

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI CAMERINO
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN MATEMATICA

CONFIGURAZIONI OTTIMALI DI PUNTI
SULLA SFERA

Tesi di Laurea in Geometria

Relatore

Prof. Riccardo Piergallini

Laureando

Alessandro Contini

Correlatore

Prof. Fabio Giannoni

Anno Accademico 1997-1998

Indice

Introduzione	v
1 Esposizione del problema	1
1.1 Il concetto di α -energia	1
1.1.1 α -Energia ottimale di un sistema di N cariche sulla sfera	1
1.1.2 Costante di distribuzione continua	4
1.2 Classificazione delle configurazioni	6
1.2.1 I poliedri convessi e la sfera	7
1.2.2 Gruppi di simmetria delle configurazioni	11
1.3 Proprietà delle configurazioni ottimali	13
1.3.1 Celle di Dirichlet	14
1.3.2 Il problema del “Best Packing”	16
1.4 Sugli algoritmi di ottimizzazione	19
2 Ottimizzazione della α-energia	21
2.1 Massimizzazione nel caso $\alpha \geq 2$	21
2.2 Ottimizzazione nel caso $0 < \alpha < 2$	26
2.3 Minimizzazione nel caso $\alpha \leq -2$	31
2.4 Minimizzazione nel caso logaritmico	35
2.5 Somme massimali	37
2.5.1 Caso bidimensionale	37
2.5.2 Caso tridimensionale	39

2.5.3	Caso n -dimensionale	41
2.6	Congettura generale	42
3	Proprietà generali delle configurazioni ottimali	44
3.1	Separazione minima dei punti	44
3.1.1	Caso $0 < \alpha < 2$	44
3.1.2	Caso $\alpha \leq -2$	48
3.1.3	Caso logaritmico	48
3.2	Momento di dipolo delle configurazioni ottimali	51
4	Ricerca di configurazioni ottimali con metodi numerici	53
4.1	Algoritmi di ottimizzazione	53
4.1.1	Metodo del Gradiente	54
4.1.2	Minimizzazione Monte Carlo	54
4.1.3	Algoritmo di Ottimizzazione Globale Vincolata	55
4.2	Risultati degli algoritmi	57
4.2.1	Problema di Thompson	58
4.2.2	Caso logaritmico	60
4.2.3	Somme massimali	61
4.3	Proprietà delle configurazioni ottimali elaborate	63
4.3.1	Chiralità	64
4.3.2	Momento di dipolo	67
4.3.3	Simmetrie	67
4.4	Congettura generale	81
A	Punti a spirale generalizzata	84
	Bibliografia	89

Elenco delle figure

1.1	Poliedri regolari	9
1.2	Celle di Dirichlet	15
1.3	Reticolo esagonale nel piano	17
2.1	Configurazione ottimale di dieci punti sulla circonferenza	39
4.1	Chiralità	66
4.2	Poliedri con simmetria C_{2v}	69
4.3	Poliedro con simmetria C_{3v}	70
4.4	Poliedro con simmetria C_s	71
4.5	Poliedri con simmetria D_{5h}	73
4.6	Poliedri con simmetria D_{4d}	74
4.7	Poliedro con simmetria D_{6d}	75
4.8	Poliedri con simmetria D_3	76
4.9	Poliedri con simmetria T	78
4.10	Poliedro con simmetria O	80
4.11	Errore nell'approssimazione di $\mathcal{E}(-1, N)$	82
4.12	Errore nell'approssimazione di $\mathcal{E}(0, N)$	82
4.13	Errore nell'approssimazione di $\mathcal{E}(1, N)$	82
A.1	Punti a spirale generalizzata	85
A.2	Valutazione della spirale generalizzata	86

Elenco delle tabelle

2.1	Risultati generali per $\mathcal{E}(\alpha, N)$ al variare di α	43
4.1	Risultati del problema di Thompson (1)	59
4.2	Risultati del problema di Thompson (2)	61
4.3	Normalizzazione della (-1)-energia minimale	61
4.4	Minimizzazione nel caso logaritmico	62
4.5	Normalizzazione della 0-energia minimale	63
4.6	Somme massimali	64
4.7	Normalizzazione della 1-energia massimale	65

Introduzione

Il modello di atomo presentato da J.J. Thompson nel 1902 è ormai vicino al suo centenario ed ancora oggi, sebbene la motivazione della sua costruzione sia divenuta obsoleta con l'avvento della meccanica quantistica, è vivo l'interesse verso lo studio di configurazioni di cariche in equilibrio sulla superficie di una sfera o di un disco per le sue molteplici applicazioni. Infatti, la generalizzazione di questo problema, cioè la *distribuzione di un certo numero di punti in modo ottimale sulla superficie di una sfera*, è una questione che sta attirando l'attenzione non solo di matematici, ma anche di biologi, chimici e fisici che lavorano in discipline come la virologia, la cristallografia e l'elettrostatica. I seguenti esempi mostrano alcune possibili applicazioni di questo problema:

- La scoperta della molecola stabile di carbonio-60 (C_{60}), che presenta gli atomi disposti in modo sferico, ha influenzato notevolmente lo studio di questo argomento. Infatti ora la ricerca è indirizzata verso costruzioni di molecole più grandi che, sebbene sia improbabile che presentino una struttura perfettamente sferica, potrebbero rappresentare un primo passo verso la costruzione di complicate strutture molecolari.
- Un insieme di punti uniformemente distribuiti sulla superficie della sfera può essere utilizzabile anche per l'integrazione numerica. Ad esempio, nell'analisi dei dati satellitari sulla superficie terrestre è utile approssimare integrali sopra una sfera con medie aritmetiche rispetto a delle opportune configurazioni di punti.
- Il problema è emerso anche in teoria della complessità: nell'affrontare il Metodo

di Newton, si incontra il problema della determinazione di configurazioni di punti che massimizzano il prodotto delle loro distanze per ottenere dei buoni valori di partenza per l'algoritmo.

- In virologia il problema ha una notevole importanza in quanto la struttura della superficie di piccoli virus di tipo sferico è paragonabile ad opportune configurazioni di punti.

Questi vari punti di vista impongono diverse condizioni di partenza sulla distribuzione dei punti e quindi possono condurre a diversi risultati; *noi esamineremo le configurazioni di punti ottimali dal punto di vista energetico, nel senso che cercheremo dei sistemi di cariche stabili sulla sfera.*

La struttura del presente lavoro è la seguente. Nel primo capitolo esponiamo il problema, introducendo le nozioni necessarie, definendo l'energia ottimale di un sistema di cariche sulla sfera ed analizzando i vari aspetti che il problema assume. Nel secondo capitolo valutiamo l'energia ottimale con gli strumenti dell'analisi matematica. In realtà, tale problema è ancora aperto, pertanto ci limiteremo a determinare soltanto degli intervalli ai quali appartiene il valore dell'energia ottimale; in base a tali risultati esponiamo una congettura. Nel capitolo 3 esaminiamo delle proprietà delle configurazioni ottimali, quali la separazione dei punti e il momento di dipolo del sistema. Queste proprietà sono generali, quindi possono essere dedotte pur non conoscendo le configurazioni stesse. Nel quarto capitolo mostreremo e commenteremo i risultati dell'ottimizzazione dell'energia e della ricerca di configurazioni ottimali effettuate per via computazionale; inoltre mostreremo una congettura generale basata su questi risultati e sui teoremi esposti nel capitolo 2. Infine, in appendice, costruiamo direttamente delle configurazioni che approssimano quelle ottimali in modo soddisfacente.

Capitolo 1

Esposizione del problema

1.1 Il concetto di α -energia

1.1.1 α -Energia ottimale di un sistema di N cariche sulla sfera

Denotiamo con $S^2 = \{x \in \mathbf{R}^3 : |x| = 1\}$ la sfera unitaria centrata nell'origine di un sistema di coordinate cartesiane nello spazio euclideo \mathbf{R}^3 . Indichiamo con $|x - y|$ la distanza euclidea tra due punti $x, y \in \mathbf{R}^3$ (talvolta indicheremo la distanza euclidea tra due punti con r , quando questa è intesa in senso generico). Sia N un numero intero positivo, $N \geq 2$, e $\omega_N = \{x_1, \dots, x_N\}$ un sottoinsieme finito di S^2 , cioè un insieme di N versori, che chiameremo *configurazione* di N punti su S^2 .

Se disponiamo su ciascun punto di una configurazione ω_N una carica positiva unitaria, la forza coulombiana totale che agisce sulla i -esima particella per effetto delle altre particelle è di tipo repulsivo, e risulta (sistema CGS di Gauss):

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j \leq N, j \neq i} \frac{x_i - x_j}{|x_i - x_j|^3},$$

mentre l'energia potenziale associata ad ogni particella risulta:

$$E_i = \sum_{j \leq N, j \neq i} \frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

Possiamo ora generalizzare il discorso, e considerare potenziali non solo di tipo coulombiano $V = 1/r$ ma anche di tipo $V = r^\alpha$, con $\alpha \in \mathbf{R}$, tenendo presente che, se $\alpha = 0$,

il potenziale diventa del tipo $V = \ln 1/r$. Definiamo quindi la seguente funzione:

$$E(\alpha, \omega_N) = \begin{cases} \sum_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j|^\alpha & \text{se } \alpha \neq 0 \\ \sum_{1 \leq i < j \leq N} \ln \frac{1}{|x_i - x_j|} & \text{se } \alpha = 0 \end{cases} \quad (1.1)$$

L'espressione (1.1) rappresenta la α -energia totale del sistema di N cariche unitarie poste sulla sfera nei punti della configurazione ω_N , che interagiscono con un potenziale $V = r^\alpha$ ovvero, nel caso logaritmico, con il potenziale $V = \ln 1/r$; in questo senso possiamo considerare la α -energia associata alla configurazione ω_N .

Osservazione 1.1.1. Data una configurazione ω_N , il numero degli addendi che contribuiscono ad ognuna delle somme in (1.1) è uguale a $N(N-1)/2$, cioè il numero di insiemi di due elementi appartenenti ad un insieme di N elementi; talvolta chiameremo *separazioni* le distanze tra i punti di ω_N .

Il nostro obiettivo è, fissati α e N , *ottimizzare* la funzione $E(\alpha, \omega_N)$, cioè determinare i valori estremi che può assumere la α -energia al variare di $\omega_N \subset S^2$. In altre parole, *definita la funzione*

$$\mathcal{E}(\alpha, N) = \begin{cases} \inf_{\omega_N \in S^2} E(\alpha, \omega_N) & \text{se } \alpha \leq 0 \\ \sup_{\omega_N \in S^2} E(\alpha, \omega_N) & \text{se } \alpha > 0 \end{cases} \quad (1.2)$$

vogliamo, data una coppia (α, N) , determinare il valore di $\mathcal{E}(\alpha, N)$ e conoscere le configurazioni che determinano questo valore.

Osservazione 1.1.2. La definizione di \mathcal{E} come funzione a valori in \mathbf{R} è ben posta. Infatti, se fissiamo $\alpha > 0$, allora l'insieme di esistenza di E è $(S^2)^N$ che è un insieme compatto, quindi, essendo la funzione E continua, è chiaro che la funzione ammette massimo. Se invece prendiamo $\alpha \leq 0$, l'insieme di esistenza è $(S^2)^N - \Delta$, dove $\Delta = \{(x_1, \dots, x_N) \in (S^2)^N : \exists i \neq j, x_i = x_j\}$; ma in questo caso l'estremo inferiore di E è comunque un minimo, perché in prossimità dei punti di Δ la funzione tende a $+\infty$. L'unicità della soluzione, a meno di isometrie, non sussiste in generale, infatti vedremo che per certi valori di α si hanno più soluzioni.

Osservazione 1.1.3. Abbiamo definito \mathcal{E} in questo modo perché siamo orientati alla ricerca di configurazioni *stabili*. Infatti, una configurazione stabile si ha, per $\alpha \leq 0$, nei punti dove l'energia potenziale è minima; se invece $\alpha > 0$, la funzione inverte il suo andamento e quindi una configurazione stabile si ha quando l'energia raggiunge il suo massimo. Lo studio di \mathcal{E} al variare di α assume diversi significati:

- Per $\alpha = 1$ lo studio della funzione $\mathcal{E}(1, N)$, fissato N , è equivalente a questo problema geometrico: per quale insieme di N punti su una sfera la somma delle distanze euclidee dei punti stessi è massima? Qual è il massimo? Questo caso, eccetto alcuni particolari valori di N , rappresenta uno dei grandi problemi ancora aperti della matematica iniziato da L. Fejes Tóth (sez. 2.5).
- Il caso $\alpha = -1$ è il classico *problema di Thompson*: i punti che minimizzano la (-1)-energia (configurazione di equilibrio stabile) si chiamano *punti di Fekete*¹.
- Per $\alpha = 0$ un problema relativo alla complessità computazionale (Shub e Smale) è riconducibile a questo; precisamente il problema della determinazione, per $N \geq 2$, di insiemi di punti $\omega_N = \{x_1, \dots, x_N\} \subset S^2$ tali che, per una certa costante C_0 , si abbia

$$E(0, \omega_N) - \mathcal{E}(0, N) \leq C_0 \ln N.$$

I punti che minimizzano la 0-energia si chiamano *punti di Fekete ellittici*.

- È interessante valutare anche il caso $\alpha \rightarrow -\infty$: fissato N , la α -energia è migliorata asintoticamente da una quantità che dipende dalla più piccola distanza tra due punti di ω_N . In questo senso il problema si riconduce al problema del “Best Packing” (cap. 3).

¹Più in generale, dato un insieme $X \subset \mathbf{R}^n$, un *sistema di punti di Fekete di X* è un insieme di N punti di X che minimizzano la funzione $\sum_{i \neq j} |x_i - x_j|^{2-n}$.

1.1.2 Costante di distribuzione continua

In modo analogo alla definizione (1.1) si può definire la α -energia associata ad una distribuzione continua di cariche sulla sfera. Per ottenere questa quantità introduciamo le seguenti nozioni generali.

Definizione 1.1.4. Una famiglia \mathcal{M} di sottoinsiemi di un insieme X si chiama σ -algebra in X se soddisfa i seguenti assiomi:

1. $X \in \mathcal{M}$.
2. Se $A \in \mathcal{M}$, allora $A^c \in \mathcal{M}$, indicando con A^c il complementare di A rispetto a X .
3. Se $A = \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i$ e $A_i \in \mathcal{M}$ per ogni $i \geq 1$, allora $A \in \mathcal{M}$.

Se \mathcal{M} è una σ -algebra in X , allora la coppia (X, \mathcal{M}) o, semplicemente, X si chiama spazio misurabile, e gli elementi di \mathcal{M} si chiamano *insiemi misurabili* in X .

Una funzione f da uno spazio misurabile X ad uno spazio topologico Y è *misurabile* se per ogni aperto U di Y si ha $f^{-1}(U)$ misurabile.

Osservazione 1.1.5. Si dimostra in [20] che, se X è uno spazio topologico, esiste una σ -algebra \mathcal{B} che è la più piccola σ -algebra contenente gli insiemi aperti di X . Gli elementi di \mathcal{B} si chiamano gli *insiemi di Borel* di X .

Definizione 1.1.6. Una *misura* è una funzione μ definita su una σ -algebra \mathcal{M} , a valori in $[0, \infty]$ e tale che, se $\{A_i\}$ è una famiglia numerabile di elementi di \mathcal{M} a due a due disgiunti, allora

$$\mu\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i).$$

Osservazione 1.1.7. In [20] si dimostra l'esistenza di una misura (*misura di Lebesgue*) σ definita su una σ -algebra \mathcal{M} in \mathbf{R}^3 con le proprietà:

1. per ogni plurintervallo P in \mathbf{R}^3 , $\sigma(P)$ è uguale al volume di P ;

2. \mathcal{M} contiene tutti gli insiemi di Borel in \mathbf{R}^3 ;
3. σ è invariante per traslazioni.

Definizione 1.1.8. Se X è uno spazio misurabile, chiamiamo *semplici* le funzioni $s : X \rightarrow [0, \infty)$ che hanno come immagine un numero finito di punti.

Data una funzione misurabile semplice s su X che assume i valori a_1, \dots, a_m rispettivamente sui sottoinsiemi del dominio A_1, \dots, A_m , possiamo rappresentare s in questo modo:

$$s = \sum_{i=1}^m a_i \chi_{A_i},$$

dove χ_{A_i} è la *funzione caratteristica* dell'insieme A_i , cioè la funzione che vale 1 sui punti di A_i e 0 sui punti di $X - A_i$.

Osservazione 1.1.9. Una funzione semplice è misurabile se e solo se sono misurabili tutti gli insiemi A_i .

Definizione 1.1.10. Data una funzione misurabile semplice s nella forma

$$s = \sum_{i=1}^m a_i \chi_{A_i},$$

ed un sottoinsieme $D \subset X$, poniamo:

$$\int_D s \, d\mu = \sum_{i=1}^m a_i \mu(A_i \cap D).$$

Data una funzione misurabile $f : X \rightarrow [0, \infty]$ ed un sottoinsieme $D \subset X$, definiamo *integrale di Lebesgue* di f su D rispetto alla misura μ :

$$\int_D f \, d\mu = \sup \int_D s \, d\mu,$$

dove il sup è relativo a tutte le funzioni misurabili semplici s tali che $0 \leq s \leq f$.

Definiamo quindi la *costante di distribuzione continua*:

$$I_\sigma(\alpha) = \begin{cases} \frac{1}{(\sigma(S^2))^2} \iint_{S^2 \times S^2} |x - y|^\alpha d\sigma(x) d\sigma(y) & \text{per } \alpha \neq 0 \\ \frac{1}{(\sigma(S^2))^2} \iint_{S^2 \times S^2} \ln \frac{1}{|x - y|} d\sigma(x) d\sigma(y) & \text{per } \alpha = 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

dove σ è la misura di Lebesgue su S^2 . Si ottiene:

$$I_\sigma(\alpha) = \begin{cases} \frac{2^{1+\alpha}}{2 + \alpha} & \text{per } 0 < |\alpha| < 2 \\ \frac{1}{2} - \log 2 & \text{per } \alpha = 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

Per $\alpha \leq -2$ l'integrale risulta infinito, mentre per $\alpha \geq 2$ calcoleremo I_σ con la *teoria del potenziale* in sez. 2.1.

La quantità $I_\sigma(\alpha)/2$ è la α -energia di una sfera con carica unitaria; se invece assumiamo la sfera con carica uguale ad N , la sua α -energia diventa $I_\sigma(\alpha)N^2/2$. Per $\alpha = -1$ si ha il caso coulombiano $I_\sigma(-1) = 1$, per cui una sfera unitaria con carica unitaria ha energia potenziale uguale ad $1/2$, mentre una sfera unitaria con carica uguale ad N ha energia potenziale $N^2/2$ (rif. [4]).

Vedremo in cap.2 che, per la determinazione di $\mathcal{E}(\alpha, N)$, è di fondamentale importanza conoscere la costante di distribuzione continua poiché per certi valori di α l'energia ottimale dipende da questa quantità.

1.2 Classificazione delle configurazioni

Per identificare e classificare le configurazioni di punti sulla sfera è utile considerare i poliedri *associati* a tali configurazioni, cioè quei poliedri inscritti nella sfera che hanno per vertici i punti della configurazione stessa. Valuteremo anche la simmetria delle configurazioni, in modo da rappresentare queste o con un nome proprio di un poliedro, quando i suoi punti corrispondono ai vertici di un poliedro noto, oppure con il simbolo del rispettivo gruppo di simmetria. Per questo motivo introduciamo le nozioni fondamentali di geometria dello spazio e dei gruppi di simmetria.

1.2.1 I poliedri convessi e la sfera

I poliedri convessi

Definizione 1.2.1. Sia \mathbf{E} uno spazio euclideo. Si definisce *poliedro convesso* un sottoinsieme limitato di \mathbf{E} che non è contenuto in un sottospazio affine proprio di \mathbf{E} e che è l'intersezione di un numero finito di semispazi.

Sia P un poliedro convesso contenuto nello spazio euclideo \mathbf{R}^3 . Se \mathcal{H} è un piano di \mathbf{R}^3 tale che P sia contenuto in uno dei semispazi definiti da \mathcal{H} , allora abbiamo le seguenti possibilità:

$$\mathcal{H} \cap P = \emptyset;$$

$$\mathcal{H} \cap P \text{ è un punto, che chiamiamo } \textit{vertice} \text{ di } P;$$

$$\mathcal{H} \cap P \text{ è un segmento, che chiamiamo } \textit{spigolo} \text{ di } P;$$

$$\mathcal{H} \cap P \text{ è un poligono, che chiamiamo } \textit{faccia} \text{ di } P.$$

Osservazione 1.2.2. Tra il numero F delle facce di un poliedro convesso, il numero L dei suoi spigoli ed il numero V dei suoi vertici sussiste la *formula di Eulero*:

$$F - L + V = 2. \tag{1.5}$$

La formula (1.5) si può verificare anche dal punto di vista topologico. Infatti, la *caratteristica di Eulero* di uno spazio topologico X è definita, indicando con m_i il numero delle *celle* di dimensione i di X :

$$\chi(X) = \sum_{i=0}^n (-1)^i m_i,$$

e tale quantità dipende solo dalla struttura topologica dell'insieme stesso. Quindi, dato un poliedro, la sua caratteristica è $F - L + V$, ma poiché ogni poliedro è topologicamente equivalente alla sfera unitaria che ha caratteristica $\chi(S^2) = 2$, la (1.5) è dimostrata².

Un poliedro si dice *regolare* se le sue facce sono poligoni regolari uguali tra loro.

Proposizione 1.2.3. *Non possono esistere più di cinque poliedri regolari.*

²In generale, la caratteristica di Eulero di una sfera S^n è uguale a 2 se n è pari ovvero 0 se n è dispari.

