

## Punts d'energia mínima i empaquetaments d'esferes

JORDI MARZO

**Resum:** En aquest article tractarem 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 interaccionen 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.

**Paraules clau:** energia de Riesz, punts ben distribuïts, empaquetaments d'esferes, programació lineal.

**Classificació MSC2010:** 31C20, 52C07, 11K36.

### 1 Problema de Thomson

L'any 1904, amb relació al seu model de nucli atòmic anomenat *pudding de panses* (*plum pudding model*), Thomson va plantejar el problema de calcular 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 i determinar les disposicions de punts amb energia mínima.

Si denotem com a  $\mathbb{S}^2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$  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  $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{S}^2$  i determinar les que assoleixen el mínim.

---

Aquest escrit està basat en la lliçó inaugural del curs 2018-2019 de la Facultat de Matemàtiques i Informàtica de la Universitat de Barcelona.

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 [23].

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. Un exemple d'això és 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*, 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, en termes d'agafar punts (20 punts), però, sorprenentment, fins i tot quan existeixen, els vèrtexs dels poliedres convexos regulars no sempre minimitzen l'energia. En efecte, amb 8 i 20 vèrtexs, que corresponen al cub i al dodecaedre, s'han trobat configuracions de punts que tenen energia menor que les donades pels vèrtexs dels corresponents sòlids platònics.

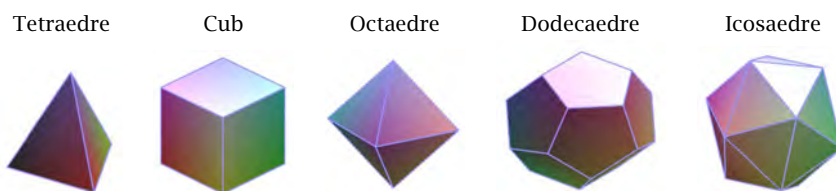


FIGURA 1: Els sòlids platònics.

## 2 Estimacions asimptòtiques de l'energia mínima

En aquest treball 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 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 de l'energia minimal quan el nombre de punts  $N$  creix.

Si considerem els dos valors límit del paràmetre  $s \in (0, +\infty)$  obtenim dos problemes particularment interessants. Quan  $s \rightarrow 0$  obtenim un potencial logarítmic, en el sentit que  $\frac{d}{ds}|_{s=0}(t^{-s}) = -\log t$ . Els punts  $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{S}^d$ , que minimitzen l'energia logarítmica

$$\sum_{i \neq j} \log \frac{1}{|x_i - x_j|},$$

són els anomenats *punts de Fekete*. Observem que aquests punts són també aquells que maximitzen el producte de les seves distàncies mútues  $\prod_{i \neq j} |x_i - x_j|$ , ja que

$$-\log \prod_{i \neq j} |x_i - x_j| = \sum_{i \neq j} \log \frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

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

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

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

No és difícil demostrar 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 assolixen l'energia mínima, que escrivem  $\mathcal{E}_s(\mathbb{S}^d, N)$ ,

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

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).

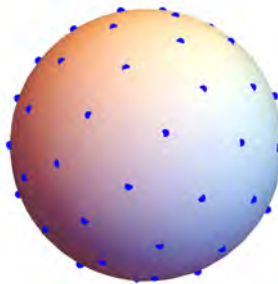


FIGURA 2: Setanta punts minimitzants de l'energia de Coulomb a  $\mathbb{S}^2$ .

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 Txebixov minimalis a l'esfera [1, 2].

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 llarg abast  $0 < s < d$  i potencials de curt abast  $s \geq d$ .

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  $\sigma$  és la mesura de superfície normalitzada a  $\mathbb{S}^d$ . Per a una demostració més moderna es pot consultar [24, p. 28]. Així, si  $x_1^*, \dots, x_N^* \in \mathbb{S}^d$  minimitza l'energia d'exponent  $0 < s < d$ , una primera aproximació del comportament asimptòtic és

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

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  $\sigma$  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  $\mu$  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 l'aportació a l'energia d'un punt, sinó que s'han de considerar també els punts llunyans. Observem que, si  $s \geq d$ , la integral a (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)* [19, 20].

