UNIVERSIDAD DE CANTABRIA

Facultad de Ciencias

LA ENERGÍA LOGARÍTMICA DE LA ESFERA DE DIMENSIÓN 3
(Logarithmic energy on the sphere of dimension 3)

Trabajo de Fin de Grado
para acceder al

GRADO EN MATEMÁTICAS

Autor: Pablo García Arce

Directora: Ujué Etayo Rodríguez

Junio - 2022

Resumen

La distribución de puntos es un objeto de estudio de gran interés y claras aplicaciones prácticas. En este trabajo se ha buscado distribuir puntos sobre la esfera S^3 con el objetivo de minimizar la energía logarítmica. Para ello, se ha empleado como herramienta fundamental a lo largo del trabajo la fibración de Hopf.

La fibración de Hopf permite asociar a cada punto de S^2 una circunferencia máxima de S^3. Esto ha permitido emplear distribuciones de puntos con energía logarítmica baja en S^2 para obtener así distribuciones de puntos en S^3.

Se ha comenzado por distribuir los puntos aleatoriamente de manera uniforme. Se hecho esto tanto en S^3 como en S^2, usando después la fibración de Hopf para obtener puntos en S^3. Se han empleado también nociones de simetría para mejorar dichas distribuciones.

Tras esto, se han distribuido puntos empleando el conjunto diamante, presentado en [1]. Sin embargo, no ha sido posible obtener resultados de manera analítica, y se ha recurrido al cálculo numérico. Esto ha permitido recuperar los dos primeros términos de la expansión asintótica y obtener un término lineal con coeficiente cercano a 0.

Finalmente, se ha empleado un proceso de puntos determinantal, el *spherical ensemble* presentado en [2]. Este proceso ha permitido obtener la siguiente expansión asintótica:

$$E = -\frac{N^2}{4} - \frac{1}{3}N\log N + \frac{N}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) - \frac{4}{3^{4/3}\pi^{2/3}}N^{2/3} + O(N^{1/3}).$$

La comparativa de este resultado con el proceso determinantal *harmonic ensemble* (presentado en [3]) ha permitido ver como los puntos dados por la combinación de la fibración de Hopf con el *spherical ensemble* presentan una energía logarítmica menor.

Palabras clave

Energía logarítmica, esfera, fibración de Hopf, conjunto diamante.

Abstract

The distribution of points is an object of study of great interest and clear practical applications. In this work, the aim has been to distribute points on the sphere S^3 with minimal logarithmic energy. In order to do so, the Hopf fibration has been used as the main tool.

The Hopf fibration allows us to associate a maximal circumference of S^3 to each point in S^2. This has made it possible to use point distributions with small logarithmic energy in S^2 to obtain point distributions in S^3.

The first step was to randomly distribute the points uniformly. This was made both in S^3 and S^2, making use of the Hopf fibration to obtain points in S^3. Some symmetry notions have been used to improve these distributions.

Following this, points have been distributed making use of the Diamond ensemble, presented in [1]. However, it has not been possible to obtain results analytically. This has led to numerical analysis and the first two terms of the asymptotical expansión have been recovered. Furthermore, a linear term with a coefficient close to 0 has been found.

Finally, a determinantal point process called *Spherical ensemble* and presented in [2] has been used. Combined with the Hopf fibration, this point process has led to the following asymptotical expansion:

$$E = -\frac{N^2}{4} - \frac{1}{3}N\log N + \frac{N}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) - \frac{4}{3^{4/3}\pi^{2/3}}N^{2/3} + O(N^{1/3}).$$

Comparing this result with the point process *Harmonic ensemble* (presented in [3]) allows us to notice how the points given by the combination of the Hopf fibration and the *Spherical ensemble* present lower logarithmic energy.

Keywords

Logarithmic energy, sphere, Hopf fibration, Diamond ensemble.

Índice general

Capítulo 1

Introducción

1.1. Marco del problema

La distribución de puntos en un subconjunto de $\mathbb{R}^n$ con un objetivo dado es un objeto de estudio de gran interés. Entre los posibles subconjuntos de $\mathbb{R}^n$ que se pueden tomar, cabe destacar la esfera, por su simetría y simple formulación:

$$S^d := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n+1} \quad : \quad ||\mathbf{x}|| = 1 \right\},$$

donde $||\mathbf{x}||$ denota la norma Euclídea.

En particular, la buena distribución de puntos sobre la esfera es el hilo conductor de varios trabajos, que se pueden encontrar recogidos en [4]. Sin embargo, dependiendo del objetivo de la distribución de puntos, queda por definir o concretar qué es una buena distribución. De esta manera, existen varios problemas centrados en la distribución de puntos sobre la esfera que tienen por objetivo distintas métricas. En primer lugar, existen trabajos que tratan de maximizar la mínima distancia entre dos puntos cualesquiera del conjunto:

$$\max_{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N \in S^d} \min_{1 \le i < j \le N} ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||.$$

Esto se conoce como *best packing problem* y su formulación se atribuye al ámbito de la biología. Existen también trabajos que tratan de minimizar la máxima distancia entre un punto cualquiera de la esfera y el punto más cercano del conjunto elegido:

$$\min_{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N \in S^d} \max_{\mathbf{y} \in S^d} \min_{1 \le i \le N} ||\mathbf{y} - \mathbf{x}_i||.$$

Esto se conoce como *best covering problem* y responde por ejemplo a la pregunta de cómo situar un servicio dado en varias localizaciones minimizando la distancia máxima (por ejemplo a la hora de situar gasolineras).

Tanto el *best packing problem* como el *best covering problem* se suelen dar en términos de la distancia Euclídea, aunque también puede emplearse la distancia geodésica, pues ambas son aproximadamente iguales para distancias pequeñas:

$$\frac{||\mathbf{x}||_E}{2} = \sin\left(\frac{||\mathbf{x}||_G}{2}\right) \Longrightarrow ||\mathbf{x}||_G = 2\arcsin\left(\frac{||\mathbf{x}||_E}{2}\right) \approx ||\mathbf{x}||_E \;\; \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : ||\mathbf{x}|| \to 0,$$

donde se ha denotado por $||\mathbf{x}||_E$ la distancia Euclídea y por $||\mathbf{x}||_G$ la geodésica.

Otra definición de buena distribución de puntos en la esfera surge de la integración numérica. Se entiende en este contexto por buena distribución aquella que proporciona un error bajo al emplear los puntos para aproximar integrales mediante métodos numéricos.

