, um in der Ebene Näherungen der Lösung zu konstruieren.

Heidelbeeren (siehe Abbildung 1). Einige versuchen, aus naheliegenden Gründen, das von den Kugeln beanspruchte Volumen zu minimieren, andere wollen die Dichte der erhaltenen Figur maximieren.

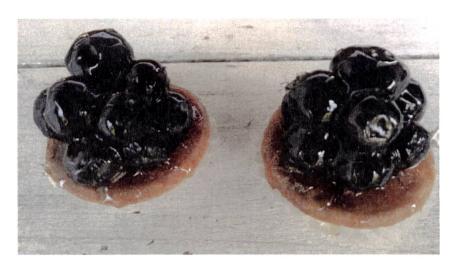


Abbildung 1 Feine Heidelbeerpackungen

Diese Art geometrischer Fragen kann man unter unterschiedlichen Aspekten betrachten:

- Geht es um Segmente (eindimensionale Sphären), Kreisscheiben (zweidimensionale Sphären), Kugeln (Dimension 3) oder Hypersphären (in einer grösseren Dimension als 3)?
- Ist die Anzahl der Sphären endlich oder unendlich?
- Falls sie endlich ist, versucht man, den Anteil des von den Sphären eingenommen Volumens in der konvexen Hülle der Konfiguration zu maximieren? Oder minimiert man die Oberfläche dieser konvexen Hülle? Oder versucht man, die Kusszahl – die Anzahl der Sphären, die eine einzige andere Sphäre berühren, ohne sie zu überlappen – zu maximieren? Oder versucht man, eine möglichst kompakte Konfiguration zu finden, deren Energie minimal ist?

Der*Die Leser*in, der*die an diesen unterschiedlichen Problemstellungen und ihrer mathematischen Erläuterung interessiert ist, kann dazu die aktuelle und sehr klare Monografie [1] betrachten.

Wir werden uns im Folgenden auf Konfigurationen von gleichgrossen sich nicht überschneidenden Kreisscheiben in einer Ebene konzentrieren, die eine gewisse Energie minimieren.

Diese Konfigurationen finden Anwendungen in sehr vielen Bereichen, zum Beispiel in der Clusterchemie, wo diese als *Aggregate von Atomen* (siehe [15]) vorkommen; bei Verschlüsselungen, die für das Senden von Signalen benötigt werden (siehe [5]); in der Optik, um optimale optische Fasern zu entwerfen (siehe [12]); oder in der Logistik, zum Beispiel um folgende (wichtige!) Frage zu beantworten: Wie verpackt man möglichst viele Frankfurter Würstchen in einer zylinderförmigen Dose?

Wir verfolgen zwei Ziele, ein theoretisches und ein angewandtes.

Zuerst analysieren wir die Kreispackungen vom Standpunkt der diskreten Geometrie. Wir werden uns insbesondere mit sechseckigen Konfigurationen beschäftigen, welche bemerkenswerte Eigenschaften besitzen. Unter anderem berechnen wir explizit eine charakteristische Grösse, ihre *quadratische Energie*. Wir werden zeigen, dass kleine sechseckige Konfigurationen (deren Seitenlänge kleiner oder gleich 7 ist) optimale gitterartige Packungen sind. Das heisst, dass das Minimum der quadratischen Energie über alle Kreisscheibenkonfigurationen erreicht wird, in dem die Kreisscheiben auf dem dreieckigen Gitter angeordnet sind.

Diese Eigenschaft gilt jedoch nicht für grössere sechseckige Packungen. Auf der Suche nach Hinweisen zur Lösung der Frage, die Tóth 1967 stellte,

What is the shape of a cluster of n spheres with equal radii minimizing their quadratic energy, i.e., their 2nd moment about their center of mass?

verwenden wir eine ganz andere Methode, eine wahrscheinlichkeitstheoretische Methode. Wir konstruieren eine zufällige Dynamik von Kreisscheiben, die sich nach langer Evolution in einer fast optimalen Konfiguration stabilisiert. Mit der Simulation dieser Bewegung (nach einer sinnvollen Wahl der Parameter), kann man folgende vernünftige These aufstellen:

Die Packungen aus Kreisscheiben, die die quadratische Energie minimieren, sind kreisförmig und auf einem dreieckigen Gitter zentriert.

1 Optimale Kreispackungen und quadratische Energie

In diesem Abschnitt werden wir uns mit Packungen aus Kreisscheiben (häufig auch *pennies* im englischsprachigen Raum) beschäftigen, mit dem Ziel ihre quadratische Energie (auch *second moment* genannt) zu minimieren. Obwohl dieses Problem einfach und sehr angewandt scheint, ist es grösstenteils noch ungelöst, sobald die Anzahl der Kreisscheiben grösser als sieben ist.

In diesem Abschnitt werden wir die für unsere Analyse notwendigen mathematischen Grössen einführen, einige explizite Berechnungen der Energie ausführen und die Vielfältigkeit der noch verbleibenden unbeantworteten Fragen hervorheben.

1.1 Die quadratische Energie einer Konfiguration von Kreisscheiben

Wir nennen Konfiguration von n Kreisscheiben eine Menge x aus n offenen Kreisscheiben mit Radius eins in der Euklidischen Ebene. Die Scheiben dürfen sich nicht überschneiden. Jede Konfiguration ist demnach durch die Position der Mittelpunkte der Kreisscheiben gegeben:

$$\mathbf{x} \equiv \{x_1, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^2$$

die selbstverständlich, für alle $1 \le i < j \le n$, die Bedingung $|x_i - x_j| \ge 2$ erfüllt, wobei $|\cdot|$ die für die euklidische Norm verwendete Notation ist.

Definition 1.1. Wir nennen *quadratische Energie* einer Konfiguration \mathbf{x} von n Kreisscheiben die Summe der Quadrate der Distanzen zwischen jedem Paar von Mittelpunkten: $\sum_{1 \le i \le j \le n} |x_i - x_j|^2$. Die *mittlere quadratische Energie* ist dann gegeben durch

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{1 \le i < j \le n} |x_i - x_j|^2.$$
 (Mittlere Energie)

Bemerkung. Man kann auch $\mathcal{E}_n(\mathbf{x})$ als Zweites Moment, mit Hilfe des Abstandes zwischen jeder Kreisscheibe und dem Gravitationszentrum der Konfiguration, ausdrücken:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{x}) = \sum_{1 \le i \le n} |x_i - \bar{x}|^2$$
 wobei $\bar{x} := \frac{x_1 + \dots + x_n}{n}$.

Wir können nun das weiter oben erwähnte Konzept der Optimierung definieren.

