

LLIÇÓ INAUGURAL
DEL CURS ACADÈMIC
2018-2019

FACULTAT DE MATEMÀTIQUES
I INFORMÀTICA

Punts d'energia mínima i empaquetaments d'esferes

Jordi Marzo Sánchez

PROFESSOR DEL DEPARTAMENT
DE MATEMÀTIQUES I INFORMÀTICA



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Punts d'energia mínima i empaquetaments d'esferes

LLIÇÓ INAUGURAL
DEL CURS ACADÈMIC
2018-2019
FACULTAT DE MATEMÀTIQUES I INFORMÀTICA

Punts d'energia mínima i empaquetaments d'esferes

Jordi Marzo Sánchez

PROFESSOR DEL DEPARTAMENT
DE MATEMÀTIQUES I INFORMÀTICA

BARCELONA, 3 D'OCTUBRE 2018



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Edicions

© Edicions de la Universitat de Barcelona
Adolf Florensa, s/n, 08028 Barcelona, tel.: 934 035 430, fax: 934 035 531,
comercial.edicions@ub.edu, www.publicacions.ub.edu

ISBN: 978-84-9168-331-5

Dipòsit digital: <http://hdl.handle.net/2445/122939>

Sumari

1. Problema de Thomson	9
2. Estimacions asimptòtiques de l'energia mínima	10
3. Xarxes i tors plans	14
4. Empaquetament d'esferes	17
5. Cotes de la densitat amb programació lineal	20
6. Sobre aquest escrit	24
Referències	25

RESUM. L'objectiu d'aquesta lliçó inaugural és parlar de dos problemes molt interessants i d'una manera de relacionar-los. El primer problema és l'estudi del desenvolupament asimptòtic de l'energia mínima d'un conjunt de punts confinats en una esfera que interacciona mitjançant un potencial de Riesz. El cas límit d'una de les constants que apareixen en aquest desenvolupament ens portarà al nostre segon problema, el de determinar el millor empaquetament d'esferes a l'espai euclidià, problema en què recentment s'han produït avenços importants.

1. Problema de Thomson

L'any 1904, amb relació al seu model de nucli atòmic anomenat *del púding de panses* (*plum pudding model*), Thomson va plantejar el problema de determinar l'energia mínima d'una configuració d'electrons a la superfície d'una esfera que es repelleixen amb una força determinada per la llei de Coulomb.

Si denotem com a $\mathbb{S}^2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$ l'esfera unitat, el problema de Thomson consisteix, doncs, a determinar el valor mínim de

$$\sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{|x_i - x_j|} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{|x_i - x_j|},$$

entre totes les eleccions possibles de $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{S}^2$.

Aquest model atòmic es va abandonar ràpidament, però el problema plantejat per Thomson s'ha continuat estudiant. A hores d'ara, però, només s'ha pogut resoldre el problema si el nombre de punts, N , és 1, 2, 3, 4, 5, 6 o 12. El darrer resultat, del 2013, va demostrar que la bipiràmide triangular (5 punts) és minimal amb una prova assistida per ordinador, [Sch13].

Un dels problemes és que a diferència del cercle, on els vèrtexs dels polígons regulars (les arrels de la unitat) minimitzen qualsevol energia raonable, a l'esfera \mathbb{S}^2 no hi ha configuracions de punts suficientment bones. N'és un bon exemple que només hi ha 5 poliedres convexos regulars: tetraedre, octaedre, cub, icosaedre i dodecaedre. Aquests poliedres són els anomenats *sòlids platònics* (Figura 1) i ja va demostrar Euclides als *Elements*,

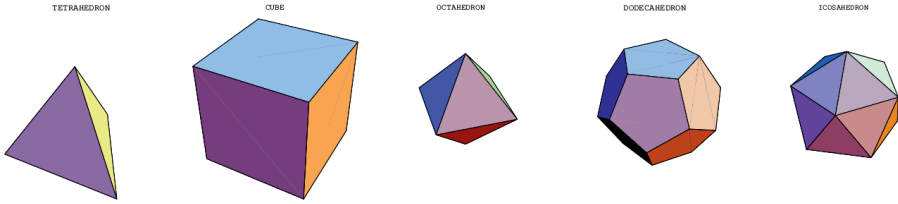


FIGURA 1. Els sòlids platònics.

que són els únics poliedres convexos regulars; aquest fet es pot demostrar de manera senzilla utilitzant la característica d'Euler. Així doncs, prendre els vèrtexs dels poliedres convexos regulars no ens permet anar gaire lluny (20 punts), però, sorprenentment, fins i tot quan existeixen, els vèrtexs dels poliedres convexos regulars no sempre minimitzen. En efecte, per als casos de 8 i 20 vèrtexs, que corresponen al cub i al dodecaedre, s'han trobat configuracions de punts que tenen energia menor que les donades per als vèrtexs dels corresponents sòlids platònics.

2. Estimacions asimptòtiques de l'energia mínima

En aquesta xerrada considerarem una generalització del problema de Thompson al context d'esferes en dimensions superiors

$$\mathbb{S}^d = \{(x_1, \dots, x_{d+1}) \in \mathbb{R}^{d+1} : x_1^2 + \dots + x_{d+1}^2 = 1\} \subset \mathbb{R}^{d+1},$$

per a $d \geq 1$ enter, on considerarem conjunts de punts que interaccionen mitjançant energies, anomenades *de Riesz*, que generalitzen a la de Coulomb

$$E_s(\mathbb{S}^d, \{x_1, \dots, x_N\}) = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{|x_i - x_j|^s} = \sum_{i \neq j} \frac{1}{|x_i - x_j|^s},$$

on $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{S}^d$ i $s > 0$. El problema que tractarem serà, no l'energia d'un nombre concret de punts, sinó el comportament asimptòtic, quan el nombre de punts N creix, de l'energia minimal.