Entre los distintos enfoques posibles destaca la buena distribución de puntos en el sentido de minimizar una energía

$$E_K(\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N) := \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

De nuevo, la elección de K se corresponde con diferentes problemas de similar formulación. Tomando

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||}$$

se tiene el problema de Thomson. Este problema surge de la electrostática, y se corresponde con la distribución de N cargas puntuales en un conductor tal que este esté en equilibrio. La generalización del problema de Thomson se tiene con el s-potencial de Riesz

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||^s},$$

que permite modelar otras cantidades físicas. También son objeto común de estudio el problema de polarización o el problema de maximización de determinantes, entre otros, que no se describen por tener menor parecido a lo realizado en este trabajo. Un problema de especial interés relacionado con la minimización de energía en la esfera es el definido por M. Shub y S. Smale: Encontrar un algoritmo que, dado N, devuelva N puntos sobre la esfera de Riemann $\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N$ tal que, para una constante universal c, se tenga

$$\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} \log \frac{1}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||} - V_N \leq c \log N,$$

donde V_N es la energía logarítmica mínima de N puntos sobre la esfera de Riemann. Este problema recibe el nombre de problema 7 de Smale, y motiva así el interés en el estudio de la energía logarítmica, dada por

$$E_{\log}(\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} \log \frac{1}{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||},$$

y su valor mínimo se denota por

$$\varepsilon_{\log}(S^d, N) = \min_{\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_N \in S^d} E_{\log}(\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N).$$

La elección del uso de la energía logarítmica no es arbitraria en el problema 7 de Smale, pues en [5] se muestra su relación con el condicionamiento de polinomios y la resolución de ecuaciones polinomiales. En la búsqueda de un conjunto en la esfera que minimice la energía logarítmica (y resuelva así el problema 7 de Smale) se ha estudiado la expansión asintótica de dicha energía. Sobre esta expansión existe la siguiente conjetura para la esfera S^2, presentada en [6]:

$$\varepsilon_{\log}(S^2, N) = W_{\log}(S^2)N^2 - \frac{1}{2}N \log N + C_{\log}N + o(N),$$

según $N \to \infty$, donde $W_{\log}(S^2)$ es la energía mínima para el caso continuo (de valor conocido) y $C_{\log}$ una constante de valor conjeturado

$$C_{\log} = 2\log 2 + \frac{1}{2}\log\frac{2}{3} + 3\log\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(1/3)} = -0{,}055605... \tag{1.1}$$

Como se puede ver, el valor de V_N (que es igual a $\varepsilon_{\log}(S^2, N)$) del problema 7 de Smale no solo es desconocido, sino que no se conoce su expansión en el orden logarítmico, orden necesario para la resolución del problema.

Una extensión lógica del problema de minimizar la energía logarítmica en la esfera es hacerlo sobre dimensiones mayores. En el caso S^d, la expansión asintótica (presentada en [7]) de la energía es

$$\varepsilon_{\log}(S^d, N) = W_{\log}(S^d)N^2 - \frac{1}{d}N \log N + O(N),$$

según $N \to \infty$. No existen conjeturas por tanto sobre el término lineal. Para la esfera S^3, sustituyendo, se tiene

$$\varepsilon_{\log}(S^3, N) = W_{\log}(S^3)N^2 - \frac{1}{3}N \log N + O(N),$$

según $N \to \infty$, con

$$W_{\log}(S^3) = \left.\frac{d}{ds}\right|_{s=0} W_s(S^3) = \left.\frac{d}{ds}\right|_{s=0} \left(2^{2-s}\frac{\Gamma(2)\Gamma(\frac{3-s}{2})}{\sqrt{\pi}\Gamma(3-\frac{s}{2})}\right) = -1/4.$$

La expansión asintótica de la energía logarítmica en la esfera S^3 queda entonces

$$\varepsilon_{\log}(S^3, N) = \frac{-1}{4}N^2 - \frac{1}{3}N \log N + O(N). \tag{1.2}$$

Este trabajo se centrará en proponer distribuciones de puntos que permitan minimizar la energía logarítmica en S^3, obteniendo el término lineal en la ecuación (1.2).

1.2. Enfoques presentados

Una vez definido el objetivo principal de este trabajo, es momento de presentar las distintas herramientas que se emplearán para llevar a cabo dicho objetivo. El hilo conductor del trabajo va a ser la fibración de Hopf. La fibración de Hopf es una función continua de S^3 en S^2 que asigna a cada circunferencia máxima de S^3 un punto de S^2. De esta manera, se va a buscar buenas distribuciones de puntos en S^2 para, después, emplear la contraimagen de la fibración de Hopf y obtener puntos en S^3.

Dado un punto en S^2, la contraimagen de la fibración de Hopf proporcionará una circunferencia máxima (S^1) en S^3. Sin embargo, distribuir puntos en S^1 es un problema sencillo de solución conocida, pues basta tomar las raíces de la unidad. Esto permitirá generalizar una distribución de puntos en S^2 a una en S^3. Por lo tanto, en este trabajo se tratará de, empleando buenas distribuciones de puntos en S^2, conseguir buenas distribuciones de puntos en S^3.

En primer lugar, se va a comenzar por el conjunto diamante, un conjunto de puntos determinista (o más bien no completamente aleatorio) definido en [1]. Este conjunto construye una configuración en S^2 con el objetivo de minimizar la energía logarítmica. Para ello, se sitúan los puntos en raíces de la unidad en paralelos. Las alturas de los paralelos y el número de puntos en cada uno se eligen para optimizar la energía logarítmica.

En segundo lugar, se han empleado distribuciones aleatorias uniformes tanto en S^2 como en S^3 con la finalidad de tener un punto de partida para comparar las energías logarítmicas de las distintas distribuciones. Como es lógico, en el caso S^2 ha sido necesario aplicar después la contraimagen de la fibración de Hopf.

Finalmente, se han empleado los puntos generados a partir de el proceso de puntos determinantal *spherical ensemble* sobre la recta proyectiva compleja. La definición de la recta proyectiva compleja como esfera de Riemann ha permitido situar los puntos en S^2 y, de nuevo, la fibración de Hopf ha permitido obtener puntos en S^3. Estos resultados se han comparado con los dados por otro proceso de puntos determinantal, el *harmonic ensemble*.

