

Keine Wurstkatastrophe

In der Jännerausgabe von Spektrum der Wissenschaft (Heft 1.19) auf S.77 ist ein Artikel von Florian Freistetter mit dem Titel die „Wurstkatastrophe“ erschienen. Im Artikel wird die sogenannte Wurstpackung von Kugeln behandelt, wobei darunter eine lineare Kugelpackung, also die Anordnung der Kugeln in einer Linie zu verstehen ist. Das Volumen einer solchen Wurstpackung kann man sich vorstellen als das Volumen, das eine Folie umschließt in der die Kugeln eingeschweißt wurden. Als Formel für das Volumen einer Wurstpackung ergibt sich dann:

$$V_w = \frac{4\pi r^3}{3} + (n - 1) \times 2\pi r^3$$

Dabei ist n die Anzahl der Kugeln in der Packung und r der Radius der Kugeln. Der erste Term $\frac{4\pi r^3}{3}$ steht für die beiden Halbkugeln an den Enden der Wurst. Der Term $2\pi r^3$ bildet das Volumen eines Zylinders der eine Kugel umhüllen kann.

Im Artikel wird dargelegt, dass für eine geringe Kugelanzahl im dreidimensionalen Raum die eindimensionale Wurstpackung weniger Volumen einnimmt als eine dreidimensionale Clusterpackung. Dagegen eignet sich laut Spektrum-Artikel bei 56 Kugeln eine sogenannte Clusterpackung besser, bei der die Kugeln nicht alle auf einer Geraden oder in einer Ebene liegen – d.h. ihr Volumen ist kleiner als das einer Wurstpackung. Allerdings wisse man laut Artikel nicht wie diese Packung im Detail aussehe. Weiß man das wirklich nicht?

Jedenfalls gibt es zumindest zwei mögliche Formen für eine solche Clusterpackung mit 56 Kugeln, die weniger Hüllvolumen einnehmen als eine Wurstpackung mit 56 Kugeln. Dazu nehme man ein sogenanntes Parallelotop mit jeweils 4 Kugelschichten entlang einer Kante (siehe Bild 1 unten). Das Parallelotop beinhaltet also $4 \times 4 \times 4 = 64$ Kugeln und das Hüllvolumen dieses Parallelotops ist größer als das einer Wurstpackung mit 64 Kugeln. Die (Mittelpunkte der) Kugeln im Bild 1 hat man sich dabei als die Mittelpunkte größerer Kugeln, die sich jeweils im Mittelpunkt der Verbindungsstäbe berühren, vorzustellen. Das dargestellte Parallelotop hat zwei spitzwinkelige und sechs stumpfwinkelige Ecken.

Schneidet man an den beiden spitzwinkeligen Ecken jeweils einen Tetraeder, bestehend aus vier Kugeln weg, so kehrt sich das Verhältnis um. Plötzlich ist das Volumen der Clusterhülle für die verbleibenden 56 Kugeln kleiner als das einer Wurstpackung mit 56 Kugeln. Schneidet man vom verbliebenen Körper (siehe Bild 2) allerdings an den ehemals spitzen Ecken eine weitere Schicht mit jeweils 6 Kugeln entlang der gelben Linie weg, so verbleibt ein Oktaeder aus 44 Kugeln und das Verhältnis kehrt sich ein weiteres mal um. Das Hüllvolumen für den Oktaeder aus 44 Kugeln ist größer als das einer Wurstpackung mit 44 Kugeln. Soweit eine mögliche Form der optimaleren Clusterpackung.

Zur Erzeugung der zweiten optimaleren Clusterpackung nehme man einen Tetraederstumpf mit 7 Kugeln entlang einer Basiskante, bei dem ein Tetraeder mit 10 Kugeln an der Spitze entfernt wurde (siehe Bild 3). Der ursprüngliche Tetraeder bestand aus 84 Kugeln und sein Hüllvolumen war größer als das Volumen einer Wurstpackung mit 84 Kugeln. An dem Tetraederstumpf mit 74 Kugeln wird weitergeschnipst bis ein Körper mit 56 Kugeln entsteht. Zuerst entfernt man an einer weiteren Spitze einen Tetraeder mit 10 Kugeln, dann an den verbliebenen zwei Spitzen jeweils einen Tetraeder aus 4 Kugeln (siehe die drei orangen Schnittlinien in Bild 3). Das Ergebnis ist ein Körper mit 56 Kugeln, dessen Hüllvolumen ebenfalls kleiner ist als das Hüllvolumen einer Wurstpackung mit 56 Kugeln (siehe Bild 4). Der Unterschied zwischen den zwei Körpern in Bild 2 und 4 ist der, dass beim ersteren die beiden Tetraederstümpfe aus jeweils 6 Kugeln an zwei räumlich gegenüberliegenden Flächen des zentralen Oktaeders platziert sind und beim letzteren auf zwei Flächen des Oktaeders, die sich an einer Spitze treffen, aber keine gemeinsame Kante haben. Der Betrag des Hüllvolumens beider Körper ist aber trotz ihrer unterschiedlichen Gestalt exakt gleich groß.

Wer die Herleitungen dazu kennen will, muss einen Rechenstift zur Hand nehmen und die Ausführungen nach den Bildern 1 bis 4 nachvollziehen.