Definition 1.2. Eine Konfiguration \mathbf{x}_{\min} von n Kreisscheiben wird *optimal* genannt, falls ihre quadratische Energie minimal unter allen Konfigurationen mit n Kreisscheiben ist:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{x}_{\min}) = \min\{\mathcal{E}_n(\mathbf{x}); \mathbf{x} \text{ Konfigurationen mit } n \text{ Kreisscheiben}\}.$$

Wir nennen C_{\min} die Menge der optimalen Konfigurationen, modulo Drehungen, Spiegelungen und Verschiebungen in der Ebene.

Schränkt man sich auf die Ebene ein, so kann man die Frage von Tóth für $n \ge 2$ beantworten, indem man

- (1) die minimale quadratische Energie von Konfigurationen von *n* Kreisscheiben berechnet und
- (2) die Menge C_{\min} von Konfigurationen, bei denen diese minimale Energie erreicht wird, bestimmt.

$$\mathcal{E}_2(\mathbf{x}_{\min}) = 2 \qquad \qquad \mathcal{E}_3(\mathbf{x}_{\min}) = 4$$

Abbildung 2 Optimale Konfigurationen von zwei, bzw. drei Kreisscheiben und ihre respektive mittlere Energie

Für n=2 und n=3 ist die Situation trivial und die Fragen (1) und (2) sind in der Abbildung 2 beantwortet. Die Menge C_{\min} der optimalen Konfigurationen besteht jeweils aus einer einzigen Konfiguration.

Der Fall n=4 ist etwas subtiler. Die durchschnittliche Energie ist minimal für unendlich viele unterschiedliche Konfigurationen: card $\mathcal{C}_{\min} = +\infty$. Alle diese optimalen Konfigurationen zeigen eine trapezartige Form. Man erhält sie, indem man zwei obere Kreisscheiben auf zwei unteren Kreisscheiben rollen lässt, so dass die Zahl der Kontaktpunkte wenigstens gleich 4 ist, siehe Abbildung 3.



Abbildung 3 Beispiele der optimalen Konfigurationen für vier Kreisscheiben: $\mathcal{E}_4(\mathbf{x}_{min}) = 8$

Bis auf Rotationen und Translationen sind diese Konfigurationen durch den Winkel θ zwischen den beiden roten Segmenten bestimmt. Indem man den Ursprung der Euklidischen Ebene auf das Zentrum der unteren, linken Scheibe legt, erhält man:

$$\mathcal{C}_{\min} = \left\{ \{ (0,0), \ (2,0), \ 2(\cos\theta, \sin\theta), \ 2(1+\cos\theta, \sin\theta) \} \,, \ \theta \in \left[\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3} \right] \right\}.$$

Durch Nachrechnen überprüfen wir, dass in dieser Menge die mittlere Energie konstant ist: für beliebige $\theta \in \left[\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right]$,

$$\mathcal{E}_4(\mathbf{x}_{\min}) = \frac{1}{4} \Big(4 \times 2^2 + |2(1 + \cos\theta, \sin\theta)|^2 + |2(\cos\theta, \sin\theta) - (1, 0)|^2 \Big)$$

= $2^2 + (2 + 2\cos\theta) + (2 - 2\cos\theta) = 8.$

Für n = 5 oder n = 6 ist die Antwort auf die Frage von Tóth nicht offensichtlich. Die in Abbildung 5 ersten beiden dargestellten optimalen Konfigurationen kann man als Teilmengen der Margerite, der optimalen Konfiguration für n = 7, interpretieren. Diese letztere wurde 1974 durch die Mathematikerin A. Temesvári in einer bemerkenswerten und fast unbekannten geometrischen Arbeit [16] in ungarischer Sprache beschrieben, siehe Abbildung 4.

1. k_4 a k_4 körbe ütközik, a többi távolság $\approxeq 1$ (12. ábra). Ugyanilyen tipus alakatt keletkezik, ha k_1 k_2 -ba ütközik.

II. k_4 k_5 -ba ütközik. Ekkor $A_2A_1A_2A_1$ is rombusz, így $A_1A_2A_1A_2$ para lelogramma (13. ábra). Ha k_1 k_2 -be ütközik, a konvex burok ugyancsak paralelog



adodik, miwł az egymiloścą (5)-ben is (6)-ban ęgyzerre nem léphet fel. A II. esteben zz. $A_1A_1A_2A_2$, paraleogrammiban (13. abra). Ekkor az ildó, négyzetősszege állandó, így az 1. segédítétéből következik, hony $A_1A_2A_2A_3$, paraleogrammiban A_2A_3 , A_3A_3 , A_4A_3 , A_4A_3 , advalentán hony $A_1A_2A_3$, diskken, ho O-y-sz 2 és ola, h-v-O. A többi távetság ugyamz a többi szára a tövelésséssezeg $A_1A_2A_3$, a következik erintekezsek (14. abra). A viltomatis után a távelésséssezeg; $A_1A_2A_3$, A_1A_3 , A_1

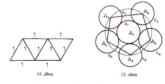
A középpontok konvex burka az $A_4A_3A_4A_5$ diszög és a $k_2, ..., k_4$ köröl érintik k_1 -et, tehát a $k_2, ..., k_6$ körök középpontjai egy egységsugarú A_1 középponti kérön vannak és mindegyik oldalhoz tartozó középponti szög kisebb-egyenlő [20] és nagvobb-egyenlő 60° (15. áhra)

Egy sokszög másodazomszód csúcsait összekő iditir a későbbiekben "másodátlóknak" nevez aik. Az ötszögünk minden "másodátlóknak" ter tozó középponti szóg a [120°; 180°] intervallum han ván.

A. $v \le 1$ estben a hatványösszeg megfelel változatásával a következőképpen jufhantsa él, változatásával a következőképpen jufhantsa él, ál, 60-nak megfelelő elrendezéhez. Legren pl. a 4,4-a a legnagyobb oldal. A, körül k_r -őt k_r -ig, keré k_r -ig, majó együtt k_r -őt fest k_r -őt k_r -ig végüt k_r -őt festgyütt k_r -őt festgyütt festgyütt festgyütt k_r -őt festgyütt k_r -őt festgyütt k_r -őt festgyütt festgyütt k_r -őt festgyütt



Az $1 < v \le 2$ esetben tegyük fel, hogy pl. A_1A_2 a legnagyobb "másodátló" é $A_A \ge A_A A_a$ Forgassuk A_1 körül k_2 és k_2 köröket együtt, mig k_2 a k_2 -ba nem ütkö zik. A 3. és a 9. segédétele miatt a hatványósszeg esőkkent és A_2A_3 é A_2A_4 . Ezutár A_1 körül k_2 és k_2 köröket forgatjak együtt, mig k_2 a k_2 -be nem ütközik. Ha ezutár ül A_1 és A_2 a jakor A_1 körül szetüt forgatjak a jakoz A_2 közt együtt eseten elektrik a közt eseten elektrik a közt eseten elektrik a közt elektrik a közt elektrik elek



ütközik. $\delta_A(b)$ a végső helyzetre nyilván csökkent és $A_2A_1A_3 < = 180^o$. A 3. segédtétel szerint invább csökkentünk, ha k_c -et A_1 körül k_c -ig forgatjuk. Így eljutottunk a d_c 60-nak megfelelő elrendezéshez.