1.3. Resultados principales

Con los enfoques expuestos anteriormente, se han obtenido dos resultados principales.

En primer lugar, el cálculo de la expansión asintótica de la energía logarítmica no se ha podido realizar de manera analítica para los puntos obtenidos a partir de la contraimagen de la fibración de Hopf de puntos en S^2 dados por el conjunto diamante. Sin embargo, se han obtenido resultados positivos de manera numérica, pudiendo obtener los dos primeros términos de la expansión asintótica mostrada en la ecuación (1.2) y un término lineal de coeficiente cercano a 0. Los resultados obtenidos numéricamente se han representado en las figuras 3.1 y 3.2.

En segundo lugar, el cálculo de la expansión de la energía logarítmica para los puntos dados por las fibras del *spherical ensemble* presenta un valor

$$E_{\log} = \frac{-1}{4}N^2 - \frac{1}{3}N\log N + C_1 N - C_2 N^{2/3} + O(N^{1/3}),$$

con C_1 y C_2 constantes cuyo valor se puede aproximar con precisión arbitraria a dos constantes $\hat{C}_1$ y $\hat{C}_2$ cuyo valor se muestra a continuación:

- $\hat{C}_1 = \frac{1}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right)$.
- $\hat{C}_2 = \frac{4}{3^{4/3}\pi^{2/3}}$.

La expansión dada por el proceso de puntos determinantal *spherical ensemble* permite obtener así una cota superior para el coeficiente lineal de la expansión asintótica de la energía mínima.

Este resultado se ha comparado con el *harmonic ensemble*, presentado en [3], que supone la colección de puntos con mejor energía logarítmica conocida. Se ha visto como el *spherical ensemble* proporciona un término lineal menor en la expansión asintótica. Se tiene por tanto que el conjunto dado por el proceso de puntos determinantal *spherical ensemble* presenta una energía menor que el *harmonic ensemble*. Los resultados obtenidos con los distintos conjuntos se muestran en la tabla 1.1.

Distribución	Expansión asintótica
Spherical ensemble	$\frac{-1}{4}N^2 - \frac{1}{3}N\log N + \frac{N}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) - C_2N^{2/3} + O(N^{1/3})$
Harmonic ensemble	$\frac{-1}{4}N^2 - \frac{1}{3}N\log N + \left(\frac{1}{3}\log\frac{1}{3} + \log 2 + \psi_0\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{1}{3}\right)N + o(N)$
Uniforme S^3	$\frac{-1}{4}N^2 + \frac{1}{4}N$
Uniforme S^3 y simetría	$\frac{-1}{4}N^2 + \left(\frac{1}{2} - \log 2\right)N$
Uniforme S^2 y fibras	$\frac{-1}{4}N^2 + (1 - 2\log 2)N$
Uniforme S^2, simetría y fibras	$\frac{-1}{4}N^2 + \left(\frac{7}{2}(1 - \log 2) - \log 7\right)N$

Tabla 1.1: Expansiones asintóticas de las distintas distribuciones de puntos estudiadas.

Capítulo 2

La esfera S^3

Se va a estudiar en este capítulo la esfera S^3. Para ello, se comenzará presentando los cuaterniones. Esto permitirá una mayor comprensión de la fibración de Hopf, herramienta fundamental de este trabajo. Finalmente, se presentará la recta proyectiva compleja y su relación con la esfera S^2.

2.1. Los cuaterniones

De forma similar a los números complejos, los cuaterniones son una extensión de los números reales. Mientras que los números complejos representan rotaciones en el plano, los cuaterniones surgen con la finalidad de codificar rotaciones en $\mathbb{R}^3$.

Los cuaterniones son el resultado de añadir tres unidades imaginarias i, j y k a $\mathbb{R}$. Estas verifican $i^2 = j^2 = k^2 = -1$. De esta manera, el conjunto de los cuaterniones se puede expresar como:

$$\mathbb{H} = \{a + bi + cj + dk \mid a, b, c, d \in \mathbb{R}\}.$$

Los cuaterniones forman un anillo (aunque no un cuerpo, como se verá a continuación). La suma es la heredada de $\mathbb{R}$. La multiplicación sigue las reglas:

$$ij = k, \quad jk = i, \quad ki = j,$$

$$ji = -k, \quad kj = -i, \quad ik = -j.$$

Consecuencia clara de estas reglas resulta la no conmutatividad de la multiplicación. Por ejemplo, se tiene $ij \neq ji$. Por lo tanto, los cuaterniones no forman un cuerpo.

De manera análoga a los complejos, se tiene que la norma de un cuaternión $r = a + bi + cj + dk$, definida como la norma como vector en $\mathbb{R}^4$, viene dada por:

$$||r|| = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2 + d^2} = \sqrt{r\bar{r}},$$

donde $\bar{r} = a - bi - cj - dk$ es el conjugado de r.

Todo cuaternión no nulo r tiene un inverso multiplicativo, que viene dado por

$$r^{-1} = \frac{\bar{r}}{||r||^2}.$$

Se define como cuaternión unitario aquel de norma unidad. Se tiene que si r es unitario, su inverso es igual a su conjugado.

Una característica clave de los cuaterniones, especialmente en su relación con la fibración de Hopf, es su capacidad para codificar rotaciones en $\mathbb{R}^3$. Dado un punto $\mathbf{p} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ y un cuaternión r, se define el cuaternión puro (sin parte real) $\tilde{p} = xi + yj + zk$. Entonces se define la rotación

$$R_r(\mathbf{p}) = r\tilde{p}r^{-1} = r\tilde{p}\bar{r},$$

donde la última igualdad se cumple si r es unitario. Es fácil ver que R_r conserva la norma y que su inversa viene dada por $R_r^{-1} = R_{(r^{-1})}$, aplicando la asociatividad de la multiplicación de cuaterniones. Además, los cuaterniones permiten calcular fácilmente la composición de rotaciones:

$$R_r \circ R_s = R_{rs}$$

Se puede ver también como dividir r por su norma no modifica R_r, por lo que nos centraremos en cuaterniones unitarios de ahora en adelante (luego hay 3 grados de libertad, lo cual encaja con una rotación en $\mathbb{R}^3$).