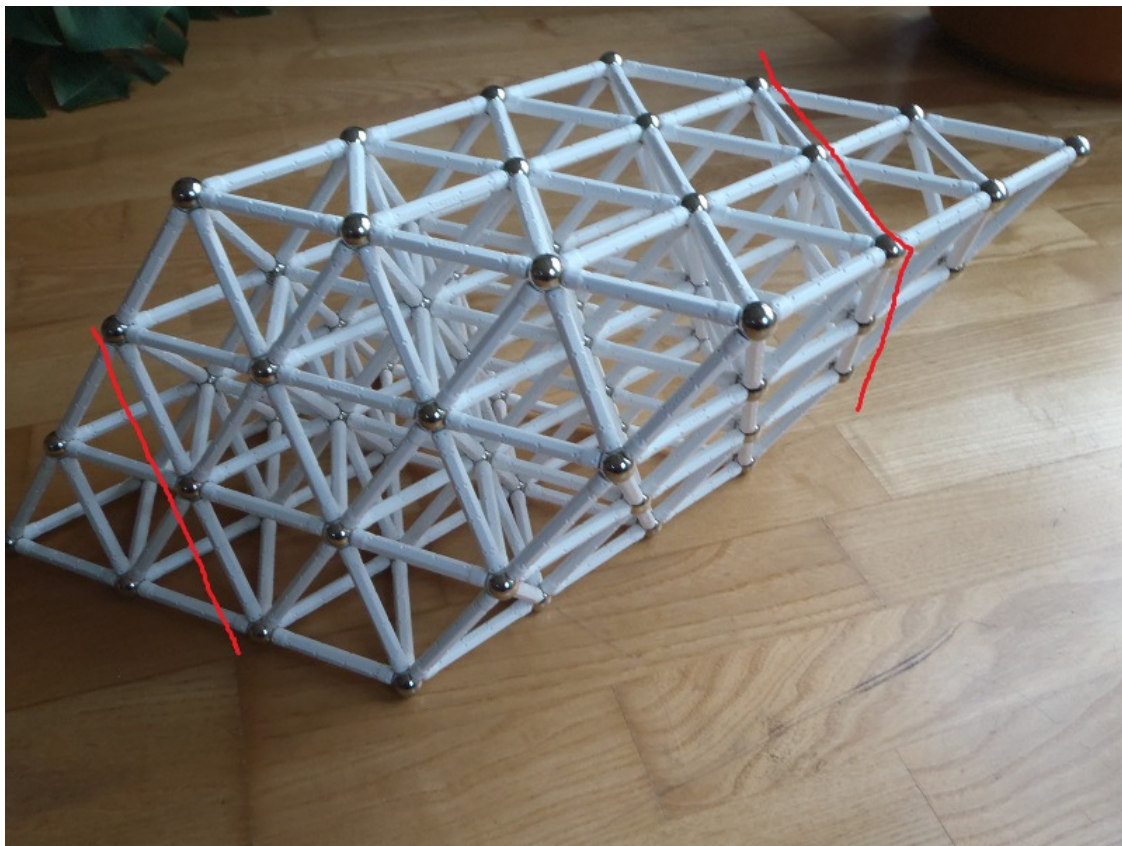


Bild 1: Parallelotop mit jeweils 4 Kugelschichten entlang einer Kante.

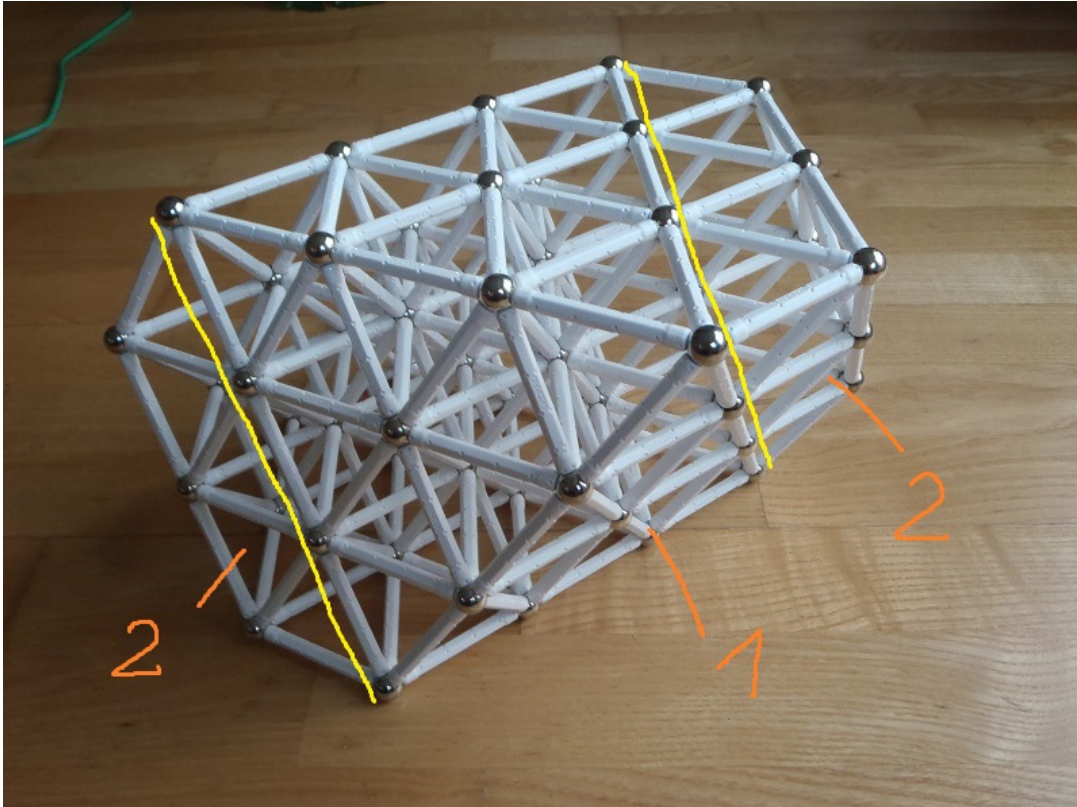


Bild 2: Körper 1 ist ein Oktaeder mit jeweils 4 Kugeln entlang einer Kante. Körper 2 ist jeweils ein Tetraederstumpf aus 6 Kugeln.