Dimostrazione. Supponiamo che in ogni vertice si incontrino p facce e che ogni faccia sia un q -agono regolare. È chiaro che sia p che q non possono essere inferiori a 3; inoltre la somma degli angoli in un vertice è minore di 2π ed ogni angolo è uguale a $(q - 2)\pi/q$, essendo l'angolo di un q -agono regolare. Quindi abbiamo:

$$\frac{p(q - 2)\pi}{q} < 2\pi,$$

da cui

$$(p - 2)(q - 2) < 4.$$

Si vede quindi che ogni soluzione di questa disuguaglianza con $p, q \geq 3$ deve avere necessariamente p o $q = 3$, per cui le soluzioni sono:

$$(p, q) = (3, 3), (3, 4), (4, 3), (3, 5), (5, 3)$$

I corrispondenti poliedri regolari (fig. 1.1) sono:

	Facce	Spigoli	Vertici
Tetraedro	4	6	4
Esaedro	6	12	8
Ottaedro	8	12	6
Dodecaedro	12	30	20
Icosaedro	20	30	12

Tali poliedri si chiamano anche *solidi platonici*, ai quali corrispondono i rispettivi *numeri platonici*, che indicano il numero dei vertici.

Oltre ai poliedri regolari incontreremo anche dei poliedri non regolari, quali: la *piramide*, che viene denominata a seconda della sua base: *triangolare*, *quadrata*, *pentagonale*, ...; la *bipiramide* cioè il poliedro formato da due piramidi aventi la base in comune; i *poliedri semiregolari* o *archimedei*, cioè i poliedri aventi facce regolari, ma non tutte dello stesso numero di lati.

Di notevole importanza è inoltre il concetto di *duale* di un poliedro, cioè di un poliedro

FIGURA 1.1: *Poliedri regolari*

costruito posizionando un vertice nel baricentro di ogni faccia del poliedro originale e unendo i punti ottenuti. Quindi il duale di un poliedro ha tanti vertici quante sono le facce del poliedro originale e tante facce quanti sono i vertici del poliedro originale; ad esempio il duale di un tetraedro è un altro tetraedro, il cubo e l'ottaedro sono reciprocamente duali, così come l'icosaedro e il dodecaedro.

La sfera

Data una generica sfera in \mathbf{R}^3 ed un suo diametro AB , chiamiamo:

Poli: gli estremi del diametro AB .

Paralleli: le circonferenze ottenute intersecando piani perpendicolari ad AB . Il parallelo ottenuto sezionando la sfera con il piano passante per il centro si chiama *equatore* ed è una circonferenza *massima*, cioè con il raggio uguale a quello della sfera. Chiamiamo *livelli* i paralleli che contengono punti di una configurazione.

Meridiani: le circonferenze massime ottenute intersecando la sfera con piani passanti per AB .

Zone sferiche: le parti della sfera ottenute intersecando la superficie con striscie solide le cui facce la intersecano.

Calotte sferiche: le parti della sfera ottenute intersecando la superficie con semispazi aventi origine da piani passanti per essa; sono quindi dei casi particolari di zone sferiche.

Denotiamo una calotta sferica di S^2 centrata in $y \in S^2$ e con raggio t con $C(y, t) = \{x \in S^2 : |x - y| \leq t\} = \{x \in S^2 : \langle x, y \rangle \geq 1 - t^2/2\}$, indicando con $\langle x, y \rangle$ il prodotto scalare standard su \mathbf{R}^3 dei vettori x e y .

Definizione 1.2.4. Si definisce *partizione regolare di S^2 in N parti* una collezione $\mathcal{D} = \{D_i\}_{i \leq N}$ di sottoinsiemi chiusi di S^2 tali che:

1.
$$\bigcup_{i=1}^N D_i = S^2,$$

2. $D_i \cap D_j$ ha interno vuoto per ogni $i \neq j$,
3. $\sigma(D_i^\circ) = 4\pi/N \quad \forall i \leq N$,

indicando, in generale, con D° l'interno dell'insieme D e con $\sigma(D) = \int_D d\sigma$ l'area di D .

1.2.2 Gruppi di simmetria delle configurazioni

Sia $O(3)$ il gruppo delle isometrie di S^2 . Data una configurazione di punti ω_N , il *gruppo di simmetria* di ω_N è il sottogruppo di $O(3)$ costituito dalle isometrie che trasformano ω_N in sé stessa:

$$S(\omega_N) = \{h \in O(3) : h(\omega_N) = \omega_N\}.$$

Chiamiamo ogni isometria di $S(\omega_N)$ un'*operazione* di simmetria mentre un *elemento di simmetria* di una data operazione è il luogo dei punti che l'operazione trasforma in sé stessi. Tra le possibili isometrie dello spazio incontreremo la *rotazione* e la *riflessione*. La prima lascia fissi tutti i punti di una particolare retta, che viene chiamata appunto *asse della rotazione*; diciamo che tale asse ha *ordine* k , con k numero intero positivo, se la rotazione di $360/k$ gradi determina la configurazione stessa. La riflessione ha invece come elemento di simmetria un piano, che può essere verticale od orizzontale. Per la classificazione dei gruppi di simmetria $S(\omega_N)$ utilizziamo la notazione di Schönflies:

Gruppi Ciclici I gruppi ciclici denotati con C_k hanno come generatore una rotazione di $360/k$ gradi attorno all'asse che collega i due poli; il caso particolare C_1 è il gruppo banale formato dalla sola identità. Il gruppo formato solo dall'identità e dalla riflessione rispetto ad un piano viene denotato con C_s .

Gruppi Diedrali I gruppi diedrali possono contenere, oltre a rotazioni attorno all'asse verticale di ordine k , anche piani speculari orizzontali o verticali. I gruppi diedrali che indichiamo con D contengono anche k rotazioni rispetto ad un asse orizzontale di ordine 2. Si determinano quindi i seguenti gruppi: gruppi D_{kh} contenenti rotazione intorno ad un asse verticale di ordine k e riflessione rispetto

al piano equatoriale; gruppi D_{kd} contenenti rotazione intorno ad un asse verticale di ordine k e k riflessioni rispetto a k piani verticali; gruppi D_k , sottogruppi dei precedenti solo rotazionali.

Il gruppo minimo che contiene tutti gli elementi di un gruppo C_k , per un certo k , e k riflessioni rispetto a k piani verticali viene denotato con C_{kv} pur essendo un gruppo diedrale; si utilizza questa notazione per differenziare i gruppi C e D in base alla presenza o meno di assi rotazionali orizzontali. Da notare che il gruppo C_s è sia ciclico che diedrale.

Gruppi dei Solidi Platonici Oltre ai gruppi ciclici e diedrali, consideriamo anche i gruppi di simmetria dei solidi platonici, con la seguente notazione. Denotiamo con T_d il gruppo di simmetria *tetraedrale*, cioè lo stesso del tetraedro, con O_h il gruppo di simmetria *ottaedrale* e con I_h il gruppo *icosaedrale*. I pedici d e h sono dovuti ai piani speculari verticali ed orizzontali che possiedono i rispettivi solidi. Se invece escludiamo dai tre gruppi le riflessioni, otteniamo i rispettivi sottogruppi solo rotazionali T , O ed I .

Osservazione 1.2.5. I poliedri duali hanno lo stesso gruppo di simmetria dei poliedri originali, perché ogni trasformazione cambia i vertici di un poliedro allo stesso modo in cui cambia le facce del suo duale; quindi l'esaedro ha gruppo simmetria O_h e il dodecaedro ha gruppo di simmetria I_h .

Esempio 1.2.6. Il gruppo C_3 ha come generatore una rotazione di 120 gradi intorno all'asse verticale, per cui il gruppo ha tre elementi: l'identità, una rotazione di 120 gradi ed una di 240 gradi.

Esempio 1.2.7. Il gruppo C_{3v} contiene i tre elementi del gruppo C_3 , tre riflessioni rispetto a piani verticali e le composizioni di queste con le rotazioni.

Esempio 1.2.8. Il gruppo D_2 contiene l'identità, la rotazione di 180 gradi rispetto all'asse verticale, due rotazioni di 180 gradi rispetto a due assi orizzontali e le possibili composizioni.

Esempio 1.2.9. Il gruppo D_{5h} contiene le cinque rotazioni rispetto all'asse verticale, la

riflessione rispetto al piano orizzontale, cinque rotazioni di 180 gradi rispetto a cinque distinti assi orizzontali, e tutte le possibili composizioni.

Per identificare una configurazione si utilizza il simbolo del proprio gruppo di simmetria; a tale simbolo si può aggiungere, per completezza, una sequenza di numeri tra parentesi, che indica la suddivisione dei punti nei vari livelli³.

Tale descrizione non è univoca, perché non dice nulla sulla posizione dei punti, ma può essere comoda per avere un'idea della rappresentazione. Inoltre ogni poliedro può essere descritto in modi diversi, a seconda della direzione in cui lo si guarda; ad esempio un ottaedro può essere descritto con la suddivisione $(1 : 4 : 1)$, ma anche con la suddivisione $(2 : 2 : 2)$. Abbiamo visto anche che un poliedro può avere un asse rotazionale verticale di un certo ordine e un asse rotazionale orizzontale di un altro ordine. Pertanto, se non viene specificato, un poliedro verrà descritto in base alla direzione nord-sud.

Esempio 1.2.10. L'icosaedro regolare si denota con i simboli $I_h(1 : 5 : 5 : 1)$ oppure $I_h(1 : 5^2 : 1)$, dove i singoli punti rappresentati con 1 sono situati ai poli e la coppia di pentagoni rappresentati con 5 su piani paralleli al piano equatoriale.

Esempio 1.2.11. I simboli $C_{4v}(1 : 4^3)$ rappresentano una disposizione con simmetria C_{4v} , con un punto al polo e tre insiemi di quattro punti coplanari e simmetrici rispetto all'asse (di ordine 4) che unisce i due poli. Inoltre la configurazione presenta anche quattro piani speculari verticali.

1.3 Proprietà delle configurazioni ottimali

La ricerca delle configurazioni ottimali è un problema che, nella maggior parte dei casi, è risolvibile solo per via numerica o tramite approssimazioni. Tuttavia, alcune proprietà delle configurazioni ottimali possono essere stabilite a priori, come la separazione minima dei punti o il momento di dipolo nel caso logaritmico; altre proprietà,

³Per ragioni di spazio, un numero ripetuto più volte può essere descritto una sola volta elevato alla relativa potenza; ad esempio $(1 : 4^3)$ al posto di $(1 : 4 : 4 : 4)$.

invece, possono essere congettrate analizzando i risultati numerici.

Per *separazione minima* dei punti si intende la più piccola distanza tra i punti di una configurazione. Intuitivamente, possiamo ipotizzare che i punti di una configurazione ottimale siano *ben separati* sulla sfera, cioè che la separazione minima sia limitata inferiormente da una quantità dipendente da N . Vedremo infatti in cap. 3 che questo è vero per $\alpha < 2$; per $\alpha \geq 2$, invece, vedremo in sez. 2.1 che i punti di una configurazione ottimale possono coincidere.

Il *momento di dipolo* di un sistema di N cariche unitarie poste nei punti di una configurazione $\omega_N = \{x_1, \dots, x_N\}$ è una grandezza vettoriale definita:

$$\mathbf{M}(N) = \sum_{i=1}^N x_i.$$

È interessante valutare il momento di dipolo di una configurazione ottimale; infatti, per come è definito, tale vettore può dare indicazioni sulla geometria della configurazione. Dai risultati numerici del cap. 4 è emerso che non tutte le configurazioni ottimali hanno momento dipolo nullo, mentre per $\alpha = 0$ dimostreremo in cap. 3 che se una configurazione ha energia minima, allora deve avere necessariamente un momento di dipolo nullo.

Un'altra proprietà notevole che presentano alcune configurazioni ottimali, indipendentemente da α , è la *chiralità*: una configurazione viene detta *chirale* se non è possibile sovrapporla, tramite rotazioni, alla sua immagine speculare. Vedremo in cap. 4 un criterio per stabilire la chiralità di una configurazione.

1.3.1 Celle di Dirichlet

Per lo studio della geometria delle configurazioni ottimali e, di conseguenza, della separazione minima dei punti, introduciamo ora l'importante concetto di "poligonazione" della sfera.

Definizione 1.3.1. Sia ω_N una configurazione di punti sulla sfera. Associamo a ω_N una famiglia di N sottoinsiemi di S^2 definiti in questo modo:

$$D_i = \{x \in S^2 : |x - x_i| = \min_{1 \leq j \leq N} |x - x_j|\}, \quad i \leq N.$$

Chiamiamo ogni D_i la *cella di Dirichlet* del punto x_i .

In altre parole ogni D_i è una regione della sfera formata da quei punti che sono più vicini a x_i che agli altri punti di ω_N ; la figura 1.2 mostra un esempio con una configurazione di 27 punti.

FIGURA 1.2: *Rappresentazione delle celle di Dirichlet associate alla configurazione ottimale di 27 punti (emisfero superiore). Si possono osservare 6 facce pentagonali e 10 esagonali, delle quali 5 a livello equatoriale; considerando anche le celle dell'emisfero inferiore, identico a quello superiore, otteniamo 12 facce pentagonali e 15 esagonali. Sono inoltre evidenziati i vari livelli in cui sono disposti i punti.*

Osservazione 1.3.2. Le celle di Dirichlet sono sottoinsiemi chiusi e regolari di S^2 tali che:

$$\bigcup_{i=1}^N D_i = S^2,$$

- $D_i \cap D_j$ ha interno vuoto per ogni $i \neq j$,

quindi una famiglia di celle di Dirichlet $\{D_i\}_{i \leq N}$ associata ad una configurazione ω_N tale che per ogni $i \leq N$ risulti $\sigma(D_i^\circ) = 4\pi/N$ è una partizione regolare della sfera.

Osservazione 1.3.3. Si può verificare che una cella di Dirichlet D_i di un punto $x_i \in \omega_N$ è un *poligono sferico*, cioè il bordo di D_i consiste in un numero finito di archi appartenenti a circonferenze massime. Diciamo che D_i è un *r-agono sferico* se il bordo di D_i consiste in r archi.

In [19] è stata formulata la seguente congettura sulla geometria delle celle di Dirichlet di una configurazione ottimale:

Congettura 1.3.4. *Se $N \geq 6$, allora le celle di Dirichlet di una configurazione ottimale $\tilde{\omega}_N$ consistono esclusivamente in quadrilateri, pentagoni ed esagoni sferici.*

Si è inoltre osservato sperimentalmente che, per $N \geq 12$, *tutte le celle di Dirichlet relative a configurazioni ottimali sono di tipo esagonale tranne esattamente 12, di tipo pentagonale*; inoltre tali esagoni sono approssimativamente uguali e regolari. Questo fatto ha indotto ad ipotizzare che le configurazioni ottimali tendono ad imitare il reticolo esagonale planare, per cui nella prossima sezione introdurremo il problema del “Best Packing” nel piano e nella sfera, un problema connesso anche alla separazione dei punti.

1.3.2 Il problema del “Best Packing”

Nel piano euclideo possiamo costruire un reticolo formato esclusivamente da esagoni regolari congruenti (fig. 1.3). I centri ed i vertici di tali esagoni sono soluzioni di vari problemi, tra i quali il problema del *Best Packing nel piano*, che può essere formulato nel seguente modo: *sistemare dei dischi di uno stesso raggio prefissato in modo che tali dischi non si sovrappongano e che il numero di dischi per unità di area sia massimo.*

Nel caso della sfera, invece, non possiamo costruire un reticolo sulla sua superficie utilizzando solo esagoni. Tale situazione è una conseguenza della formula di Eulero (1.5): per poter costruire un reticolo simile sulla sfera dobbiamo necessariamente

FIGURA 1.3: *Reticolo esagonale nel piano*

modificare il modello esagonale inserendo delle facce pentagonali, come descrive la proposizione 1.3.5; tali pentagoni possono essere visti come una deformazione del modello esagonale dovuto all'adattamento sulla sfera.

Proposizione 1.3.5. *Per $N \geq 12$ ogni reticolo sulla sfera composto esclusivamente da esagoni e pentagoni deve contenere esattamente 12 pentagoni.*

Dimostrazione. Assumiamo che da ogni vertice escano tre lati, per cui, per la formula di Eulero, il numero totale di vertici è $2(N - 2)$ mentre quello degli spigoli è $3(N - 2)$. Se denotiamo con p il numero di facce pentagonali e con q il numero di quelle esagonali, otteniamo:

$$\frac{5p + 6q}{2} = 3(p + q - 2),$$

dalla quale si ricava $p = 12$. \square

Esempio 1.3.6. Per $N = 32$, abbiamo il modello del ben noto pallone da calcio, con 20 esagoni e 12 pentagoni; curiosamente la struttura duale di questa configurazione rappresenta invece la molecola del carbonio-60 (sez. 4.3.3). È emerso sperimentalmente che i 12 punti le cui celle di Dirichlet sono pentagoni tendono a distribuirsi il più lontano possibile; nonostante questi non formino un icosaedro, la loro disposizione è molto simile a tale poliedro.

Il problema del *Best Packing sulla sfera* può assumere diversi aspetti, infatti è possibile formularlo in vari modi equivalenti:

1. Trovare il massimo diametro di N cerchi uguali che possono essere sistemati su una sfera senza sovrapporsi.
2. Si definisce *densità di impacchettamento* ρ_N il rapporto tra l'area totale di N cerchi uguali disgiunti sulla superficie della sfera e l'area totale della sfera; trovare le configurazioni di cerchi per cui è massimo valore di ρ_N .
3. Per quale configurazione di N punti sulla sfera la più piccola distanza tra due punti è massima?

Quest'ultimo enunciato viene comunemente chiamato *problema di Tammes* ed è quello che analizzeremo, in quanto è strettamente connesso al problema di distribuzione ottimale dei punti ed alla determinazione della minima distanza dei punti stessi. In pratica questo problema consiste nella determinazione della seguente quantità:

$$d_N = \sup_{\omega_N \in S^2} \inf_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j|.$$

W. Habicht e B.L. Van der Waerden [10] hanno dimostrato i seguenti limiti:

$$\sqrt{\frac{8\pi}{\sqrt{3}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} - \frac{C}{\sqrt[3]{N^2}} \leq d_N \leq \sqrt{\frac{8\pi}{\sqrt{3}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (1.6)$$

dove C è un'opportuna costante positiva.

L'idea essenziale per la dimostrazione dei due limiti è la cosiddetta *proiezione esagonale*, cioè la proiezione sulla sfera del reticolo esagonale costruito nel piano. Questo metodo ha fornito il termine dominante in (1.6):

$$\delta_N = \sqrt{\frac{8\pi}{\sqrt{3}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Infatti, sia \mathcal{L} un reticolo esagonale normalizzato in modo che la più piccola distanza tra due punti sia 1:

$$\{a + be^{i\pi/3} : a, b \in \mathbf{Z}\},$$

cioè la cella di Dirichlet di ogni punto del reticolo è un esagono con area $\sqrt{3}/2$ e, assumendo $(0,0), (1,0) \in \mathcal{L}$, un generico punto di \mathcal{L} si può rappresentare con $a(1,0) + b(1/2, \sqrt{3}/2)$. Considerando una disposizione ottimale di N punti su una sfera, immaginiamo che un punto di questi sia il centro di una cella di Dirichlet, e che la sua proiezione su un piano tangente sia parte di un reticolo in scala opportuna (trascurando le 12 facce pentagonali). Il fattore di scala si può ricavare uguagliando le aree totali:

$$\delta_N^2 \cdot N \frac{\sqrt{3}}{2} = 4\pi,$$

che fornisce δ_N , cioè il valore approssimato della distanza minima tra due punti sulla sfera.

Recentemente, la tecnica della proiezione esagonale è stata utilizzata da A.B.J. Kuijlaars e E.B. Saff in [11] anche per la determinazione della α -energia ottimale per certi α e per la formulazione di alcune congetture (cap. 2). Questi risultati dipendono da funzioni associate ai reticoli, quali

- la *funzione zeta di Riemann*, definita

$$\zeta(\alpha) = 1 + \frac{1}{2^\alpha} + \frac{1}{3^\alpha} + \frac{1}{4^\alpha} + \dots$$

- la \mathcal{L} -*funzione di Dirichlet*, che in questo caso

$$\mathcal{L}(\alpha) = 1 - \frac{1}{2^\alpha} + \frac{1}{4^\alpha} - \frac{1}{5^\alpha} + \frac{1}{7^\alpha} - \dots$$

1.4 Sugli algoritmi di ottimizzazione

In generale, nei casi in cui non è possibile determinare un'ottimizzazione per via analitica, vengono utilizzati degli algoritmi di ottimizzazione per poter risolvere il problema per via computazionale. Il problema in esame è un tipico esempio di problema non risolvibile analiticamente (esclusi alcuni valori particolari dei parametri), pertanto descriveremo nel cap. 4 degli algoritmi utilizzati per elaborare numericamente delle soluzioni.

Tuttavia, non sempre gli algoritmi forniscono “buoni” risultati. La causa di ciò è data dall’esistenza, al crescere di N , di molte soluzioni *locali* che, inoltre, presentano valori di energia molto simili tra loro. Questo fatto rende molto difficile la determinazione della soluzione *globale* poiché, in generale, non è possibile confrontare tutte le soluzioni locali, per cui le configurazioni trovate sono in realtà delle probabili soluzioni. Una particolare elaborazione numerica [9] ha mostrato che nell’intervallo $70 \leq N \leq 112$ il numero $\Omega(N)$ di distinte soluzioni locali cresce in modo esponenziale con la legge $\Omega(N) \approx 0.382 \exp(0.0479N)$; se la tendenza dovesse mantenersi anche per $N > 112$, calcolare una soluzione globale sarebbe proibitivo.

Capitolo 2

Ottimizzazione della α -energia

La determinazione di una formula generale per $\mathcal{E}(\alpha, N)$ sembra essere, ancora oggi, alquanto difficile e lontana; tuttavia, siamo in grado di stabilire degli intervalli ai quali appartiene il valore di $\mathcal{E}(\alpha, N)$.

Analizzeremo separatamente i casi $\alpha \geq 2$, $0 < |\alpha| < 2$, $\alpha \leq -2$ e $\alpha = 0$, perché in tali intervalli il procedimento di calcolo di \mathcal{E} è notevolmente diverso a causa delle diverse interazioni tra le particelle; affronteremo infine il caso particolare $\alpha = 1$ in modo indipendente.

2.1 Massimizzazione nel caso $\alpha \geq 2$

Siano X un insieme compatto nello spazio \mathbf{R}^3 e \mathbb{M}_X la classe di tutte le *distribuzioni di massa positiva*¹ su X con massa totale uguale a 1, cioè la classe di tutte le misure μ tali che $\mu(X) = 1$ e $\mu(\mathbf{R}^3 - X) = 0$. Tra queste denotiamo con δ_x la misura *massa unità* concentrata in $x \in X$, cioè la misura definita, per ogni sottoinsieme $A \subset X$, $\delta_x(A) = 1$ se $x \in A$ e $\delta_x(A) = 0$ se $x \notin A$.