Por último, queda ver como codifica la información sobre la rotación R_r el cuaternión $r = a + bi + cj + dk$. Se tiene que R_r se corresponde con la rotación determinada por el eje $(b, c, d) \in \mathbb{R}^3$ y el ángulo

$$\theta = 2\cos^{-1}(a) = 2\sin^{-1}(\sqrt{b^2 + c^2 + d^2}).$$

Esto se tiene en varios pasos:

1. Ver que (b, c, d) es invariante por R_r.

2. Tomar un vector $\mathbf{w}$ perpendicular a (b, c, d).

3. Calcular el ángulo entre $\mathbf{w}$ y $R_r\mathbf{w}$.

2.2. La fibración de Hopf

La fibración de Hopf es una función continua $h : S^3 \to S^2$ dada por:

$$h(a, b, c, d) = (a^2 + b^2 - c^2 - d^2, 2(ad + bc), 2(bd - ac)). \tag{2.1}$$

Resulta fácil ver que los cuadrados de las componentes del lado derecho de la igualdad suman $(a^2 + b^2 + c^2 + d^2)^2 = 1$, por lo que la imagen está en efecto en S^2:

$$||h(a,b,c,d)||^2 = (a^2+b^2-c^2-d^2)^2 + 4(ad+bc)^2 + 4(bd-ac)^2$$
$$= (a^2+b^2)^2+(c^2+d^2)^2-2(a^2+b^2)(c^2+d^2)+4(a^2d^2+b^2c^2+2abcd)+4(b^2d^2+a^2c^2-2abcd)$$
$$= a^4+b^4+2a^2b^2+c^4+d^4+2c^2d^2-2a^2c^2-2a^2d^2-2b^2c^2-2b^2d^2+4a^2d^2+4b^2c^2+4b^2d^2+4a^2c^2$$
$$= a^4+b^4+c^4+d^4+2a^2b^2+2c^2d^2+2a^2c^2+2a^2d^2+2b^2c^2+2b^2d^2 = (a^2+b^2+c^2+d^2)^2 = 1^2 = 1.$$

En la notación introducida anteriormente con los cuaterniones, dado $\mathbf{P_0} = (1,0,0) \in S^2$ y $\mathbf{r} \in S^3 \subset \mathbb{R}^4$, la fibración de Hopf tiene la forma

$$h(\mathbf{r}) = R_r(\mathbf{P_0}) = r\tilde{P}_0\bar{r} = ri\bar{r}, \tag{2.2}$$

donde $\mathbf{r}$ se ha expresado como cuaternión r para la multiplicación. Es decir, la fibración de Hopf manda el punto $\mathbf{r} \in S^3$ al punto que representa el giro de $(1,0,0) \in S^2$ codificado por $\mathbf{r}$ según lo visto anteriormente. La equivalencia de las fórmulas (2.1) y (2.2) se muestra en el lema 2.2.2.

Dado un punto $\mathbf{P} \in S^2$ se tiene que la preimagen $h^{-1}(\mathbf{P})$ es un círculo máximo en S^3. Dicha preimagen recibe el nombre de fibra de $\mathbf{P}$ y se dice entonces que S^3 es un fibrado no trivial sobre S^2, con fibra una circunferencia (S^1).

La preimagen de un punto $\mathbf{P} = (p_1,p_2,p_3) \in S^2$ se corresponde con todas las posibles rotaciones de $(1,0,0) \in S^2$ en $\mathbf{P}$. Se tiene entonces que el eje de rotación debe estar necesariamente en la circunferencia mediatriz de $\{(1,0,0),\mathbf{P}\}$. Un caso sencillo para el cálculo del cuaternión es cuando el eje de rotación es perpendicular al plano dado por el origen y los dos puntos. Esto se muestra en el siguiente lema:

Lema 2.2.1. *El cuaternión que codifica la rotación del punto $(1,0,0) \in S^2$ en $\mathbf{P} = (p_1,p_2,p_3) \in S^2$ de eje perpendicular al plano formado por ambos puntos y el origen viene dado por*
$$\hat{r} = \sqrt{\frac{1+p_1}{2}}\left(1 - \frac{p_3 j}{1+p_1} + \frac{p_2 k}{1+p_1}\right).$$

Demostración. Buscamos el cuaternión $r = a+bi+cj+dk$ que codifica la rotación. De acuerdo con lo visto en la sección 2.1, se tiene que el a vendrá dado por el ángulo de rotación:

$$a = \cos\frac{\theta}{2} = \frac{(1,0,0)\cdot((1+p_1)/2, p_2/2, p_3/2)}{\frac{1}{2}\sqrt{1+p_1^2+p_2^2+p_3^2+2p_1}} = \frac{1+p_1}{\sqrt{2(1+p_1)}},$$

donde se ha aplicado que $P \in S^2$.

El eje será proporcional a un vector perpendicular a los dados por ambos puntos. Mediante el producto escalar se tiene

$$(b,c,d) = k(0,-p_3,p_2),$$

con k una constante dada.

Imponiendo que $a^2+b^2+c^2+d^2=1$ se tiene $k=\frac{1}{\sqrt{2(1+p_1)}}$ y por tanto el resultado buscado. $\square$

Una vez presentado el cuaternión que codifica este caso más simple, un cálculo rápido permite ver que la fibra viene dada por:

$$h^{-1}(\mathbf{P})=\{\hat{r}e^{it}\}_{0\leq t<2\pi}.$$

Expresando esto en $\mathbb{R}^4$ se tiene:

$$\begin{aligned} &h^{-1}((p_1,p_2,p_3)) \\ &\quad=\frac{1}{\sqrt{2(1+p_1)}}\left((1+p_1)\cos t,(1+p_1)\sin t,p_2\sin t-p_3\cos t,p_2\cos t+p_3\sin t\right), \end{aligned} \tag{2.3}$$

con $t\in[0,2\pi)$.

Como se puede ver en la fórmula de $\hat{r}$, el punto $\mathbf{P}=(-1,0,0)$ representa un caso especial (pues $(1,0,0)$, $\mathbf{P}$ y el origen están alineados) y entonces la fibra viene dada por:

$$h^{-1}((-1,0,0))=\{e^{it}\}_{0\leq t\leq 2\pi}.$$

Dado que la esfera S^3 se encuentra en $\mathbb{R}^4$, la visualización de las fibras no resulta trivial. Se emplea para ello la proyección estereográfica que establece una función continua $S^3\backslash(1,0,0,0)\to\mathbb{R}^3$:

$$(w,x,y,z)\mapsto\left(\frac{x}{1-w},\frac{y}{1-w},\frac{z}{1-w}\right).$$

La proyección estereográfica permite ver que toda pareja de fibras está entrelazada, teniendo además intersección vacía.