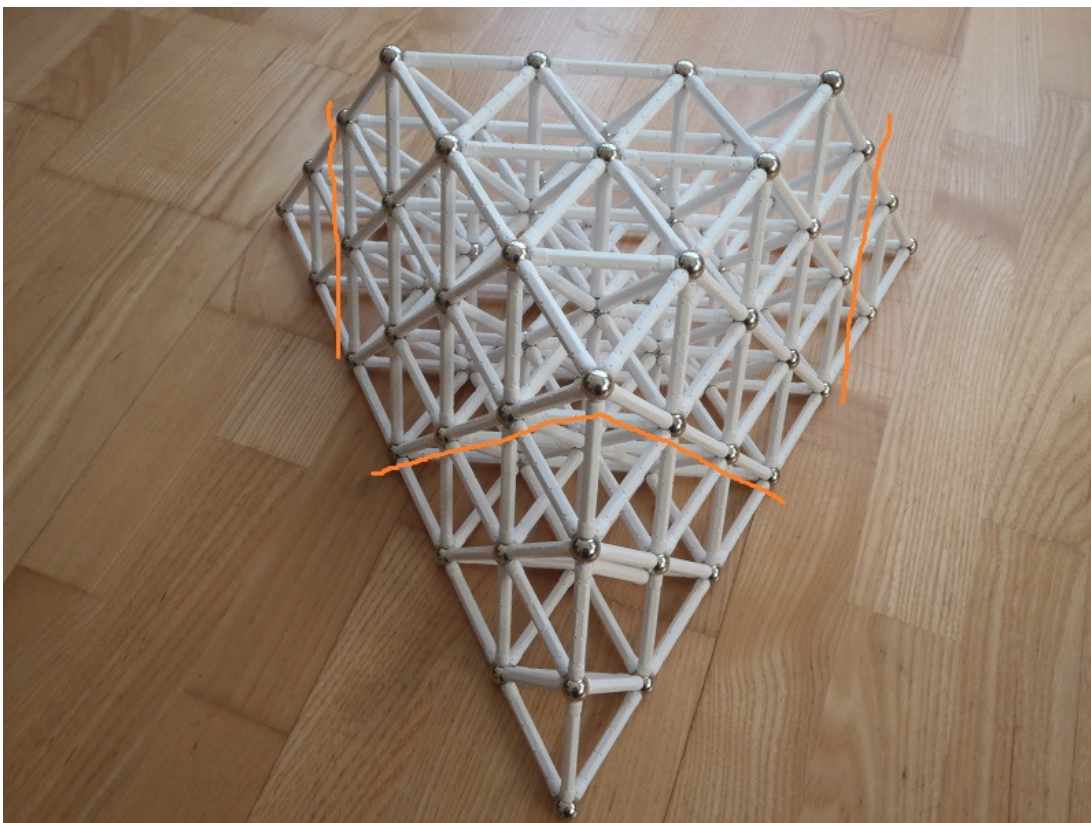


Bild 3: Tetraederstumpf mit 7 Kugeln entlang einer Basiskante, bei dem ein Tetraeder mit 10 Kugeln an der Spitze entfernt wurde.