Si considerem els dos valors límit del paràmetre $s \in (0, +\infty)$ obtenim dos problemes particularment interessants. Quan $s \rightarrow 0$ obtenim un po-

tencial logarítmic, en el sentit que $\frac{d}{dt}|_{t=0}(t^{-s})$. Els punts que minimitzen són els anomenats *punts de Fekete* i són aquells que compleixen que maximitzen el producte de les seves distàncies mútues

$$\prod_{i \neq j} |x_i - x_j|.$$

Quan $s \rightarrow +\infty$ obtenim l'anomenat *problema de Tammes*, o *del millor empaquetament*, que consisteix a trobar les configuracions de N punts a $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{S}^d$ amb distància mínima

$$\min_{1 \leq i \neq j \leq N} |x_i - x_j|$$

màxima. Per tal de limitar una mica el tema, deixarem de banda el cas del potencial logarítmic.

No és gaire difícil veure que per a tot $d \geq 2$, N i $s > 0$ hi ha configuracions de punts $x_1^*, \dots, x_N^* \in \mathbb{S}^d$ que assoleixen l'energia mínima

$$\mathcal{E}_s(\mathbb{S}^d, N) = E_s(\mathbb{S}^d, \{x_1^*, \dots, x_N^*\}) = \min_{x_1, \dots, x_N \in \mathbb{S}^d} E_s(\mathbb{S}^d, \{x_1, \dots, x_N\}).$$

En termes físics, aquestes configuracions de punts d'energia mínima són estats fonamentals (*ground states*) si considerem partícules a l'esfera que interaccionen mitjançant el potencial de Riesz (Figura 2).

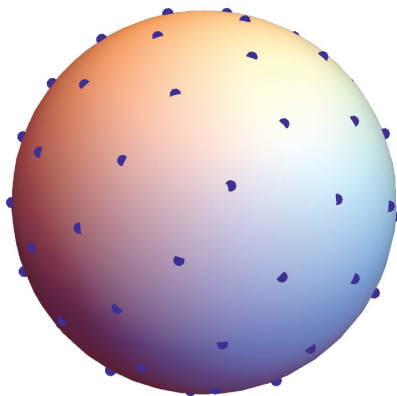


FIGURA 2. Setanta punts minimitzants de l'energia de Coulomb a la \mathbb{S}^2 .

Observem que per a esferes \mathbb{S}^d amb $d \geq 3$ tampoc hi ha configuracions universalment bones. En efecte, Schläfli i Coxeter van demostrar que només hi ha 6 polítops convexos regulars a \mathbb{R}^4 i per a $d > 4$ només n'hi ha 3 (les generalitzacions del tetraedre, del cub i de l'octaedre). Una altra mostra d'aquesta falta de bones distribucions és la inexistència, excepte en uns pocs casos, de quadratures de Txeixov minimalis a l'esfera, [BD79, BD80].

Tal com hem avançat, el nostre objectiu ara és estudiar el comportament asimptòtic, quan $N \rightarrow +\infty$, de l'energia mínima $\mathcal{E}_s(\mathbb{S}^d, N)$. La idea general és que l'energia mínima discreta, si augmenta el nombre de punts, convergeix cap a l'energia mínima contínua. També veurem que hi ha una gran diferència entre potencials de rang llarg $0 < s < d$ i potencials de rang curt $s \geq d$.

Arguments clàssics de teoria del potencial que involucren l'anomenat *diàmetre transfinit generalitzat de Pólya i Szegő* demostren que si $0 < s < d$

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\mathcal{E}_s(\mathbb{S}^d, N)}{N^2} = \int_{\mathbb{S}^d} \int_{\mathbb{S}^d} \frac{1}{|x - y|^s} d\sigma(x) d\sigma(y),$$

on σ és la mesura de superfície normalitzada a \mathbb{S}^d . Per a una demostració més moderna vegeu, per exemple, [Ser15, p. 28]. Així, si $x_1^*, \dots, x_N^* \in \mathbb{S}^d$ minimitza l'energia d'exponent $0 < s < d$, aleshores

$$\mathcal{E}_s(\mathbb{S}^d, N) = \sum_{i \neq j} \frac{1}{|x_i^* - x_j^*|^s} \approx \left(\int_{\mathbb{S}^d} \int_{\mathbb{S}^d} \frac{1}{|x - y|^s} d\sigma(x) d\sigma(y) \right) N^2, \quad (2.1)$$

si N és gran. Observem que aquest resultat és cert també per a varietats suaus d dimensionals $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{d+1}$ si considerem l'energia mínima discreta a \mathcal{X} i canviem σ per l'anomenada *mesura d'equilibri*, que és la que minimitza el potencial de Riesz continu

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \frac{1}{|x - y|^s} d\mu(x) d\mu(y),$$

entre totes les mesures μ de probabilitat a \mathcal{X} .