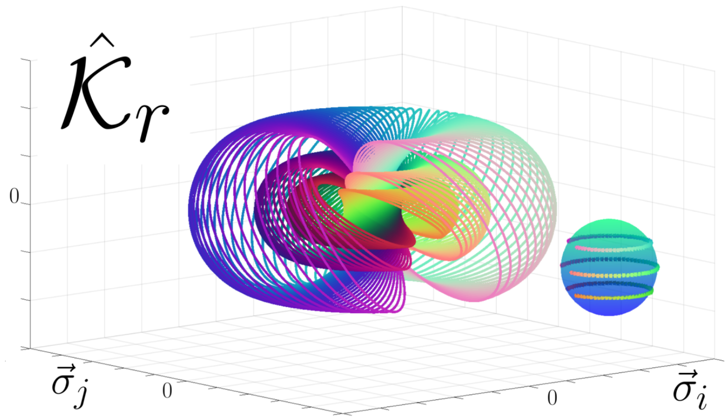

Figura 2.1: Representación gráfica de la fibración de Hopf mediante la proyección estereográfica. Figura obtenida de [8].

Otra forma de expresar la fibración de Hopf, que será util en el desarrollo de este trabajo, es la siguiente:

$$\begin{aligned} h : \mathbb{C}^2 &\longrightarrow \mathbb{C} \times \mathbb{R} \\ (z_0, z_1) &\longmapsto (2z_0\bar{z}_1, |z_0|^2 - |z_1|^2). \end{aligned} \tag{2.4}$$

La equivalencia de las fórmulas (2.1), (2.2) y (2.4) se verifica en el siguiente lema:

Lema 2.2.2. *Las tres formulaciones de la fibración de Hopf dadas por las ecuaciones* (2.1), (2.2) *y* (2.4) *son equivalentes.*

Demostración. Desarrollando (2.2) se tiene:

$$\begin{aligned} &h(r) = h(a + bi + cj + dk) = (a + bi + cj + dk)i(a - bi - cj - dk) \\ &= (-b + ai + dj - ck)(a - bi - cj - dk) = (a^2 + b^2 - c^2 - d^2)i + 2(bc + ad)j + 2(bd - ac)k, \end{aligned}$$

con lo que se recupera (2.1) identificando los cuaterniones con $\mathbb{R}^4$. De la misma manera, desarrollando (2.4) se tiene:

$$h(z_0, z_1) = h(a + bi, c + di) = (2(ac - bd) + 2(ad + bc)i, a^2 + b^2 - c^2 - d^2).$$

En este caso, es necesario realizar una permutación de los ejes para obtener el resultado deseado. Se tiene así la equivalencia de las tres formulaciones. □

2.3. La recta proyectiva compleja

En esta sección se presentan ciertos fundamentos sobre los espacios proyectivos, con el caso particular de la recta proyectiva compleja ($\mathbb{CP}^1$). A continuación se demuestra la existencia de un homeomorfismo entre S^2 y $\mathbb{CP}^1$. Lo presentado en esta sección está basado en [9], a donde se remite al lector para mayor detalle.

Definición 2.3.1. *Sea E un $\mathbb{K}-$ espacio vectorial, se llama espacio proyectivo asociado a E al conjunto de todas las rectas vectoriales de E y se denota por $\mathbb{P}(E)$.*

También puede definirse el espacio proyectivo asociado a E como el cociente de $E\backslash\{0\}$ con respecto a la relación de equivalencia $u \sim v$ si $u = \lambda v$ para cierto $\lambda \in \mathbb{K}\backslash\{0\}$.

Definición 2.3.2. *Sea $\mathbb{K}$ un cuerpo. Se define como espacio proyectivo estándar al espacio proyectivo asociado a $E = \mathbb{K}^{n+1}$ y se denota por $\mathbb{P}^n := \mathbb{P}(\mathbb{K}^{n+1})$. En caso de ser necesario especificar el cuerpo asociado se emplea la notación $\mathbb{KP}^n := \mathbb{P}(\mathbb{K}^{n+1})$.*

Como se ha comentado ya, en este trabajo presenta un interés especial la recta proyectiva compleja:

$$\mathbb{CP}^1 = \mathbb{P}(\mathbb{C}^2)$$

Una característica clave de la recta compleja, fundamental para este trabajo, se expone en el siguiente teorema:

Teorema 2.3.3. *Existe un homeomorfismo entre S^2 y $\mathbb{CP}^1$.*

Demostración.

Sea

$$\mathbb{U} := \left\{ \mathbf{w} = a + ib \in \mathbb{C}^2 \quad : \quad ||\mathbf{w}||^2 = |w_0|^2 + |w_1|^2 = ||a||^2 + ||b||^2 = 1 \right\}$$

Se puede identificar $\mathbb{U}$ con $S^3 \subset \mathbb{R}^4 = \mathbb{C}^2$. Se usará la fibración de Hopf para construir una biyección entre $\mathbb{CP}^1$ y $S^2 \subset \mathbb{R}^3 \equiv \mathbb{C} \times \mathbb{R}$.

1. Consideramos la fibración de Hopf $h : \mathbb{U} \longrightarrow S^2 \subset \mathbb{C} \times \mathbb{R}$ expresada según la ecuación (2.4).

2. Veamos que h es suprayectiva:

   Sea $\mathbf{z} = (z_1, t) \in S^2 \subset \mathbb{C} \times \mathbb{R}$. Veamos que existen $(w_0, w_1) \in S^3 \subset \mathbb{C}^2$ tal que se cumple

$$\begin{cases} z_1 = 2w_0\bar{w}_1, \\ t = |w_0|^2 - |w_1|^2. \end{cases}$$

   - Si se tiene $z_1 = 0$, entonces basta tomar $\begin{cases} w_0 = \sqrt{t}, w_1 = 0 \text{ si } t \geq 0. \\ w_0 = 0, w_1 = \sqrt{-t} \text{ si } t < 0. \end{cases}$

   - Si se tiene $t = 0$ (y $z_1 \neq 0$), entonces se tiene

$$\begin{cases} z_1 = 2w_0\bar{w}_1 \\ |w_0|^2 = |w_1|^2 \end{cases} \Rightarrow \exists \lambda \in S^1 \subset \mathbb{C} : w_0 = \lambda w_1 \Rightarrow z_1 = 2\lambda|w_1|^2.$$

     Basta entonces tomar $w_0 = \frac{z_1}{|z_1|}\sqrt{\frac{|z_1|}{2}}$ y $w_1 = \sqrt{\frac{|z_1|}{2}}$.