Legyen n=7.

Ha a középpontok konvex burka hétszög, a 2. segédtétel miatt elegendő az egyiégnyi oldalú esettel foglalkozni,
Egy sokazóg harmadszomszéd csúcsait összekötő átlókat a későbbiekben
"harmadátlóknak" nevezzük.
Vezvük az előbbi hétszőg "harmadátlóit". Belátisk hogy legfelisébb némy

Mateourikai Leonk

Abbildung 4 Ausschnitt aus dem Artikel [16] von A. Temesvári

Wir heben hervor, dass die Mittelpunkte dieser optimalen Konfigurationen als benachbarte Punkte auf einem dreieckigen Gitter liegen, das wir von nun an \mathcal{T} nennen.







Abbildung 5 Die einzigen optimalen Konfigurationen von 5 (bzw. 6 oder 7) Kreisscheiben in der Margeriten-Form, in der ein bzw. zwei Blütenblätter fehlen. Die Mittelpunkte der Kreisscheiben sind auf dem Gitter \mathcal{T} .

Für n > 7 ist die Beschreibung von \mathcal{C}_{min} bis heute unvollständig. Das erfolgreichste Ergebnis erreichte Chow [3], der die quadratische Energie nur für gitterartige Konfigurationen – deren Mittelpunkte auf \mathcal{T} liegen – minimieren konnte.

Wir bemerken auch, dass die Margerite eine sechseckige Konfiguration ist, was kein Zufall ist, da die Zahl 7 die erste nicht triviale *zentrierte Sechseckszahl* ist. Darum werden wir uns nun auf Konfigurationen konzentrieren, deren Kardinalität eine dieser interessanten Zahlen ist.

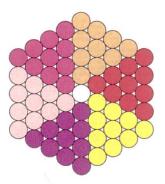
1.2 Schönheit und Nutzen der zentrierten Sechseckszahlen

Wir wiederholen zuerst die algebraische Definition.

Definition 1.3. Eine zentrierte Sechseckszahl n ist eine ganze Zahl n(h), die sich auf folgende Art zerlegen lässt:

$$n(h) = 1 + 6\frac{h(h-1)}{2} = 3h^2 - 3h + 1 = h^3 - (h-1)^3$$
 (1)

für eine feste ganze Zahl h.



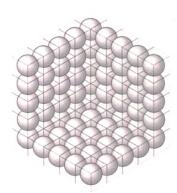


Abbildung 6 Zerlegung der Sechseckszahl n(h) in sechs Blütenblätter (erster Term in (1)), oder in die Differenz von zwei konsekutiven Würfeln (letzter Term in (1)

Sie entspricht der Anzahl ähnlicher Kreisscheiben, die man in einem regelmässigen Sechseck auf dem dreieckigen Gitter \mathcal{T} um eine zentrierte Kreisscheibe mit Gravitationszentrum

 \bar{x} der Konfiguration anordnen kann. Die Zahl h stellt also die Anzahl der angeordneten Kreisscheiben auf jeder Seite des Sechseckes dar oder auch die Anzahl der Schichten im Sechseck (der graphische Beweis ist in der Abbildung 6 gegeben.) Man überprüft leicht, dass jedes der sechs farbigen Blütenblätter aus $\frac{h(h-1)}{2}$ Kreisscheiben besteht. Abbildung 7 zeigt die graphische Darstellung der sechseckigen Konfigurationen der Seitenlänge h=1,2,3,4 und 5.

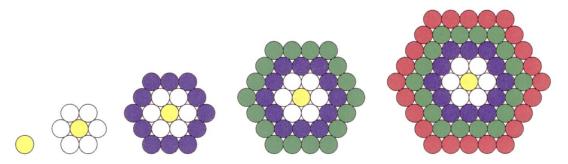


Abbildung 7 Abbildung der sechseckigen Konfigurationen $\mathbf{x}_{\text{hex}}(1)$, resp. $\mathbf{x}_{\text{hex}}(2)$, $\mathbf{x}_{\text{hex}}(3)$, $\mathbf{x}_{\text{hex}}(4)$ und $\mathbf{x}_{\text{hex}}(5)$, von Kardinalität n(1) = 1 resp. n(2) = 7, n(3) = 19, n(4) = 37 und n(5) = 61.

1.3 Berechnung der mittleren quadratischen Energie einer sechseckigen Konfiguration

Zur Vereinfachung nennen wir E(h) die mittlere quadratische Energie der sechseckigen Konfiguration $\mathbf{x}_{hex}(h)$ der Seitenlänge h, und der Kardinalität n(h):

$$E(h) := \mathcal{E}_{n(h)}(\mathbf{x}_{\text{hex}}(h))$$

1.3.1 Konfigurationen von kleiner Grösse

In diesem Abschnitt werden wir die zwei kleinsten, nicht trivialen sechseckigen Konfigurationen behandeln.

Wir beginnen mit der Margerite der Seitenlänge h=2. Wir nummerieren zuerst die Kreisscheiben, dabei fangen wir im Mittelpunkt an und folgen den zwei Schichten. Wir



Abbildung 8 Nummerierung der sechseckigen Konfiguration der Seitenlänge h = 2 und Kardinalität n(2) = 7

benutzen nun den Ausdruck des zweiten Momentes, um die quadratische Energie dieser Konfiguration zu berechnen. Da x_1 , der Mittelpunkt der zentralen Kreisscheibe, dem Gravitationszentrum entspricht, erhalten wir : $E(2) = \sum_{i=2}^{7} |x_i - x_1|^2 = 6 \cdot 2^2 = 24$.