Els potencials de Riesz per a $0 < s < d$ es diuen *de llarg abast (long range)*, donat que no només els punts propers contribueixen de manera significativa a aportar l'energia d'un punt, sinó que s'han de considerar també els punts llunyans. Observem que si $s \geq d$, la integral a (2.1) no

convergeix tot i que el terme de l'esquerra és, per a tot N , un valor finit. Si deixem de banda el cas $s = d$, més tècnic, i considerem el cas de potencials de curt abast (*short range potentials*), amb $s > d$, la resposta al comportament asimptòtic de l'energia mínima discreta ve donada per l'anomenat *teorema de la rosquilla amb llavors de rosella (Poppy-seed Bagel Theorem)*.

Teorema 2.1 (Hardin-Saff (05)). *Sigui \mathcal{X} una varietat regular de dimensió d . Sigui*

$$\mathcal{E}_s(\mathcal{X}, N) = \sum_{i \neq j} \frac{1}{|x_i^* - x_j^*|^s}$$

l'energia mínima discreta que poden assolir N punts $x_1^, \dots, x_N^* \in \mathcal{X}$. Si $s > d$, aleshores*

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\mathcal{E}_s(\mathcal{X}, N)}{N^{1+\frac{1}{s}}} = \frac{C_{s,d}}{\sigma(\mathcal{X})^{s/d}}, \quad (2.2)$$

on $C_{s,d}$ és una constant positiva independent de \mathcal{X} i σ és la mesura de superfície convenientment normalitzada.

Observem el fet remarcable que la constant $C_{s,d}$ del teorema no depèn de la varietat \mathcal{X} . Per al cercle \mathbb{S}^1 es pot demostrar sense gaire dificultat (vegeu a [HS04]) que

$$C_{s,1} = 2\zeta(s),$$

on $\zeta(s)$ és la funció zeta de Riemann que es defineix com a

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n^s},$$

si $\text{Re } s > 1$ i es defineix per continuació analítica a tot $\mathbb{C} \setminus \{1\}$.

En general, de cara a determinar el comportament asimptòtic de l'energia mínima $\mathcal{E}_s(\mathbb{S}^d, N)$ quan $N \rightarrow +\infty$, com que la constant $C_{s,d}$ del teorema no depèn de la varietat \mathcal{X} , una possible estratègia és considerar varietats més senzilles que \mathbb{S}^d i determinar el comportament de $\mathcal{E}_s(\mathcal{X}, N)$ per trobar $C_{s,d}$. Aquesta constant serà, a partir d'ara, el nostre objecte d'estudi principal. Per tal de definir varietats senzilles en dimensions superiors introduïrem alguns conceptes.

3. Xarxes i tors plans

Definim una xarxa com el conjunt

$$\Lambda = \{v_1 k_1 + \cdots + v_d k_d : k_i \in \mathbb{Z}\},$$

on els v_1, \dots, v_d formen una base de \mathbb{R}^d (Figura 3A).

Recordem que un problema que tenim per estimar l'energia mínima discreta a l'esfera \mathbb{S}^d , quan $d \geq 2$, és que no tenim bones distribucions de punts. Les varietats que considerarem en comptes de l'esfera són els anomenats *tors plans* \mathbb{R}^d/Λ , que identificarem amb el domini fonamental

$$\{v_1 \alpha_1 + \cdots + v_d \alpha_d : \alpha_1, \dots, \alpha_d \in [0, 1)\};$$

vegeu Figura 3B.

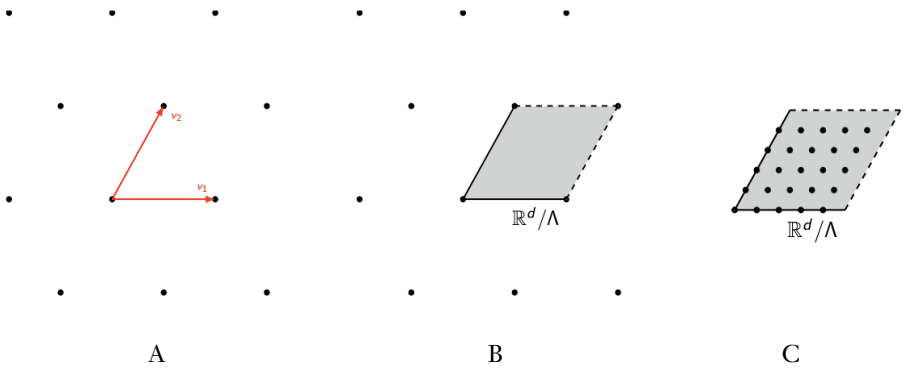


FIGURA 3. (A) Xarxa, (B) Domini fonamental, (C) Punts reescalats.

En aquestes varietats sí que podem definir de manera senzilla conjunts de punts clarament ben distribuïts, i són simplement els reescalats dels punts de la xarxa Λ que cauen al tor \mathbb{R}^d/Λ (Figura 3C). En efecte, si definim els conjunts

$$X_n = \frac{1}{n} \Lambda \cap (\mathbb{R}^d/\Lambda) = \left\{ v_1 \frac{k_1}{n} + \cdots + v_d \frac{k_d}{n} : k_i \in \{0, \dots, n-1\} \right\},$$

tenim que $\#X_n = n^d$ i si denotem els $x \in X_n$ com a $x = \frac{\lambda}{n}$ amb $\lambda \in \Lambda$, aleshores

$$\sum_{x' \in X_n \setminus \{x\}} |x - x'|^{-s} = n^s \sum_{\substack{\lambda' \in \Lambda \setminus \{\lambda\} \\ \lambda' \in nX_n}} |\lambda - \lambda'|^{-s} \leq n^s \sum_{\lambda' \in \Lambda \setminus \{0\}} |\lambda'|^{-s} = n^s \zeta_\Lambda(s), \quad (2.3)$$

on per a $s > d$

$$\zeta_\Lambda(s) = \sum_{\lambda \in \Lambda \setminus \{0\}} \frac{1}{|\lambda|^s};$$