   - Supongamos entonces $t \neq 0$ y $z_1 \neq 0$. Escribimos $w_0 = \lambda w_1$ para cierto $\lambda \in \mathbb{C}$. Se tiene entonces

$$\begin{cases} z_1 = 2\lambda|w_1|^2 \\ t = |w_1|^2(|\lambda|^2 - 1) \end{cases} \Rightarrow z_1(|\lambda|^2 - 1) = 2\lambda t \Rightarrow |z_1|^2(|\lambda|^2 - 1) = 2\lambda\bar{z}_1 t. \quad (2.5)$$

Sea $\mu := \lambda\bar{z}_1$. Analizando la ultima igualdad en (2.5) se puede ver que $\mu \in \mathbb{R}$. Se tiene entonces sustituyendo en (2.5):

$$\mu^2 - |z_1|^2 = 2\mu t \Rightarrow \mu = t \pm \sqrt{|z_1|^2 + t^2} \Rightarrow \lambda = \frac{t \pm \sqrt{|z_1|^2 + t^2}}{\bar{z}_1}.$$

Para averiguar el signo correcto se sustituye en la primera igualdad de (2.5) y se tiene así

$$\lambda = \frac{t + \sqrt{|z_1|^2 + t^2}}{\bar{z}_1} \qquad \text{y} \qquad |w_1| = \frac{|z_1|}{\sqrt{2(t + \sqrt{|z_1|^2 + t^2})}}.$$

Basta tomar entonces $w_1 = |w_1|$ y $w_0 = \lambda|w_1|$.

Se tiene entonces que h es suprayectiva.

3. Veamos ahora cuáles son las fibras de h:

Veamos en primer lugar que dados $\mathbf{w} = (w_0, w_1), \mathbf{v} = (v_0, v_1) \in \mathbb{U} : h(\mathbf{w}) = h(\mathbf{v})$, se tiene $\mathbf{w} = \lambda\mathbf{v}$ con $|\lambda| = 1$.

Si $w_0 = 0$, comprobando la ecuación (2.4) se tiene que $v_0 = 0$ y $w_1 = \lambda v_1$ con $|\lambda| = 1$. Lo mismo sucede si $w_1 = 0$ (se tiene que $v_1 = 0$ y $w_0 = \lambda v_0$ con $|\lambda| = 1$).

Supongamos entonces $w_0 \neq 0$ y $w_1 \neq 0$. Existen $\alpha_0, \alpha_1 \in \mathbb{C} : v_i = \alpha_i w_i, i \in \{1, 2\}$. Se tiene que

$$\begin{cases} 2w_0\bar{w}_1 = 2v_0\bar{v}_1 = 2\alpha_0\bar{\alpha}_1 w_0\bar{w}_1 \Rightarrow \alpha_0\bar{\alpha}_1 = 1, \\ |w_0|^2 - |w_1|^2 = |v_0|^2 - |v_1|^2 = |\alpha_0 w_0|^2 - |\alpha_1 w_1|^2, \end{cases} \Rightarrow \alpha_0 = \alpha_1 \in S^1 \subset \mathbb{C}.$$

Veamos ahora el recíproco. Dados $\mathbf{w} = (w_0, w_1), \mathbf{v} = (v_0, v_1) \in \mathbb{U} : \mathbf{w} = \lambda\mathbf{v}$ con $|\lambda| = 1$, veamos que se tiene $h(\mathbf{w}) = h(\mathbf{v})$.

$$\begin{aligned} h(\mathbf{w}) = (2w_0\bar{w}_1, |w_0|^2 - |w_1|^2) = (2v_0\bar{v}_1|\lambda|^2, |\lambda|^2(|v_0|^2 - |v_1|^2)) \\ = (2v_0\bar{v}_1|, |v_0|^2 - |v_1|^2) = h(\mathbf{v}). \end{aligned}$$

4. Consideramos entonces la aplicación $g : \mathbb{CP}^1 \longrightarrow S^2$ dada por $g([\mathbf{w}]) = h\left(\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||}\right)$. Veamos que es biyectiva.

En primer lugar, veamos que g está bien definida. Dados $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{C}^2\backslash\{0\} : \mathbf{v} = \lambda\mathbf{w}$ con $\lambda \in \mathbb{C}\backslash\{0\}$ sus imágenes por g han de ser iguales. En efecto

$$\frac{\mathbf{v}}{||\mathbf{v}||} = \frac{\lambda}{||\lambda||}\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||} = \alpha\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||} \text{ con } \alpha \in S^1,$$

luego por el apartado 2. se tiene que

$$h\left(\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||}\right) = h\left(\frac{\mathbf{v}}{||\mathbf{v}||}\right) \Rightarrow g([\mathbf{v}]) = g([\mathbf{w}])$$

y h está bien definida. Veamos ahora que es inyectiva. Dados $[\mathbf{w}], [\mathbf{v}] \in \mathbb{CP}^1$ con $g([\mathbf{v}]) = g([\mathbf{w}])$, se tiene que

$$\begin{aligned} g([\mathbf{v}]) = g([\mathbf{w}]) \Rightarrow h\left(\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||}\right) = h\left(\frac{\mathbf{v}}{||\mathbf{v}||}\right) \\ \Rightarrow \exists \alpha \in S^1 \subset \mathbb{C} : \frac{\mathbf{v}}{||\mathbf{v}||} = \alpha\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||} \Rightarrow [\mathbf{v}] = [\mathbf{w}] \end{aligned}$$

y se tiene entonces que g es inyectiva. Además, al ser h suprayectiva, se tiene que g también lo es. Por lo tanto, se tiene que g es biyectiva, como se quería ver.

5. Por último, concluimos que g es continua por serlo h. Además, al ser $\mathbb{CP}^1$ compacto y S^2 Hausdorff, se tiene que g es un homeomorfismo, como se quería demostrar.

$\square$

Capítulo 3

Conjuntos deterministas

3.1. El conjunto diamante

El conjunto diamante se define en [1] con el objetivo de minimizar la energía logarítmica de un conjunto de N puntos repartidos sobre la esfera S^2. Además, este conjunto permite obtener analíticamente términos para la expansión asintótica de la energía, proporcionando así una prueba rigurosa más allá de los resultados numéricos.