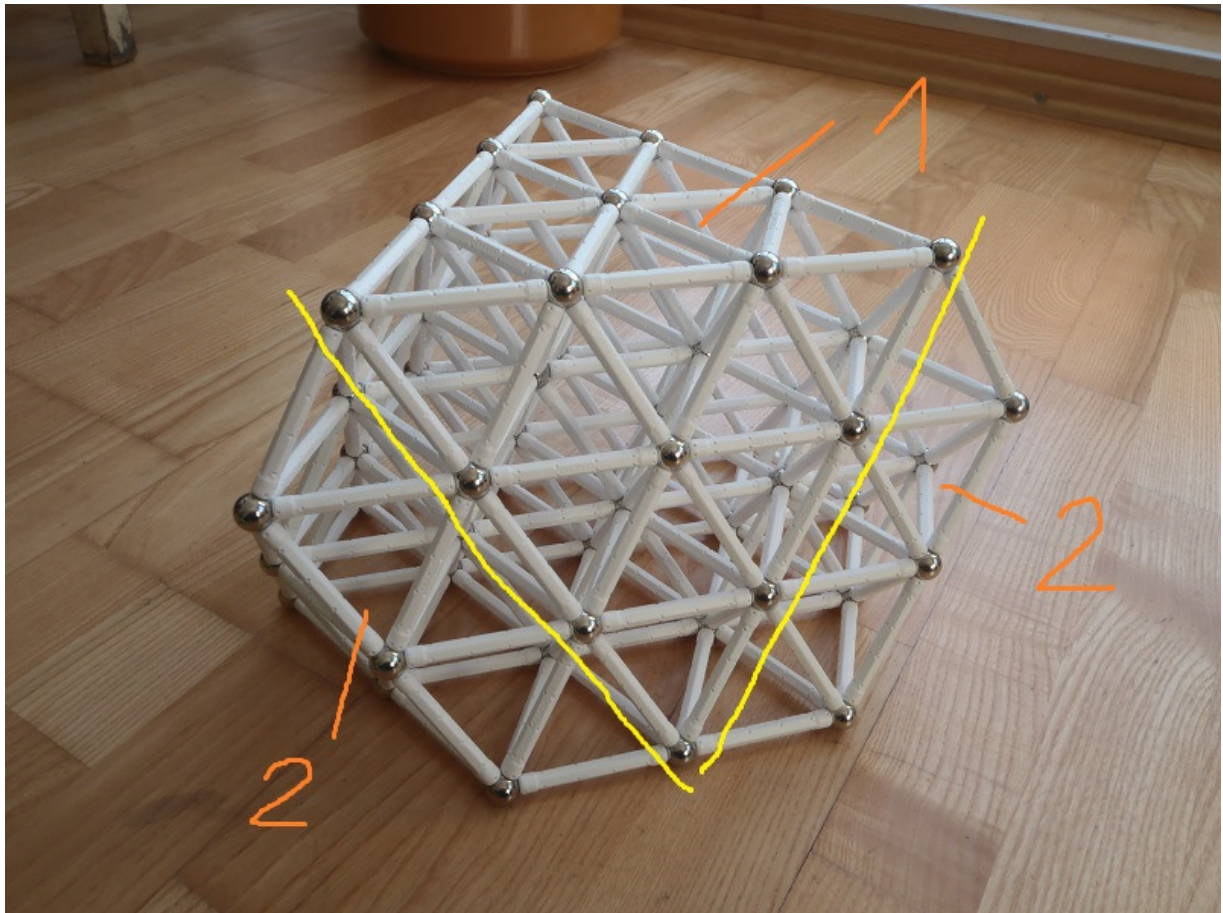


Bild 4: Körper 1 ist ein Oktaeder mit jeweils 4 Kugeln entlang einer Kante. Körper 2 ist jeweils Tetraederstumpf aus 6 Kugeln.

Um das Hüllvolumen einer Clusterpackung berechnen zu können, ist es notwendig sich vorher auf eine konkrete Kategorie von Kugelpackungen festzulegen. Im gegenständlichen Fall, bei dem minimale Hüllvolumina gesucht werden, erscheint es zweckmäßig sich auf dichteste, konvexe Kugelpackungen zu konzentrieren. Bei konkaven nach innen gewölbten Kugelpackungen würden sich nicht genutzte Hohlräume und somit ungenutzte Volumina unter der Hüllfläche ergeben.

Die dichteste dreidimensionale Kugelpackung ist jene bei der jede Kugel von 12 benachbarten Kugeln berührt wird. Diese Art der Kugelpackung kann durch das für die Bilder verwendete Magnetspiel gut repräsentiert werden. Man muss sich dabei nur die (Mittelpunkte der) Kugeln im Bild als die Mittelpunkte größerer Kugeln, die sich jeweils im Mittelpunkt der Verbindungsstäbe berühren, vorstellen.

Was ist eigentlich das am wenigsten komplizierte Element, welches die dichteste Kugelpackung repräsentiert und mit dem sich der dreidimensionale Raum lückenlos füllen lässt? Ich würde behaupten ein Parallelotop mit 2 Kugeln entlang einer Kante (siehe Bild 5).