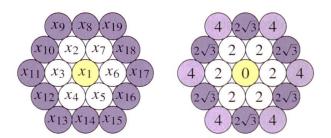


Abbildung 9 Links: Nummerierung der sechseckigen Konfiguration $\mathbf{x}_{hex}(3)$ und ihrer 3 Schichten; Rechts: Abstand der Mittelpunkte der Kreisscheiben zum Gravitationszentrum $\bar{x} = x_1$

Wir berechnen nun die Energie einer Konfiguration der Seitenlänge h=3. Auch hier benutzen wir den Ausdruck des zweiten Momentes und führen das Gravitationszentrum x_1 und die bereits berechnete Energie ein, um die mittlere quadratische Energie dieser Konfiguration zu beschreiben.

$$E(3) = E(2) + 6((2\sqrt{3})^2 + 4^2) = 192.$$

Wir stellen nun zwei sehr unterschiedliche Kontexte vor, in denen die Packung aus n(3) Kreisscheiben auftaucht. Eine Skulptur in der Kathedrale von Magdeburg aus dem 13. Jahrhundert stellt den germanischen Kaiser Otto I. und seine Frau Editha dar. Er hält stolz eine sechseckige Konfiguration mit 19 Kreisscheiben in seiner rechten Hand, deren Interpretation bis heute ein Mysterium bleibt (und somit eine Quelle der Uneinigkeit zwischen Historiker*innen).

Ingenieur*innen haben empirisch herausgefunden, dass die sechseckige Geometrie einen optimalen Widerstand bildet. Darum wurde sie beispielsweise beim Bau von Kabeln benutzt: Die Kabel der 1883 eingeweihten Brooklyn Bridge bestehen aus 19 = n(3) Leitungen, die wiederum aus 331 = n(11) metallischen Fäden des Durchmessers 1/8 bestehen, siehe Abbildung 11.

1.3.2 Energie einer sechseckigen Konfiguration beliebiger Grösse

In diesem Abschnitt präsentieren wir eine explizite Formel. Die Grundlage für den Beweis bildet das zweite Moment, sowie die Invarianz jeder sechseckigen Konfiguration unter einer Rotation von $\pi/3$, illustriert in Abbildung 6.

Proposition 1.1. Die mittlere quadratische Energie einer sechseckigen Konfiguration $\mathbf{x}_{\text{hex}}(h)$ ist gegeben durch

$$E(h) = h(h-1)(5h(h-1)+2) = \frac{(n(h)-1)(5n(h)+1)}{9}$$
 (2)

Bemerkung. Die Energie E(h) ist in der Tat eine Funktion von $\frac{h(h-1)}{2} = \binom{h}{2}$, wobei $\binom{h}{2}$ nichts anderes ist als die Kardinalität jedes Blütenblattes der sechseckigen Konfiguration der Seitenlänge h. Darüber hinaus verallgemeinert sich diese Formel ohne Weiteres für Kreisscheiben vom beliebigen Radius r: $E(h) = (2r)^2 \binom{h}{2} \left(5\binom{h}{2} + 1\right)$.



Abbildung 10 Editha und Otto, Magdeburg, 1245¹

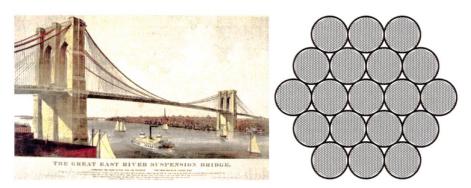


Abbildung 11 Brooklyn Bridge (New York City Brooklyn Bridge - Currier & Ives 1877) und ihre Kabel

Beweis. Indem wir wie oben die Kreisscheiben schichtweise nummerieren, erhalten wir die rekursive Formel

$$E(h+1) = E(h) + \sum_{i=n(h)+1}^{n(h+1)} |x_i - x_1|^2.$$
 (3)

Dank der Zerlegung der Sechsecke in sechs identische Blütenblätter (siehe Abbildung 6), ist der Zuwachs der mittleren Energie E(h+1)-E(h) sechs mal der Anteil der rosafarbigen Kreisscheiben der Abbildung 12. Wenn wir den Ursprung in $\bar{x}=x_1$ fixieren, so haben alle diese Kreisscheiben die gleiche Ordinate, gegeben durch $\frac{\sqrt{3}}{2}2h=\sqrt{3}h$.

¹Dieses Wikipedia und Wikimedia Commons Bild des Users Chris 73 ist frei verfügbar unter //commons.wikimedia.org/wiki/File:HerscherpaarMagdeburgCathedral.jpg unter der creative commons cc-by-sa 3.0 Lizenz.

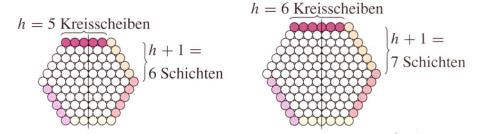


Abbildung 12 Die äusseren Kreisscheiben eines Blütenblattes, hier in rosa, sind verantwortlich für 1/6 der Steigerung der mittleren Energie E(h+1)-E(h).

Der Unterschied der Abszissen zweier nebeneinanderliegender rosafarbigen Kreisscheiben beträgt zwei, dabei ist die niedrigste Abszisse -h und die höchste h-2. Die Abszisse der orangefarbigen Scheibe, die nicht zu dem Blütenblatt gehört, ist h. Somit folgt:

$$\sum_{i=n(h)+1}^{n(h+1)} |x_i - x_1|^2 = 6 \left(\sum_{k=0}^{h-1} (-h+2k)^2 + 3h^3 \right) = 24 \left(\sum_{k=0}^{h-1} k^2 - h \sum_{k=0}^{h-1} k + h^3 + 3h^3 \right).$$

$$\operatorname{Da} \sum_{k=1}^{m} k^2 = \frac{m(m+1)(2m+1)}{6} \text{ und } \sum_{k=1}^{m} k = \frac{m(m+1)}{2} \text{ folgt}$$

$$\sum_{i=n(h)+1}^{n(h+1)} |x_i - x_1|^2 = 24 \left(\frac{(h-1)h(2h-1)}{6} - h \frac{(h-1)h}{2} + h^3 \right) = 4h(5h^2 + 1).$$

Die Formel (3) zusammen mit dem obigen Ergebnis ergibt:

$$E(h) = \sum_{l=0}^{h-1} 4l (5l^2 + 1) = 20 \sum_{l=1}^{h-1} l^3 + 4 \sum_{l=1}^{h-1} l.$$

Zusammen mit $\sum_{l=1}^{m} l^3 = \frac{m^2(m+1)^2}{4}$ und $(h-1)h = \frac{n(h)-1}{3}$ folgt die Aussage.

1.4 Sind die grossen sechseckigen Konfigurationen noch immer optimal?

Kehren wir zu der Suche nach der Menge C_{min} zurück, die bei der Betrachtung der quadratischen Energie optimal ist (siehe Definition 1.2).