El conjunto diamante se define a partir de raíces de la unidad en paralelos definidos por unas alturas dadas. Por lo tanto, queda definido a partir del número de paralelos, el número de raíces por paralelo y las alturas de estos:

$$\Omega(p, \{r_j\}, \{z_j\}) = \{\mathbf{x}_j^i\} = \left\{ \left(\sqrt{1 - z_j^2} \cos\left(\frac{2\pi i}{r_j} + \theta_j\right), \sqrt{1 - z_j^2} \sin\left(\frac{2\pi i}{r_j} + \theta_j\right), z_j \right) \right\}. \tag{3.1}$$

Sin embargo, los puntos de este conjunto son aleatorios, pues quedan definidos a partir de θ_j, variables aleatorias uniformemente distribuidas en el intervalo $[0, 2\pi)$. No puede decirse por tanto que el conjunto sea totalmente determinista (y claramente tampoco es aleatorio). La esperanza de la energía logarítmica de los puntos descritos anteriormente viene entonces dada por

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{\theta_1,\ldots,\theta_p}[\varepsilon_{\log}(\Omega(p, \{r_j\}, \{z_j\})] \\
&= -2\log(2) - \sum_{j=1}^{p} r_j \left[\log(4) + \frac{1}{2}\log(1 - z_j^2) + \log r_j\right] - \sum_{j,k=1}^{p} \frac{\log(1 - z_j z_k + |z_j - z_k|)}{2}.
\end{aligned}$$

La fórmula anterior permite obtener, dados los distintos $\{r_j\}$, el valor de z_l que minimiza la energía logarítmica, que viene dado por

$$z_l = \frac{\sum_{j=l+1}^{p} r_j - \sum_{j=1}^{l-1} r_j}{1 + \sum_{j=1}^{p}} r_j = 1 - \frac{1 + r_l + 2\sum_{j=1}^{l-1} r_j}{N - 1}, \tag{3.2}$$

donde $N = 2 + \sum_{j=1}^{p} r_j$ es el número total de puntos.

Queda entonces reducido el problema a la correcta elección del número de raíces de la unidad r_l en el paralelo l dado p, el número de paralelos.

Para la elección del número de raíces de la unidad en cada paralelo se ha empleado inicialmente el siguiente argumento. Suponiendo que dicho número pudiera ser no natural, una aproximación razonable sería que la distancia entre raíces de la unidad fuese igual a una constante por la distancia entre paralelos. De esta forma se tendría

$$r_j = \frac{K_0 \pi \sin\left(\frac{j\pi}{p+1}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2(p+1)}\right)}$$

y, tras calcular la expansión de la energía logarítmica (en S^2) con este valor de r_j, se tiene $K_0 = 3/\pi$.

Sin embargo, como se ha comentado ya, esta construcción no es posible, pues el número de puntos en cada paralelo ha de ser natural. Se ha empleado entonces una aproximación mediante una función continua definida a trozos lineales. La selección óptima se muestra en (3.3).

Dado $M = 7m$, con m entero positivo y sea $p = 2M - 1$, entonces

$$r(x) = \begin{cases} 6x & 0 \le x \le 2m, \\ 2m + 5x & 2m \le x \le 3m, \\ 5m + 4x & 3m \le x \le 4m, \\ 9m + 3x & 4m \le x \le 5m, \\ 14m + 2x & 5m \le x \le 6m, \\ 20m + x & 6m \le x \le 7m, \\ 34m - x & 7m \le x \le 8m, \\ 42m - 2x & 8m \le x \le 9m, \\ 51m - 3x & 9m \le x \le 10m, \\ 61m - 4x & 10m \le x \le 11m, \\ 72m - 5x & 11m \le x \le 12m, \\ 84m - 6x & 12m \le x \le 14m = p + 1. \end{cases} \tag{3.3}$$

proporciona la elección óptima de raíces de la unidad para cada paralelo. A partir de esta elección se tiene la expansión asintótica de la energía logarítmica

$$E_{\log} = W_{\log}(S^2)N^2 - \frac{1}{2}N \log N + c_\diamond N + o(N),$$

donde $c_\diamond = -0{,}049222...$. Comparando este valor con el presentado en la ecuación (1.1) se puede comprobar la cercanía entre el valor obtenido a partir del conjunto diamante y el valor conjeturado como valor mínimo para la expansión asintótica.

Debido a los buenos resultados presentados en S^2 por el conjunto diamante para la minimización de la energía logarítmica, este será un buen punto de partida para tratar de minimizar la energía logarítmica en S^3 a partir de la fibración de Hopf.

Sin embargo, el cálculo de la expansión asintótica de la energía logarítmica no ha sido posible de manera analítica, como se muestra en la sección 5.1. Como consecuencia, se ha decidido proceder empleando métodos numéricos para evaluar este enfoque. Esto se ha realizado mediante [10] de *Python*. También se ha empleado la librería [11] para acelerar los cálculos mediante la traducción de parte del código a *C*.

Se han combinado las ecuaciones (2.3) y (3.1), de manera similar a lo descrito en la sección 5.1. Esto ha permitido obtener la siguiente expresión para las fibras en S^3:

$$h^{-1}(\mathbf{x}_j^i) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$\left(\sqrt{1+z_j}\cos t, \sqrt{1+z_j}\sin t, \sqrt{1-z_j}\sin\left(t - \frac{2\pi i}{r_j} - \theta_j\right), \sqrt{1-z_j}\cos\left(t - \frac{2\pi i}{r_j} - \theta_j\right)\right).$$

Cabe recordar que los puntos se han obtenido a partir de estas fibras tomando

$$t = \frac{2\pi l}{k} + \psi_j^i,$$

con ψ aleatorio con distribución uniforme en $[0, 2\pi)$. La combinación de esta expresión con las ecuaciones (3.2) y (3.3) ha permitido calcular de manera numérica las distancias y, a partir de estas, la energía logarítmica.

Se ha visto como el conjunto diamante se ve determinado a partir del número de paralelos, luego la selección de este valor ya determina tanto el número de puntos como el resto de parámetros del conjunto. Sin embargo, al pasar a la esfera S^3 mediante la fibración de Hopf, un parámetro cuyo valor óptimo es desconocido es el número de puntos por fibra, denotado por k.