TEOREMA 2.1 (HARDIN, SAFF). *Sigui  $X \subset \mathbb{R}^d$  una varietat regular de dimensió  $d$ . Sigui*

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

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

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\mathcal{E}_s(X, N)}{N^{1+\frac{s}{d}}} = \frac{C_{s,d}}{\sigma(X)^{s/d}}, \quad (2)$$

*on  $C_{s,d}$  és una constant positiva independent de  $X$  i  $\sigma$  és la mesura de Hausdorff de dimensió  $d$  a  $\mathbb{R}^d$ , normalitzada de manera que el cub unitat  $[0, 1]^d$  a  $\mathbb{R}^d$  té mesura 1.*

Observem el fet remarcable que la constant  $C_{s,d}$  del teorema no depèn de la varietat  $X$ . Per al cercle  $\mathbb{S}^1$  es pot demostrar sense gaire dificultat, [19], 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 s'estén 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  $X$ , una possible estratègia és considerar varietats més senzilles que  $\mathbb{S}^d$  i determinar el comportament de  $\mathcal{E}_s(X, N)$  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* o *reticle* com el conjunt

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

on  $v_1, \dots, v_d$  formen una base de  $\mathbb{R}^d$  (figura 3(a)).

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*  $\mathbb{R}^d/\Lambda$ , que identificarem amb el domini fonamental

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

(figura 3(b)).

En aquestes varietats sí que podem definir de manera senzilla conjunts de punts clarament ben distribuïts dels quals podem estimar l'energia. Són simplement els reescalats dels punts de la xarxa  $\Lambda$  que cauen al tor  $\mathbb{R}^d/\Lambda$  (figura 3(c)). En efecte, si definim els conjunts

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

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

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

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 l'energia dels punts reescalats es pot afitar com a

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

i podem deduir que, per a  $N \geq 1$  enter, l'energia mínima compleix

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

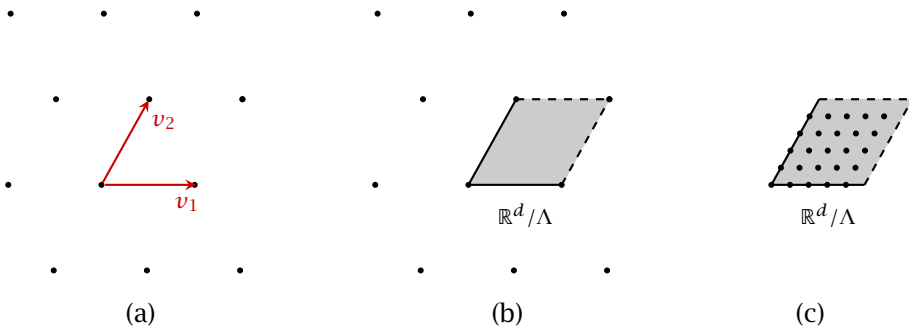


FIGURA 3: (a) Xarxa  $\Lambda$ , (b) domini fonamental, (c) punts reescalats  $X_n$ .

Dividint per  $N^{1+\frac{s}{d}}$ , prenent el límit quan  $N \rightarrow +\infty$  i aplicant el teorema 2.1 obtenim que la constant a (2) es pot afitar per

$$C_{s,d} \leq \min_{\Lambda} \text{vol}(\mathbb{R}^d/\Lambda)^{s/d} \zeta_\Lambda(s), \tag{3}$$

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

Epstein va definir la funció  $\zeta_\Lambda(s)$  l'any 1903 com a generalització de la funció zeta de Riemann, que és  $\zeta(s) = \zeta_{\mathbb{Z}}(s)/2$ . Anàlogament al cas de la zeta de Riemann, es pot veure que es pot estendre per continuació analítica a tot  $\mathbb{C} \setminus \{d\}$ , compleix una equació funcional, té zeros (trivials) als enters parells negatius i té un pol simple a  $s = d$  (figura 4), vegeu [25, p. 64]. Tanmateix, se sap que hi ha xarxes per a les quals la corresponent zeta d'Epstein té zeros a l'interval  $(0, d)$  i per tant, en general, no es compleix l'anàleg de la hipòtesi de Riemann [26].