Aus der Arbeit von Temesvári [16] folgt, dass die Margerite $\mathbf{x}_{hex}(2)$ die einzige Konfiguration unter *allen* Konfigurationen mit n(2) = 7 Kreisscheiben ist, die die quadratische Energie minimiert: für n = 7 gilt $\mathcal{C}_{min} = \{\mathbf{x}_{hex}(2)\}$. Aber was ist mit der sechseckigen Konfiguration der Seitenlänge h = 3? Ist sie optimal unter den Konfigurationen mit 19 Kreisscheiben? Und sind die anderen grösseren sechseckigen Konfigurationen auch optimal?

Wir beantworten diese Fragen in der unterstehenden Proposition. Die Antwort ist bejahend für hinreichend *kleine* Konfigurationen ($h \le 7$) und falls man für die Optimierung nur die gitterartigen Konfigurationen betrachtet. Für *grössere* sechseckige Konfigurationen ($h \ge 8$) werden wir diese Aussage durch Gegenbeispiele widerlegen.

h	n(h)	E(h)
1	1	0
2	7	24
3	19	192
4	37	744
5	61	2040
6	91	4560
7	127	8904
8	169	15792
9	217	26064
10	271	40680
11	331	60720
12	397	87384
13	469	121992
14	547	165984
15	631	220920
16	721	288480
17	817	370464
18	919	468792
19	1027	585504
20	1141	722760
20	1171	122100

Tabelle 1 Die mittlere Energie der vierzig ersten sechseckigen Konfigurationen in Abhängigkeit der Seitenlänge des Sechseckes.

Proposition 1.2. Unter den gitterartigen Konfigurationen ist die sechseckige Packung der Seitenlänge h optimal genau dann, wenn $h \leq 7$. In diesem Fall gilt

$$E(h) = \min\{\mathcal{E}_{n(h)}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \text{ Konfiguration aus } n(h) \text{ Kreisscheiben mit } \mathbf{x} \subset \mathcal{T}\}.$$

Um diese Proposition zu beweisen, beweisen wir zuerst, dass eine sechseckige Packung $\mathbf{x}_{\text{hex}}(h)$ (in einem noch zu erläuternden Sinn) genau dann kreisförmig ist, wenn sie klein genug ist, das heisst falls $2 \le h \le 7$. Anschliessend verwenden wir das mächtige Ergebnis von Chow, der bewiesen hat, dass die optimalen gitterförmigen Konfigurationen kreisförmig sind.

Definition 1.4. Eine gitterartige Konfiguration $\mathbf{x} \subset \mathcal{T}$ wird kreisförmig genannt, falls ein Radius R > 0 existiert, so dass alle Punkte auf dem dreieckigen Gitter \mathcal{T} , deren Abstand zum Gravitationszentrum \bar{x} kleiner oder gleich R ist, zu dieser gehören. Andersgesagt, \mathbf{x} ist kreisförmig falls $\mathbf{x} = \{x_i \in \mathcal{T}, |x_i - \bar{x}| \leq R\}$.

Lemma 1.1. Die sechseckige Konfiguration der Seitenlänge h ist kreisförmig genau dann, wenn $h \leq 7$.

Beweis. Jede sechseckige Konfiguration ist gitterartig: $\mathbf{x}_{hex}(h) \subset \mathcal{T}$. Sei $x_1 = \bar{x} = 0$. Der Radius der kleinsten Kugel mit Zentrum $\bar{x} = 0$, der alle Punkte $x_2, \ldots, x_{n(h)}$ umschliesst,

ist 2(h-1). Daraus folgt, dass $\mathbf{x}_{\text{hex}}(h)$ eine kreisförmige Konfiguration ist genau dann, wenn $\mathbf{x}_{\text{hex}}(h) = B(0, 2(h-1)) \cap \mathcal{T}$. Wir unterscheiden zwei Fälle.

(i) h ist gerade: Falls $B(0, 2(h-1)) \cap \mathcal{T} \setminus \mathbf{x}_{hex}(h) \neq \emptyset$ befindet sich der Punkt $(0, h\sqrt{3})$ in der Kugel B(0, 2(h-1)), siehe Abbildung 13. Aber

$$|(0, h\sqrt{3})| \le 2(h-1) \quad \Leftrightarrow \quad h \ge \frac{2}{2-\sqrt{3}} \approx 7,46.$$

Daraus folgt, dass h mindestens 8 sein muss.

(ii) h ist ungerade: Falls $B(0, 2(h-1)) \cap \mathcal{T} \setminus \mathbf{x}_{hex}(h) \neq \emptyset$ befindet sich der Punkt $(1, h\sqrt{3})$ in der Kugel B(0, 2(h-1)). Aber

$$|(1, h\sqrt{3})| \le 2(h-1) \quad \Leftrightarrow \quad h \ge 4 + \sqrt{13} \approx 7, 6.$$

Dies bedeutet, dass h mindestens 9 sein muss.

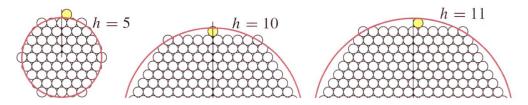


Abbildung 13 Kreisförmige bzw. nicht kreisförmige Konfigurationen.

Um den Beweis der Proposition 1.2 abzuschliessen, verwenden wir die Charakterisierung der optimalen gitterartigen Packung, die von Chow in der Proposition 3 des Artikels [3] bewiesen wurde. Diese sind kreisförmig (auf englisch: *Circular cluster*). Daraus folgt, dass für $2 \le h \le 7$ die sechseckigen Packungen kreisförmig und somit optimal unter der gitterartigen Packungen sind.

Für $h \ge 8$, zeigt der konstruktive Beweis des Lemmas 1.1, dass die Konfiguration, die man durch das Verschieben der Kreisscheiben aus den Ecken in die Mitte der äusseren Seiten des Sechseckes abrundet, eine kleinere Energie als das Sechseck hat. Die optimale(n) Konfiguration(en) der Kardinalität n(h) kann/können also nicht die sechseckigen sein.

Bilanz. Wenn $\mathbf{x}_{hex}(h)$ aber nicht optimal ist für h grösser als 7, was ist dann die optimale Gestalt für grosse Konfigurationen, die aus n > n(7) = 127 Kreisscheiben bestehen?

Diese Frage ist bis jetzt nicht vollständig beantwortet und war Ursprung vieler Vermutungen. Unter anderen stellen Graham und Sloane in [11] drei unterschiedliche Methoden vor, wie man den Energiezuwachs, der durch das Hinzufügen einer Scheibe entsteht, minimieren kann. Chow [3] entwickelte dann einen teilweise zufälligen Algorithmus, der nach einer stetigen Gleichverteilung unter mehreren Möglichkeiten zufällig die Stelle auswählt, an der eine neue Kreisscheibe der vorherigen Schicht hinzugefügt wird.