és l'anomenada *funció zeta d'Epstein*. Tenim ara, doncs, que

$$E_s(\mathbb{R}^d/\Lambda, X_n) = \sum_{x \in X_n} \sum_{x' \in X_n \setminus \{x\}} \frac{1}{|x - x'|^s} \leq n^{s+d} \zeta_\Lambda(s) \quad (2.4)$$

i podem deduir que per a $N \geq 1$ enter

$$\mathcal{E}_s(\mathbb{R}^d/\Lambda, N) \leq N^{1+\frac{s}{d}} \zeta_\Lambda(s).$$

Aplicant ara el teorema Poppy-seed Bagel obtenim que la constant a (2.2) es pot afitar per

$$C_{s,d} \leq \min_{\Lambda} \text{vol}(\mathbb{R}^d/\Lambda)^{s/d} \zeta_\Lambda(s), \quad (3.1)$$

on el mínim recorre les xarxes Λ de \mathbb{R}^d . Observem que per a $d = 1$ tenim igualtat.

Donada una xarxa qualsevol Λ a \mathbb{R}^d , la funció zeta d'Epstein està definida per a tot $s \in \mathbb{C}$ amb $\text{Re}(s) > d$ com a

$$\zeta_\Lambda(s) = \sum_{\lambda \in \Lambda \setminus \{0\}} \frac{1}{|\lambda|^s}.$$

Aquesta funció la va definir Epstein l'any 1903 com a generalització de la funció zeta de Riemann, que és $\zeta(s) = \zeta_{\mathbb{Z}}(s)/2$. Observem que es pot definir per continuació analítica a tot $\mathbb{C} \setminus \{d\}$, té zeros (trivials) als enters parells negatius i té un pol simple a $s = d$ (Figura 4). Es pot veure que compleix una relació funcional similar a la de la funció zeta de Riemann i que, en general, no es compleix la hipòtesi de Riemann, Terras (80); vegeu [Ter13, Ter16].

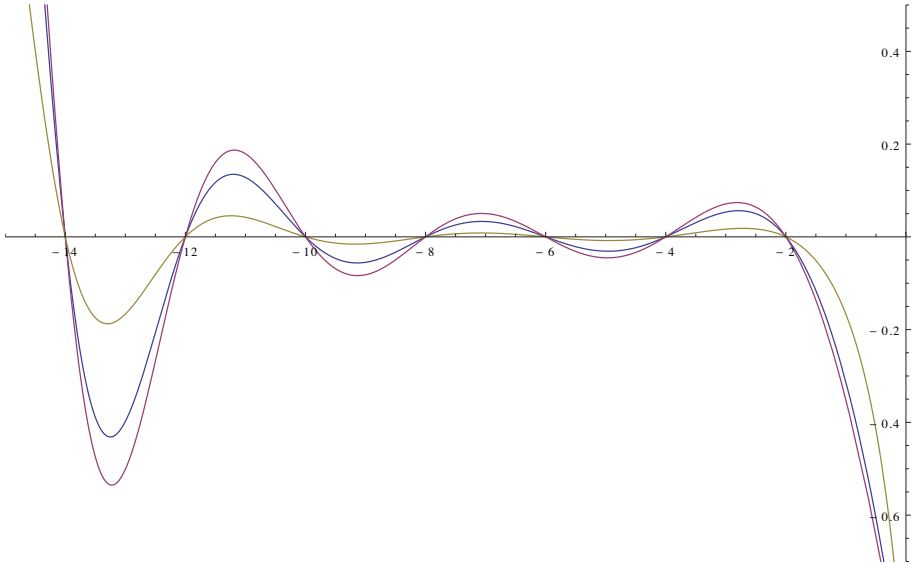


FIGURA 4. Gràfiques de $\zeta_{\mathbb{Z}}(s)$, $\zeta_{E_8}(s)$ i $\zeta_{\Lambda_{24}}(s)$.

Donat que sempre podem normalitzar la superfície del *torus*, si volem donar cotes superiors de la constant $C_{s,d}$ a (3.1) hem de considerar el problema de la minimització de la funció zeta d'Epstein. Ara bé, de nou, no hi ha gaires resultats coneguts.

- Si $d = 2$, la xarxa hexagonal

$$\left\{ k_1 \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} + k_2 \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} : k_1, k_2 \in \mathbb{Z} \right\}$$

minimitza $\zeta_{\Lambda}(s)$ entre totes les xarxes $\Lambda \subset \mathbb{R}^2$ amb volum 1, per a tot $s > 0$, Rankin, Cassels (53).

- Si $d = 4, 8$ i 24 , la funció zeta d'Epstein $\zeta_{\Lambda}(s)$ té un mínim local estricte respectivament a la xarxa de tauler d'escacs

$$D_4 = \{(x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{Z}^4 : x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \text{ parell}\},$$

la xarxa

$$E_8 = \left\{ (x_1, \dots, x_8) : x_i \in \mathbb{Z} \text{ o } x_i \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2} \text{ i } x_1 + \dots + x_8 \text{ parell} \right\},$$

i a la xarxa de Leech Λ_{24} , Sarnak-Strömbergsson (06), [SS06].