Sia $\alpha > 0$; definiamo i seguenti funzionali:

$$I(\mu, \mu') = \iint_{X \times X} |x - y|^\alpha d\mu(x) d\mu'(y), \quad I(\mu) = I(\mu, \mu), \quad (2.1)$$

¹Utilizziamo il termine *positiva*, anche se, in realtà, si tratta di distribuzioni di massa *non negativa*.

dove $\mu, \mu' \in \mathbb{M}_X$.

Osserviamo che, per la definizione (2.1) e per $X = S^2$, segue $I(\sigma^*) = I_{\sigma^*}(\alpha)$, denotando con σ^* la misura di Lebesgue normalizzata rispetto a S^2 .

Il *potenziale* di una distribuzione $\mu \in \mathbb{M}_X$ è definito

$$p_\mu(x) = \int_X |x - y|^\alpha d\mu(y).$$

Naturalmente si ha:

$$I(\mu, \mu') = \int_X p_\mu(x) d\mu'(x) = \int_X p_{\mu'}(y) d\mu(y).$$

Il *supporto* di una distribuzione $\mu \in \mathbb{M}_X$ è il sottoinsieme $X_0 \subset X$ definito come la chiusura dell'insieme

$$\{x \in X : \mu(x) \neq 0\}$$

Definizione 2.1.1. Se $\alpha > 0$, definiamo *distribuzione massimale* una distribuzione $\bar{\mu} \in \mathbb{M}_X$ tale che

$$I(\bar{\mu}) = M := \sup_{\mu \in \mathbb{M}_X} I(\mu).$$

Teorema 2.1.2. Per ogni X e per ogni $\alpha > 0$ esiste una distribuzione massimale.

Dimostrazione. Sia $\{\mu_k\}$ una successione di distribuzioni in \mathbb{M}_X e $I(\mu_k) \rightarrow M$. Selezioniamo da questa una sottosuccessione $\{\mu_{k_j}\}$ convergente debolmente ad una distribuzione $\hat{\mu}$, cioè tale che per ogni funzione continua f si abbia $\int_X f(y) d\mu_{k_j} \rightarrow \int_X f(y) d\hat{\mu}$ (per la nozione di convergenza debole rif. [20]). Poiché la funzione $|x - y|^\alpha$ è continua in x e y , otteniamo $I(\mu_{k_j}) \rightarrow I(\hat{\mu})$, per cui $I(\hat{\mu}) = M$. Ma $\hat{\mu}$, essendo un limite debole di elementi di \mathbb{M}_X , deve appartenere a \mathbb{M}_X , quindi $\hat{\mu}$ è massimale. \square

Teorema 2.1.3. Se μ è una distribuzione massimale con supporto X_0 , allora

$$\begin{aligned} p_\mu(y) &\leq M && \text{per } y \in X, \\ p_\mu(y) &= M && \text{per } y \in X_0. \end{aligned}$$

Dimostrazione. Sia ν una qualsiasi distribuzione di massa su X tale che

$$\nu(X) = 0; \quad \mu + \epsilon \cdot \nu \geq 0, \quad \forall \epsilon : 0 \leq \epsilon \leq 1. \quad (2.2)$$

Segue che $(\mu + \epsilon \cdot \nu) \in \mathbb{M}_X$, e quindi

$$M \geq I(\mu + \epsilon \cdot \nu) = I(\mu) + \epsilon^2 I(\nu) + 2\epsilon I(\mu, \nu) = M + \epsilon^2 I(\nu) + 2\epsilon I(\mu, \nu);$$

questo implica che, per ogni $0 \leq \epsilon \leq 1$,

$$0 \geq \epsilon \cdot (2I(\mu, \nu) + \epsilon \cdot I(\nu)),$$

cioè

$$I(\mu, \nu) \leq 0. \quad (2.3)$$

Supponiamo che il teorema non sussista. Allora possiamo trovare un punto $y_1 \in X_0$ e un punto $y_2 \in X$ tali che

$$a = p_\mu(y_2) > p_\mu(y_1) = b.$$

Sia K una boccia di centro y_1 che non contenga y_2 e tale che l'oscillazione di p_μ in K sia $\leq \frac{a-b}{2}$. Poiché $y_1 \in X_0$, si ha $\mu(K) > 0$. Definiamo allora la distribuzione ν in modo che “muova la massa da K a y_2 ”:

$$\nu(x) = \mu(K) \cdot \delta_{y_2}(x) - \mu(x \cap K).$$

La distribuzione ν soddisfa la (2.2) e quindi la (2.3). Ma

$$\begin{aligned} I(\mu, \nu) &= \int_X p_\mu(x) d\nu = p_\mu(y_2) \cdot \mu(K) - \int_K p_\mu(x) d\mu(x) \\ &\geq a \cdot \mu(K) - \left(b + \frac{a-b}{2}\right) \cdot \mu(K) - \frac{a-b}{2} \cdot \mu(K) > 0, \end{aligned}$$

in contraddizione con la (2.3). Quindi $p_\mu(y) = C$ per $y \in X_0$ e $p_\mu(y) \geq C$ per $y \in X$ e C opportuna costante. Di conseguenza,

$$M = I(\mu) = \int_X p_\mu(x) d\mu(x) = \int_{X_0} p_\mu(x) d\mu(x) = C \int_{X_0} d\mu(x) = C,$$

che completa la dimostrazione. \square

Corollario 2.1.4. *Se $\alpha = 2$, allora X_0 è un sottoinsieme di una sfera.*

Dimostrazione. Risulta

$$\begin{aligned} p_\mu(y) &= \int_{X_0} \sum_{i=1}^n (x^{(i)} - y^{(i)})^2 d\mu(x) \\ &= \sum_{i=1}^n (y^{(i)})^2 + \int_{X_0} \sum_{i=1}^n (x^{(i)})^2 d\mu(x) - 2 \sum_{i=1}^n y^{(i)} \int_{X_0} x^{(i)} d\mu(x) \end{aligned} \quad (2.4)$$

e se $y \in X_0$, abbiamo $p_\mu(y) = M$, che è l'equazione di una sfera. \square

Corollario 2.1.5. *Se $0 < \alpha < 2$, la distribuzione massimale è unica.*

Dimostrazione. Siano μ e μ' due distribuzioni massimali. Posto $\nu = \mu - \mu'$, ν soddisfa le condizioni (2.2) e quindi la (2.3). Poiché

$$M = I(\mu + \nu) = I(\mu) + I(\nu) + 2I(\mu, \nu) = M + I(\nu) + 2I(\mu, \nu),$$

si ha:

$$I(\nu) = -2I(\mu, \nu) \geq 0,$$

per cui

$$\nu \equiv 0; \quad \mu \equiv \mu'.$$

Queste relazioni seguono direttamente dal lemma seguente che non dimostriamo. \square

Lemma 2.1.6. *Se $0 < \alpha < 2$ e se ν è una distribuzione su X tale che $\int_X d\nu = 0$ e $I(\nu) \geq 0$, allora ν è la misura nulla.*

Teorema 2.1.7 (Björck). *Se $\alpha = 2$ e $X = S^2$, allora*

$$M = 2$$

e una distribuzione è massimale se e solo se il suo supporto è un sottoinsieme di S^2 avente baricentro nel centro di S^2 .

Dimostrazione. Sia μ una distribuzione massimale con supporto X_0 e $y \in X_0$. Moltiplicando la (2.4) per $d\mu(x)$ ed integrando su X_0 , otteniamo

$$I(\mu) = 2 \int_{X_0} \left(\sum_{i=1}^n (x^{(i)})^2 \right) d\mu(x) - 2 \sum_{i=1}^n \left(\int_{X_0} x^{(i)} d\mu(x) \right)^2.$$

Supponiamo ora che il sistema di coordinate sia scelto con l'origine nel centro di S^2 . Allora il primo termine di $I(\mu)$ è massimo ed è uguale a 2 mentre il secondo termine è minimo ed uguale a 0 se e solo se

$$\int_{X_0} x^{(i)} d\mu(x) = 0 \quad \text{per ogni } i \leq n.$$

Quindi $I(\mu)$ è massimale ed uguale a 2 se e solo se l'origine è il baricentro di μ , che completa la dimostrazione. \square

Teorema 2.1.8 (Björck). *Se $\alpha > 2$ e $X = S^2$, allora*

$$M = 2^{\alpha-1}$$

e una distribuzione è massimale se e solo se consiste in due punti-massa, ognuno di massa $1/2$, posti in due punti della sfera diametralmente opposti.

Dimostrazione. Per ogni $\mu \in \mathbb{M}_X$, si ha:

$$\begin{aligned} I(\mu) &= \iint_{X \times X} |x - y|^\alpha d\mu(x) d\mu(y) \\ &= \iint_{X \times X} |x - y|^{\alpha-2} |x - y|^2 d\mu(x) d\mu(y) \\ &\leq 2^{\alpha-2} \iint_{X \times X} |x - y|^2 d\mu(x) d\mu(y) \\ &\leq 2^{\alpha-2} \sup_{\mu \in \mathbb{M}_X} \iint_{X \times X} |x - y|^2 d\mu(x) d\mu(y) \\ &= 2^{\alpha-2} \cdot 2 = 2^{\alpha-1}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Dalla (2.5):

$$M \leq 2^{\alpha-1}.$$

Ma una distribuzione $\hat{\mu}$, consistente in $1/2$ massa in ciascun punto di una coppia antipodale, fornisce

$$I(\hat{\mu}) = 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot 2^\alpha = 2^{\alpha-1}$$

e, di conseguenza,

$$M = 2^{\alpha-1}.$$

Ognuna delle due disuguaglianze in (2.5) sono delle disuguaglianze strette per tutte quelle coppie di elementi che contribuiscono all'integrale $\iint_{X \times X} |x - y|^2 d\mu(x) d\mu(y)$, cioè tali che $|x - y| \neq 0$. Quindi l'unica distribuzione che fornisce l'uguaglianza in (2.5) è la $\hat{\mu}$. Questo completa la dimostrazione. \square

Dai teoremi 2.1.7 e 2.1.8 si ricavano direttamente i seguenti risultati:

- $\mathcal{E}(2, N) = \sum_{i < j} (x_i - x_j)^2 = N^2$; la configurazione che determina \mathcal{E} è centrosimmetrica.
- $\mathcal{E}(\alpha, N) = (N^2/2)^2 \cdot 2^\alpha = 2^{\alpha-2} N^2$ per $\alpha > 2$ e N pari; la configurazione che determina \mathcal{E} è distribuita in due punti diametralmente opposti. Per N dispari, si dimostra che la configurazione massimale si distribuisce su più punti, ma non approfondiamo questo discorso.

Osservazione 2.1.9. I teoremi 2.1.7 e 2.1.8 mostrano anche che, per $\alpha \geq 2$, la soluzione massimale non è unica. Inoltre, per questi valori di α le configurazioni ottimali possono avere dei punti coincidenti.

2.2 Ottimizzazione nel caso $0 < |\alpha| < 2$

L'obiettivo è ottenere dei limiti di \mathcal{E} utilizzando una opportuna partizione regolare della sfera (sez. 1.2.1). L'utilità di tale costruzione si può dedurre dal seguente teorema, che si può facilmente generalizzare anche a partizioni della sfera $S^{n-1} \subset \mathbf{R}^n$.

Diremo che una funzione reale f , definita su uno spazio topologico, è *semicontinua inferiormente* se, per ogni $a \in \mathbf{R}$, l'insieme $\{x : f(x) > a\}$ è aperto; se invece è aperto, per ogni $a \in \mathbf{R}$, l'insieme $\{x : f(x) < a\}$, diremo che f è *semicontinua superiormente*. Indicheremo inoltre con $\text{diam}(D)$ il *diametro* dell'insieme D , definito $\text{diam}(D) = \sup\{|x - y| : x, y \in D\}$.

Teorema 2.2.1 (Rakhmanov - Saff - Zhou). *Sia $K(r)$, $0 < r \leq 2$, una funzione decrescente semicontinua inferiormente e supponiamo che*

$$\beta(K) := \frac{1}{(\sigma(S^2))^2} \iint_{S^2 \times S^2} K(|x - y|) \, d\sigma(x) \, d\sigma(y) < \infty. \quad (2.6)$$

Se $\mathcal{D} = \{D_i\}_{i=1}^N$ è una partizione regolare di S^2 in N parti, allora esistono punti $\{\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N\}$, con $\hat{x}_i \in D_i$ per ogni $i \leq N$, tali che

$$\sum_{i \neq j} K(|\hat{x}_i - \hat{x}_j|) \leq N^2 \beta(K) - \sum_{i=1}^N K(\text{diam}(D_i^\circ)). \quad (2.7)$$

Dimostrazione. Definiamo:

$$h(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i \neq j} K(|x_i - x_j|),$$

$$J = \inf\{h(x_1, \dots, x_N) : x_i \in D_i^\circ, \text{ per } i = 1, \dots, N\},$$

$$d\tilde{\sigma} = \frac{N}{4\pi} d\sigma, \quad d\tilde{\sigma}_i = d\tilde{\sigma} \upharpoonright_{D_i^\circ}, \quad \text{per } i = 1, \dots, N,$$

pertanto $\tilde{\sigma}_i(D_j^\circ) = \delta_{ij}$. Integrando la disuguaglianza $J \leq h(x_1, \dots, x_N)$ rispetto a $d\tilde{\sigma}_i(x_1) \dots d\tilde{\sigma}_i(x_N)$, otteniamo:

$$\begin{aligned} J &\leq \int \dots \int \sum_{i \neq j} K(|x_i - x_j|) \, d\tilde{\sigma}_i(x_1) \dots d\tilde{\sigma}_i(x_N) \\ &= \sum_{i \neq j} \int_{D_i^\circ} \int_{D_j^\circ} K(|x - y|) \, d\tilde{\sigma}_i(x) \, d\tilde{\sigma}_j(y) \\ &= \iint K(|x - y|) \, d\tilde{\sigma}(x) \, d\tilde{\sigma}(y) - \sum_{i=1}^N \iint_{D_i^\circ \times D_i^\circ} K(|x - y|) \, d\tilde{\sigma}_i(x) \, d\tilde{\sigma}_i(y), \quad (2.8) \end{aligned}$$

dove nell'ultima uguaglianza abbiamo usato il fatto che il bordo di ogni D_i ha misura zero. Poiché K è decrescente, otteniamo dalle espressioni (2.6) e (2.8) la disuguaglianza

$$J \leq N^2 \beta(K) - \sum_{i=1}^N K(\text{diam}(D_i^\circ)),$$

da cui segue il teorema per opportune $\hat{x}_i \in D_i$. \square

Osservazione 2.2.2. Se K è una funzione crescente semicontinua superiormente, allora la (2.7) è vera con il segno di disuguaglianza invertito.

Osservazione 2.2.3. Per $0 < |\alpha| < 2$ e nucleo $K = r^\alpha$, la funzione $\beta(K)$ è la costante di distribuzione continua, per cui risulta $\beta(K) = 2^{\alpha+1}/(2 + \alpha)$.

Teorema 2.2.4. *Per ogni $N \geq 2$ esiste una partizione regolare di S^2 in N parti con diametro di ogni parte $\leq 7/\sqrt{N}$.*

Osservazione 2.2.5. L'esistenza di una costante C tale che, per ogni $N \geq 2$, la sfera possa essere divisa in N parti di uguale area con diametro $\leq C/\sqrt{N}$, era un risultato già noto; con questo teorema si è potuto quantificare la costante C . La costante 7, per N sufficientemente grande, si può migliorare: ad esempio per $N \geq 3100$, si può trovare una partizione regolare della sfera tale che ogni parte abbia diametro $\leq 6/\sqrt{N}$; comunque C deve essere necessariamente ≥ 4 (non conosciamo la costante precisa) perché tra tutti i possibili sottoinsiemi di S^2 aventi area fissa $4\pi/N$, la calotta sferica ha diametro minimo, che è uguale a $4\sqrt{N-1}/N$. Tuttavia, se imponiamo che molte parti abbiano piccolo diametro, allora è possibile suddividere la sfera in quadrilateri sferici come descrive il prossimo teorema.

Teorema 2.2.6 (Rakhmanov - Saff - Zhou). *Dato $0 < \epsilon \leq 1$, esistono k_0, N_0 tali che, se $N > N_0$, esiste una partizione regolare $\mathcal{D} = \{D_j\}_{j=1}^N$ di S^2 che soddisfa:*

$$\text{diam}(D_j) \leq \begin{cases} \frac{2\sqrt{2\pi}(1+\epsilon)}{\sqrt{N}} & \text{se } k_0 + 1 \leq j \leq N - k_0 \\ \frac{2\sqrt{k_0}}{\sqrt{N}} & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Poiché le dimostrazioni dei teoremi 2.2.4 e 2.2.6 sono simili, analizziamo solo quella del teorema 2.2.6 facendo uso del lemma seguente che si dimostra per induzione. Per convenienza, dato p intero positivo, chiameremo una sequenza $\{y_k\}_{k=1}^p$ di numeri reali *simmetrica* se $y_k = y_{p-k+1}$ per tutti i k , $1 \leq k \leq p$.

Lemma 2.2.7. *Se p è un intero positivo dispari e $\{y_i\}_{i=1}^p$ è una sequenza simmetrica di numeri reali con la proprietà che $\sum_{i=1}^p y_i$ è un numero intero, allora esiste una sequenza simmetrica di interi $\{m_i\}_{i=1}^p$ tali che*

1. $\sum_{i=1}^p m_i = \sum_{i=1}^p y_i$;
2. $|y_1 - m_1| = |y_p - m_p| \leq \frac{1}{2}$; $|y_i - m_i| \leq 1$, $i = 2, \dots, p-1$;
3. $\left| \sum_{i=1}^k (y_i - m_i) \right| \leq \frac{1}{2} \quad \forall k = 1, \dots, p$.

Dimostrazione del Teorema 2.2.6 (cenni). Denotiamo con (θ, ϕ) , $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$, le coordinate sferiche su S^2 . Ad ogni partizione dell'intero N in $\gamma = (m_1, \dots, m_p)$, associamo una partizione regolare della sfera $\mathcal{D} = \{D_{k,j}\}$ come segue:

$$D_{k,j} = [\theta_{k-1}, \theta_k] \times \left[\frac{2\pi(j-1)}{m_k}, \frac{2\pi j}{m_k} \right], \quad j = 1, \dots, m_k, \quad k = 1, \dots, p,$$

dove $\theta_k = \arccos \left(1 - \frac{2}{N} \sum_{i=1}^k m_i \right)$, $k \geq 1$, e $\theta_0 = 0$. Chiamiamo questa partizione una

γ -partizione. Dato $0 < \epsilon \leq 1$, posto $\eta = 1 - \frac{1}{\sqrt{1+\epsilon}}$, definiamo:

$$k_0 = \frac{(\sqrt{\pi} + \eta)^2}{2\eta^2} + 1, \quad N_0 = \frac{16\pi k_0}{\eta^2} + 1,$$

$$p = \max\{q \in \mathbf{N} : q \text{ dispari}, q < \sqrt{\pi N}/2\},$$

$$\theta_0 = \arccos \left(1 - \frac{2k_0}{N} \right), \quad \Delta\theta = \frac{\pi - 2\theta_0}{p},$$

$$\theta'_k = \theta_0 + k \cdot \Delta\theta \quad \text{per } 0 \leq k \leq p, \quad \theta'_{p+1} = \theta'_{p+1} = \pi,$$

$$y_k = \frac{N}{2}(\cos \theta'_{k-1} - \cos \theta'_k), \quad \text{per } k = 1, \dots, p.$$

In base a queste definizioni, $\sum_{k=1}^p y_k = N - 2k_0$ e $\{y_k\}_{k=1}^p$ è una sequenza simmetrica di interi che soddisfa le proprietà del Lemma 2.2.7; si dimostra in [27] che la γ -partizione corrispondente a $\gamma = (k_0, m_1, \dots, m_p, k_0)$ soddisfa l'enunciato del teorema. \square

Osservazione 2.2.8. Senza la nozione di partizione regolare della sfera enunciata in sez. 1.2.1, suddividere la sfera in N parti aventi ciascuna “piccolo” diametro è un problema che si riconduce al “Best Packing” sulla sfera. Infatti, come conseguenza di un risultato di W. Habicht e B.L. Van der Waerden [10], la sfera può essere ricoperta da calotte sferiche ciascuna di diametro

$$\vartheta_N = \frac{4}{\sqrt{N}} \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{\sqrt{27}}}(1 + \epsilon_N), \quad \text{con } \epsilon_N > 0, \epsilon_N \rightarrow 0 \text{ per } N \rightarrow \infty.$$

Le celle di Dirichlet corrispondenti ai centri di queste N calotte formano una partizione della sfera in N parti ciascuna avente diametro $\leq \vartheta_N$. Nonostante questa non sia una partizione regolare, è ipotizzabile che, per

$$\gamma_N = \inf \left\{ \max_{1 \leq j \leq N} d(D_j) : \{D_j\}_{j=1}^N \text{ è una partizione regolare di } S^2 \right\},$$

abbiamo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{N} \gamma_N = 4 \sqrt{\frac{2\pi}{\sqrt{27}}} = 4.39854 \dots$$

Dai risultati dei teoremi 2.2.1 e 2.2.6 e dalla costante di distribuzione continua (1.3), si deduce il seguente

Corollario 2.2.9 (Rakhmanov - Saff - Zhou). *Per ogni $\alpha \in \mathbf{R}$, $0 < |\alpha| < 2$, $\forall \epsilon > 0 \exists N_0 = N_0(\epsilon, \alpha)$ tale che $\forall N > N_0$*

$$\mathcal{E}(\alpha, N) \leq \frac{2^\alpha}{2 + \alpha} N^2 - \frac{1}{2} (2\sqrt{2\pi})^\alpha (1 - \epsilon) N^{1-\alpha/2}, \quad \text{per } -2 < \alpha < 0; \quad (2.9)$$

$$\mathcal{E}(\alpha, N) \geq \frac{2^\alpha}{2 + \alpha} N^2 - \frac{1}{2} (2\sqrt{2\pi})^\alpha (1 - \epsilon) N^{1-\alpha/2}, \quad \text{per } 0 < \alpha < 2. \quad (2.10)$$

Osservazione 2.2.10. Unifichiamo i risultati del corollario introducendo la costante di distribuzione continua (1.3) ed il resto $R_{N,\alpha}$: per $0 < |\alpha| < 2$, c_1 e c_2 opportune costanti positive,

$$\mathcal{E}(\alpha, N) = I_\sigma(\alpha) \cdot \frac{N^2}{2} - R_{N,\alpha}, \quad \text{dove } c_1 N^{1-\alpha/2} \leq R_{N,\alpha} \leq c_2 N^{1-\alpha/2}, \quad (2.11)$$

per cui il termine dominante in $\mathcal{E}(\alpha, N)$ dipende dalla α -energia di una distribuzione continua sulla sfera.