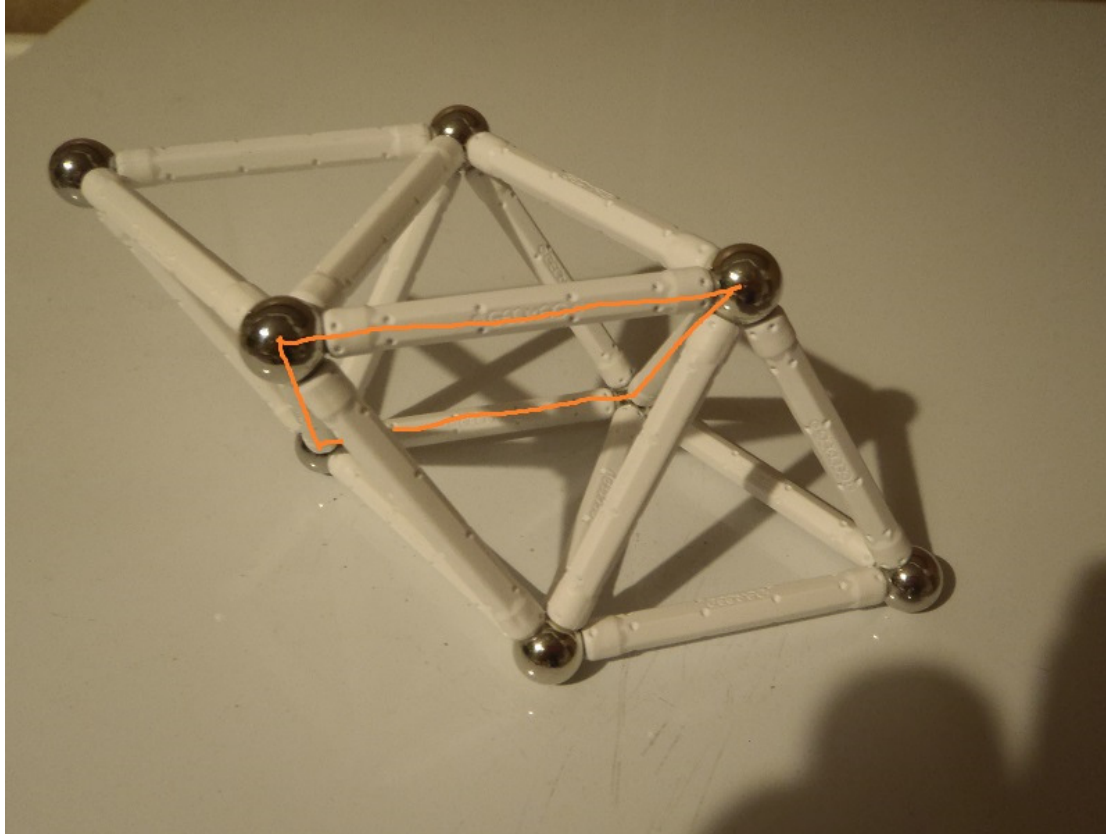


Bild 5: elementares Parallelotop mit 2 Kugeln entlang einer Kante

Das dargestellte Parallelotop kann natürlich weiter zerlegt werden, nämlich in zwei Tetraeder und einen Oktaeder oder zwei Tetraeder und zwei quadratische Pyramiden, allerdings hat man dann nicht mehr nur ein einheitliches elementares Element sondern zwei. So gesehen wäre das kleinste einheitliche elementare Element eine quadratische Pyramide mit aufgesetztem Tetraeder, welches man gewinnt, wenn man das im Bild dargestellte Parallelotop entlang der orangen Linien in zwei solche Elemente zerschneidet. Allerdings muss dann bei der Befüllung des Raumes dieses Pyramiden/Tetraeder-Element abwechselnd mit verschiedenen Orientierungen zusammengebaut werden, was die Sache verkompliziert, während die elementaren Parallelotope mit gleicher Orientierung, Schicht für Schicht zusammengebaut werden können (siehe Bild 6). In Bild 6 müsste man genaugenommen noch Magnetstäbe zwischen die Doppelkugelschichten geben, sodass auch diese wie die übrigen Kugeln denselben Abstand voneinander haben.

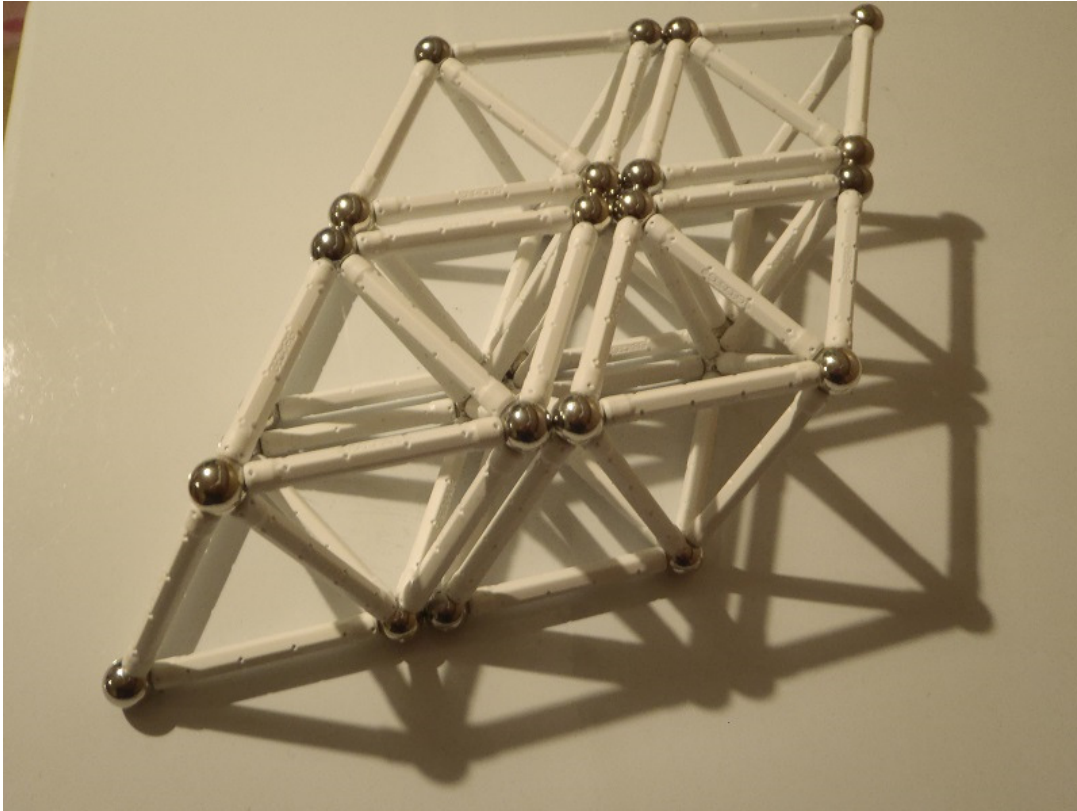


Bild 6: elementare Parallelotope vom Typ Bild 5 füllen lückenlos den Raum

Nachdem wir also ein passendes Grundelement für die dichteste Kugelpackung im Raum gefunden haben, wollen wir versuchen ein Parallelotop mit einer Kugelanzahl von 56 zusammenzubauen, dessen Hüllvolumen möglichst klein ist. Dafür kommen zunächst einmal Parallelotope in Frage deren Kugelzahl pro Kante gleich ist, also gestauchte Würfel, wie jener in Bild 5. Hat ein Parallelotop 3 Kugeln pro Kante, so besteht es aus insgesamt $3 \times 3 \times 3 = 27$ Kugeln. Ein $4 \times 4 \times 4$ Parallelotop enthält 64 Kugeln, also bereits zu viele.