De fet s'ha conjeatrat que en aquestes dimensions privilegiades la constant $C_{s,d}$ s'assoleix en aquestes xarxes, [BHS12, CK06], i tenim igualtat a (3.1).

Conjectura 3.1 (Brauchart-Hardin-Saff (12) i Cohn-Kumar (06)).

$$C_{s,d} = \min_{\Lambda} \text{vol}(\mathbb{R}^d / \Lambda)^{s/d} \zeta_{\Lambda}(s),$$

per a $d = 2, 4, 8$ i 24 i el mínim s'assoleix respectivament a les xarxes hexagonal, D_4, E_8 i Λ_{24} .

4. Empaquetament d'esferes

Hem vist, doncs, que l'únic cas en què es coneix el valor de $C_{s,d}$ és quan $d = 1$. Ara bé, asimptòticament aquesta constant està relacionada amb una altra constant lligada al segon problema que volem tractar, [BHS07].

Teorema 4.1 (Borodachov-Hardin-Saff (07)).

$$\lim_{s \rightarrow +\infty} C_{s,d}^{1/s} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1) \Delta_d} \right)^{1/d},$$

on Δ_d és la major densitat d'un empaquetament d'esferes a \mathbb{R}^d .

Un empaquetament d'esferes de \mathbb{R}^d és un conjunt de boles congruents (mateix radi) amb interiors disjunts (Figura 5) i Δ_d és la fracció de volum màxim de \mathbb{R}^d que podem cobrir amb un empaquetament d'esferes.

Les esferes dels empaquetaments poden estar centrades en punts no ordenats (Figura 5) o estar centrades en punts d'una xarxa (Figura 6).

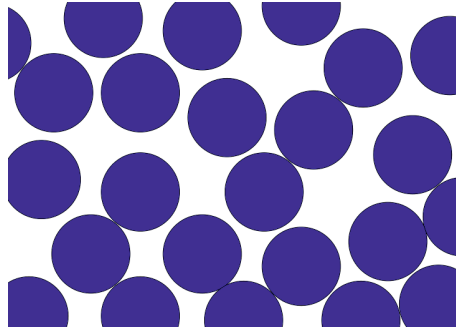


FIGURA 5. Empaquetament d'esferes.

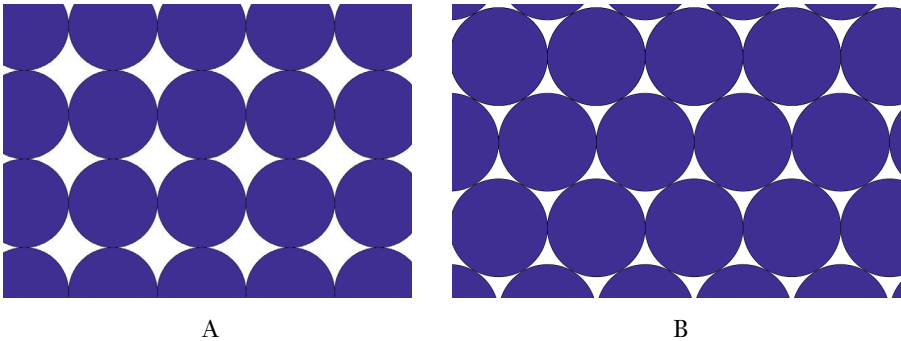


FIGURA 6. Xarxes regulars: (A) xarxa quadrada, (B) xarxa hexagonal.

Clarament, la fracció de volum màxim que podem ocupar de \mathbb{R} és $\Delta_1 = 1$ ja que els intervals $[k, k + 1)$ per a $k \in \mathbb{Z}$ cobreixen tot \mathbb{R} . Observem que sabent que $\zeta(s) \approx 1 + \frac{1}{s}$ quan $s \gg 1$, a partir del valor de $C_{s,1}$ efectivament obtenim del teorema 4.1 que $\Delta_1 = 1$. Al pla \mathbb{R}^2 es pot veure fàcilment que l'empaquetament quadrat (Figura 6A) té densitat $\frac{\pi}{4} = 0.7853 \dots$ i per tant cobreix un 78.5 % de \mathbb{R}^2 mentre que l'empaquetament hexagonal (Figura 6B) té densitat $\frac{\pi}{\sqrt{12}} = 0.9069 \dots$ i cobreix un 90.7 % de l'espai. També és fàcil veure que l'empaquetament hexagonal és el millor empaquetament entre els regulars. Ja és una mica més difícil veure que, de fet, és el millor també si considerem tots els empaquetaments de \mathbb{R}^2 (Thue, 1910) i que, per tant,

$$\Delta_2 = \Delta_2^* = \frac{\pi}{\sqrt{12}}.$$

Formalment, donat un empaquetament d'esferes \mathcal{P} de \mathbb{R}^d (això és, un conjunt de boles congruents amb interiors disjunts), definim la densitat superior de \mathcal{P} com

$$\limsup_{R \rightarrow \infty} \frac{\text{vol}([-R, R]^d \cap \mathcal{P})}{(2R)^d},$$

i la major densitat d'un empaquetament d'esferes (*sphere packing density*) com

$$\Delta_d = \sup_{\mathcal{P}} \limsup_{R \rightarrow \infty} \frac{\text{vol}([-R, R]^d \cap \mathcal{P})}{(2R)^d},$$

on el suprem recorre els empaquetaments \mathcal{P} de \mathbb{R}^d .