All diese raffinierten Versuche sind jedoch beschränkt durch die Konstruktion von gitterartigen Konfigurationen. Da es heute unmöglich erscheint, einen Algorithmus zu finden, der optimale, nicht gitterartige Konfigurationen generiert, stellen wir im zweiten Teil dieses Artikels eine grundsätzlich andere Herangehensweise vor, nämlich einen wahrscheinlichkeitstheoretischen Zugang.

2 Zufällige Dynamik der Kreisscheiben und ihr Gleichgewichtszustand

In diesem Teil werden wir die optimalen Konfigurationen von Kreisscheiben beliebiger Grösse – die typischerweise nicht sechseckig sind – durch eine zufällige Dynamik der Kreisscheiben approximieren. Nach langer Zeit findet diese komplexe Bewegung einen Gleichgewichtszustand in einer Konfiguration, die nahe einer Konfiguration der minimalen Energie ist. Diese in [2] eingeführte Methode befreit uns somit vom Zwang der den vorherigen quasi-deterministischen Methoden inhärenten gitterartigen Geometrie.

2.1 Zufällige Bewegung von sich gegenseitig anziehenden Kreisscheiben

Wir betrachten n Kreisscheiben (für n gross genug). Jede Kreisscheibe oszilliert zufällig und chaotisch in der Ebene, unabhängig von den anderen (n-1) Kreisscheiben. Diese üben allerdings eine Anziehungskraft auf sie aus. Wenn ausserdem zwei Kreisscheiben zusammenstossen, stossen sie sich nach den gebräuchlichen Gesetzten der Physik einer elastischen Kollision wieder ab, da sie sich nicht überschneiden können. Jede der n Kreisscheiben $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^2$ wird sich demnach in Abhängigkeit der Zeit t entlang einer gewissen, zufälligen Bahn in der Ebene bewegen. Genauer gesagt, werden die Funktionen $t \mapsto x_i(t)$, $1 \le i \le n$, das folgende System von stochastischen Integralgleichungen erfüllen:

Ansiehungskraft der anderen Kreisscheiben
$$x_{i}(t) = \overbrace{x_{i}(0)}^{\text{Anfangsposition Oszillation}} + \overbrace{W_{i}(t)}^{\text{Anziehungskraft der anderen Kreisscheiben}}$$

$$= \underbrace{x_{i}(t) = \underbrace{x_{i}(0)}_{\text{Authors Zusammenstösse bedingte Abstossung}}^{\text{Anziehungskraft der anderen Kreisscheiben}}_{\text{Jossphare Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}_{\text{Jossphare Julius Institute of Susammenstösse bedingte Abstossung}}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \int_{0}^{t} (x_{i}(s) - x_{j}(s)) dL_{ij}(s)}_{\text{Jossphare Julius Ins$$

Wir betrachten nun die Bedeutung der vier obenstehenden Terme.

2.1.1 Anfangsposition

Die Position der n Kreisscheiben zum Zeitpunkt 0 ist durch die ihrer Zentren gegeben, die für alle Paare $i \neq j$ die Bedingung $|x_i(0) - x_j(0)| \geq 2$ erfüllen. Sie bilden die Ausgangskonfiguration $\mathbf{x}(0)$.

2.1.2 Zufällige Brownsche Oszillation

Die Oszillation, die jede Kreisscheibe im Verlauf der Zeit macht, ist eine zufällige Bewegung, genannt *Brownsche* Bewegung. Sie wurde nach dem Botaniker R. Brown benannt,

der 1828 in seinem Mikroskop eine unregelmässige, allgegenwärtige Bewegung von Pollenkörnern in einer Flüssigkeit entdeckte, die aber keine Lebenserscheinung war. Erst sehr viel später wurde diese Bewegung durch Einstein, Smoluchowsky und schliesslich Wiener mathematisch beschrieben. (Die Bezeichnung der Bewegung durch den Buchstaben W geht auf ihn zurück.) Zu *jedem* Zeitpunkt verändert jede Kreisscheibe spontan die Richtung ihrer Bewegung, ohne eine bestimmte zu bevorzugen und unabhängig von den anderen Kreisscheiben. Daraus folgt, dass ihre Geschwindigkeit de facto unendlich ist und ihre Bahn eine fraktale Funktion ist, die nirgendwo differenzierbar ist (siehe Abbildung 14).

5. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen; von A. Einstein.

In dieser Arbeit soll gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen V seien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist das Volumen V^* durch eine für das Lösungsmittel, nicht aber für die gelöste Substanz durchlässige Wand vom reinen Lösungs-

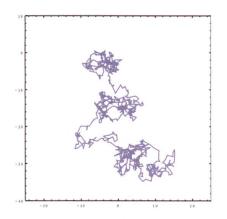


Abbildung 14 Links: Ausschnitt aus dem Artikel von A. Einstein über die Brownsche Bewegung (1905).

Rechts: Eine Simulation einer möglichen Bahn eines Brownschen Teilchens in der Ebene

2.1.3 Anziehungskraft zwischen den Kreisscheiben

Zu jedem Zeitpunkt s wird die Scheibe i durch die anderen Kreisscheiben j angezogen, mit einer zu dem Vektor $x_j(s) - x_i(s)$, der die relative Position der beiden Kreisscheiben darstellt, proportionalen Kraft (siehe Figur 15). Der Proportionalitätskoeffizient a wird Anziehungskoeffizient genannt. Im Folgenden wird er eine wichtige Rolle spielen.

2.1.4 Auswirkung der Zusammenstösse der Kreisscheiben

Falls eine Kreisscheibe i sich einer Kreisscheibe j nähert und diese zu einem Zeitpunkt s berührt, $|x_i(s) - x_j(s)| = 2$, wird sie sofort zurückgestossen, da sich die Kreisscheiben nicht überschneiden dürfen. Diese Rückstosskraft, die den Gesetzen der elastischen Kollision folgt, ist kollinear zu dem Vektor $x_i(s) - x_j(s)$ (in blau in der Abbildung 15).

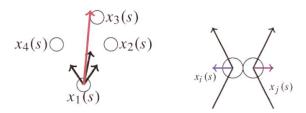


Abbildung 15 Links: Die durch die Kreisscheiben $x_2(s)$, $x_3(s)$ und $x_4(s)$ auf $x_1(s)$ ausgeübten Anziehungskräfte; in Rot ihre Summe. Rechts: Die Bewegung von $x_i(s)$ und $x_j(s)$ kurz vor und kurz nach den Zusammenstoss. In Blau, die Kraft der elastischen Kollision, die $x_i(s)$ von $x_j(s)$ entfernt.