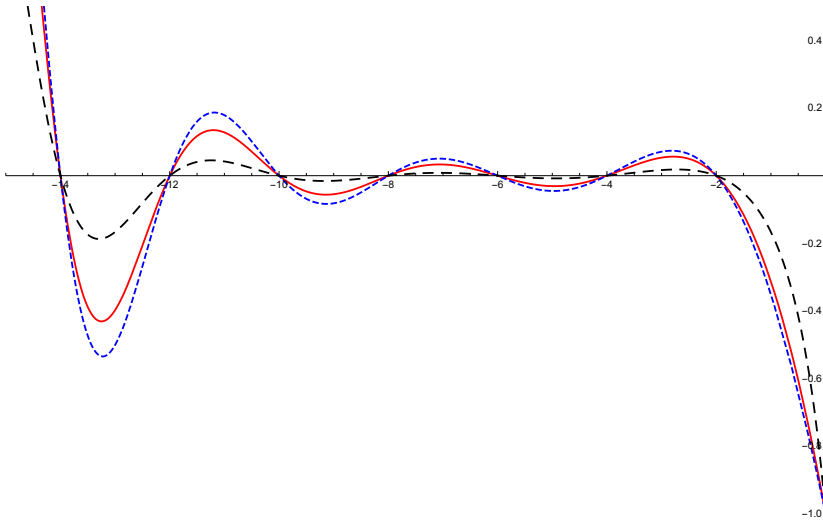


FIGURA 4: Gràfiques de  $\zeta_{\mathbb{Z}}(s)$  (discontínua, traç llarg),  $\zeta_{E_8}(s)$  (contínua) i  $\zeta_{\Lambda_{24}}(s)$  (discontínua, traç curt).

Donat que sempre podem normalitzar la superfície del tor, si volem donar cotes superiors de la constant  $C_{s,d}$  a (3), hem de considerar el problema de la minimització de la funció zeta d'Epstein. Ara bé, de nou, no hi ha gaires resultats coneguts.<sup>1</sup>

- 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 [21], Cassels [8]).

<sup>1</sup> Durant la preparació d'aquest treball s'han resolt els casos  $d = 8$  i  $24$  [15], vegeu la darrera secció.

- 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

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

a 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  $\Lambda_{24}$  (Sarnak i Strömbergsson [22]).

De fet s'ha conjeatut que en aquestes dimensions privilegiades la constant  $C_{s,d}$  s'assoleix en aquestes xarxes, [7, 12], i tenim igualtat a (3).

CONJECTURA 3.1 (BRAUCHART, HARDIN, SAFF [7] I COHN, KUMAR [12]).

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

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

## 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.

TEOREMA 4.1 (BORODACHOV, HARDIN, SAFF [4]).

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

on  $\Delta_d$  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 del mateix radi amb interiors disjunts (figura 5) i  $\Delta_d$  és la fracció de volum màxim de  $\mathbb{R}^d$  que podem cobrir amb un empaquetament d'esferes.

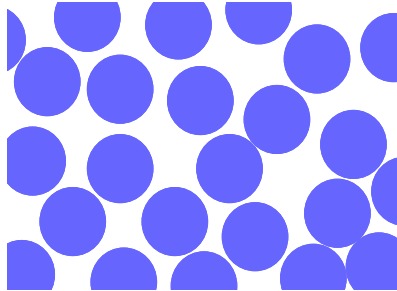


FIGURA 5: Empaquetament d'esferes.



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

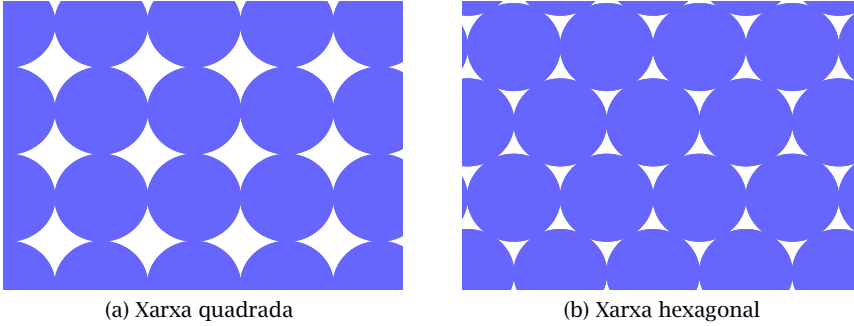


FIGURA 6: Xarxes regulars.