Observem que aquesta quantitat és, en principi, més fàcil de calcular en el cas regular. En efecte, donada una xarxa $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, la densitat superior de l'empaquetament format per boles centrades als punts de Λ i radi $r(\Lambda)/2$, on

$$r(\Lambda) = \min\{|\lambda| : \lambda \in \Lambda \setminus \{0\}\}$$

és

$$\frac{\text{vol}\left(B_{r(\Lambda)/2}^d\right)}{\text{vol}\left(\mathbb{R}^d/\Lambda\right)},$$

ja que al domini fonamental \mathbb{R}^d/Λ hi ha exactament una bola de radi $r(\Lambda)/2$, (Figura 7).

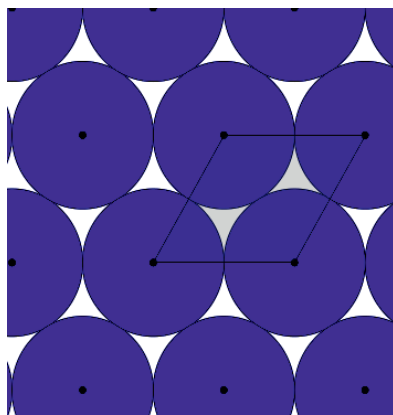


FIGURA 7. Xarxa hexagonal.

Definirem la major densitat dels empaquetaments regulars, això és, d'un empaquetament d'esferes amb centres als punts d'una xarxa, com

$$\Delta_d^* = \sup_{\Lambda} \frac{\text{vol} \left(B_{r(\Lambda)/2}^d \right)}{\text{vol}(\mathbb{R}^d/\Lambda)},$$

on el suprem recorre les xarxes de \mathbb{R}^d . Observem que $\Delta_d^* \leq \Delta_d$.

Fins a 2017, mitjançant proves essencialment geomètriques s'havia pogut trobar el valor de Δ_d per a $d = 2$ i 3 . Algunes dates d'aquesta història són les següents:

- 1773, Lagrange demostra que $\Delta_2^* = \frac{\pi}{\sqrt{12}}$.
- 1910, Thue demostra que $\Delta_2 = \frac{\pi}{\sqrt{12}}$.
- 1611, Kepler conjectura que la xarxa FCC (*face centered cubic*) és òptima i per tant que $\Delta_3 = \Delta_3^* = \frac{\pi}{\sqrt{18}}$.
- 1831, Gauss demostra que $\Delta_3^* = \frac{\pi}{\sqrt{18}}$.
- 1953, Fejes Tóth proposa una estratègia per a la conjectura de Kepler de manera que la determinació de Δ_3 es pot reduir a un nombre finit (encara intractable) de casos.
- 1998-2017, Hales prova la conjectura de Kepler amb una demostració per casos utilitzant ordinadors, que va ser acceptada finalment l'any 2017.

Així doncs, finalment al 2017 s'havia pogut resoldre, en afirmatiu, la conjectura de Kepler amb una prova extremadament complexa que donava poques esperances de poder tractar qualsevol altra dimensió més enllà de \mathbb{R}^3 , [Hal00]. Tanmateix, l'aproximació purament analítica al problema, iniciada per Cohn i Elkies (03), [CE03], ha donat finalment resultats inesperats, com veurem en la nostra darrera secció.

5. Cotes de la densitat amb programació lineal

Per introduir els darrers resultats necessitarem definir alguns conceptes. Donada una funció prou regular, formalment $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, definim la seva transformada de Fourier

$$\hat{f}(y) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)e^{-2\pi i x \cdot y} dx, \quad y \in \mathbb{R}^d.$$

Es pot veure que $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ i que podem recuperar la funció original fent una anti-transformada

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(y)e^{2\pi i x \cdot y} dy.$$

En termes físics, si interpretem una funció com un senyal $f(x)$, un so o una imatge, la seva transformada de Fourier $\hat{f}(y)$ ens en dona la freqüència. Entre una funció i la seva transformada hi ha una relació molt estreta. En particular, una funció i la seva transformada no poden estar totes dues ben localitzades. En efecte, es pot veure, per exemple, que si $d = 1$, la transformada d'una funció que és zero fora d'un interval és entera i, per tant, els seus zeros no es poden acumular. Un altre exemple d'aquest comportament és que per a $\alpha > 0$, si

$$f(x) = e^{-\pi\alpha|x|^2}, \quad \text{aleshores} \quad \hat{f}(y) = \frac{1}{\alpha^{d/2}} e^{-\pi\frac{|y|^2}{\alpha}},$$

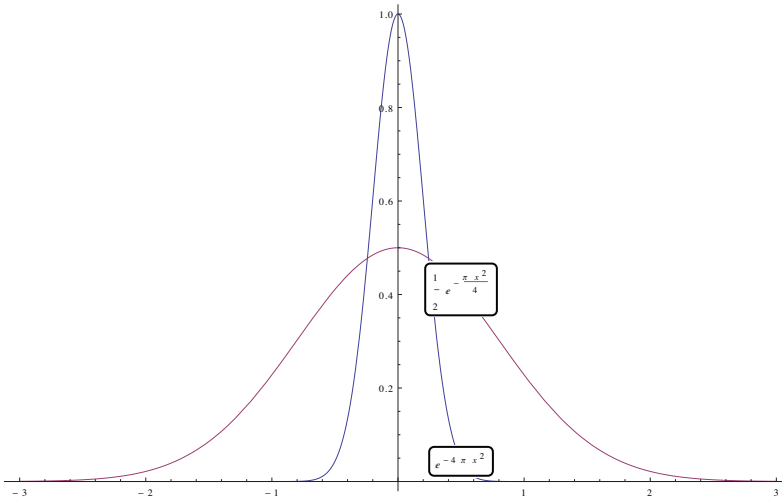


FIGURA 8. Transformades de Fourier.