Nonostante la (2.11) ci induca ad ipotizzare che il resto $R_{N,\alpha}$ sia dello stesso ordine di $N^{1-\alpha/2}$, non siamo in grado di calcolare il

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{R_{N,\alpha}}{N^{1-\alpha/2}}.$$

In [11] è stata formulata la seguente congettura, in base a considerazioni sui reticoli della sfera:

Congettura 2.2.11. *Se $-2 < \alpha < 0$, allora*

$$\mathcal{E}(\alpha, N) = \frac{2^\alpha}{2 + \alpha} N^2 + C_\alpha N^{1-\alpha/2} + o(N^{1-\alpha/2}),$$

dove $C_\alpha = 3 \left(\frac{\sqrt{3}}{8\pi} \right)^{-\alpha/2} \zeta(-\alpha/2) \mathcal{L}(-\alpha/2)$, e $o(N^{1-\alpha/2})$ rappresenta un infinito di ordine inferiore a $N^{1-\alpha/2}$.

Nel caso $\alpha = -1$ la congettura 2.2.11 fornisce:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{R_{N,-1}}{N^{3/2}} = -3 \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{8\pi}} \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \mathcal{L}(1/2) \approx 0.55305 \dots ;$$

i risultati numerici supportano la congettura (sez. 4.4).

2.3 Minimizzazione nel caso $\alpha \leq -2$

Per $\alpha \leq -2$ l'integrale $I_\sigma(\alpha)$ non è finito, e la rappresentazione di $\mathcal{E}(\alpha, N)$ in funzione del resto non ha significato, in quanto è proprio il resto il termine dominante. Questa proprietà è dovuta al fatto che, per $\alpha \leq -2$, l'influenza sull'energia da parte dei punti più vicini cresce in modo rilevante. Si hanno comunque i seguenti risultati:

Teorema 2.3.1 (Kuijlaars - Saff). *Sia $\alpha < -2$. Esistono costanti positive c_3 e c_4 tali che*

$$c_3 N^{1-\alpha/2} \leq \mathcal{E}(\alpha, N) \leq c_4(\alpha) N^{1-\alpha/2}. \quad (2.12)$$

Dimostrazione (cenni). Proviamo innanzitutto il limite inferiore. Data una configurazione ω_N , definiamo per ogni i

$$r_i = \min_{j \neq i} |x_i - x_j|;$$

quindi le calotte sferiche $C(x_i, r_i/2)$ sono disgiunte. Denotata con σ^* la misura di Lebesgue normalizzata rispetto a S^2 , si ha $\sigma^*(C(x_i, r_i/2)) \geq A r_i^2$ per una certa costante A (rif. [11]). Da questa otteniamo:

$$A \sum_{i=1}^N r_i^2 \leq \sum_{i=1}^N \sigma^*(C(x_i, r_i/2)) \leq 1.$$

Con la tecnica dei moltiplicatori di Lagrange si dimostra che

$$\sum_{i=1}^N r_i^\alpha \geq A^{-\alpha/2} N^{1-\alpha/2}.$$

Questo fornisce $E(\alpha, \omega_N) \geq \frac{1}{2} A^{-\alpha/2} N^{1-\alpha/2}$, per cui $\mathcal{E}(\alpha, N) \geq c_3 N^{1-\alpha/2}$, che è il limite desiderato.

Proviamo il limite superiore. Sia $\tilde{\omega}_N$ è una configurazione che minimizza la α -energia. Denotiamo con $D_i = S^2 - C(\tilde{x}_i, N^{-1/2})$ e poniamo $D = \bigcap_{i=1}^N D_i$. Poiché, in generale, $\sigma^*(C(y, r)) \leq r^2/4$ (rif. [11]), si ottiene:

$$\sigma^*(D) \geq 1 - \frac{1}{4} > 0. \quad (2.13)$$

Consideriamo, per un dato indice i , la funzione:

$$U_i(x) = \sum_{j \neq i} |x - \tilde{x}_j|^\alpha, \quad x \in S^2; \quad (2.14)$$

abbiamo dunque

$$\int_D U_i(x) d\sigma^*(x) = \sum_{j \neq i} \int_D |x - \tilde{x}_j|^\alpha d\sigma^*(x) \leq \sum_{j \neq i} \int_{D_j} |x - \tilde{x}_j|^\alpha d\sigma^*(x). \quad (2.15)$$

Si dimostra in [11] che quest'ultima quantità è $\leq CN^{-\alpha/2}$. Poiché $\tilde{\omega}_N$ minimizza la α -energia, la funzione U_i raggiunge il suo minimo nel punto \tilde{x}_i . Quindi

$$U_i(\tilde{x}_i) \leq \frac{1}{\sigma^*(D)} \int_D U_i(x) d\sigma(x)^*. \quad (2.16)$$

Combinando le espressioni 2.13, 2.15 e 2.16 otteniamo, per ogni i ,

$$U_i(\tilde{x}_i) \leq CN^{-\alpha/2}, \quad \alpha < -2. \quad (2.17)$$

Poiché $\sum_i U_i(\tilde{x}_i) = 2\mathcal{E}(\alpha, N)$, segue il limite superiore. \square

La relazione (2.12) suggerisce, anche se non possiamo provarlo, che, per $\alpha < 2$, il

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}(\alpha, N)}{N^{1-\alpha/2}}$$

esista e sia finito; in [11] è stata infatti formulata la seguente

Congettura 2.3.2. *Per $\alpha < -2$, il*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}(\alpha, N)}{N^{1-\alpha/2}}$$

esiste e risulta

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{8\pi} \right)^{-\frac{\alpha}{2}} \zeta_{\mathcal{L}}(\alpha).$$

Tale congettura è supportata dal seguente teorema.

Teorema 2.3.3. *Se $\alpha < -2$, allora*

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}(\alpha, N)}{N^{1-\alpha/2}} \leq \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{8\pi} \right)^{-\frac{\alpha}{2}} \zeta_{\mathcal{L}}(\alpha),$$

dove $\zeta_{\mathcal{L}}(\alpha)$ è la funzione zeta di Riemann nel campo $\mathbf{Q}(\sqrt{3})$.

Dimostrazione. Rif.[11]

Infine il seguente teorema determina l'ordine di \mathcal{E} nel caso $\alpha = -2$.

Teorema 2.3.4 (Kuijlaars - Saff).

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}(-2, N)}{N^2 \ln N} = \frac{1}{8}.$$

Dimostrazione (cenni). Il teorema si dimostra provando i due limiti:

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}(-2, N)}{N^2 \ln N} \geq \frac{1}{8} \quad (2.18)$$

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}(-2, N)}{N^2 \ln N} \leq \frac{1}{8} \quad (2.19)$$

Per la dimostrazione della (2.18), che non approfondiamo, si utilizza la nozione di *armoniche sferiche* (rif. [11]).

Dimostriamo la (2.19) seguendo la dimostrazione del limite superiore nella (2.12). Sia $\tilde{\omega}_N$ una configurazione che minimizza la (-2)-energia. Per $r > 0$ poniamo:

$$\begin{aligned} D_i(r) &= S^2 - C(\tilde{x}_i, rN^{-1/2}), \quad \text{per } i = 1, \dots, N, \\ D(r) &= \bigcap_{i=1}^N D_i(r); \end{aligned}$$

quindi, anche in questo caso si ha

$$\sigma^*(D(r)) \geq 1 - \frac{1}{4}r^2. \quad (2.20)$$

Se fissiamo $r > 0$ ed introduciamo, per ogni i , la funzione

$$U_i(x) = \sum_{j \neq i} \frac{1}{|x - \tilde{x}_j|^2}, \quad x \in S^2,$$

otteniamo (rif. [11]):

$$\begin{aligned} \int_{D(r)} U_i(x) \, d\sigma^*(x) &\leq \sum_{j \neq i} \int_{D_j(r)} \frac{1}{|x - \tilde{x}_j|^2} \, d\sigma^*(x) \\ &= -\frac{1}{2}N \ln(rN^{-1/2}) + O(N) \quad (N \rightarrow \infty) \\ &= \frac{1}{4}N \ln N + O(N) \quad (N \rightarrow \infty). \end{aligned}$$

Poiché ω_N minimizza la (-2)-energia, la funzione U_i assume il suo minimo nel punto \tilde{x}_i . Perciò

$$U_i(\tilde{x}_i) \leq \frac{1}{\sigma^*(D(r))} \int_{D(r)} U_i(x) d\sigma^*(x) \leq \frac{1}{\sigma^*(D(r))} \cdot \frac{1}{4} N \ln N + O(N), \quad (2.21)$$

dalla quale si ottiene

$$\mathcal{E}(-2, N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N U_i(\tilde{x}_i) \leq \frac{1}{\sigma^*(D(r))} \cdot \frac{1}{8} N^2 \ln N + O(N^2).$$

Facendo tendere $r \rightarrow 0$ ed utilizzando la (2.20) si ottiene la (2.19). \square

2.4 Minimizzazione nel caso logaritmico

Nel caso logaritmico, poiché risulta $\exp(-E(0, \omega_N)) = \prod_{i \neq j} |x_i - x_j|$, per trovare una configurazione che minimizza la 0-energia è sufficiente trovare un insieme ω_N che renda massima la funzione $\prod_{i \neq j} |x_i - x_j|$.

Partiamo dunque dal risultato di N.D. Elkies [13], il quale ha descritto un metodo generale per ottenere un limite inferiore per la energia logaritmica minimale valido su tutte le superfici riemanniane. Nel caso particolare della sfera risulta:

$$\mathcal{E}(0, N) \geq -\frac{1}{4} \ln \left(\frac{4}{e} \right) N^2 - \frac{1}{4} N \ln N + O(N). \quad (2.22)$$

Vogliamo ora ottenere una stima del termine $O(N)$. La dimostrazione del seguente teorema è comunque indipendente da quella di Elkies e si presta ad ulteriori miglioramenti.

Teorema 2.4.1 (Rakhmanov - Saff - Zhou). *Per ogni $\omega_N = \{x_1, \dots, x_N\} \subset S^2$, si ha:*

$$\begin{aligned} \prod_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j| &\leq 2^{N(N-1)/2} \sqrt{\prod_{k=1}^{N-1} \frac{k!}{k^k}} (1 - e^{-a} + \epsilon_N)^{bN/4} \\ &\leq (4/e)^{N^2/4} N^{N/4} (\pi/2)^{N/4} (1 - e^{-a} + \epsilon_N)^{bN/4}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

dove

$$a = \frac{2\sqrt{2\pi}}{\sqrt{27}} \left(\sqrt{2\pi} + \sqrt{2\pi + \sqrt{27}} \right), \quad b = \frac{\sqrt{2\pi + \sqrt{27}} - \sqrt{2\pi}}{\sqrt{2\pi + \sqrt{27}} + \sqrt{2\pi}},$$

e $\epsilon_N > 0$, $\epsilon_N \rightarrow 0$ per $N \rightarrow \infty$. Definito C_N tale che

$$\mathcal{E}(0, N) = -\frac{1}{4} \ln \left(\frac{4}{e} \right) N^2 - \frac{1}{4} N \ln N + C_N N,$$

segue:

$$\begin{aligned} \liminf_{N \rightarrow \infty} C_N &\geq -\frac{1}{4} \ln \left(\frac{\pi}{2} (1 - e^{-a})^b \right) = -0.1127\dots \\ \limsup_{N \rightarrow \infty} C_N &\leq -\frac{1}{4} \ln \frac{\pi\sqrt{3}}{2} - \frac{\pi}{8\sqrt{3}} = -0.023\dots \end{aligned}$$

Dimostrazione (cenni). Dimostriamo che

$$\prod_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j| \leq 2^{N(N-1)/2} \sqrt{\prod_{k=1}^{N-1} \frac{k!}{k^k}}. \quad (2.24)$$

Sia $\mathcal{S} : S^2 \rightarrow \mathbf{C}$ la proiezione stereografica di S^2 nel piano complesso \mathbf{C} . Denotiamo con $z_i = \mathcal{S}(x_i)$, per $i = 1, \dots, N$. Quindi abbiamo:

$$\begin{aligned} \prod_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j| &= \prod_{1 \leq i < j \leq N} \frac{2|z_i - z_j|}{\sqrt{(1 + |z_i|^2)(1 + |z_j|^2)}} \\ &= \frac{2^{N(N-1)/2}}{\prod_{k=1}^N (1 + |z_k|^2)^{(N-1)/2}} \prod_{1 \leq i < j \leq N} |z_i - z_j|, \end{aligned}$$

e quindi

$$\prod_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j| = 2^{N(N-1)/2} \prod_{k=1}^{N-1} \binom{N-1}{k}^{-1/2} \cdot |\det(\xi_1, \dots, \xi_N)|,$$

dove

$$\xi_k = \frac{1}{(1 + |z_k|^2)^{(N-1)/2}} \left(\binom{N-1}{0}^{1/2}, \binom{N-1}{1}^{1/2} z_k, \dots, \binom{N-1}{N-1}^{1/2} z_k^{N-1} \right),$$

per $k = 1, \dots, N$. Sfruttando il fatto che

$$\prod_{k=0}^{N-1} \binom{N-1}{k} = \prod_{k=1}^{N-1} \frac{k^k}{k!},$$

otteniamo

$$\prod_{1 \leq i < j \leq N} |x_i - x_j| = 2^{N(N-1)/2} \sqrt{\prod_{k=1}^{N-1} \frac{k!}{k^k}} \cdot |\det(\xi_1, \dots, \xi_N)|.$$

Da questa deduciamo la (2.24). In [18] viene migliorata la maggiorazione (2.24), sottraendo dal vettore ξ_i , per opportuni indici i , la sua proiezione sul più vicino vettore ξ_j . Inoltre, sempre in [18], vengono determinati i limiti di C_N enunciati. \square

Osservazione 2.4.2. Analogamente al caso $0 < |\alpha| < 2$, possiamo scrivere il risultato del teorema in funzione della costante di distribuzione uniforme (1.3) e del resto $R_{N,\alpha}$: per $\alpha = 0$, c_5, c_6 opportune costanti,

$$\mathcal{E}(0, N) = I_\sigma(0) \frac{N^2}{2} - \frac{1}{4} N \ln N - R_{N,0}, \quad c_5 N \leq R_{N,0} \leq c_6 N, \quad (2.25)$$

per cui il termine dominante in $\mathcal{E}(0, N)$ dipende dalla 0-energia di una distribuzione continua sulla sfera.

2.5 Somme massimali

Analizziamo il caso $\alpha = 1$ in modo indipendente, con uno sguardo anche ai risultati in altre dimensioni. Utilizzeremo la notazione $E_n(1, \omega_N)$ per indicare la somma delle distanze degli N punti di ω_N sulla sfera $S^{n-1} \subset \mathbf{R}^n$ ($n \neq 3$).

2.5.1 Caso bidimensionale

Teorema 2.5.1 (Fejes Tóth). *Data una configurazione di punti ω_N sulla circonferenza S^1 , la somma $E_2(1, \omega_N)$ delle separazioni determinate dai suoi punti soddisfa la disuguaglianza:*

$$E_2(1, \omega_N) \leq N \cot \frac{\pi}{2N}.$$

Si ha l'uguaglianza solo se i punti sono vertici di un N -agone regolare.

Dimostrazione. Supponiamo, senza perdita di generalità, che i punti x_1, \dots, x_N siano ordinati in senso antiorario ed introduciamo la notazione $x_{N+1} = x_1, \dots, x_{2N-1} = x_{N-1}$. Definiamo la seguente somma:

$$s_k = \sum_{i=1}^N |x_i - x_{i+k}| = 2 \sum_{i=1}^N \sin \frac{1}{2} \widehat{x_i x_{i+k}},$$

dove k è un intero tale che $1 \leq k \leq N-1$. Considerando che $0 \leq \frac{1}{2} \widehat{x_i x_{i+k}} \leq \pi$ e la concavità della funzione $\sin t$ per $0 \leq t \leq \pi$, possiamo applicare la disuguaglianza di Jensen, ottenendo

$$s_k \leq 2N \sin \left(\frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \widehat{x_i x_{i+k}} \right).$$

Poiché gli archi $\widehat{x_1 x_{1+k}}, \dots, \widehat{x_N x_{N+k}}$ ricoprono la circonferenza esattamente k volte, abbiamo:

$$s_k \leq 2N \sin \frac{k\pi}{N}.$$

D'altra parte, tenendo presente la relazione $s_k = s_{N-k}$ ed il fatto che per N pari ogni distanza $|x_i - x_{i-N/2}|$ contribuisce due volte alla somma $s_{N/2}$, abbiamo:

$$2E_2(1, \omega_N) = \sum_{k=1}^{N-1} s_k.$$

Di conseguenza

$$E_2(1, \omega_N) \leq N \sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{k\pi}{N} = N \cot \frac{\pi}{2N}.$$

Da questa disuguaglianza segue banalmente l'uguaglianza. \square

Esempio 2.5.2. Esaminiamo la configurazione per $N = 10$ in fig. 2.1. È interessante osservare che i vettori $x_{1+k} - x_1, \dots, x_{N+k} - x_N$ formano un poligono se N e k sono primi tra loro, più poligoni se non sono primi tra loro. La dimostrazione del teorema 2.5.1 si basa essenzialmente sul fatto che $E_2(1, \omega_N)$ può essere vista come la somma dei perimetri di tali poligoni che assumono il valore massimo nel caso regolare. In questo caso risulta:

$$\mathcal{E}_2(1, 10) = 10 \cot \frac{\pi}{20} \approx 63.1375.$$

FIGURA 2.1: Configurazione ottimale di dieci punti sulla circonferenza (decagono regolare); sono visibili le 45 separazioni.

2.5.2 Caso tridimensionale

Il punto di partenza è la nozione di *discrepanza* di una configurazione ω_N , che denotiamo con $D(\omega_N)$. Questa funzione può essere interpretata come *una misura di quanto si discosta un insieme discreto di punti da una distribuzione continua*. Per la sua definizione introduciamo la seguente notazione.

Indichiamo con $\sigma^*(x, t) = C(x, t)/\sigma(S^2)$ l'area di una calotta sferica $C(x, t)$ (definita in sez. 1.2.1) normalizzata rispetto a S^2 . Denotiamo inoltre con $Z(\omega_N, x, t) = \#\{\omega_N \cap C(x, t)\}$, cioè Z rappresenta il numero di punti di ω_N appartenenti alla calotta sferica $C(x, t)$.

Definizione 2.5.3. Si definisce *discrepanza di ω_N* la quantità:

$$D(\omega_N) = \int_0^2 \left(\frac{1}{\sigma(S^2)} \int_{S^2} (Z(\omega_N, x, t) - N\sigma^*(x, t))^2 d\sigma(x) \right) dt.$$

Il prossimo risultato mostra l'utilità di questa grandezza.

Teorema 2.5.4 (Principio di invarianza di Stolarsky).

$$E(1, \omega_N) + D(\omega_N) = I_\sigma(1) \frac{N^2}{2}. \quad (2.26)$$

Dimostrazione. Rif. [21]

Questo teorema è interpretato come un principio di invarianza poiché, *fissato* N , la somma delle distanze degli N punti di una configurazione più la loro discrepanza è una costante che dipende solo da N e non dalla configurazione scelta.

Osservazione 2.5.5. Abbiamo lasciato $I_\sigma(1)$ per sottolineare il legame tra E ed I_σ ; poiché in questo caso $I_\sigma(1) = 4/3$, il teorema di Stolarsky diventa: $E(1, \omega_N) + D(\omega_N) = \frac{2}{3}N^2$.

Osservazione 2.5.6. Dal precedente teorema si vede immediatamente che la differenza $\frac{2}{3}N^2/2 - \mathcal{E}(1, N)$ è sempre positiva, perché la quantità $D(\omega_N)$ è sempre positiva.

Mostriamo ora una applicazione di questo principio, che fornisce dei limiti per $\mathcal{E}(1, N)$.

Corollario 2.5.7 (Stolarsky). *Per ogni $\epsilon > 0$ esistono costanti positive $c_7(\epsilon)$ e c_8 (indipendente da ϵ) tali che:*

$$c_7(\epsilon)N^{-1-\epsilon} < I_\sigma(1)\frac{N^2}{2} - \mathcal{E}(1, N) < c_8N^{1/2}.$$

Dimostrazione. Rif. [21].

Questo risultato non ci dice nulla sull'ordine di $I_\sigma(1)\frac{N^2}{2} - \mathcal{E}(1, N)$; il seguente teorema completa il risultato di Stolarsky.

Teorema 2.5.8 (Beck).

$$I_\sigma(1)\frac{N^2}{2} - \mathcal{E}(1, N) > c_9N^{1/2},$$

con c_9 opportuna costante.

Dimostrazione. Rif. [2]

Unendo i risultati dei due teoremi 2.5.7 e 2.5.8 otteniamo dei limiti per $\mathcal{E}(1, N)$, dati dalla relazione:

$$\frac{2}{3}N^2 - c_8N^{1/2} < \mathcal{E}(1, N) < \frac{2}{3}N^2 - c_9N^{1/2}. \quad (2.27)$$

Osservazione 2.5.9. Consideriamo la (2.27) nella forma

$$c_9 N^{1/2} < I_\sigma(1) \frac{N^2}{2} - \mathcal{E}(1, N) < c_8 N^{1/2}.$$

Poiché, in generale, gli esponenti di N espressi nel limite inferiore ed in quello superiore dipendono dalla dimensione dello spazio, vogliamo sottolineare una differenza tra il caso bidimensionale e quello tridimensionale. Se n è la dimensione, i suddetti esponenti sono dati dall'espressione $1 - 1/(n - 1)$ (rif. [21]). Questo significa che nel caso bidimensionale otteniamo che $I_\sigma(1)N^2/2 - \mathcal{E}(1, N)$ è limitato inferiormente e superiormente da costanti; se invece $n \geq 3$ la quantità $I_\sigma(1)N^2/2 - \mathcal{E}(1, N)$ tende a infinito per $N \rightarrow \infty$ con velocità polinomiale. Malgrado ciò non siamo in grado di stabilire se esiste il

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{I_\sigma(1)N^2/2 - \mathcal{E}(1, N)}{N^{1/2}}.$$

2.5.3 Caso n -dimensionale

Esaminiamo il caso n -dimensionale nella particolare condizione $N = n + 1$.