Clarament, la fracció de volum màxim que podem ocupar de  $\mathbb{R}^d$  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 6(a)) 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 6(b)) 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  $\mathbb{R}^2$  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 del mateix radi 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  $\Lambda$  i radi  $r(\Lambda)/2$ , on

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

és

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

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

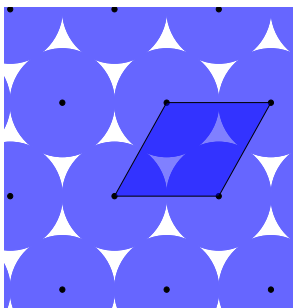


FIGURA 7: Domini fonamental  $\mathbb{R}^d/\Lambda$ .

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

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

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

Fins al 2017, mitjançant proves essencialment geomètriques, s'havia pogut trobar el valor de  $\Delta_d$  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  $\Delta_3$  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. La demostració va ser acceptada l'any 2017.

Així doncs, finalment, al 2017 s'havia pogut resoldre, en afirmatiu, la conjectura de Kepler amb una prova extremament complexa que donava poques esperances de poder tractar qualsevol altra dimensió més enllà de  $\mathbb{R}^3$  [18].

Tanmateix, l'aproximació purament analítica al problema, iniciada per Cohn i Elkies [10], ha donat finalment resultats inesperats, com veurem en la secció següent.

Recordem que hem començat l'article amb el problema de Thomson a l'esfera i que el desenvolupament de l'energia mínima per a potencials de curt abast, de paràmetre  $s > d$ , ens ha portat a definir la constant  $C_{s,d}$ , al teorema 2.1. Un nou límit quan  $s \rightarrow +\infty$ , al teorema 4.1, ens ha fet considerar l'empaquetament d'esferes i la constant  $\Delta_d$  que hem vist que s'ha pogut determinar per a uns pocs valors de  $d$ .

## 5 Cotes de la densitat amb programació lineal

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

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

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

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

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

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

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 millor concentrat. En general, un principi d'incertesa expressa una relació entre propietats d'una funció (per exemple, la concentració) i propietats de la seva transformada.

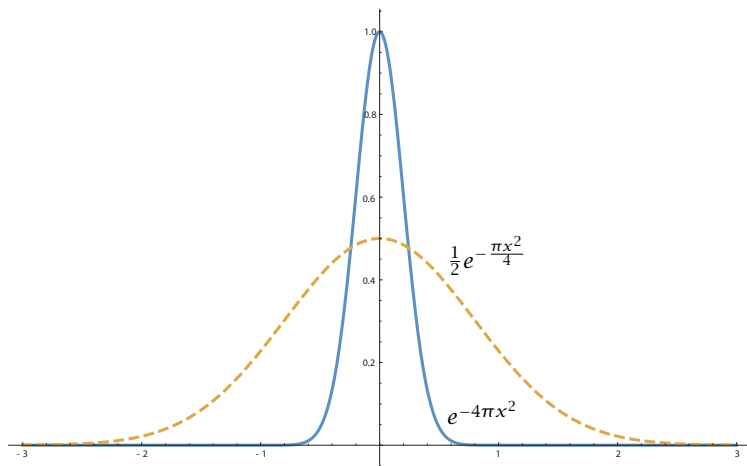


FIGURA 8: Transformades de Fourier.

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

TEOREMA 5.1 (COHN, ELKIES [10]). *Sigui  $f \in S(\mathbb{R}^d)$  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 compleix que*

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

Així doncs, per aprofitar aquest resultat, l'estratègia natural és tractar de trobar funcions  $f \in S(\mathbb{R}^d)$  que compleixin les condicions anteriors (podem suposar que són 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 del 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 i Elkies [10], Cohn i Kumar [13]

i Cohn i 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 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 hexagonal,  $E_8$  i  $\Lambda_{24}$  que hem vist abans (figura 9).