i això ens diu que, tal com es pot veure a la Figura 8, la transformada d'una funció gaussiana molt concentrada és una altra gaussiana poc concentrada

i a l'inrevés. De fet, aquesta tensió entre la concentració d'una funció i de la seva transformada es pot quantificar en el principi d'incertesa d'Heisenberg, que a més, ens diu que les gaussianes són precisament les funcions tals que el parell $f(x), \hat{f}(y)$ està concentrat millor. En general, un principi d'incertesa expressa una relació entre propietats d'una funció (per exemple la concentració) i propietats de la seva transformada.

El següent resultat de Cohn i Elkies és una de les claus dels nous resultats sobre empaquetaments, [CE03].

Teorema 5.1 (Cohn-Elkies (03)). *Sigui $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ a valors reals tal que*

- $f(0) = \hat{f}(0) > 0$.
- $\hat{f}(y) \geq 0$, si $y \in \mathbb{R}^d$.
- $f(x) \leq 0$ si $|x| \geq r$ per a un cert $r = r(f) > 0$.

Aleshores, la major densitat d'un empaquetament d'esferes complexix:

$$\Delta_d \leq \text{vol}(B_{r/2}^d) = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \left(\frac{r}{2}\right)^d.$$

Així doncs, per aprofitar aquest resultat, l'estratègia natural és tractar de trobar funcions $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ que compleixin les condicions anteriors (poden ser radials) amb $r = r(f)$ tan petit com sigui possible. Aquí trobem, de nou, un principi d'incertesa, ja que les condicions sobre f i \hat{f} van en contra del fet que $r = r(f)$ sigui molt petit. Ara bé, fixada una dimensió, quin és el valor mínim? Es pot assolir? Al seu treball de 2003, Cohn i Elkies només van poder trobar la funció òptima en el cas trivial de dimensió 1, on la funció

$$f(x) = \frac{1}{1-x^2} \left(\frac{\sin \pi x}{\pi x}\right)^2,$$

torna a demostrar que $\Delta_1 = 1$.

Donada la dificultat de trobar bones funcions explícitament (excepte per a $d = 1$), en tota una sèrie de treballs Cohn-Elkies (03), Cohn-Kumar (09) i Cohn-Miller (16) van buscar cotes numèricament amb funcions del tipus $P(|x|)e^{-\pi|x|^2}$, on $P(x)$ és un polinomi. D'aquesta estratègia prové

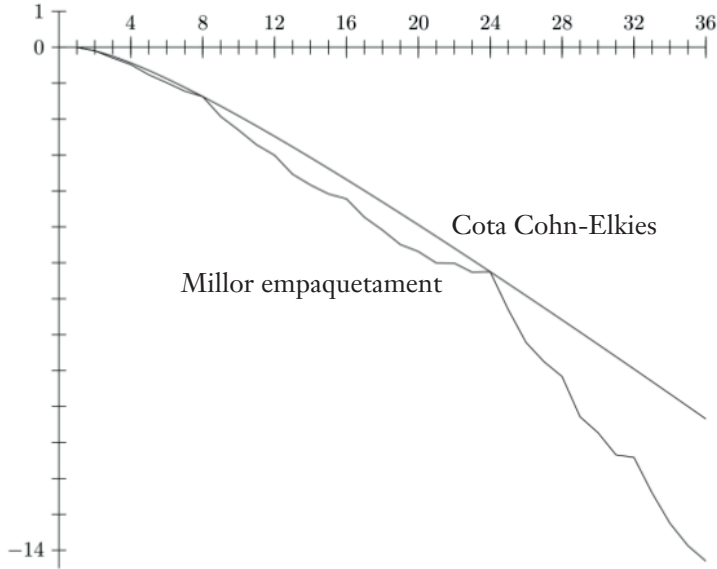


FIGURA 9. Cotes superiors i inferiors de $\log \Delta_d$.

el nom de *programació lineal*. Com a resultat van millorar totes les cotes conegudes prèviament. A més, en alguns casos concrets, $d = 2, 8$ i 24 , les cotes superiors que obtenien coincidien (fins al límit del que podien calcular) amb les cotes inferiors donades per a les xarxes hexagonals, E_8 i Λ_{24} que hem vist abans (Figura 9).

Això va portar Cohn i Elkies a conjeturar l'existència de funcions que donaven la igualtat al teorema per a aquests valors $d = 2, 8$ i 24 . Però, tot i que des d'un punt de vista numèric les funcions òptimes es podien calcular, no es va poder trobar una expressió explícita i quedava per tant la incertesa de si, més enllà del nombre de decimals computables, podia trobar-se una configuració millor que les donades per a aquestes xarxes. Aquest problema es va resoldre finalment l'any 2017 quan Viazovska va construir la funció òptima per a $d = 8$ [Via17] utilitzant formes modulars i va demostrar, per tant, que

$$\Delta_8 = \Delta_8^* = \frac{\pi^4}{384} = 0.253669 \dots$$

Molt poc temps després, utilitzant les tècniques desenvolupades per Viazovska per a E_8 , Cohn, Kumar, Miller, Radchenko i Viazovska van construir la funció òptima per a $d = 24$ ([CKMRV17]) demostrant que

$$\Delta_{24} = \Delta_{24}^* = \frac{\pi^{12}}{12!} = \frac{\pi^{12}}{479001600} = 0.001929\dots$$

En contrast amb la demostració de Hales per a \mathbb{R}^3 , aquests treballs no requereixen càlculs informàtics i es basen en eines clàssiques. Ara bé, tal com es pot anticipar per la Figura 9, no és d'esperar que es puguin demostrar altres cotes òptimes utilitzant aquestes tècniques. De fet, sorprenentment encara s'ha trobat la funció que demostra que la xarxa hexagonal és el millor empaquetament a \mathbb{R}^2 !