Teorema 2.5.10 (Fejes Tóth). *La somma $E_{(N-1)}(1, \omega_N)$ delle distanze degli N punti di ω_N sulla sfera S^{N-2} nello spazio euclideo $(N - 1)$ -dimensionale soddisfa la disuguaglianza:*

$$E_{(N-1)}(1, \omega_N) \leq N \sqrt{\frac{N(N-1)}{2}}. \quad (2.28)$$

Si ha l'uguaglianza solo se i punti sono vertici di un semplice regolare inscritto nella sfera.

Dimostrazione. La dimostrazione si basa su considerazioni sulla somma Q_N dei quadrati delle varie separazioni. Posto $M(N) = \sum_{i=1}^N x_i$ (momento di dipolo), abbiamo

$$2Q_N = \sum_{i \neq j} (x_i - x_j)^2 = \sum_{i \neq j} (x_i^2 + x_j^2 - 2x_i x_j) = 2N \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2M^2(N),$$

per cui

$$Q_N \leq N^2,$$

e l'uguaglianza si ha solo se $M(N) = 0$. Ma poiché la media aritmetica non supera mai quella quadratica, otteniamo la disuguaglianza desiderata:

$$E_{(N-1)}(1, \omega_N) \cdot \frac{2}{N(N-1)} \leq \sqrt{Q_N \cdot \frac{2}{N(N-1)}} \leq N \cdot \sqrt{\frac{2}{N(N-1)}}.$$

L'uguaglianza segue solo se tutte le $\frac{N(N-1)}{2}$ separazioni sono uguali, cioè nel caso del simpleso regolare inscritto. \square

Esempio 2.5.11. Il risultato ottenuto nel caso bidimensionale si può facilmente verificare nell'espressione (2.28) ponendovi il segno di uguaglianza; si ha, infatti, $E_2(1, \tilde{\omega}_3) = 3 \cot \pi/6 = 3\sqrt{3}$, dove la configurazione massimale $\tilde{\omega}_3$ che lo determina è il triangolo equilatero inscritto nella circonferenza.

Nel caso tridimensionale, invece, si ha

$$\mathcal{E}(1, 4) = E_3(1, \tilde{\omega}_4) = 4\sqrt{6} \approx 9.798,$$

dove la configurazione massimale $\tilde{\omega}_4$ che lo determina è il *tetraedro regolare*.

2.6 Conggettura generale

Riportiamo in tab. 2.1 tutti i risultati ricavati dai teoremi di questo capitolo su \mathcal{E} . In base a tali risultati è stata formulata da E.A. Rakhmanov, E.B. Saff e Y.M. Zhou [18] la seguente congettura generale.

Conggettura 2.6.1. *Per ogni $\alpha \in \mathbf{R}$, $-2 < \alpha < 2$, esistono costanti reali B_α e C_α , dipendenti solo da α , tali che:*

$$\mathcal{E}(\alpha, N) = \begin{cases} \frac{2^\alpha}{2 + \alpha} N^2 - B_\alpha N^{1-\alpha/2} + C_\alpha N^{\frac{-\alpha}{2}} + O(N^{-1-\alpha/2}) & \text{per } \alpha \neq 0 \\ -\frac{1}{4} \ln\left(\frac{4}{e}\right) N^2 - \frac{1}{4} N \ln N + B_\alpha N + C_\alpha \ln N + O(1) & \text{per } \alpha = 0 \end{cases} \quad (2.29)$$

TABELLA 2.1: Risultati generali per $\mathcal{E}(\alpha, N)$ al variare di α

$\alpha > 2$	$\mathcal{E}(\alpha, N) = 2^{\alpha-2}N^2$ (N pari)
$\alpha = 2$	$\mathcal{E}(2, N) = N^2$
$0 < \alpha < 2$	$\mathcal{E}(\alpha, N) = I_\sigma(\alpha)\frac{N^2}{2} - R_{N,\alpha}$
$\alpha = 0$	$\mathcal{E}(0, N) = I_\sigma(0)\frac{N^2}{2} - \frac{1}{4}N \ln N - R_{N,0}$
$-2 < \alpha < 0$	$\mathcal{E}(\alpha, N) = I_\sigma(\alpha)\frac{N^2}{2} - R_{N,\alpha}$
$\alpha = -2$	$\mathcal{E}(-2, N) = O(N^2 \ln N)$
$\alpha < -2$	$C_1N^{1-\alpha/2} < \mathcal{E}(\alpha, N) < C_2N^{1-\alpha/2}$

Assumendo la validità di questa congettura, per $\alpha \neq 0$ il corollario 2.2.9 fornisce un limite superiore per B_α se $-2 < \alpha < 0$ ed un limite inferiore se $0 < \alpha < 2$. Combinando i risultati otteniamo:

$$-\frac{5+2\alpha}{4+2\alpha} \leq B_\alpha \leq -\frac{1}{2}(2\sqrt{2\pi})^\alpha, \quad \text{per } -2 < \alpha < 0;$$

$$-\frac{1}{2}(2\sqrt{2\pi})^\alpha \leq B_\alpha \leq 0, \quad \text{per } 0 < \alpha < 2.$$

Il limite inferiore nella prima disuguaglianza e quello superiore nella seconda sono stati ottenuti rispettivamente in [24] e [25]. Segue invece dal teorema 2.4.1 che, per $\alpha = 0$,

$$-0.1127688 \leq B_0 \leq -0.0234973.$$

In sez. 4.4 adattiamo la congettura 2.6.1 ai risultati numerici, in modo da ottenere una espressione generale che approssima \mathcal{E} in modo soddisfacente.

Capitolo 3

Proprietà generali delle configurazioni ottimali

In questo capitolo analizziamo due proprietà generali delle configurazioni ottimali. Una importante proprietà è la separazione minima dei punti: verificheremo, per $\alpha < 2$, se la più piccola distanza tra i punti di una configurazione ottimale è maggiore di una certa quantità dipendente da N ; per $\alpha \geq 2$, invece, abbiamo visto nel capitolo precedente che i punti di una configurazione ottimale possono coincidere. Infine quantificheremo il momento di dipolo di un generico sistema di punti di Fekete ellittici.

3.1 Separazione minima dei punti

3.1.1 Caso $0 < |\alpha| < 2$

Teorema 3.1.1 (Stolarsky). *Sia $0 < \alpha < 2$. Se $\tilde{\omega}_N = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N\} \subset S^2$ è una configurazione di punti con α -energia massima, allora risulta, per ogni $i \neq j$,*

$$|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \geq \left(\frac{4\alpha}{2^\alpha(2+\alpha)} \right)^{1/(2-\alpha)} \cdot N^{-1/(2-\alpha)}. \quad (3.1)$$

Dimostrazione. Siano $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N$ dei punti che massimizzano la somma

$$\sum_{i < j} G(|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j|),$$

dove G è una funzione continua definita in $[0, 2]$ e derivabile fino al quarto ordine in $(0, 2)$. Possiamo inoltre ruotare la sfera in modo da far coincidere, senza perdita di generalità, il punto \tilde{x}_1 con il polo $(0, 0, 1)$. Definiamo la seguente funzione su S^2 :

$$f(u) = \sum_{i=2}^N G(|u - \tilde{x}_i|), \quad (3.2)$$

sia inoltre U un intorno sferico su S^2 avente centro in \tilde{x}_1 . Chiaramente $f(\tilde{x}_1)$ deve essere maggiore o uguale al valor medio di $f(u)$ su U .

Introduciamo le coordinate sferiche (θ, ϕ) , per cui un generico punto u ha coordinate $(\sin \phi \sin \theta, \sin \phi \cos \theta, \cos \phi)$. Si ha quindi

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(u) d\theta \leq f(0, 0, 1). \quad (3.3)$$

Sia ora $g = g(x, y, z)$ una funzione avente espansione in serie di potenze convergente in $(0, 0, 1)$

$$g(x, y, z) = \sum_{i,j,k} c_{ijk} x^i y^j (z-1)^k.$$

Per $(x, y, z) \in U \subset S^2$, si ha, per ϕ piccolo,

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(x, y, z) d\theta - g(0, 0, 1) \\ &= \sum_{i,j,k} c_{ijk} (\sin \phi)^{i+j} (\cos \phi - 1)^k \cdot \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^i \theta \cos^j \theta d\theta. \end{aligned} \quad (3.4)$$

L'integrale sulla destra della (3.4) è zero se i e j non sono entrambi pari. Quindi per ϕ piccolo,

$$\Delta = \frac{1}{4} \phi^2 \left(\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial g}{\partial z} \right) \Big|_{\tilde{x}_1} + O(\phi^4). \quad (3.5)$$

Infatti la (3.5) è valida assumendo che esistano tutte le derivate parziali del quarto ordine.

Sia $u_0 = (x_0, y_0, z_0) \in S^2$ un punto fissato; poniamo $g(u) = G(v)$, dove $v = |u - u_0|$.

Si ha quindi

$$\frac{\partial g}{\partial x} = \frac{dG}{dv} \frac{(x - x_0)}{|u - u_0|}$$

e

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = \frac{d^2 G (x - x_0)^2}{dv^2 |u - u_0|^2} + \frac{dG (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}{dv |u - u_0|^3}.$$

Valutando le derivate parziali in $u = \tilde{x}_1$, possiamo determinare il coefficiente $\phi^2/4$ in (3.5):

$$\left(1 - \frac{v^2}{4}\right) \frac{d^2 G}{dv^2} + \left(\frac{1}{v} - \frac{3}{4}v\right) \frac{dG}{dv},$$

dove $v = |\tilde{x}_1 - u_0|$. Quindi

$$\Delta = \frac{1}{4}\phi^2 \left(\frac{1}{v} \frac{d}{dv} \left(v \left(1 - \frac{v^2}{4}\right) \frac{dG}{dv} \right) \right) + O(\phi^4) = a(v)\phi^2 + O(\phi^4). \quad (3.6)$$

Sostituiamo ora u_0 con \tilde{x}_i , con $2 \leq i \leq N$, e poniamo $u_i = |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_i|$, per cui la (3.6) diventa

$$\Delta_i = \frac{1}{4}a(v_i)\phi^2 + O(\phi^4). \quad (3.7)$$

Assumiamo ora che la somma (3.2) sia massimale. Sia s il numero dei punti \tilde{x}_i che coincidono con \tilde{x}_1 , e ogni punto in U sottenda un piccolo angolo ϕ con $(0, 0, 1)$. Applichiamo le (3.3), (3.4), (3.6) e (3.7) con g al posto di f (tenendo presente la (3.2)), ed otteniamo

$$\Delta = s \cdot 2\pi \sin \phi + \phi^2 \cdot \sum_{2 \leq i \leq N, \tilde{x}_i \neq \tilde{x}_1} a(v_i) + O(\phi^4) \leq 0,$$

dove la somma è intesa solo sugli i per cui $\tilde{x}_i \neq \tilde{x}_1$. Per $\phi \rightarrow 0$, notiamo innanzitutto che $s = 0$, per cui la somma su tutti gli i è $\neq 1$; inoltre la somma è al più zero, cioè

$$\sum_{i=2}^N a(|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_i|) \leq 0.$$

Se $G(v) = v^\alpha$, con $0 < \alpha < 2$, allora

$$a(v) = \frac{\alpha^2}{4v^{2-\alpha}} - \frac{\alpha(\alpha+2)v^\alpha}{16}.$$

Quindi per ogni $j \neq 1$ abbiamo

$$\begin{aligned} \alpha^2 |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_j|^{\alpha-2} &\leq \sum_{i=2}^N \alpha^2 |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_i|^{\alpha-2} \\ &\leq \frac{1}{4} \alpha (2 + \alpha) \sum_{i=2}^N |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_i|^\alpha \leq \frac{1}{4} \alpha (2 + \alpha) 2^\alpha \cdot N. \end{aligned}$$

Poiché \tilde{x}_1 può essere scelto arbitrariamente, la dimostrazione del teorema è completa.

□

Osservazione 3.1.2. Se sostituiamo la distanza euclidea con la distanza sferica, non sussiste più questa proprietà. In [17] si dimostra infatti che i punti di una configurazione con somma delle distanze sferiche massimale non sono necessariamente ben separati sulla sfera.

Esempio 3.1.3. Nonostante il problema della determinazione di una configurazione di punti sulla sfera con somma massimale sia ancora aperto, possiamo comunque ricavare dal teorema 3.1.1 che, se $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N$ sono punti aventi somma delle distanze massima, allora

$$|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \geq \frac{2}{3N}.$$

Per quanto riguarda il caso $-2 < \alpha < 0$, enunciamo soltanto il caso più importante $\alpha = -1$, dimostrato da B.E.J. Dahlberg su una generica sottovarietà liscia di uno spazio n -dimensionale. L'adattamento della dimostrazione del teorema di Dahlberg al caso della sfera nello spazio tridimensionale offre una risposta al nostro problema, cioè una stima della distanza tra un punto di Fekete \tilde{x}_i ed il punto della configurazione più vicino \tilde{x}_j .

Teorema 3.1.4 (Dahlberg). *Esistono costanti positive C_1, C_2 tali che, se N è un intero positivo e $\tilde{\omega}_N = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N\}$ è un sistema di punti di Fekete per S^2 , allora*

$$\frac{C_1}{\sqrt{N}} \leq |\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \leq \frac{C_2}{\sqrt{N}} \quad \forall i : 1 \leq i \leq N. \quad (3.8)$$

Dimostrazione. Rif. [5]

3.1.2 Caso $\alpha \leq -2$

I seguenti teoremi sulle proprietà di separazione di una configurazione ottimale nel caso $\alpha \leq -2$ possono essere considerati dei corollari dei teoremi 2.3.1 e 2.3.4.

Teorema 3.1.5 (Kuijlaars - Saff). *Sia $\alpha < -2$ e $\tilde{\omega}_N = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N\}$ una configurazione che minimizza la α -energia. Allora esiste una costante C , dipendente solo da α , tale che, per ogni $i \neq j$, risulti:*

$$|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \geq \frac{C}{\sqrt{N}}. \quad (3.9)$$

Dimostrazione. Le espressioni (2.14) e (2.17) forniscono:

$$|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j|^\alpha \leq CN^{-\alpha/2}, \quad \text{per } i \neq j.$$

Da questa disuguaglianza si ottiene la (3.9). \square

Teorema 3.1.6 (Kuijlaars - Saff). *Sia $\tilde{\omega}_N = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N\}$ una configurazione che minimizza la (-2)-energia. Allora esiste una costante C , dipendente solo da α , tale che, per ogni $i \neq j$, risulti:*

$$|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \geq \frac{C}{\sqrt{N}} \cdot \frac{1}{(\ln N)^{1/2}}. \quad (3.10)$$

Dimostrazione. Questo teorema si deduce direttamente dalla espressione (2.21). \square

L'ordine di N nella (3.9) è il migliore possibile, mentre quello nella (3.10) può essere migliorato.

3.1.3 Caso logaritmico

Il prossimo teorema mostra che i punti di una configurazione di equilibrio nel caso logaritmico (*punti di Fekete ellittici*) sono ben separati sulla sfera.

Teorema 3.1.7 (Rakhmanov - Saff - Zhou). *Se $\tilde{\omega}_N = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N\} \subset S^2$ è una configurazione di minimo per $E(0, \omega_N)$, allora, per ogni $\tilde{x}_i, \tilde{x}_j \in \tilde{\omega}_N$, $i \neq j$,*

$$|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \geq \frac{3}{5\sqrt{N}}. \quad (3.11)$$

Dimostrazione. Senza perdita di generalità, possiamo considerare la differenza $|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_j|$ e dimostrare il teorema per $2 \leq j \leq N$.

Per ogni $\omega_N = \{x_1, \dots, x_N\} \subset S^2$ segue, per l'ipotesi fatta su $\tilde{\omega}_N$, che

$$\sum_{i < j} \log \frac{1}{|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j|} \leq \sum_{i < j} \log \frac{1}{|x_i - x_j|},$$

che è equivalente alla disuguaglianza

$$\prod_{i < j} |x_i - x_j| \leq \prod_{i < j} |\tilde{x}_i - \tilde{x}_j|.$$

Di conseguenza l'espressione

$$\prod_{i=2}^N |x - \tilde{x}_i| \cdot \prod_{2 \leq i < j \leq N} |\tilde{x}_i - \tilde{x}_j| \quad (3.12)$$

ha il suo massimo su S^2 per $x = \tilde{x}_1$.

Sia $\mathcal{S} : S^2 \rightarrow \mathbf{C}$ la proiezione stereografica di S^2 nel piano complesso \mathbf{C} e $z_i = \mathcal{S}(\tilde{x}_i)$, per $i = 1, \dots, N$. Possiamo assumere che il punto \tilde{x}_1 sia al polo sud di S^2 per cui $z_1 = \mathcal{S}^{-1}(\tilde{x}_1) = 0$. Quindi, per la (3.12), l'espressione

$$\prod_{i=2}^N \frac{|z - z_i|}{\sqrt{1 + |z|^2}} = \prod_{i=2}^N |z - z_i| \cdot (1 + |z|^2)^{-(N-1)/2}$$

ha il suo massimo su \mathbf{C} per $z = z_1 = 0$.

Indichiamo con $p(z) = \prod_{i=2}^N (z - z_i)$, ottenendo

$$|p(0)| = \sup_{z \in \mathbf{C}} \{|p(z)| \cdot (1 + |z|^2)^{-(N-1)/2}\},$$

per cui

$$|p(z)| \leq |p(0)| \cdot (1 + |z|^2)^{(N-1)/2} \leq |p(0)| (1 + |z|^2)^{N/2}, \quad \text{per } z \in \mathbf{C}. \quad (3.13)$$

Per la formula di Cauchy, abbiamo per $|z| \leq r < R$,

$$p'(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|\zeta|=R} \frac{p(\zeta)}{(\zeta - z)^2} d\zeta$$

e quindi, dalla (3.13),

$$\begin{aligned}
|p'(z)| &\leq \frac{1}{2\pi} \left| \int_{|\zeta|=R} \frac{p(\zeta)}{(\zeta-z)^2} d\zeta \right| \\
&\leq \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{|p(0)|(1+R^2)^{N/2}R}{(R-r)^2} d\theta \\
&= \frac{R|p(0)|}{(R-r)^2} (1+R^2)^{N/2}.
\end{aligned}$$

Ponendo $r = \frac{1}{3\sqrt{N}}$ e $R = 4r$ otteniamo

$$\begin{aligned}
|p'(z)| &\leq \frac{4}{3\sqrt{N}} \cdot \frac{|p(0)|}{1/N} \cdot \left(1 + \frac{16}{9N}\right)^{N/2} \\
&\leq \frac{4\sqrt{N}}{3} \cdot |p(0)| \cdot e^{8/9} \quad \text{per } |z| \leq \frac{1}{3\sqrt{N}}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Verifichiamo ora la seguente proprietà:

Se z' è uno dei punti $\{z_i\}_{i=2}^N$, allora $|z'| \geq \frac{3e^{-8/9}}{4\sqrt{N}}$.

Infatti, se $|z'| > \frac{1}{3\sqrt{N}}$, allora, poiché $\frac{1}{3} > \frac{3e^{8/9}}{4}$, non c'è nulla da provare; assumiamo quindi $|z'| \leq \frac{1}{3\sqrt{N}}$. Poiché

$$0 = p(z') = p(0) + \int_0^{z'} p'(\zeta) d\zeta,$$

abbiamo

$$|p(0)| = \left| \int_0^{z'} p'(\zeta) d\zeta \right|,$$

e quindi, dalla (3.14) otteniamo

$$|p(0)| \leq \frac{4\sqrt{N}}{3} |p(0)| e^{8/9} |z'|.$$

Pertanto $|z'| \geq \frac{3e^{-8/9}}{4\sqrt{N}}$, come affermato.

Infine, se $z \in \mathbf{C}$ soddisfa $|z| = \frac{3e^{-8/9}}{4\sqrt{N}}$ e $x = \mathcal{S}^{-1}(z)$, allora la distanza euclidea da x al

polo sud è

$$\begin{aligned}
|x - \tilde{x}_1| &= \frac{2|z - 0|}{\sqrt{1 + |z|^2}} = \frac{\frac{3e^{-8/9}}{2\sqrt{N}}}{\sqrt{1 + \left(\frac{3e^{-8/9}}{4\sqrt{N}}\right)^2}} \\
&\geq \frac{\frac{3e^{-8/9}}{2\sqrt{N}}}{\sqrt{1 + \left(\frac{3e^{-8/9}}{4\sqrt{2}}\right)^2}} \approx 0.6025 \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} > \frac{3}{5} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}},
\end{aligned}$$

che completa la dimostrazione. \square

Osservazione 3.1.8. La costante $3/5$ nel precedente teorema non può essere sostituita da un numero $\geq \sqrt{8\pi/\sqrt{3}} \approx 3.809$, quantità ricavata in (1.6). Infatti, considerando il caso $N = 5$, si verifica per assurdo che esiste almeno una coppia di punti con distanza $\leq \sqrt{2}$, per cui la costante $3/5$ non può essere sostituita con un numero $> \sqrt{2}\sqrt{5} = \sqrt{10} \approx 3.162$.

3.2 Momento di dipolo delle configurazioni ottimali

La seguente proposizione ci permette di quantificare il momento di dipolo di una configurazione minimale per $\alpha = 0$.