Sie wird global dargestellt durch den additiven Term $\int_0^t (x_i(s) - x_j(s)) \, dL_{ij}(s)$. Ihre Intensität hängt von der Anzahl und den (zufälligen) Zeitpunkten der Zusammenstösse zwischen i und j ab. Dies rechtfertigt, dass der Integrand ein wachsender, zufälliger Prozess ist, den wir mit $L_{ij}(t)$ bezeichnen und der lokale Zeit des Zusammenstosses genannt wird. Letztere wächst nur, falls sich die zwei Kreisscheiben i und j berühren:

$$\int_0^t \mathbb{1}_{|x_i(s) - x_j(s)| \neq 2} dL_{ij}(s) = 0.$$

Die Anfangsbedingung $L_{ij}(0) = 0$ ist beliebig.

Die Symmetrie $L_{ij} \equiv L_{ji}$ liegt in der Natur des Problems. Ein Zusammenstoss zwischen x_i und x_j hat einen symmetrischen Einfluss auf das Verhalten von x_i und x_j . (In Abbildung 15 sind der blaue und der rosa Pfeil entgegengesetzt.) Da ein Partikel nicht mit sich selbst zusammenstossen kann, gilt $L_{ii} \equiv 0$.

Die Existenz einer mathematischen Lösung des Systemes (*) ist kein einfaches Problem auf Grund der lokalen Zeiten des Zusammenstosses, die selbst Unbekannte sind. Der erste Beweis der Existenz einer solchen Dynamik mit n Kugeln ohne gegenseitige Anziehungskraft (a=0) wurde von Saisho und Tanaka in [13] 1986 gegeben. Die Autorinnen M.F. und S.R. haben diese Methode verbessert und erweitert, um so auch den Fall eines unendlichen Systems mit allgemeiner Interaktion behandeln zu können, siehe [9].

2.2 Stabilisierung gegen quasi-optimalen Packungen

Die Dynamik (*) ist in vielerlei Hinsicht bemerkenswert. Wir bemerken zuerst, dass die augenblickliche Anziehungskraft zwischen Kreisscheiben (bis auf einen Koeffizienten) als Ableitung der quadratischen Energie gesehen werden kann, da

$$a\sum_{j=1}^{n}(x_{j}-x_{i})=-\frac{na}{2}\frac{\partial}{\partial x_{i}}\,\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}).$$

Die Dynamik (*) ist somit eine sogenannte *Gradienten-Dynamik*, von der man bestimmte zeitabhängige Eigenschaften kennt. Insbesondere hat die zweite Autorin in Theorem 3.3 von [7] bewiesen, dass, durch das Festlegen von zufälligen Ausgangspositionen $x_1(0), \ldots$

 $x_n(0)$ durch eine geeignete Verteilung μ_a , die Bewegung der Kreisscheiben ein stationäres Verhalten zeigt; das heisst, dass ihre Verteilung zu jedem Zeitpunkt die gleiche bleibt. Tatsächlich entspricht μ_a dem gleichmässigen Mass der Menge der Konfigurationen von n Kreisscheiben, durch den Dichtefaktor $\exp\left(-na \, \mathcal{E}_n(\mathbf{x})\right)$ verzerrt. In anderen Worten: Die zufällige Position der Kreisscheiben der Verteilung μ_a ist ein Gleichgewichtszustand der Dynamik (*).

Nun stellen sich uns zwei Fragen, die mit dem Zeitparameter t und mit der Anziehungskraft a verbunden sind.

- Können wir davon ausgehen, dass, wenn wir die Anfangspositionen der Kreisscheiben deterministisch festlegen $\mathbf{x}(0) = \{x_1(0), \dots, x_n(0)\}$, das System nach einer langen Zeit t den oben beschriebenen Gleichgewichtszustand annimmt? Anders gesagt, gibt es eine Stabilisierung der zufälligen Dynamik der Kreisscheiben zu der Wahrscheinlichkeitsverteilung μ_a ?
- Die für die Verteilung μ_a wahrscheinlichsten Konfigurationen x sind diejenigen, für die die Dichte e^{-naε_n(x)} maximal ist, das heisst sie sind Elemente von C_{min} mit einer minimalen Energie ε_n(x). Können wir davon ausgehen, dass wir die Konfigurationen von C_{min} erreichen, in dem wir den Anziehungskoeffizienten erhöhen, so dass die Wahrscheinlichkeit jeder suboptimalen Konfiguration vernachlässigbar wird?

Wir beantworten beide Fragen positiv:

Wir legen eine beliebige anfängliche Konfiguration eines Systems mit n Kreisscheiben fest. Wir können dann einen ausreichend grossen Anziehungskoeffizienten a wählen, so dass nach der Evolution während ausreichend langer Zeit gemäss der Dynamik (*) sich das System mit einer beliebig grossen Wahrscheinlichkeit in einer Konfiguration befindet, die beliebig nahe an den optimalen Konfigurationen ist. Dies wird wie folgt formalisiert. Der Abstand \mathbf{d} , der dort vorkommt, wird durch den Unterschied zwischen der Energie der Konfiguration $\mathbf{x}(t)$ und der minimalen Energie gegeben.

Satz 2.1. Sei $\mathbf{x}(0)$ eine beliebige Anfangskonfiguration. Für alle ε , $\eta > 0$ existiert ein A > 0 und ein T > 0, so dass für alle a > A und t > T,

$$\mathbb{P}\big(\exists\,\mathbf{x}_{\min}\in\mathcal{C}_{\min},\;\mathbf{d}(\mathbf{x}(t),\mathbf{x}_{\min})\leq\eta\big)\geq 1-\varepsilon.$$

Beweis. Wir erweitern die Menge C_{\min} ein wenig, in dem wir auch η-optimale Konfigurationen zulassen: $C_{\min}^{\eta} := \{ \mathbf{x} : \mathcal{E}_n(\mathbf{x}) \leq \underline{\mathcal{E}}_n + \eta \}$ wobei $\underline{\mathcal{E}}_n := \mathcal{E}_n(\mathbf{x}_{\min})$.

$$\mu_{a}((\mathcal{C}_{\min}^{\eta})^{c}) = \frac{\int e^{-\frac{an}{2}\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x})} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) > \underline{\mathcal{E}}_{n} + \eta} d\mathbf{x}}{\int e^{-\frac{a}{2}n\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}} \leq \frac{\int e^{-\frac{an}{2}(\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) - \underline{\mathcal{E}}_{n} - \eta)} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) > \underline{\mathcal{E}}_{n} + \eta} d\mathbf{x}}{\int e^{-\frac{an}{2}(\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) - \underline{\mathcal{E}}_{n} - \eta)} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) \leq \underline{\mathcal{E}}_{n} + \eta} d\mathbf{x}}$$
$$\leq \frac{1}{\int \mathbb{1}_{\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) \leq \underline{\mathcal{E}}_{n} + \eta} d\mathbf{x}} \int e^{-\frac{an}{2}(\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) - \underline{\mathcal{E}}_{n} - \eta)} \mathbb{1}_{\mathcal{E}_{n}(\mathbf{x}) > \underline{\mathcal{E}}_{n} + \eta} d\mathbf{x}.$$

Dies geht nach 0 wenn a nach unendlich geht. Daraus folgt, dass für ein ausreichend grosses a die Wahrscheihnlichkeit von C_{\min}^{η} unter μ_a sich 1 mehr und mehr nähert.