Ein $4 \times 4 \times 3$ Parallelotop enthält nur 48 Kugeln, also zu wenige. Ein $7 \times 4 \times 2$ Parallelotop enthält zwar 56 Kugeln aber das Oberflächen/Volumenverhältnis ist bereits weit weg vom optimalen eines gestauchten Würfels. Werden zwei unterschiedliche Parallelotope zusammengebaut z.B. ein $4 \times 4 \times 3$ mit 48 Kugeln und ein $2 \times 2 \times 2$ mit 8 Kugeln, dann ergibt das zwar ein Gebilde mit 56 Kugeln, aber dieses ist nicht mehr zur Gänze konvex, was genau so wenig optimal ist. Verbleibt die naheliegende Idee ein $4 \times 4 \times 4$ Parallelotop so zurechtzuschneiden, dass es nur mehr 56 Kugeln enthält und trotzdem noch vollständig konvex ist.

Wie man anhand von Bild 6 erkennen kann, eignen sich nur die beiden spitzen Ecken eines Parallelotops zum Zurechtschneiden. Sobald man nämlich Kugeln an einer der 6 stumpfen Ecken entfernt wird die Sache konkav. Also liegt es nahe, an den beiden Ecken eines $4 \times 4 \times 4$ Parallelotops jeweils einen Tetraeder aus 4 Kugeln zu entfernen. Es verbleibt ein Gebilde mit 56 Kugeln, dessen Oberflächen/Volumenverhältnis etwas besser ist, als das des $4 \times 4 \times 4$

Parallelotops und genau darauf kommt es an: die Wurstpackung kann jetzt unterboten werden.

So und jetzt zur Berechnung des Hüllvolumens! Das Parallelotop in Bild 5, welches von den Mittelpunkten der 8 Kugeln gebildet wird, wird von 6 Parallelogrammen gleicher Fläche begrenzt. Die Fläche eines solchen Parallelogrammes ergibt sich aus Seitenlänge mal Höhe eines gleichseitigen Dreiecks ($h = \frac{\sqrt{3}}{2}a$): $A = ah = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$.

Das Volumen des Parallelotops ergibt sich aus Parallelogrammfläche mal Höhe eines Tetraeders ($h_t = \frac{\sqrt{6}}{3}a$): $V = Ah_t = \frac{\sqrt{2}}{2}a^3$ (V1).

Um das gesamte Hüllvolumen zu berechnen sind noch folgende Komponenten zum Parallelotopvolumen zu addieren:

Das Volumen von sechs Prismen mit der Grundfläche des Parallelogramms und Höhe eines Kugelradius r: $6V_{pr} = 6Ar = 3\sqrt{3}ra^2$ (V2).

Weiters 6 abgerundete Kanten in Form eines Zylindersektors der Länge a und mit einem Sektorwinkel der 180° minus dem Flächenwinkel eines Tetraeders von $70,53^\circ = 109,47^\circ$ beträgt sowie 6 abgerundete Kanten in Form eines Zylindersektors der Länge a und mit einem Sektorwinkel der 180° minus dem Flächenwinkel eines Oktaeders von $109,47^\circ = 70,53^\circ$ beträgt. Da $6 \times 70,53^\circ + 6 \times 109,47^\circ = 3 \times 360^\circ$ ist, ergeben die Kanten in Summe 3 volle Zylinder der Länge a und mit Kugelradius r. Das Volumen der drei Zylinder beträgt: $3V_z = 3\pi ar^2$ (V3).

Weiters 8 abgerundete Ecken in Form eines dreikantigen Kugelteils das vom Kugelmittelpunkt und den Ecken eines sphärischen Dreiecks auf der Kugel gebildet wird. Die drei Großkreisbögen des jeweiligen sphärischen Dreiecks weisen vom Kugelmittelpunkt aus gesehen denselben Öffnungswinkel auf wie der Sektorwinkel des angrenzenden Zylindersektors. Bei den zwei spitzen Ecken des Parallelotops sind dies $3 \times 109,47^\circ$. Mit Hilfe des Seiten-Cosinus-Satzes der sphärischen Trigonometrie können daraus die Winkel des sphärischen Dreiecks auf der Kugel zu $3 \times 120^\circ = 3 \times 2\pi/3$ berechnet werden. Die Fläche des sphärischen Dreiecks ist dann $A_\Delta = (\alpha + \beta + \gamma - \pi)r^2$, wenn die sphärischen Winkel im Bogenmaß eingesetzt werden. Bei $\alpha = \beta = \gamma = 2\pi/3$ folgt $A_\Delta = \pi r^2$ oder ein Viertel einer Kugeloberfläche. Das ergibt für die zwei abgerundeten spitzen Ecken des Parallelotops eine halbe Kugeloberfläche.

Der selbe Berechnungsvorgang für die 6 stumpfen Ecken mit den Großkreisbögen von $2 \times 70,53^\circ$ und $1 \times 109,47^\circ$ ergibt für die Winkel des sphärischen Dreiecks $2 \times \pi/3$ und $1 \times 2\pi/3$. Mit der Flächenformel ergibt sich die Fläche von $\pi/3 r^2$ für eine abgerundete

stumpfe Ecke des Parallelotops. Für sechs stumpfe Ecken ergibt das wieder eine halbe Kugeloberfläche. Für alle 8 abgerundeten Ecken (spitz und stumpf) des Parallelotops ergibt das in Summe exakt eine Kugeloberfläche von $4\pi r^2$. Diese Summe von einer Kugeloberfläche ergibt sich auch für die abgerundeten Ecken anderer Körper, wie des Tetraeders und des Oktaeders und ist vermutlich allgemein gültig für alle konvexen Körper dieser Art.