Proposizione 3.2.1. *Ogni configurazione con 0-energia minimale possiede un momento di dipolo nullo.*

Dimostrazione. Per verificare questa proposizione, basta osservare che in ogni configurazione di equilibrio la forza sulla i -esima particella dovuta alla presenza di tutte le altre è diretta radialmente, altrimenti la carica si sposterebbe lungo la superficie. Possiamo quindi scrivere:

$$F_i x_i = \sum_{i \neq j} \frac{x_i - x_j}{(x_i - x_j)^2}. \quad (3.15)$$

Facendo il prodotto scalare su entrambi i membri dell'equazione per x_i otteniamo:

$$F_i = \frac{1}{2}(N-1) \quad \text{per ogni } i \leq N.$$

Sommando l'equazione (3.15) in i e sfruttando il fatto che $x_i - x_j$ è antisimmetrico in i e j , otteniamo:

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2}(N-1) x_i = 0,$$

e quindi il momento di dipolo si annulla. \square

In sez. 4.2.1 vedremo invece che, per $\alpha = -1$, alcune configurazioni ottimali hanno un momento di dipolo non nullo, per cui deduciamo che il momento di dipolo di una configurazione ottimale non è uguale per ogni α .

Capitolo 4

Ricerca di configurazioni ottimali con metodi numerici

In sez. 2.6 è stata formulata una congettura su una formula generale per \mathcal{E} in base ad alcuni teoremi; vogliamo ora adattare tale congettura ai risultati ottenuti con metodi computazionali. A questo proposito, dopo aver descritto gli algoritmi utilizzati per l'ottimizzazione, commenteremo e valuteremo i risultati, fino ad ottenere delle espressioni per \mathcal{E} con buona approssimazione e delle rappresentazioni di configurazioni ottimali per diversi valori di N con relative proprietà geometriche.

Restringiamo il campo dei valori di α ai casi più interessanti $\alpha = \pm 1, 0$.

4.1 Algoritmi di ottimizzazione

In questa sezione descriviamo tre algoritmi utilizzati per calcolare \mathcal{E} e le rispettive configurazioni. I primi due sono dei classici algoritmi di ottimizzazione, per cui descriveremo soltanto l'adattamento al problema in esame; il terzo è un algoritmo presentato recentemente in [1], utilizzato per il calcolo di $\mathcal{E}(-1, N)$ per $N > 65$.

4.1.1 Metodo del Gradiente

Un semplice metodo per trovare numericamente una configurazione di equilibrio è il *Metodo del Gradiente*.

Date N cariche unitarie poste su punti casuali x_1, \dots, x_N della sfera si calcola, per ogni particella, la forza totale che agisce su di essa per effetto delle altre particelle:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j \leq N, j \neq i} \frac{x_i - x_j}{|x_i - x_j|^{2-\alpha}}$$

quindi si muovono le particelle in direzione della forza di una distanza proporzionale alla forza stessa. Il processo viene quindi ripetuto e fermato quando l'energia stabilizza con la precisione desiderata. L'iterazione è data quindi da questa espressione:

$$x_i \rightarrow x'_i = \frac{x_i + \lambda \mathbf{F}_i}{|x_i + \lambda \mathbf{F}_i|},$$

e λ è scelta in modo da rendere massima la convergenza; se il passaggio fornisce un valore di energia per x'_i più alto di quello per x_i , allora λ viene automaticamente modificata per far decrescere l'energia.

L'algoritmo descritto, pur essendo molto semplice e quindi di facile applicazione, non fornisce risultati eccellenti in quanto la sua convergenza è lineare.

4.1.2 Minimizzazione Monte Carlo

Nella sua forma più semplice, la *Minimizzazione Monte Carlo*, utilizzata per l'ottimizzazione di $\mathcal{E}(-1, N)$, consiste nelle seguenti operazioni:

- Modifica sequenziale dei parametri tramite piccoli incrementi casuali.
- Valutazione dei vari cambiamenti.
- Determinazione se i risultati sono più vicini o più lontani rispetto ai criteri stabiliti.

In questo caso i criteri riguardano la minimizzazione di energia potenziale, quindi un abbassamento dell'energia significa che il passaggio ha avvicinato la funzione al minimo, un innalzamento di energia significa il contrario; ovviamente l'algoritmo accetta il

primo, determinando una configurazione con più bassa energia, e rifiuta il secondo. Il metodo viene quindi ripetuto fino a che non si raggiunge una precisione prestabilita. La minimizzazione viene effettuata variando gli angoli formati dagli N vettori che partono dal centro e terminano in una carica sulla sfera, per cui i passi dell'algoritmo sono i seguenti:

- Il processo inizia posizionando tutte le cariche in un punto.
- Vengono determinati gli spostamenti di ogni carica, generando un numero casuale tra -1 e 1, e moltiplicando questo per un prefissato fattore H , per cui il coefficiente di cambiamento sarà compreso tra $-H$ e H .
- I vettori vengono ruotati individualmente e sequenzialmente fino ad un dato numero di iterazioni
- Se non viene generato nessun cambiamento, si abbassa il fattore H (di solito viene dimezzato) e si ripete il processo. L'abbassamento del fattore H continua fino ad un determinato ordine di precisione.

I primi larghi spostamenti permettono un veloce avvicinamento dei punti verso la configurazione minimale, i successivi piccoli spostamenti perfezionano la disposizione.

La configurazione ottenuta viene considerata come una configurazione di minimo locale; il successivo lavoro consiste nel generare altre configurazioni e confrontarle, anche se, in generale, non si avrà mai la certezza di aver trovato la configurazione di minimo globale, a causa della molteplicità di esistenza di configurazioni di minimo locale.

4.1.3 Algoritmo di Ottimizzazione Globale Vincolata

Questo metodo di ottimizzazione, denominato *Ottimizzazione Globale Vincolata* è in realtà un adattamento dell'*algoritmo Metropolis* [15] ed utilizza iterativamente detto algoritmo ed il concetto di *probabilità di Glauber*; quest'ultima permette di cambiare ad ogni iterazione solo i valori di quelle variabili che contribuiscono in modo eccessivo

alla funzione da minimizzare, mentre lascia invariate le altre variabili, come ora descriviamo.

Sia f una funzione reale delle N variabili x_1, \dots, x_N ; l'algoritmo calcola i valori di x_1, \dots, x_N che minimizzano la funzione $f(x_1, \dots, x_N)$. Denotiamo con ω_N una generica N -pla (x_1, \dots, x_N) ; l'algoritmo parte da una configurazione iniziale casuale, che indichiamo con $\omega_N^{(0)}$, quindi vengono iterati i seguenti tre passaggi:

Primo passo: Determinare, per ogni variabile x_i , se $x_i^{(n+1)}$ deve rimanere uguale a $x_i^{(n)}$ o deve cambiare valore.

Per vedere questo, si sceglie un numero casuale Q_i compreso tra 0 e 1. Se

$$Q_i < \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-g(x_i^{(n)}) - C}{kT}\right)}, \quad (4.1)$$

allora viene assegnato a $x_i^{(n)}$ un nuovo valore come descrive il secondo passo, altrimenti $x_i^{(n+1)}$ rimane uguale a $x_i^{(n)}$. Nell'espressione (4.1), g è una funzione reale di x_i ; C è una costante reale che utilizziamo per ogni $x_i^{(n)}$ in una iterazione, ma che può cambiare ad ogni iterazione; k e T sono rispettivamente la “costante di Boltzmann” e la “temperatura” del sistema. La parte destra dell'espressione (4.1) è la probabilità di Glauber, e deriva dalla considerazione che ogni $x_i^{(n+1)}$ ha esattamente due stati: rimane uguale a x_i (stato P_+) oppure no (stato P_-). Risolvendo il sistema

$$\begin{cases} P_+ + P_- = 1 \\ \frac{P_+}{P_-} = \frac{\exp\left(\frac{-g(x_i^{(n)})}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{-C}{kT}\right)} \end{cases}$$

per P_- otteniamo l'espressione (4.1).

Possiamo considerare $g(x_i^{(n)})$ come un “energia” associata a quelle variabili $x_i^{(n+1)}$ che rimangono uguali a $x_i^{(n)}$, e C come l'energia limite associata all'assegnazione di un nuovo valore per $x_i^{(n+1)}$. La funzione g e la costante C dipendono naturalmente dal problema che stiamo considerando; il valore di C ad una certa

iterazione può dipendere inoltre dai valori correnti delle variabili, e, in generale, cresce quando decresce la probabilità che una variabile cambi valore, decresce quando cresce la probabilità.

Secondo passo: Per ogni $x_i^{(n)}$ che rimane invariata secondo la procedura del primo passo, poniamo $x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)}$; per ogni x_i che deve cambiare il suo valore secondo il primo passo, scegliamo un $x_i^{(n+1)}$ casualmente da un insieme assegnato, che dipende dal problema in esame. Ad esempio, un problema potrebbe limitare i valori delle variabili, oppure potrebbe limitare il numero delle x_i con lo stesso valore, ecc.

Terzo passo: Si calcola $f(\omega_N^{(n+1)})$ e si esegue l'algoritmo Metropolis: se $f(\omega_N^{(n+1)}) < f(\omega_N^{(n)})$ allora la nuova assegnazione viene accettata, altrimenti viene respinta, a meno che un numero casuale Q prefissato sia inferiore a $\exp \frac{-(f(\omega_N^{(n+1)}) - f(\omega_N^{(n)}))}{T}$; se viene respinta definitivamente, $x_i^{(n+1)}$ viene ripristinato a x_i per ogni i .

I tre passi vengono iterati un certo numero di volte ad una data T , quindi si diminuisce T in base ad un criterio prefissato e si ripete il processo alla nuova temperatura.

Osserviamo che il secondo passo consente delle ridisposizioni globali del sistema, ma queste disposizioni sono vincolate dal primo passo, il quale, in generale, consente di cambiare valore solo a quelle variabili che contribuiscono eccessivamente alla f . Il terzo passo limita ulteriormente questa ridisposizione, infatti non consente di assegnare un nuovo valore a ω_N se la conseguente variazione della f è troppo grande.

4.2 Risultati degli algoritmi

Sono stati utilizzati i precedenti algoritmi di ottimizzazione nei casi più significativi $\alpha = \pm 1, 0$ sia per il calcolo di $\mathcal{E}(\alpha, N)$ per N fino a 65 sia per la ricerca delle rispettive configurazioni che la determinano; sono stati inoltre determinati i valori della (-1)-energia minimale per N fino a 100. Mostriamo ora i risultati dell'ottimizzazione di $E(\alpha, N)$ ed il gruppo di simmetria delle configurazioni ottimali; relativamente a questi

risultati abbiamo calcolato il valore di \mathcal{E} *normalizzato* secondo il seguente criterio. Abbiamo ipotizzato su ogni punto di una configurazione ω_N una carica unitaria, per cui la carica totale del sistema è N . Al crescere di N , le configurazioni approssimano sempre più una distribuzione continua di cariche, per cui l'energia che il sistema assume si avvicina sempre più a $N^2/2$ (sez. 1.1.2). Se invece assumiamo la carica totale del sistema uguale a 1, dividendo $\mathcal{E}(\alpha, N)$ per N^2 , il risultato deve tendere a $I_\sigma(\alpha)/2$, cioè la α -energia di una sfera con carica totale uguale a 1; denotiamo tali valori di energia ottimale normalizzata con \mathcal{E}^* .

4.2.1 Problema di Thompson

Risultati del Metodo del Gradiente e della Minimizzazione Monte Carlo

Abbiamo confrontato i risultati del Metodo del Gradiente e della Minimizzazione Monte Carlo, prendendo per ogni N la configurazione migliore (tab 4.1): la prima colonna contiene il numero N dei punti, nella seconda colonna elenchiamo una statistica che descrive in percentuale la probabilità di uscita della configurazione ottimale, nella terza viene indicato il gruppo di simmetria della configurazione ottimale, nella quarta colonna viene quantificata l'energia e infine, nell'ultima colonna, vengono elencati i valori del momento di dipolo. In questa elaborazione si valutano 1000 diverse configurazioni iniziali per valori di N da 2 a 65.

Si può subito notare che, al crescere di N , le configurazioni diventano sempre più complesse e subiscono anche dei cambiamenti strutturali come, ad esempio, la presenza o meno di un momento di dipolo non nullo o l'esistenza, a parità di cariche, di più configurazioni minimali con valori di energia molto vicini. Quest'ultima caratteristica si può dedurre dalla percentuale di uscita: per $N > 30$, raramente una configurazione ottimale esce al 100%, infatti è affiancata da altre "buone" configurazioni. Il primo caso con momento di dipolo diverso da zero lo abbiamo per $N = 11$, mentre il primo caso che presenta più configurazioni minimali lo abbiamo per $N = 16$, ma la situazione è molto frequente al crescere di N .

TABELLA 4.1: Risultati del problema di Thompson con il Metodo del Gradiente e la Minimizzazione Monte Carlo.

N	Freq.	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(-1, N)$	$M(N)$	N	Freq.	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(-1, N)$	$M(N)$
2	100.0	$D_{\infty h}$	0.5000	0.0	34	100.0	C_{2v}	468.9049	0.0
3	100.0	D_{3h}	1.7321	0.0	35	80.6	C_2	498.5699	0.000419
4	100.0	T_d	3.6742	0.0	36	100.0	C_{2v}	529.1224	0.000049
5	100.0	D_{3h}	6.4747	0.0	37	18.7	D_{5h}	560.6189	0.0
6	100.0	O_h	9.9853	0.0	38	44.2	D_{6h}	593.0385	0.0
7	100.0	D_{5h}	14.4530	0.0	39	66.7	D_{3h}	626.3890	0.0
8	100.0	D_{4d}	19.6753	0.0	40	66.9	T_d	660.6753	0.0
9	100.0	D_{3h}	25.7600	0.0	41	94.2	D_{3h}	695.9167	0.0
10	100.0	D_{4d}	32.7169	0.0	42	97.3	D_{5h}	732.0781	0.0
11	100.0	C_{2v}	40.5965	0.013220	43	100.0	C_{2v}	769.1908	0.000400
12	100.0	I_h	49.1653	0.0	44	100.0	O_h	807.1743	0.0
13	100.0	C_{2v}	58.8532	0.008820	45	100.0	D_3	846.1884	0.0
14	100.0	D_{6d}	69.3064	0.0	46	11.7	T	886.1671	0.0
15	100.0	D_3	80.6702	0.0	47	54.0	C_s	927.0593	0.002483
16	72.7	T	92.9117	0.0	48	100.0	O	968.7135	0.0
17	100.0	D_{5h}	106.0504	0.0	49	100.0	C_3	1011.5572	0.001529
18	100.0	D_{4d}	120.0845	0.0	50	100.0	D_{6d}	1055.1823	0.0
19	100.0	C_{2v}	135.0995	0.000135	51	98.5	D_3	1099.8193	0.0
20	100.0	D_{3h}	150.8816	0.0	52	56.8	C_3	1145.4190	0.000457
21	100.0	C_{2v}	167.6416	0.001406	53	68.2	C_{2v}	1191.9223	0.000279
22	96.9	T_d	185.2875	0.0	54	80.4	C_2	1239.3615	0.000138
23	100.0	D_3	203.9302	0.0	55	31.1	C_2	1287.7727	0.000392
24	100.0	O	223.3470	0.0	56	10.3	C_{2v}	1337.0949	0.0
25	100.0	C_s	243.8128	0.001021	57	89.9	D_3	1387.3832	0.0
26	100.0	C_2	265.1333	0.001919	58	25.5	C_{2v}	1438.6183	0.0
27	100.0	D_{5h}	287.3026	0.0	59	27.7	C_2	1490.7733	0.000154
28	100.0	T	310.4915	0.0	60	24.8	D_3	1543.8304	0.0
29	100.0	D_3	334.6344	0.0	61	63.6	C_1	1597.9418	0.001092
30	100.0	C_2	359.6039	0.0	62	27.4	C_{5v}	1652.9094	0.0
31	100.0	C_{3v}	385.5308	0.003205	63	99.8	D_3	1708.8797	0.0
32	97.5	I_h	412.2613	0.0	64	84.0	C_{2v}	1765.8026	0.0
33	100.0	C_s	440.2041	0.004356	65	93.8	C_2	1823.6680	0.000400

Risultati dell'Algoritmo di Ottimizzazione Globale Vincolata

Mostriamo ora i risultati dell'Algoritmo dell'Ottimizzazione Globale Vincolata applicato al problema di Thompson. Date N cariche poste su una sfera nei punti

x_1, \dots, x_N (vettori), definiamo la funzione g definita nell'espressione (4.1) secondo i criteri energetici:

$$g(x_i) = \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

Per quelle cariche che cambiano coordinate durante l'ottimizzazione, assegniamo le nuove coordinate sferiche $\theta_i^{(n+1)} = \theta_i^{(n)} + \eta Q_i \pi$, $\phi_i^{(n+1)} = \phi_i^{(n)} + \eta Q'_i 2\pi$ ($x_i \equiv 1, \forall i$), dove Q_i e Q'_i indicano due numeri casuali tra 0 e 1, η riduce la massima variazione angolare in proporzione alla prefissata tabella di temperature, e le somme sono fatte con una opportuna periodicità. Definiamo inoltre, nella stessa espressione (4.1) la costante $C = \lambda \max\{g(r_i) : i = 1, \dots, N\}$, con $\lambda = 0.7$; con questo valore di λ i risultati non risentono molto di piccoli cambiamenti.

Ad ogni temperatura si considerano 100 configurazioni, quindi si abbassa la temperatura T nell'equazione (4.1), l'algoritmo Metropolis, ed η di un fattore 0.9. Infine utilizziamo la configurazione ottenuta da questo metodo come input di un algoritmo associato del tipo del *Metodo del Gradiente* per ridurre l'energia il più possibile; si ripete quindi la procedura per cinque diverse configurazioni iniziali. L'algoritmo ha calcolato i valori di \mathcal{E} per $66 \leq N \leq 100$, elencati in tab. 4.2. In tab.4.3 osserviamo la convergenza di \mathcal{E}^* a $I_\sigma(-1)/2 = 0.5$.

4.2.2 Caso logaritmico

Consideriamo un sistema di particelle, disposte sulla superficie della sfera S^2 , che interagiscono con un potenziale che dipende in modo logaritmico dalla loro distanza. I risultati esposti in tab. 4.4 sono stati ottenuti applicando il Metodo del Gradiente, per i valori di N appartenenti all'intervallo $2 \leq N \leq 64$. In tabella sono elencati i gruppi di simmetria delle configurazioni minimali e i rispettivi valori di \mathcal{E} per ogni N , mentre in tab. 4.5 sono elencati i valori della 0-energia minimale normalizzata. In questo caso si può notare la convergenza di $\mathcal{E}^*(0, N)$ a $\frac{I_\sigma(0)}{2} \approx -0.0966$.

TABELLA 4.2: Risultati del problema di Thompson con l'Algoritmo di Ottimizzazione Globale Vincolata.

N	$\mathcal{E}(-1, N)$	N	$\mathcal{E}(-1, N)$	N	$\mathcal{E}(-1, N)$
65	1823.667960	77	2591.850152	89	3497.439019
66	1882.441525	78	2662.046475	90	3579.091223
67	1942.122700	79	2733.248358	91	3661.713699
68	2002.874702	80	2805.355876	92	3745.291636
69	2064.536066	81	2878.522830	93	3829.844338
70	2127.100902	82	2952.569675	94	3915.309270
71	2190.649906	83	3027.522830	95	4001.771676
72	2255.001191	84	3103.465124	96	4089.154010
73	2320.633884	85	3180.361443	97	4177.533600
74	2387.072982	86	3258.213663	98	4266.822464
75	2454.369689	87	3337.002643	99	4357.139163
76	2522.674872	88	3416.720197	100	4448.350634

TABELLA 4.3: Normalizzazione della (-1)-energia minimale

N	$\mathcal{E}^*(-1, N)$	N	$\mathcal{E}^*(-1, N)$	N	$\mathcal{E}^*(-1, N)$
65	0.4316	77	0.4371	89	0.4415
66	0.4321	78	0.4376	90	0.4420
67	0.4326	79	0.4380	91	0.4422
68	0.4331	80	0.4383	92	0.4425
69	0.4336	81	0.4387	93	0.4428
70	0.4341	82	0.4391	94	0.4431
71	0.4346	83	0.4395	95	0.4434
72	0.4350	84	0.4398	96	0.4437
73	0.4355	85	0.4402	97	0.4440
74	0.4360	86	0.4405	98	0.4443
75	0.4363	87	0.4409	99	0.4446
76	0.4368	88	0.4412	100	0.4448

4.2.3 Somme massimali

Recentemente, E.A. Rakhmanov, E.B. Saff e Y.M. Zhou in [19] hanno implementato un algoritmo che combina insieme il Metodo del Gradiente con altri algoritmi, tra i quali alcuni che aumentano la convergenza in prossimità di punti estremanti, il tutto unito

TABELLA 4.4: *Minimizzazione nel caso logaritmico*

N	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(0, N)$	N	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(0, N)$	N	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(0, N)$
2	$D_{\infty h}$	-0.6931	23	D_3	-69.5784	44	O_h	-229.6418
3	D_{3h}	-1.6479	24	O	-75.2140	45	D_3	-239.4537
4	T_d	-2.9425	25	C_s	-80.9975	46	T	-249.4558
5	D_{3h}	-4.4205	26	C_2	-87.0094	47	C_s	-259.6618
6	O_h	-6.2383	27	D_{5h}	-93.2520	48	O	-270.1179
7	D_{5h}	-8.1825	28	T	-99.6586	49	C_3	-280.7019
8	D_{4d}	-10.4280	29	C_2	-106.2548	50	D_{6d}	-291.5286
9	D_{3h}	-12.8878	30	C_2	-113.0893	51	D_3	-302.5337
10	D_{4d}	-15.5631	31	C_{3v}	-120.1103	52	C_3	-313.7324
11	C_{2v}	-18.4205	32	I_h	-127.3789	53	C_{2v}	-325.1382
12	I_h	-21.6061	33	C_s	-134.7478	54	C_2	-336.7455
13	C_{2v}	-24.8667	34	C_{2v}	-142.3759	55	C_2	-348.5418
14	D_{6d}	-28.4078	35	C_2	-150.1921	56	C_2	-360.5459
15	D_3	-32.1479	36	C_{2v}	-158.2241	57	D_3	-372.7412
16	T	-36.1062	37	D_{5h}	-166.4507	58	C_{2v}	-385.1328
17	D_{5h}	-40.2731	38	D_{6h}	-174.8802	59	C_2	-397.7281
18	D_{4d}	-44.6503	39	D_{3h}	-183.5092	60	D_3	-410.5332
19	C_{2v}	-49.1999	40	T_d	-192.3377	61	C_1	-423.5076
20	D_{3h}	-54.0111	41	D_{3h}	-201.3592	62	C_{5v}	-436.7040
21	C_{2v}	-59.0009	42	D_{5h}	-210.5845	63	D_3	-450.0812
22	T_d	-64.2060	43	C_{2v}	-220.0035	64	C_{2v}	-463.6544

a considerazioni geometriche e scelte pilotate. L'algoritmo è stato applicato nei tre casi $\alpha = \pm 1, 0$, fornendo dei risultati vicini ai precedenti per il problema di Thompson ed il caso logaritmico; ora mostriamo i risultati nel caso $\alpha = 1$. Anche in questo caso elenchiamo i gruppi di simmetria delle configurazioni ottimali e il rispettivo valore di \mathcal{E} per ogni N (tab. 4.6). In tab. 4.7 sono elencati i risultati della normalizzazione della 1-energia massimale: è notevole la convergenza a $I_\sigma(1)/2 \approx 0.6667$.