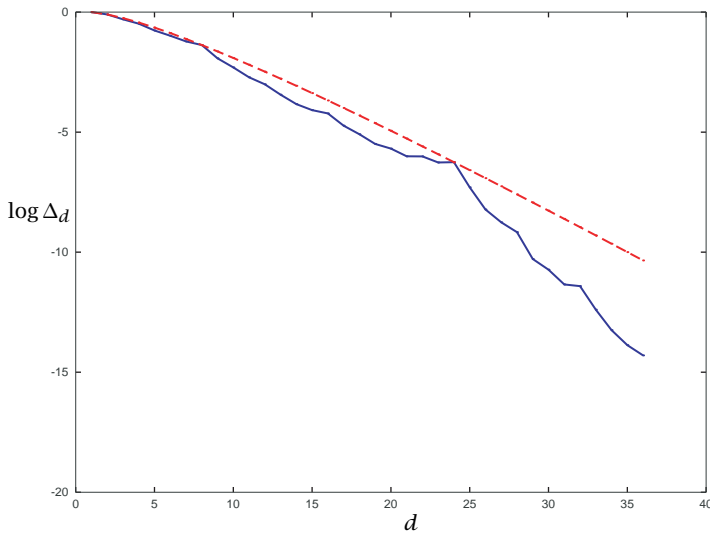


FIGURA 9: Cotes superiors i inferiors de  $\log \Delta_d$  calculades amb les dades de [9]. La línia contínua mostra el millor empaquetament conegut, i la discontinua, la cota per programació lineal. Observeu l'aparent coincidència quan  $d = 8, 24$ .

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  $d = 8$  ([27]) utilitzant formes modulars i va demostrar, per tant, que

$$\Delta_8 = \Delta_8^* = \frac{\pi^4}{384} = 0.253\,669\dots$$

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  $d = 24$  ([14]) i van demostrar que

$$\Delta_{24} = \Delta_{24}^* = \frac{\pi^{12}}{12!} = \frac{\pi^{12}}{479\,001\,600} = 0.001\,929\dots$$

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 veient la figura 9, no és d'esperar que es puguin demostrar altres cotes òptimes utilitzant aquestes tècniques. De fet, sorprenentment, encara s'ha de trobar la funció que demostrï 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 i Elkies com un principi d'incertesa i tractar de trobar les cotes i les funcions òptimes. Seguint aquesta idea Cohn i Gonçalves [11], utilitzant les tècniques desenvolupades per Viazovska, han trobat les cotes òptimes, en dimensió 12, per un principi d'incertesa que van estudiar Bourgain, Clozel i Kahane.

## 6 Darreres observacions

Els resultats de les primeres seccions d'aquest article tenen una versió dual, en un cert sentit, en termes de configuracions de punts de polarització màxima. Aquest problema és més complex que el de l'energia mínima i té com a límit el problema del millor recobriment (*best-covering*), en comptes del de millor empaquetament [3]. Encara està per desenvolupar, però, una teoria anàloga a la programació lineal per a aquest problema.

Com a actualització de darrera hora, voldria mencionar que els mateixos autors que van demostrar l'optimalitat de la xarxa de Leech han demostrat que  $E_8$  i  $\Lambda_{24}$  són, de fet, universalment òptims, en el sentit que minimitzen no només l'energia donada pel potencial de Riesz, sinó la de tot potencial donat per una funció completament monòtona [15].

Finalment, voldria remarcar que cap dels resultats de què he parlat són meus i només ho és la lectura que he fet dels resultats d'altres. Algunes referències per a aquells que vulguin aprofundir en aquests temes són els articles [6], [19] i [9], i els llibres [17] i [5]. També són molt recomanables les col·leccions de xerrades de Viazovska a l'Institut des Hautes Études Scientifiques (IHES) i les de Carneiro i Gonçalves a l'Instituto de Matemática Pura e Aplicada (IMPA).

## Referències

- [1] BANNAI, E.; DAMERELL, R. M. «Tight spherical designs. I». *J. Math. Soc. Japan*, 31 (1) (1979), 199-207.
- [2] BANNAI, E.; DAMERELL, R. M. «Tight spherical designs. II». *J. London Math. Soc.* (2), 21 (1) (1980), 13-30.
- [3] BORODACHOV, S. V.; HARDIN, D. P.; REZNIKOV, A.; SAFF, E. B. «Optimal discrete measures for Riesz potentials». *Trans. Amer. Math. Soc.*, 370 (10) (2018), 6973-6993.