Wenn die Flächen der abgerundeten Ecken exakt einer Kugeloberfläche entsprechen, dann entspricht die Summe der Volumina der dreikantigen Kugelteile die vom jeweiligen Kugelmittelpunkt und den jeweiligen Ecken des sphärischen Dreiecks auf der Kugel gebildet werden exakt einem Kugelvolumen $\frac{4\pi}{3} r^3$ (V4).

Damit haben wir alle Bestandteile um das Hüllvolumens eines $4 \times 4 \times 4$ Parallelotops mit 64 Kugeln berechnen zu können. Die Kantenlänge a des $4 \times 4 \times 4$ Parallelotops beträgt 6 Kugelradien r womit sich das Volumen (Summe von V1 bis V4) von $400,53 r^3$ ergibt. Im Vergleich dazu beträgt das Hüllvolumen einer Wurst mit 64 Kugeln $400,03 r^3$.

Schneidet man an den beiden spitzwinkeligen Ecken jeweils einen Tetraeder, bestehend aus vier Kugeln weg, so verbleibt das gesuchte Objekt mit 56 Kugeln. Dazu sind vom Volumen des $4 \times 4 \times 4$ Parallelotops folgende Bestandteile abzuziehen:

2 Tetraedervolumen $2V_t = 2 * \frac{a^3}{12} \sqrt{2}$ (A1) der Kantenlänge $4r$.

2x2 Dreiecksprismen $4V_{\Delta p} = 4 * \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} r$ (A2) der Kantenlänge $4r$ und der Höhe r , weil beim Wegschneiden eines Tetraeders 3 Dreiecksprismen wegfallen und an der Schnittstelle ein neues hinzukommt, macht netto zwei weniger.

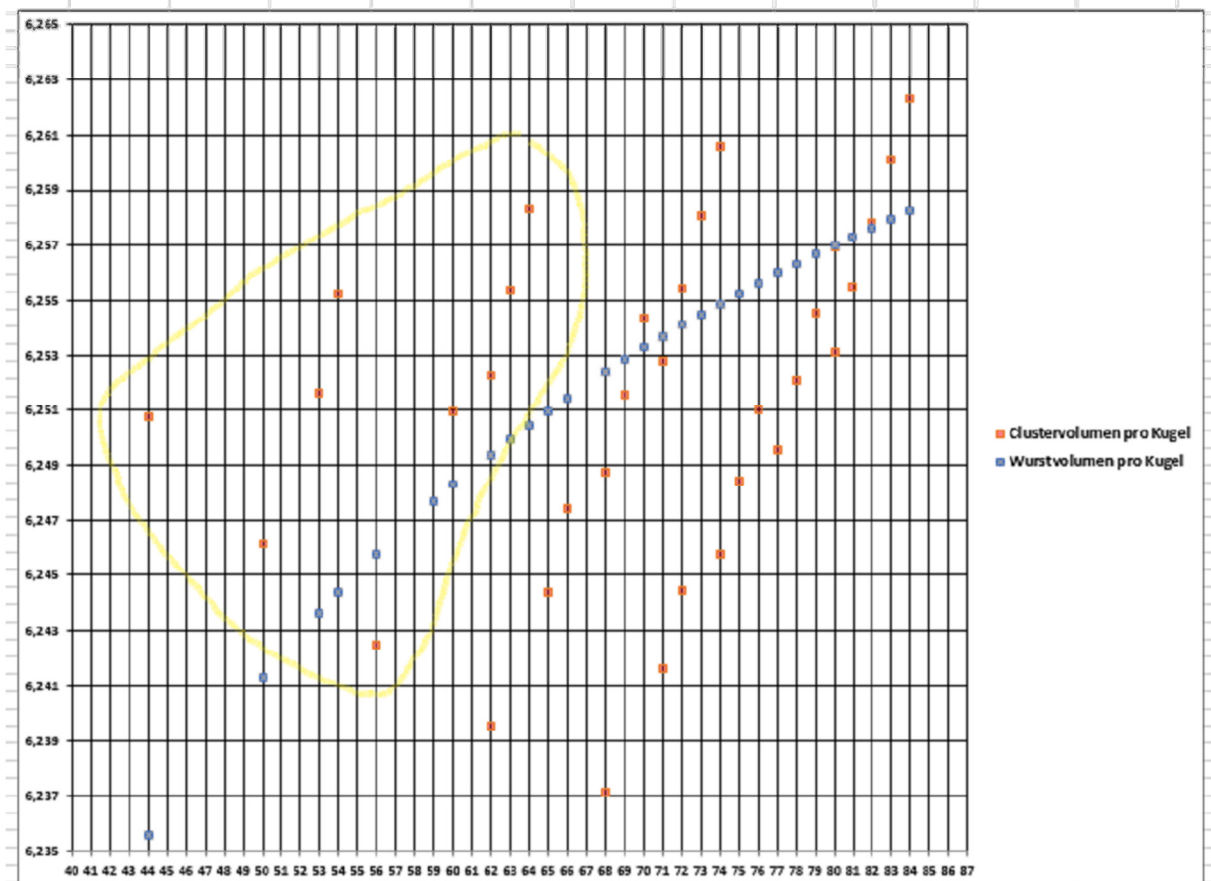
2x3-fach der Unterschied einer abgerundeten Spitzkante eines Tetraeders ($109,47^\circ$ Rundung) zu einer abgerundeten Stumpfkante eines Oktaeders ($70,53^\circ$ Rundung) gibt netto einen Zylindersektor mit $233,64^\circ$ ($6 \times 38,94^\circ$) und der Länge $a=4r$ als Abzug ($V_{zs} = \frac{233,64^\circ}{360^\circ} \pi r^2 a$ (A3)). Beim Wegschneiden eines Tetraeders fallen 3 spitze Kanten weg, dafür entstehen 3 neue stumpfe Kanten an der Schnittstelle.