Andererseits konvergiert für eine Anfangsposition $\mathbf{x}(0)$ und für jede festgelegte Anziehungskraft a die Verteilung des Systems von n Kreisscheiben zur Zeit t gegen μ_a , wenn t gegen unendlich geht. Diese intuitive (aber sehr schwierig zu beweisende) Stabilisierung wurde in [2] für n=3 Kreisscheiben gezeigt. Die Verallgemeinerung für eine beliebige Anzahl n von Kreisscheiben ist das Thema des Artikels [10], der gerade von den Autorinnen M.F. und S.R. geschrieben wird. Es gilt also

$$\lim_{t \to +\infty} \mathbb{P}(\mathbf{x}(t) \in \mathcal{C}_{\min}^{\eta}) = \mu_a(\mathcal{C}_{\min}^{\eta}).$$

Man erhält das endgültige Resultat in dem man die Stetigkeit der Energie verwendet. Diese impliziert, dass die Menge C_{\min}^{η} der η -optimalen Konfigurationen sich C_{\min} nähert, wenn η nach 0 geht.

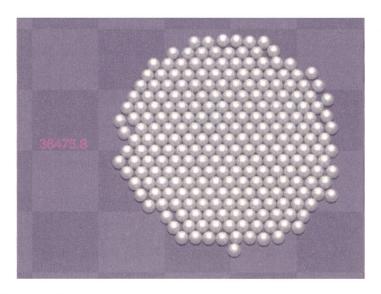


Abbildung 16 Form einer fast-optimalen Konfiguration aus n = 250 Kreisscheiben

Der*Die Leser*in, der*die an der dynamischen Visualisierung der Konvergenz interessiert ist, ist eingeladen, die Webseite

http://mfradon.plil.fr/penny_packing_simulation.html zu besuchen, auf der Simulationen unsere Ergebnisse illustrieren.

Danksagung. Die erste Autorin absolvierte im Mai und Juni 2016 ein Praktikum im mathematischen Institut Paul Painlevé der Université de Lille im Rahmen des Studienvorbereitungs- und Orientierungsjahres ProTechnicale. Einige der vorgestellten Resultate dieses Artikels sind die Ergebnisse dieses Praktikums. Der Forschungsgruppe für Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik wird an dieser Stelle für den herzlichen Empfang gedankt.

Literatur

- K. Böröczky: Finite packing and covering. Cambridge tracts in mathematics 154, Cambridge University Press (2004).
- [2] P. Cattiaux, M. Fradon, A.M. Kulik und S. Rœlly: Longtime behaviour of stochastic hard ball systems. Bernoulli 22-2 (2016), 681–710

- [3] T.Y. Chow: Penny-packings with minimal second moments. Combinatorica 15 (1995), 151–158.
- [4] J.H. Conway und N.J.A. Sloane: Sphere Packings, Lattices and Groups *Grundlehren der math. Wiss.* 290, Springer-Verlag, Berlin-New-York third ed. (1993).
- [5] J.H. Conway und N.J.A. Sloane: A fast encoding method for lattice codes and quantizers. *IEEE Transactions on Information Theory* **29-6** (1983), 820–824.
- [6] P. Diaconis, G. Lebeau und L. Michel: Geometric analysis for the Metropolis Algorithm on Lipschitz Domains. *Inventiones mathematicae* 185 (2011), 239–281.
- [7] M. Fradon: Brownian dynamics of globules. Electronic Journal of Probability 15-6 (2010), 142–161.
- [8] M. Fradon und S. Rœlly: Infinitely many Brownian globules with Brownian radii. Stochastics and Dynamics 10-4 (2010), 591–612.
- [9] M. Fradon und S. Rœlly: Infinite system of Brownian balls with interaction: the non-reversible case. *ESAIM: Probability and Statistics* **11** (2007), 55–79.
- [10] M. Fradon und S. Rœlly: Brownian dynamics as approximation of the finite packing problem. *Wird zurzeit verfasst* (2018).
- [11] R.L. Graham und N.J.A. Sloane: Penny-packing and two-dimensional codes. *Discrete and Computational Geometry* **5** (1990), 1–11.
- [12] J. Karout, E. Agrell, K. Szczerba und M. Karlsson: Optimizing constellations for single-subcarrier intensity-modulated optical systems. *IEEE Transactions on Information Theory* 58-7 (2012), 4645–4659.
- [13] Y. Saisho und H. Tanaka: Stochastic Differential Equations for Mutually Reflecting Brownian Balls. *Osaka Journal of Mathematics* **23** (1986), 725–740.
- [14] N.J.A. Sloane, R.H. Hardin, T.D.S. Duff und J.H. Conway: Minimal-Energy Clusters of Hard Spheres. Discrete and Computational Geometry 14 (1995), 237–259.
- [15] N.J.A. Sloane und B.K. Teo: Theta series and magic numbers for close-packed spherical clusters. *Journal of Chemical Physics* 83 (1985), 6520–6534.
- [16] A. H. Temesvári: Távolságok hatványösszegének extrémumáról. (Über die extremalen Werten der Summe Abstandpotenzen.) Matematikai Lapok 25 (1974), 329–342 (in ungarischer Sprache).

Charlotte Dombrowsky ETH Zürich Rämistrasse 101 CH-8092 Zürich, Schweiz

CII-6092 Zuricii, Schweiz

e-mail: ch.dombrowsky@gmx.de

Myriam Fradon
U.F.R. de Mathématiques
CNRS UMR 8524
Université Lille 1
F-59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France
e-mail: Myriam. Fradon@univ-lille1.fr

Sylvie Rœlly Institut für Mathematik der Universität Potsdam Karl-Liebknecht-Str. 24–25 D-14476 Potsdam OT Golm, Deutschland e-mail: roelly@math.uni-potsdam.de