- [4] BORODACHOV, S. V.; HARDIN, D. P.; SAFF, E. B. «Asymptotics of best-packing on rectifiable sets». *Proc. Amer. Math. Soc.*, 135 (8) (2007), 2369–2380.
- [5] BORODACHOV, S. V.; HARDIN, D. P.; SAFF, E. B. *Discrete Energy on Rectifiable Sets*. Nova York: Springer-Verlag, 2019. (Springer Monographs in Mathematics)
- [6] BRAUCHART, J. S.; GRABNER, P. J. «Distributing many points on spheres: Minimal energy and designs». *J. Complexity*, 31 (3) (2015), 293–326.
- [7] BRAUCHART, J. S.; HARDIN, D. P.; SAFF, E. B. «The next-order term for optimal Riesz and logarithmic energy asymptotics on the sphere». A: *Recent Advances in Orthogonal Polynomials, Special Functions, and Their Applications*. Providence, RI: Amer. Math. Soc., 2012, 31–61. (Contemp. Math.; 578)
- [8] CASSELS, J. W. S. «On a problem of Rankin about the Epstein zeta-function». *Proc. Glasgow Math. Assoc.*, 4 (1959), 73–80.
- [9] COHN, H. «A conceptual breakthrough in sphere packing». *Notices Amer. Math. Soc.*, 64 (2) (2017), 102–115.
- [10] COHN, H.; ELKIES, N. «New upper bounds on sphere packings. I». *Ann. of Math. (2)*, 157 (2) (2003), 689–714.
- [11] COHN, H.; GONÇALVES, F. «An optimal uncertainty principle in twelve dimensions via modular forms». *Invent. Math.*, 217 (3) (2019), 799–831.
- [12] COHN, H.; KUMAR, A. «Universally optimal distribution of points on spheres». *J. Amer. Math. Soc.*, 20 (1) (2007), 99–148.
- [13] COHN, H.; KUMAR, A. «Optimality and uniqueness of the Leech lattice among lattices». *Ann. of Math. (2)*, 170 (3) (2009), 1003–1050.
- [14] COHN, H.; KUMAR, A.; MILLER, S. D.; RADCHENKO, D.; VIAZOVSKA, M. «The sphere packing problem in dimension 24». *Ann. of Math. (2)*, 185 (3) (2017), 1017–1033.
- [15] COHN, H.; KUMAR, A.; MILLER, S. D.; RADCHENKO, D.; VIAZOVSKA, M. «Universal optimality of the  $E_8$  and Leech lattices and interpolation formulas». Preprint, 2019. <https://arxiv.org/abs/1902.05438v2>.
- [16] COHN, H.; MILLER, S. D. «Some properties of optimal functions for sphere packing in dimensions 8 and 24». Preprint, 2016. <https://arxiv.org/abs/1603.04759>.
- [17] CONWAY, J. H.; SLOANE, N. J. A. *Sphere Packings, Lattices and Groups*. 3a ed. Nova York: Springer-Verlag, 1999. (Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften; 290)
- [18] HALES, T. C. «Cannonballs and honeycombs». *Notices Amer. Math. Soc.*, 47 (4) (2000), 440–449.
- [19] HARDIN, D. P.; SAFF, E. B. «Discretizing manifolds via minimum energy points». *Notices Amer. Math. Soc.*, 51 (10) (2004), 1186–1194.
- [20] HARDIN, D. P.; SAFF, E. B. «Minimal Riesz energy point configurations for rectifiable  $d$ -dimensional manifolds». *Adv. Math.*, 193 (1) (2005), 174–204.

- [21] RANKIN, R. A. «A minimum problem for the Epstein zeta-function». *Proc. Glasgow Math. Assoc.*, 1 (1953), 149-158.
- [22] SARNAK, P.; STRÖMBERGSSON, A. «Minima of Epstein's zeta function and heights of flat tori». *Invent. Math.*, 165 (1) (2006), 115-151.
- [23] SCHWARTZ, R. E. «The five-electron case of Thomson's problem». *Exp. Math.*, 22 (2) (2013), 157-186.
- [24] SERFATY, S. *Coulomb Gases and Ginzburg-Landau Vortices*. Zurich: EMS, 2015. (Zurich Lectures in Advanced Mathematics; 21).
- [25] TERRAS, A. *Harmonic Analysis on Symmetric Spaces—Euclidean Space, the Sphere, and the Poincaré Upper Half-Plane*. 2a ed. Nova York: Springer, 2013.
- [26] TERRAS, A. *Harmonic Analysis on Symmetric Spaces—Higher Rank Spaces, Positive Definite Matrix Space and Generalizations*. 2a ed. Nova York: Springer, 2016.
- [27] VIAZOVSKA, M. S. «The sphere packing problem in dimension 8». *Ann. of Math. (2)*, 185 (3) (2017), 991-1015.

DEPARTAMENT DE MATEMÀTIQUES I INFORMÀTICA  
UNIVERSITAT DE BARCELONA  
08007 BARCELONA, SPAIN  
jmarzo@ub.edu