Mit den Abzügen A1 bis A3 ergibt sich das Volumen des Parallelotopstumpfes mit 56 Kugeln von $349,58 r^3$. Im Vergleich dazu ist das Hüllvolumen einer Wurst mit 56 Kugeln mit $349,76 r^3$ etwas größer.

Will man nun wissen, wie sich das Verhältnis Clustervolumen zu Wurstvolumen bei anderen Kugelmengen verhält, so muss man ein $4 \times 4 \times 4$ Parallelotop oder einen Tetraeder mit 7 Kugeln entlang einer Kante in unterschiedlicher Weise an den spitzen Ecken zurechtschneiden. Am besten führt man die nötigen Volumenberechnungen nach oben beschriebener Weise mit Hilfe eines Tabellenkalkulationsprogrammes durch.

Das folgende Diagramm zeigt das Ergebnis einer solchen Kalkulation. Die blaue Punktmenge im Diagramm zeigt das spezifische Hüllvolumen pro Kugel (Hüllvolumen gesamt durch Kugelanzahl) einer Wurstpäckung. Klarerweise steigt dieses geringfügig mit der Kugelanzahl (auf der Abszisse aufgetragen), weil die beiden Halbkugeln an den Enden der Wurst sich immer weniger auswirken.

Diagramm: Clustervolumen versus Wurstvolumen



Die rote Punktmenge insgesamt stellt das spezifische Hüllvolumen der verschiedenen Clusterpackungen dar, die man beim Zurechtschneiden eines Tetraeders mit 7 Kugeln entlang einer Kante erhält. Der Punkt mit 44 Kugeln repräsentiert den Oktaeder, den man erhält, wenn pro Tetraederecke 10 Kugeln entfernt werden. Rechts dieses Punktes bilden die übrigen roten Punkte bemerkenswerterweise beinahe 4 schräg nach oben laufende Parallelen, die jeweils ein „Schnittmuster“ repräsentieren.

Die dem Punkt am nächsten liegende Linie aus drei Punkten erhält man indem an drei Ecken des Tetraeders je 10 Kugeln entfernt und an der verbleibenden Ecke 0, 1 oder 4 Kugeln.

Die nächste Linie entsteht, wenn man an zwei Ecken 10 Kugeln entfernt und an den restlichen zwei Ecken je 0, 1 oder 4 Kugeln (6 mögliche Varianten). Bei 59 Kugeln liegt das Clustervolumen mit $368,611 r^3$ so knapp unter dem Wurstvolumen von $368,614 r^3$, dass der blaue Punkt in der Graphik den roten verdeckt und nur fünf rote zu sehen sind.

Die nächste Linie entsteht, wenn man an einer Ecke 10 Kugeln entfernt und an den restlichen drei Ecken je 0, 1 oder 4 Kugeln (10 mögliche Varianten).

Die Linie ganz rechts entsteht, wenn man an keiner Ecke 10 Kugeln entfernt, sondern nur je 0, 1 oder 4 Kugeln (15 mögliche Varianten). Auch hier wird ein roter Punkt bei 80 Kugeln (es gibt zwei mögliche Optionen mit 80 Kugeln, aber unterschiedlichem Volumen: $84-1 \times 4$ Kugeln oder $84-4 \times 1$ Kugel) durch einen blauen verdeckt (Clustervolumen zu Wurstvolumen: $500,557 r^3$ zu $500,560 r^3$). Bei 82 Kugeln ist das Clustervolumen etwas größer und der rote Punkt gerade noch sichtbar.

Insgesamt gibt es also $1+3+6+10+15 = 35$ Optionen einen Tetraeder mit 84 Kugeln zurechtzuschneiden, bis ein Oktaeder mit 44 Kugeln entsteht.

Es gibt aber nur 10 Optionen ein Parallelotop aus 64 Kugeln bis zu einem Oktaeder mit 44 Kugeln zu reduzieren (eine davon bei 59 Kugeln ist verdeckt). Diese 10 Optionen sind mit einer gelben Linie umrandet. Die Volumina dieser 10 Optionen sind exakt ident mit jenen der Tetraederstümpfe mit gleicher Kugelzahl, obwohl die räumliche Anordnung der Tetraederstümpfe an der Oktaederoberfläche nicht dieselbe ist (vergleiche dazu Bild 2 mit Bild 4). Sind die roten Punkte unter der blauen Linie, die einzigen Clustervarianten die die Wurstopackung unterbieten? Bei weitem nicht:

Jedes Parallelotop mit mehr als 4 Kugeln pro Kante (ab $5 \times 5 \times 5$ Kugeln) schafft dies, genauso wie jeder Tetraeder mit mehr als 7 Kugeln pro Kante und zwar ohne, dass man seine Ecken beschneidet. Bei Oktaedern passiert das bereits ab 5 Kugeln pro Kante, was einem Oktaeder mit 85 Kugeln entspricht. Auch beim Kuboktaeder geschieht dies ab 5 Kugeln pro Kante, was aber bereits einer Menge von 309 Kugeln entspricht. Dies nährt die Vermutung, dass jede konvexe dichtestgepackte Clusterpackung ab einer gewissen Größe die entsprechende Wurstopackung unterbietet.