TABELLA 4.5: *Normalizzazione della 0-energia minimale*

N	$\mathcal{E}^*(0, N)$	N	$\mathcal{E}^*(0, N)$	N	$\mathcal{E}^*(0, N)$
2	-0.1733	23	-0.1315	44	-0.1186
3	-0.1831	24	-0.1306	45	-0.1182
4	-0.1839	25	-0.1296	46	-0.1179
5	-0.1768	26	-0.1301	47	-0.1175
6	-0.1733	27	-0.1279	48	-0.1172
7	-0.1670	28	-0.1271	49	-0.1169
8	-0.1629	29	-0.1263	50	-0.1166
9	-0.1591	30	-0.1265	51	-0.1163
10	-0.1556	31	-0.1250	52	-0.1160
11	-0.1522	32	-0.1244	53	-0.1157
12	-0.1500	33	-0.1237	54	-0.1155
13	-0.1471	34	-0.1232	55	-0.1152
14	-0.1449	35	-0.1226	56	-0.1150
15	-0.1429	36	-0.1221	57	-0.1147
16	-0.1410	37	-0.1216	58	-0.1145
17	-0.1394	38	-0.1211	59	-0.1143
18	-0.1378	39	-0.1207	60	-0.1140
19	-0.1363	40	-0.1202	61	-0.1138
20	-0.1353	41	-0.1198	62	-0.1136
21	-0.1358	42	-0.1194	63	-0.1134
22	-0.1327	43	-0.1192	64	-0.1132

4.3 Proprietà delle configurazioni ottimali elaborate

Esaminiamo ora le proprietà geometriche e le simmetrie delle configurazioni ottimali elaborate relativamente al problema di Thompson; le configurazioni ottimali relative ai casi $\alpha = 0, 1$ hanno lo stesso gruppo di simmetria di quelle relative al caso $\alpha = -1$ eccetto i valori di $N = 7, 29, 33, 35, 43, 53, 56$.

Le configurazioni che si ottengono per $N = 2, 3$ sono rispettivamente: la coppia di punti antipodale nord-sud $D_{\infty h}(1^2)$ e un triangolo equilatero inscritto nella circonferenza massima, $D_{3h}(3)$). Nel primo caso l'unica separazione è il diametro che collega i due

TABELLA 4.6: *Somme massimali*

N	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(1, N)$	N	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(1, N)$	N	$S(\omega_N)$	$\mathcal{E}(1, N)$
2	$D_{\infty h}$	2.0000	23	D_3	320.7529	44	O_h	1287.9839
3	D_{3h}	5.1962	24	O	382.0048	45	D_3	1347.2863
4	T_d	9.7980	25	C_s	414.6246	46	T	1407.9205
5	D_{3h}	15.6814	26	C_2	448.5856	47	C_s	1469.8888
6	O_h	22.9706	27	D_{5h}	483.8883	48	O	1533.2010
7	C_2	31.5309	28	T	520.5149	49	C_3	1597.8334
8	D_{4d}	41.4731	29	C_{2v}	558.4722	50	D_{6d}	1663.8078
9	D_{3h}	52.7436	30	C_2	597.7730	51	D_3	1731.1120
10	D_{4d}	65.3497	31	C_{3v}	638.4029	52	C_3	1799.7493
11	C_{2v}	79.2747	32	I_h	680.3789	53	C_2	1869.7215
12	I_h	94.5829	33	C_1	723.6647	54	C_2	1941.0283
13	C_{2v}	111.1704	34	C_{2v}	768.2980	55	C_2	2013.6669
14	D_{6d}	129.1204	35	C_s	814.2623	56	C_2	2087.6412
15	D_3	148.4006	36	C_{2v}	861.5640	57	D_3	2162.9476
16	T	169.0191	37	D_{5h}	910.1979	58	C_{2v}	2239.5874
17	D_{5h}	190.9723	38	D_{6h}	960.1665	59	C_2	2317.5616
18	D_{4d}	214.2610	39	D_{3h}	1011.4684	60	D_3	2396.8718
19	C_{2v}	238.8723	40	T_d	1064.1042	61	C_1	2477.5106
20	D_{3h}	264.8362	41	D_{3h}	1118.0725	62	C_{5v}	2559.4875
21	C_{2v}	292.1256	42	D_{5h}	1173.3754	63	D_3	2642.7947
22	T_d	320.7529	43	D_{2d}	1230.0107	64	C_{2v}	2727.4353

poli, nel secondo caso si hanno tre separazioni tutte di lunghezza $\sqrt{3}$.

4.3.1 Chiralità

Per come è definita la chiralità (sez. 1.3), è chiaro che sono chirali tutte le configurazioni con simmetria ciclica C_k , quelle con simmetria diedrale D_k e quelle con simmetria dei solidi platonici T , O ed I .

Per vedere direttamente se una configurazione è chirale, si può utilizzare la seguente procedura:

- Si costruisce una seconda configurazione invertendo le coordinate dei punti di quella originale ($x_i \rightarrow -x_i$).

TABELLA 4.7: *Normalizzazione della 1-energia massimale*

N	$\mathcal{E}^*(1, N)$	N	$\mathcal{E}^*(1, N)$	N	$\mathcal{E}^*(1, N)$
2	0.5000	23	0.6063	44	0.6653
3	0.5774	24	0.6640	45	0.6653
4	0.6124	25	0.6634	46	0.6654
5	0.6273	26	0.6636	47	0.6654
6	0.6381	27	0.6638	48	0.6655
7	0.6435	28	0.6639	49	0.6655
8	0.6480	29	0.6641	50	0.6655
9	0.6512	30	0.6642	51	0.6656
10	0.6535	31	0.6643	52	0.6656
11	0.6552	32	0.6644	53	0.6656
12	0.6568	33	0.6645	54	0.6656
13	0.6578	34	0.6646	55	0.6657
14	0.6588	35	0.6647	56	0.6657
15	0.6596	36	0.6648	57	0.6657
16	0.6609	37	0.6649	58	0.6658
17	0.6608	38	0.6649	59	0.6658
18	0.6613	39	0.6650	60	0.6658
19	0.6617	40	0.6651	61	0.6658
20	0.6621	41	0.6655	62	0.6658
21	0.6624	42	0.6652	63	0.6659
22	0.6627	43	0.6653	64	0.6659

- Si prendono i primi due punti dell'insieme originale e si esegue la rotazione rispetto l'origine fino a che la corda che congiunge i due punti non raggiunga una posizione standard parallela all'asse delle x e con il punto medio sull'asse delle z positive.
- Si calcola la lunghezza della corda e si trova l'insieme delle coppie della configurazione invertita che sono separate dalla stessa lunghezza con una precisione prestabilita.
- Si pone la corda generata da tutte le coppie nella posizione standard.
- Si controlla che i due insiemi siano uguali con una certa tolleranza.

È risultato dal confronto dei casi $\alpha = \pm 1, 0$ che, per i valori di N le cui configurazioni ottimali hanno diversa simmetria, se una configurazione ottimale è chirale con un certo potenziale, non lo è con gli altri potenziali; questo significa che il cambiamento di potenziale comporta anche un cambiamento strutturale.

Le prime configurazioni chirali che incontriamo, al crescere di N , sono per $N = 15, 16$, ma per $N > 44$ quasi tutte le configurazioni ottimali sono chirali. In fig. 4.1 abbiamo un esempio di poliedro non chirale ed un esempio di poliedro chirale: nel primo è possibile determinare dei piani speculari, mentre il secondo non si può sovrapporre, tramite rotazioni, alla sua immagine speculare.

FIGURA 4.1: *In figura sono rappresentati due poliedri (parte superiore a sinistra, parte inferiore a destra), dei quali il primo non è chirale poiché ha tre piani speculari, mentre il secondo è chirale perché non è possibile ottenere l'immagine speculare del poliedro stesso tramite rotazioni.*

4.3.2 Momento di dipolo

Analizzando le configurazioni con momento di dipolo diverso da zero (caso $\alpha = -1$), si può congetturare che una condizione necessaria (ma non sufficiente) affinché si verifichi questa proprietà è che la configurazione abbia gruppo di simmetria di tipo C . Tra le configurazioni con simmetria C_{kv} , solo quelle con N pari hanno momento nullo (o trascurabile); si può congetturare, quindi, che la presenza di momento di dipolo per N dispari sia dovuta alla carica posizionata nel polo, necessaria per ottenere un insieme di un numero dispari di punti con simmetria C_{kv} . Mentre non si possono stabilire criteri per le configurazioni con simmetria C_k , tutte le configurazioni con simmetria C_s presentano invece un momento di dipolo diverso da zero.

In sez. 3.2 abbiamo visto che il momento di dipolo delle configurazioni ottimali con potenziale logaritmico è sempre nullo, mentre il caso coulombiano presenta alcune configurazioni con momento di dipolo diverso da zero. Poiché tali configurazioni hanno, per quasi tutti gli N , lo stesso gruppo di simmetria, possiamo dedurre che in generale, le configurazioni ottimali pur avendo stesso gruppo di simmetria non rappresentano lo stesso insieme di punti al variare di α (infatti il gruppo di simmetria non dà informazioni sulla posizione dei punti).

4.3.3 Simmetrie

Un altro aspetto interessante del problema, è la manifestazione di nuovi livelli di complessità dovuti al passaggio di un sistema da pochi a molti elementi. Per vedere questo basta osservare i risultati dell'ottimizzazione al crescere di N : se N è basso, il sistema ha pochi gradi di libertà, e quindi sono sufficienti alcune considerazioni geometriche per determinare gli stati di equilibrio; al crescere di N , invece, le considerazioni sulla simmetria non sono più sufficienti, come confermano i risultati numerici, i quali mostrano che le soluzioni hanno sempre una debole simmetria. Nonostante la simmetria di una configurazione non possa essere determinata a priori, i vari risultati mostrano, nella maggior parte dei casi, l'esistenza di un asse di simmetria coincidente con l'asse polare della sfera, e la tendenza delle cariche a disporsi sulla coppia antipodale dell'as-

se polare e/o su poligoni regolari nel piano equatoriale e/o in piani paralleli ad esso; questi poligoni, molto spesso, sono disposti anche in modo simmetrico. Si può notare, inoltre, che gli algoritmi di ottimizzazione tendono a produrre poliedri aventi facce triangolari piuttosto che quadrate; ciò è dovuto probabilmente al fatto che una faccia triangolare rimane più “rigida” di una faccia quadrata, e quindi viene più difficilmente distorta.

Suddividiamo le configurazioni in base al loro gruppo di simmetria. Il caso $N = 7$ è l’unico che presenta una differenza notevole al variare del potenziale: infatti, a differenza della configurazione con gruppo di simmetria diedrale $D_{5h}(1:5:1)$ ottenuta nei casi $\alpha = -1, 0$, nel caso $\alpha = 1$ si è ottenuta la configurazione con gruppo di simmetria ciclico $C_2(1 : 2^3)$.

Configurazioni con simmetria di tipo C

Gruppi C_{kv} Le simmetrie di tipo C_{kv} hanno come elementi degli assi di simmetria verticali di ordine k e k piani speculari verticali. Molto frequenti sono i poliedri con simmetria di tipo C_{2v} ; oltre a questi notiamo il poliedro con 31 vertici con simmetria di tipo C_{3v} , ed il poliedro con 62 vertici con la rara simmetria C_{5v} .

Esaminiamo ad esempio alcune configurazioni di tipo C_{2v} . Per $N = 11$ la distribuzione presenta i punti disposti su 5 livelli: a livello 0 un punto al polo; nel primo livello abbiamo due punti in posizioni opposte rispetto al polo; nel secondo livello si hanno quattro punti disposti a rettangolo con il lato lungo orientato ad angolo retto rispetto ai due punti precedenti; a livello 3 ci sono due punti su opposte longitudini e orientate come i punti del primo livello (i due punti formano quasi gli interi diametri con i punti opposti del primo livello); infine nel quarto livello abbiamo due punti orientati ad angolo retto rispetto ai precedenti; il poliedro corrispondente ha quindi sei tipi di diversi triangoli. Il poliedro di 13 vertici ha invece disposizione $(1 : 2^2 : 4 : 2^2)$ e possiede ben sette classi di differenti triangoli. La configurazione ottimale con 19 punti presenta la disposizione $(1 : 4 : 2 : 4 : 2^2 : 4)$, quindi il poliedro corrispondente possiede un quadrilatero in prossimità del polo sud. I poliedri descritti con simmetria

C_{2v} sono in fig. 4.2, mentre il poliedro di 31 vertici con simmetria C_{3v} è in fig. 4.3.

FIGURA 4.2: *Poliedri con simmetria C_{2v} : sono rappresentati i 2 piani speculari verticali che possiede ciascun poliedro.*

FIGURA 4.3: Poliedro con simmetria C_{3v} con tre piani speculari verticali.

Gruppi C_k Le simmetrie di tipo C_k hanno come elemento un solo asse rotazionale di ordine k ; l'elaborazione ha prodotto numerose configurazioni con simmetria C_2 e C_3 . Tra le configurazioni ottimali aventi simmetria C_k , inseriamo anche quella di 61 punti, l'unica con simmetria banale C_1 .

Si può notare in tab. 4.1 che, al crescere di N , le simmetrie di tipo C_k sono quelle più frequenti, pertanto anche da questo fatto si può dedurre che le configurazioni assumono simmetrie sempre più deboli.

Gruppi C_s I poliedri con simmetria C_s non hanno assi rotazionali, ma solo un piano speculare; hanno questa simmetria i poliedri con $N = 25, 33, 47$ vertici.

Per $N = 25$ (fig. 4.4) il piano speculare passa attraverso i cinque punti che compaiono singolarmente nel proprio livello. Il caso $N = 47$ presenta due configurazioni ottimali, con piccola differenza di energia, entrambe di tipo C_s .

Configurazioni con simmetria di tipo D

Dei cinque solidi platonici, l'esaedro ($N = 8$) e il dodecaedro ($N = 20$) non forniscono una soluzione ottimale del problema. Sono infatti soluzioni, nei rispettivi casi, il *cubo*

FIGURA 4.4: *Poliedro con simmetria C_s : il gruppo di simmetria di tale poliedro contiene solo una riflessione oltre all'identità.*

*ruotato*¹ avente simmetria D_{4d} e il poliedro $D_{3h}(1 : 3^2 : 6 : 3^2 : 1)$. Da notare che il cubo ruotato e il poliedro con simmetria D_{3h} sono stati ottenuti dagli algoritmi anche ponendo come configurazione iniziale rispettivamente il cubo e il dodecaedro. Questo fatto conferma l'osservazione sul tipo di faccia che possiede una configurazione ottimale; infatti l'esaedro ha tutte facce quadrate, mentre il dodecaedro ha tutte facce pentagonali.

I due poliedri descritti forniscono due tipici esempi di simmetria diedrale; anche in questo caso possiamo suddividere il tipo di simmetria in tre sottogruppi.

Gruppi D_{kh} I gruppi di tipo D_{kh} hanno come elemento, oltre agli assi rotazionali verticali ed orizzontali, anche un piano speculare a livello equatoriale, cioè hanno la stessa disposizione dei punti nei due emisferi.

La configurazione di 38 punti è l'unica con la rara simmetria D_{6h} e presenta la suddivisione $(1 : 6^6 : 1)$, cioè un punto in ciascun polo e ben sei anelli con sei punti, determinando 4 tipi di diversi triangoli.

¹Il *cubo ruotato* è un esaedro con la metà superiore ruotata di un angolo di 45 gradi.

Le configurazioni ottimali di $N = 7, 17, 27, 37, 42$ punti hanno invece simmetria D_{5h} : la bpiramide pentagonale ($N = 7$) presenta un vertice in ognuno dei due poli ed un pentagono regolare all'equatore, determinando 10 facce triangolari uguali. Gli altri poliedri si possono ottenere da questo poliedro: ad esempio, il poliedro con 17 vertici (fig. 4.5) si può costruire inserendo un vertice in direzione del baricentro di in ogni faccia triangolare della bpiramide; si mantiene la simmetria D_{5h} e si determinano tre tipi di triangoli, che possiamo chiamare "polari", "tropicali" ed "equatoriali". Anche i poliedri con 27 (fig. 4.5) e 37 vertici si possono ottenere in modo analogo, mentre fa eccezione il poliedro con 42 vertici che ha 10 punti all'equatore; quest'ultima configurazione è risultata migliore di quella prevista con simmetria I_h . Possiamo riassumere le disposizioni osservando le analogie:

$$\begin{aligned} N = 7 & \quad : (1:5:1) \\ N = 17 & \quad : (1:5^3:1) \\ N = 27 & \quad : (1:5^5:1) \\ N = 37 & \quad : (1:5^7:1) \end{aligned}$$

I poliedri con simmetria D_{3h} , risultati per $N = 5, 20$, sono simili ai precedenti con l'unica differenza che l'asse rotazionale ha ordine 3. Ad esempio, per $N = 5$, abbiamo la bpiramide triangolare, con due vertici ai poli e gli altri tre formanti un triangolo equilatero all'equatore. In particolare, la separazione dei punti ai poli ha ovviamente lunghezza 2, le sei separazioni dei punti ai poli rispetto a quelli all'equatore hanno lunghezza $\sqrt{2}$ e le tre separazioni dei tre punti all'equatore hanno lunghezza $\sqrt{3}$, per cui si calcola facilmente $\mathcal{E}(-1, 5) \approx 6.4746$. Da notare che questa configurazione di 5 punti contiene come sottoinsiemi le configurazioni di 2 e 3 punti. Per $N = 20$ la configurazione di equilibrio ha sette livelli: un punto al polo nord, sotto il polo un triangolo equilatero, al livello successivo un altro triangolo equilatero ruotato di 60 gradi rispetto al primo, all'equatore sei punti formanti due triangoli equilateri sfasati tra loro ma non di 60 gradi, quindi nell'emisfero inferiore abbiamo l'immagine speculare di quella dell'emisfero superiore. Le configurazioni con 9 e 39 punti, invece, pur avendo la stessa simmetria D_{3h} , non presentano punti ai poli, ma solo terne di punti disposte su piani paralleli: quella di 9 punti ha tre terne, delle quali una all'equatore e le altre due

FIGURA 4.5: *I poliedri rappresentati hanno la forte simmetria D_{5h} : oltre ad avere la parte superiore identica a quella inferiore, i poliedri presentano un asse rotazionale verticale di ordine 5.*

a stesse latitudini sopra e sotto l'equatore ma sfasate rispetto alla terna nell'equatore; quella di 39 punti presenta la disposizione $(3^2 : 6 : 3 : 9 : 3 : 6 : 3^3)$. La configurazione di 41 punti è uguale a quella di 39 punti con l'aggiunta di un punto in ogni polo.

Gruppi D_{kd} Sono risultate cinque configurazioni ottimali con simmetria D_{kd} , precisamente tre con simmetria D_{4d} ($N = 8, 10, 18$) e due con simmetria D_{6d} ($N = 14, 50$). Per $N = 8$ si ha il cubo ruotato: gli otto vertici si sistemano in due quadrati su piani paralleli ed a stesse latitudini, ma con un quadrato ruotato di 45 gradi rispetto all'altro. Per questa configurazione risulta $E \approx 19.675$, mentre per l'esaedro risulta $E \approx 19.741$; è evidente, quindi, che i solidi platonici non rappresentano necessaria-

mente configurazioni di equilibrio. Per $N = 10$ la configurazione presenta due punti ai poli e due quadrati a stesse latitudini sopra e sotto rispetto all'equatore; per $N = 18$ la configurazione ha due ulteriori livelli con quattro punti ciascuno.

FIGURA 4.6: *Poliedri con simmetria D_{4d} : son ben visibili i 4 piani speculari verticali e l'asse rotazionale verticale di ordine 4.*

I poliedri con la forte simmetria di tipo D_{6d} , invece, sono $D_{6d}(1:6^2:1)$ per $N = 14$ (fig. 4.7) e $D_{6d}(1:6^3:12:6^3:1)$ per $N = 50$.

FIGURA 4.7: *Poliedro con simmetria D_{6d}*

Gruppi D_k Infine esaminiamo le simmetrie D_k , indicando con k l'ordine dell'asse verticale; ricordiamo che i poliedri con questa simmetria presentano anche k assi di simmetria orizzontali di ordine 2. Abbiamo ben otto configurazioni con simmetria D_3 , tra cui quelle di 15, 23 e 29 punti (fig. 4.8), mentre le altre cinque sono risultate per $N \geq 45$.

Per $N = 15$ si ha il primo esempio di poliedro chirale; il sistema consiste in cinque anelli di tre punti ciascuno e sfasati tra loro in modo da impartire chiralità alla figura. La disposizione dei punti per $N = 23, 29$ è invece, rispettivamente $(1:3^7:1)$ e $(1:3^9:1)$; anche i corrispondenti poliedri sono chirali.

Configurazioni con simmetria tetraedrale

Sono risultate sei configurazioni ottimali con simmetria tetraedrale, di cui tre ($N = 4, 22, 40$) del tipo T_d e le altre tre ($N = 16, 28, 46$) puramente rotazionali, cioè di tipo T .