Així doncs, tret d'aquest cas ja conegut, semblaria que la història de les cotes per programació lineal acaba aquí, però, com sempre en matemàtiques, una nova solució ens porta a nous problemes. Una vessant molt interessant és precisament interpretar les cotes de Cohn-Elkies com un principi d'incertesa i tractar de trobar les cotes i les funcions òptimes. Seguint aquesta idea, Cohn-Gonçalves (18), utilitzant les tècniques desenvolupades per Viazovska, han trobat les cotes òptimes, en dimensió 12, per un principi d'incertesa que van establir Bourgain, Clozel i Kahane (10), [CG19].

6. Sobre aquest escrit

Aquest escrit està basat en la Lliçó inaugural del curs 2018-2019 de la Facultat de Matemàtiques i Informàtica de la Universitat de Barcelona. Cap dels resultats de què parlo és meu i només ho és la lectura que he fet dels resultats d'altres. Les referències principals són els articles [BG15], [HS04], [Coh17] i el llibre [CS99].

Referències

- [BD79] BANNAI, E. i DAMERELL, R. M. Tight spherical designs I, *J. Math. Soc. Japan* 31, no. 1, 199-207, 1979.
- [BD80] BANNAI, E. i DAMERELL, R. M. Tight spherical designs II, *J. Lond. Math. Soc.*, v s2-21, Issue 1, pp 13-30, 1980.
- [BHS07] BORODACHOV, S. V., HARDIN, D. P. i SAFF, E. B. *Asymptotics of best-packing on rectifiable sets*, *Proc. Amer. Math. Soc.*, 135(8): 2369-2380, 2007.
- [BHS12] BRAUCHART, J. S., HARDIN, D. P. i SAFF, E. B. *The next-order term for optimal Riesz and logarithmic energy asymptotics on the sphere*. Recent advances in orthogonal polynomials, special functions, and their applications, 31-61, *Contemp. Math.*, 578, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2012.
- [BG15] BRAUCHART, J. S. i GRABNER, P.J. *Distributing many points on spheres: minimal energy and designs*. *J. Complexity* 31, no. 3, 293-326, 2015.
- [Coh17] COHN, H. *A conceptual breakthrough in sphere packing*, *Notices Amer. Math. Soc.*, 64, 102-115, 2017.
- [CE03] COHN, H. i ELKIES, N. *New upper bounds on sphere packings I*, *Ann. of Math.*, 157, no. 2, 689-714, 2003.
- [CG19] COHN, H. i GONÇALVES, F. *An optimal uncertainty principle in twelve dimensions via modular forms*, arXiv:1712.04438v3, 2019.
- [CK06] COHN, H. i KUMAR, A. *Universally optimal distribution of points on spheres*, *J. Amer. Math. Soc.*, 10, 99-148, 2006.
- [CKMRV17] COHN, H., KUMAR, A., MILLER, S. D., RADCHENKO, D. i VIAZOVSKA, M. *The sphere packing problem in dimension 24*, *Ann. of Math.*, 185, 1017-1033, 2017.
- [CS99] CONWAY, J. H. i SLOANE, N. J. A. *Sphere packings, lattices and groups*, *Fundamental Principles of Mathematical Sciences*, 290. Springer-Verlag, Nova York, 1999.
- [Hal00] HALES, T. C. Cannonballs and honeycombs, *Notices Amer. Math. Soc.* 47, no. 4, 440-449, 2000.
- [HS04] HARDIN, D. P. i SAFF, E. B. *Discretizing manifolds via minimum energy points*, *Notices Amer. Math. Soc.*, 51(10), 1186-1194, 2004.
- [SS06] SARNAK, P. i STRÖMBERGSSON, A. *Minima of Epstein's Zeta Function and Heights of Flat Tori*, *Invent. Math.*, 165, 115-151, 2006.
- [Sch13] SCHWARTZ, R. *The five-electron case of Thomson's problem*, *Exp. Math.* 22, no. 2, 157-186, 2013.

- [Ser15] SERFATY, S. *Coulomb Gases and Ginzburg-Landau Vortices*, Zurich Lectures in Advanced Mathematics, EMS, 2015.
- [Ter13] TERRAS, A. *Harmonic analysis on symmetric spaces-Euclidean space, the sphere, and the Poincaré upper half-plane*, Second edition. Springer, New York, 2013.
- [Ter16] TERRAS, A. *Harmonic analysis on symmetric spaces-higher rank spaces, positive definite matrix space and generalizations*, Second edition. Springer, Nova York, 2016.
- [Via17] VIAZOVSKA, M. *The sphere packing problem in dimension 8*, Ann. of Math., 185, 991-1015, 2017.



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Edicions