FIGURA 4.8: *I poliedri rappresentati, con simmetria D_3 , hanno solo un asse rotazionale verticale di ordine 3, oltre agli assi rotazionali orizzontali di ordine 2 comuni a tutti i poliedri con simmetria diedrale.*

Gruppi T_d Per $N = 4$, i quattro punti si dispongono dunque ai vertici di un tetraedro; si formano sei separazioni di lunghezza $2\sqrt{2/3}$, pertanto $\mathcal{E}(-1, 4) \approx 3.6742$.

Il poliedro con 22 vertici consiste in 4 vertici nelle posizioni tetraedriche di base, ognuna al centro di un esamero composto da triangoli scaleni uguali, producendo appunto un asse di simmetria di ordine 3; ogni coppia di tali esagoni ha in comune un vertice. Anche in questo caso si formano tre tipi di triangoli, mentre nel poliedro con $N = 40$ vertici si possono notare cinque diversi triangoli.

Gruppi T Il caso $N = 16$ è il primo che presenta due distinte configurazioni di equilibrio con energia molto vicina. Nel poliedro corrispondente alla prima configurazione, con simmetria T (chirale), compaiono solo triangoli, mentre nel poliedro $D_{4d}(4 : 8 : 4)$ compaiono anche due quadrati. Le loro rispettive energie sono: $E(-1, \omega_{16,T}) \approx 92.9116$, mentre $E(-1, \omega_{16,D_{4d}}) \approx 92.9203$, pertanto è da preferire il primo poliedro. Questo può essere ottenuto da un tetraedro tronco (12 vertici) aggiungendo gli altri quattro vertici in direzione del centro di ogni triangolo equilatero dell'originale tetraedro. Si formano tre tipi di diversi triangoli, e la loro particolare disposizione impartisce chiralità alla figura.

La configurazione con 28 punti ha simmetria T poiché, a differenza di quella con 22 punti, non contiene piani speculari che bisecano l'angolo tra gli assi di simmetria. Anche nel poliedro corrispondente a questa configurazione si possono notare cinque diversi triangoli. I poliedri con simmetria T sono in fig. 4.9.

Per $N = 46$ si ha un altro tipico caso in cui compaiono più configurazioni ottimali con piccolissime variazioni di energia. Sono state elaborate configurazioni con le seguenti simmetrie, di cui la prima è la migliore:

- Simmetria T : $\mathcal{E} = 886.1671$
- Simmetria C_{2v} : $\mathcal{E} = 886.1702$
- Simmetria C_2 : $\mathcal{E} = 886.1714$

Da notare che la configurazione migliore è risultata con frequenza molto minore delle altre due (11,7% contro, rispettivamente, 45% e 26,7%).

FIGURA 4.9: *Poliedri con simmetria T : sono indicate con le frecce le posizioni tetraedrali.*

I poliedri con simmetria tetraedrale si possono determinare anche facendo le seguenti considerazioni geometriche. Se aggiungiamo casualmente un punto su una faccia triangolare del tetraedro, sono necessari altri due punti per conservare la simmetria rotazionale (di ordine 3) di quella faccia; poiché il tetraedro ha 4 facce di questo tipo, in totale bisogna aggiungere 12 punti, quindi otteniamo la formula:

$$N = 4 + 12a.$$

Infatti i poliedri esaminati con 4, 16, 28 e 40 vertici si ottengono proprio da questa formula per $a = 0, 1, 2, 3$. Si potrebbe distinguere inoltre una seconda serie aggiungendo un punto in ogni lato del tetraedro nel punto medio in modo da conservare l'asse

rotazionale di ordine 2. Si ottiene quindi analogamente la formula generale:

$$N = 4 + 12a + 6b.$$

Prendendo $b = 1$ e $a = 1$ e 3 , si ottengono i poliedri di 22 e 46 punti sopra descritti.

Configurazioni con simmetria ottaedrale

Quattro configurazioni ottimali hanno simmetria ottaedrale; due di queste ($N = 6, 44$) sono del tipo O_h e due ($N = 24, 48$) rotazionali di tipo O .

Gruppi O_h Per $N = 6$ i punti si dispongono ai vertici di un ottaedro; abbiamo 15 separazioni, di cui tre diametri di lunghezza 2 e le altre dodici di lunghezza $\sqrt{2}$, per cui otteniamo $\mathcal{E}(-1, 6) \approx 9.9852$. La configurazione di 6 punti è formata da tre configurazioni ortogonali di 2 punti, e può essere vista, nelle tre direzioni, come un asse nord-sud e un quadrato all'equatore.

Il poliedro con 44 vertici ha una simmetria molto forte: consiste in otto esameri regolari adiacenti con un punto in direzione del loro centro; quattro quadrati chiudono la struttura.

Gruppi O Per $N = 24, 48$, i poliedri che identificano le configurazioni di equilibrio possiedono la rara simmetria di tipo O . Il poliedro di 24 vertici (fig. 4.10) ha sei facce quadrate e 32 triangolari, quindi, a prima vista, sembrerebbe il cubottaedro, cioè il poliedro semiregolare formato da 32 facce triangolari regolari e sei facce quadrate disposte ad ottaedro. Tuttavia si possono distinguere due tipi di diversi triangoli: i 24 triangoli adiacenti ai quattro quadrati e gli altri 8 triangoli non adiacenti; la piccolissima differenza tra questi due tipi di triangoli rendono comunque il poliedro molto simile al cubottaedro. Inoltre la disposizione delle facce quadrate escludono l'esistenza di un piano speculare, richiesto per la simmetria di tipo O_h . Il poliedro di 48 vertici ha una simile struttura chirale.

Anche i poliedri con simmetria ottaedrale si possono determinare facendo alcune considerazioni geometriche. In questo caso, i poliedri possono essere costruiti sia da

FIGURA 4.10: *Poliedro con simmetria O : le posizioni ottaedrali sono al centro dei 6 quadrati che contiene il poliedro (sono visibili solo quella superiore e quella inferiore).*

un ottaedro che da un cubo, poiché sono reciprocamente duali. In entrambi i casi, ogni punto aggiunto in una faccia produce, per le stesse motivazioni del precedente caso tetraedrale, 24 punti. Se a questi aggiungiamo i vertici del solido originale otteniamo una delle due formule:

$$N = 24a + 6$$

$$N = 24a + 8$$

Un'altra serie può essere ricavata aggiungendo un punto in ogni lato della figura originale in direzione del punto medio di questo, per un totale di 12 vertici; otteniamo quindi la formula generale:

$$N = 24a + 12b + 6c + 8c',$$

dove c e c' possono essere 0 oppure 1.

Configurazioni con simmetria icosaedrale

Oltre alla configurazione corrispondente all'icosaedro ($N = 12$), l'unica configurazione ottimale avente simmetria I_h è quella con 32 vertici, mentre nessuna configurazione

con simmetria di tipo I è stata elaborata.

Abbiamo visto che il dodecaedro non è soluzione ottimale nel caso $N = 20$; tuttavia quest'ultimo compare elegantemente nel poliedro di 32 vertici avente questa simmetria, mostrando un particolare uso del concetto di duale. Infatti, abbiamo visto che il dodecaedro e l'icosaedro sono reciprocamente duali, per cui hanno stesso tipo di simmetria. Se ora dall'intero poliedro di 32 vertici togliamo i 12 formanti l'icosaedro, rimangono i venti vertici formanti il dodecaedro; ma poiché i vertici dell'uno giacciono al centro delle rispettive facce dell'altro, segue che anche l'intero poliedro ha simmetria I_h .

Inoltre, il poliedro di 32 vertici con simmetria I_h è importante perché il suo duale è molto simile al modello della molecola di carbonio-60. Tale poliedro è l'icosaedro tronco, un altro solido archimedeo avente 20 facce esagonali e 12 pentagonali tutte regolari, per un totale di 60 vertici. Da notare che questo poliedro non è una soluzione ottimale per $N = 60$.

4.4 Conggettura generale

Utilizzando la congettura generale formulata in sez 2.6, possiamo sostituire i coefficienti dell'espressione 2.6.1 in modo da ottenere una formula per \mathcal{E} che si adatti ai risultati numerici ottenuti con il minimo errore possibile. Denotiamo con $f(\alpha, N)$ la funzione che approssima la \mathcal{E} ; i risultati numerici determinano le seguenti stime:

$$f(-1, N) = \frac{N^2}{2} - 0.5523 \cdot N^{3/2} + 0.0689 \cdot N^{1/2},$$

$$f(0, N) = -\frac{1}{4} \ln\left(\frac{4}{e}\right)N^2 - \frac{1}{4}N \ln N - 0.026422 \cdot N + 0.13822,$$

$$f(1, N) = \frac{2}{3}N^2 - 0.40096 \cdot N^{1/2} + 0.188 \cdot N^{-1/2}.$$

Per vedere graficamente la precisione delle precedenti stime, osserviamo nelle figg. 4.11, 4.12, 4.13 i grafici che rappresentano l'andamento di $\mathcal{E}(\alpha, N) - f(\alpha, N)$; sono state

FIGURA 4.11: *Errore nell'approssimazione di $\mathcal{E}(-1, N)$*

FIGURA 4.12: *Errore nell'approssimazione di $\mathcal{E}(0, N)$*

FIGURA 4.13: *Errore nell'approssimazione di $\mathcal{E}(1, N)$*

calcolate le differenze per N fino a 200. Da notare che i valori più alti (valori assoluti) delle differenze $\mathcal{E}(\alpha, N) - f(\alpha, N)$ si hanno per le configurazioni icosaedrali ($N =$

12, 32, ...), mentre per $N > 25$ si può notare che la migliore approssimazione si ha per $\alpha = 1$.

Appendice A

Punti a spirale generalizzata

Molti algoritmi sono stati proposti per la costruzione diretta di configurazioni di punti opportunamente distribuiti sulla sfera; tra questi, il metodo di costruzione dei *punti a spirale generalizzata* sembra essere quello più soddisfacente per quanto riguarda l'aspetto energetico, soprattutto per N grande, dal momento che si basa su risultati numerici e su considerazioni sul reticolo pseudo-esagonale discusso in sez. 1.3.2. Infatti, abbiamo visto che i punti di stabilità, in molti casi, si distribuiscono su una rete sferico-esagonale; questo fatto suggerisce di costruire delle configurazioni che approssimano questa disposizione.

Per costruire questa configurazione utilizziamo le coordinate sferiche (θ, ϕ) , $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Posto, per $1 \leq k \leq N$,

$$h_k = -1 + \frac{2(k-1)}{N-1},$$

definiamo:

$$\theta_k = \arccos(h_k), \tag{A.1}$$

e, posto $\phi_1 = \phi_N = 0$, definiamo per $2 \leq k \leq N-1$

$$\phi_k = \left(\phi_{k-1} + \frac{K}{\sqrt{N}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-h_k^2}} \right) \pmod{2\pi}, \tag{A.2}$$

dove K è una costante scelta in modo che i punti abbiano approssimativamente la stessa distanza euclidea su S^2 .

La configurazione costruita $\hat{\omega}_N = \{(\theta_k, \phi_k)\}_{k=1}^N$ è chiamata *spirale generalizzata* su S^2 . Tale costruzione a spirale ha la seguente interpretazione geometrica. Si taglia la sfera con N piani orizzontali, distanti $2/(N-1)$ unità l'un l'altro e formanti N circonferenze, di cui la prima e l'ultima sono degeneri in un punto. Ogni piano latitudinale contiene esattamente un punto. Il k -esimo punto si costruisce a partire dal $(k-1)$ -esimo $(\theta_{k-1}, \phi_{k-1})$, facendolo scorrere lungo un meridiano fino al successivo piano latitudinale. Da qui si fa percorrere al punto una distanza fissa (indipendente da k) lungo la circonferenza latitudinale in senso antiorario determinando il punto (θ_k, ϕ_k) (fig. A.1). La distanza fissa è il valore da assegnare a $(\phi_k - \phi_{k-1})\sqrt{1 - h_k^2}$. I risultati di W. Habiet

FIGURA A.1: *Punti a spirale generalizzata*

e B.L. Van Der Waerden sul problema del Best Packing (sez. 1.3.2) forniscono il noto valore

$$\delta_N = \left(\frac{8\pi}{\sqrt{3}}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \approx 3.809 \cdot \frac{1}{\sqrt{N}},$$

per cui

$$(\phi_k - \phi_{k-1})\sqrt{1 - h^2} \approx \frac{3.809}{\sqrt{N}}.$$

Tuttavia risultati sperimentali hanno fornito un valore più basso per la costante K , cioè $K = 3.6$. Ciò può essere dovuto al fatto che le distanze si restringono quando si proietta su una sfera una rete esagonale da un piano tangente.

Esaminiamo graficamente (fig. A.2) la differenza $E(0, \hat{\omega}_N) - f(0, N)$ per $N \leq 12000$ dove la funzione f è la stessa definita in sez. 4.4.

FIGURA A.2: *Stima della differenza $E(0, \hat{\omega}_N) - f(0, N)$ per la spirale generalizzata.*

La spirale generalizzata fornisce dunque le seguenti stime sperimentali:

$$\begin{aligned} E(0, \hat{\omega}_N) - f(0, N) &\leq \frac{5}{2} \cdot \ln N \quad \text{per } N \leq 12000; \\ E(0, \hat{\omega}_N) - \mathcal{E}(0, N) &\leq 114 \cdot \ln N \quad \text{per } N \leq 12000. \end{aligned}$$

Sebbene tale costruzione non sembri risolvere il problema di Shub e Smale (sez. 1.1.1), la configurazione ha energia concorde con la congettura (2.29) per $-2 < \alpha < 2$ e N sufficientemente grande; inoltre è probabile che i risultati esposti si prestino ad ulteriori miglioramenti.

Esempi di altre costruzioni I seguenti esempi descrivono dei metodi abbastanza intuitivi di distribuzione di punti su una sfera che, pur essendo “buoni” algoritmi di distribuzione, hanno numerosi svantaggi, soprattutto per quanto riguarda il discorso energetico, nel senso che non offrono configurazioni stabili. Nonostante questo, le configurazioni ottenute dai seguenti algoritmi sono comunque importanti perché possono essere utilizzate in altre applicazioni.

Esempio A.0.1 (Sezionamento icosaedrale). Questa tecnica di distribuzione procede come segue. Per ogni faccia triangolare di un icosaedro, si uniscono i punti medi dei lati, formando quattro nuovi triangoli; quindi si proiettano radialmente sulla sfera i baricentri dei nuovi triangoli, ottenendo 80 punti. Si ripete quindi il processo k volte, ottenendo esattamente $N = 20 \cdot 4^k$ punti sulla sfera.

Un immediato svantaggio di questo metodo è il ristretto campo di valori di N , che deve necessariamente risultare dalla precedente formula con k intero positivo; ma un difetto notevole è dato dai mediocri risultati dell'algoritmo rispetto ai criteri energetici. Inoltre, i punti non sono asintoticamente uniformemente distribuiti; per vedere questo, è sufficiente osservare che, dopo il primo passo, gli 80 triangoli non hanno tutti la stessa area, poiché la proiezione dei punti sulla sfera determina il triangolo centrale con area maggiore degli altri tre. Poiché il processo si ripete anche nei triangoli ottenuti, è chiaro che l'uniformità non può sussistere.

Esempio A.0.2. Un altro metodo consiste nel costruire una configurazione di punti uniformemente distribuiti su una superficie rettangolare, per poi adattarla sulla sfera tramite proiezioni cilindriche.

Esempio A.0.3 (Rotazioni della sfera). Questo metodo utilizza delle *sequenze di rotazioni della sfera* che, tramite proiezioni stereografiche, corrispondono a trasformazioni di Möbius nel piano [14].

Esempio A.0.4 (“Space-Claim”). La costruzione degli *Space-Claim* è stata esposta da J. Molnár in [16], e può essere considerata una generalizzazione del problema di Tammes.

Infatti, dato un impacchettamento della sfera in N cerchi congruenti, che denotiamo ciascuno con \mathcal{C} , lo Space-Claim è un insieme associato ad ogni cerchio \mathcal{C} , e consiste in uno o più cerchi tangenti ad ogni \mathcal{C} , congruenti o non congruenti tra loro, anche se, in generale, lo Space-Claim può essere un arbitrario insieme di punti. Uno Space-Claim può intersecare un altro Space-Claim ma non un cerchio \mathcal{C} , pertanto ognuno di questi può essere visto come un “dominio di esclusione” del proprio \mathcal{C} .

Se ogni Space-Claim consiste in un cerchio associato ad ogni \mathcal{C} , i centri dei cerchi \mathcal{C} della

configurazione estremante sono i vertici dei cinque solidi platonici ($N = 4, 6, 8, 12, 20$) e dei solidi archimedei $O(4^6)$ per $N = 24$, $I_h(5^{12})$ per $N = 60$. Se ogni Space-Claim consiste in due cerchi congruenti per ognuno dei \mathcal{C} , con tutti i tre centri posizionati su una circonferenza massima, si ottengono il cubottaedro $O_h(4:4:4)$ e l'icosidodecaedro $I_h(5^2 : 10 : 5^2)$ rispettivamente per $N = 12$ e $N = 30$. Se invece ogni Space-Claim consiste in tre cerchi per ognuno dei \mathcal{C} , due di essi congruenti ed il terzo più piccolo, si ottiene per $N = 60$ l'icosaedro tronco $I_h(5^2 : 10^4 : 5^2)$.

Questo tipo di costruzione, anche se non fornisce soluzioni ottimali dal punto di vista energetico, è interessante perché presenta una disposizione di punti simile alla struttura di alcuni virus di tipo sferico e di piccole dimensioni; per questo motivo il più generale problema di Tammes è stato approfondito anche in discipline come la virologia.

Esempio A.0.5. Si possono inoltre costruire configurazioni a partire da configurazioni esistenti. Infatti, abbiamo visto che, in molte configurazioni riportate, p vertici si sistemano in una spirale avente come asse quello polare nord-sud. Ruotando la spirale successivamente di $2\pi/k$ rispetto allo stesso asse si ottiene un insieme di kp vertici; possono quindi essere aggiunti ai poli uno oppure due vertici, ottenendo delle configurazioni di kp , $kp + 1$ o $kp + 2$ punti aventi simmetria rotazionale di tipo C_k o D_k .

Bibliografia

- [1] E.L. Altschuler, T.J. Williams, E.R. Ratner, F. Dowla, F. Wooten: *Method of Constrained Global Optimization*, Phys. Rev. Lett., No. 72 (1994), pp. 2671-2674.
- [2] J. Beck: *Sums of distances between points on a sphere*, Mathematika, No. 31 (1984), pp. 33-41.
- [3] G. Björk: *Distributions of positive mass which maximize a certain generalized energy integral*, Ark. Mat., No. 3 (1956), pp. 255-269.
- [4] R. Blum, D.E. Roller: *Electricity, Magnetism and Light*, Holden Day, San Francisco, 1982.
- [5] B.E.J. Dahlberg: *On the distribution of Fekete points*, Duke Math. J., No. 45 (1978), pp.537-542.
- [6] J.R. Edmunson: *The distribution of point charges on the surface of a sphere*, Acta Cryst., No. A48 (1992), pp. 60-69.
- [7] J.R. Edmunson: *The arrangement of point charges with tetrahedral and octahedral symmetry on the surface of a sphere with minimum coulombic potential energy*, Acta Cryst., No. A49 (1993), pp. 648-654.
- [8] T. Erber, G.M. Hockney: *Equilibrium configurations of N equal charges on a sphere*, J. Phys. A:Math. Gen., No. 24 (1991), pp. L1369-L1377.
- [9] T. Erber, G.M. Hockney: *Comment on "Method of Constrained Global Optimization"*, Phys. Rev. Lett., No. 74 (1995), p. 1482.

- [10] W. Habicht, B.L. Van der Waerden: *Lagerung von Punkten auf der Kugel*, Math. Ann., No. 123 (1951), pp. 223-234.
- [11] A. B. J. Kuijlaars, E. B. Saff: *Asymptotics for minimal discrete energy on the sphere*, Trans. Am. Math. Soc.
- [12] A. B. J. Kuijlaars, E. B. Saff: *Distributing many points on a sphere*, The Mathematical Intelligencer, No. 19 (1997), pp. 5-11.
- [13] S. Lang: *Introduction to Arakelov theory*, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [14] A. Lubotzky, R. Phillips, P. Sarnak: *Hecke operators and distributing points on the sphere*, Comm. Pure Appl. Math., No. 39 (1986), pp. 149-186.
- [15] N. Metropolis, A. & M. Rosenbluth, A. & E. Teller: *J. Chem. Phys.*, No. 21 (1953), pp. 1087-.
- [16] J. Molnár: *On a generalisation of Tammes problem*, Publicationes Mathematicae, No. 22 (1975), pp. 109-114.
- [17] F. Nielsen: *Om summen af afstandene mellem N punkter paa en kugleflade*, Nordisk Mat. Tidskr., No. 13 (1965), pp. 45-50.
- [18] E. A. Rakhmanov, E. B. Saff, Y. M. Zhou: *Minimal discrete energy on the sphere*, Math. Res. Lett., No. 1 (1994), pp. 647-662.
- [19] E. A. Rakhmanov, E. B. Saff, Y. M. Zhou: *Electrons on the sphere*, Computational Methods and Function Theory, World Scientific (1995), pp 111-127.
- [20] W. Rudin: *Real and complex analysis*, McGraw-Hill, New York, 1966.
- [21] K. B. Stolarsky: *Sums of distances between points on a sphere*, Proc. Amer. Math. Soc., No. 41 (1973), pp. 575-582.
- [22] K. B. Stolarsky: *Spherical distributions of N points with maximal distance sum are well spaced*, Proc. Amer. Math. Soc., No. 48 (1975), pp. 203-206.

- [23] L.F. Tóth: *On the sum of distances determined by a pointset*, Acta Math. Sci. Hungar., No. 7 (1956), pp. 397-401.
- [24] G. Wagner: *On the means of distances on the surface of a sphere (lower bounds)*, Pacific J. Math., No. 144 (1990), pp. 389-398.
- [25] G. Wagner: *On the means of distances on the surface of a sphere (upper bounds)*, Pacific J. Math., No. 154 (1992), pp. 381-396.
- [26] J.B. Weinrach, K.L. Carter, D.W. Bennett, H.K. McDowell: *Point charges approximations to a spherical charge distribution*, J. Chem. Educ., No. 67 (1990), pp. 995-999.
- [27] Y.M. Zhou: *Arrangements of points on the sphere*, Thesis (1995), University of South Florida.