Al igual que en la sección 5.3, se ha experimentado con varias opciones para tomar k, resultando óptimo tomar $k = p^\alpha$, siendo p el número de paralelos (valor que determina el resto de parámetros del conjunto diamante). De nuevo, se han realizado múltiples simulaciones para distintos valores de α, siendo el valor óptimo $\alpha \approx 1{,}2$.

Los valores del término $N \log N$ de la expansión asintótica de la energía con $\alpha = 1{,}2$ se muestran en la figura 3.1:

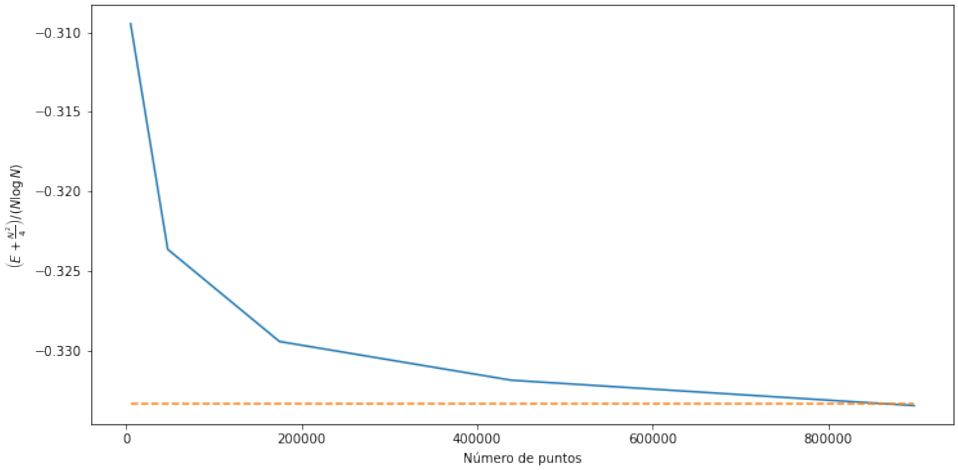

Figura 3.1: $\left(E + \frac{N^2}{4}\right)/N \log N$ frente al número de puntos, donde E denota la energía logarítmica.

Como se puede ver en la figura 3.1, los valores tienden $-1/3$, hacia $-1/3$, el valor mostrado en la ecuación (1.2).

Se ha representado también el término lineal en N de la expansión asintótica de la energía con $\alpha = 1{,}2$. Los resultados se muestran en la figura 3.2:

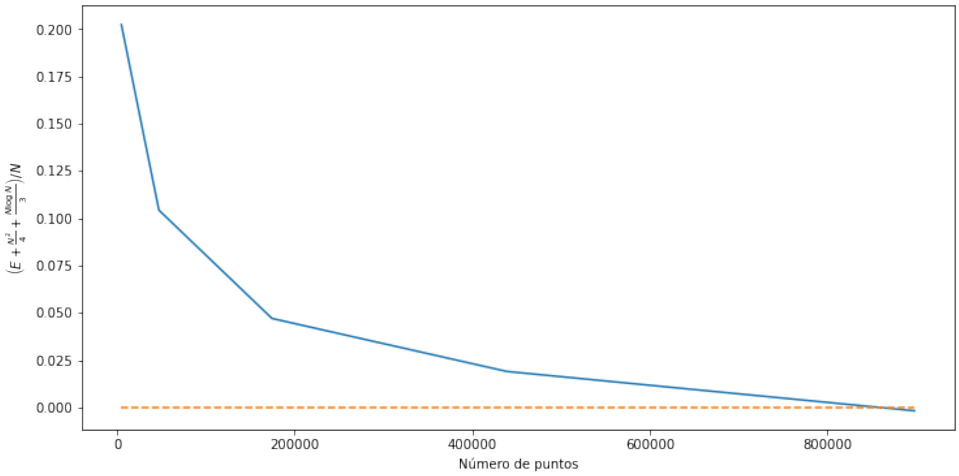

Figura 3.2: $\left(E + \frac{N^2}{4} + \frac{N \log N}{3}\right)/N$ frente al número de puntos, donde E denota la energía logarítmica.

En la figura 3.2 se observa como el término lineal en N tiende a valores cercanos a 0. Este resultado es muy positivo comparado con el resto de resultados de este trabajo.

Capítulo 4

Conjuntos aleatorios

4.1. Distribuciones uniformes

Como punto de partida, se ha comenzado empleando la distribución uniforme tanto sobre S^2 como S^3. Al igual que en otras partes de este trabajo, en el caso de los puntos distribuidos sobre S^2 se ha usado después la fibración de Hopf para situar los puntos en S^3.

En primer lugar, se ha comenzado por emplear la distribución uniforme en S^3 por ser el caso más simple. Los puntos en S^3 distribuidos aleatoriamente de manera uniforme vienen dados por

$$\begin{cases} x = \sqrt{1-v^2}\sqrt{1-u^2}\cos\phi \\ y = \sqrt{1-v^2}\sqrt{1-u^2}\operatorname{sen}\phi \\ z = \sqrt{1-v^2}u \\ t = v \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \phi \in [0, 2\pi] \text{ uniforme,} \\ u \in [-1, 1] \text{ uniforme,} \\ v \in [-1, 1] \text{ con función de densidad } f_{\mathbb{V}}(v), \end{cases}$$

con

$$f_{\mathbb{V}}(v) = \frac{2}{\pi}\sqrt{1-v^2}.$$

A partir de dicha distribución se ha obtenido la siguiente expansión asintótica para la energía logarítmica:

$$E = \frac{-1}{4}N^2 + \frac{1}{4}N.$$

Los cálculos se presentan en la sección 5.2.1.

Una vez calculada la expansión asintótica de la energía para este caso, se ha presentado el siguiente razonamiento. Dado un único punto en la esfera, se tiene que el punto antipodal dado por la simetría central es la mejor distribución posible de dos puntos. Además, de cara al cálculo de la energía con un tercer punto, cada uno de los puntos podrán tratarse como puntos aleatorios distribuidos de manera uniforme. Por lo tanto, esto sugiere que la generación de $N/2$ puntos y posterior simetría central debería proporcionar puntos mejor distribuidos.

La expansión asintótica de la energía obtenida a partir de este razonamiento es

$$E = \frac{-1}{4}N^2 + \left(\frac{1}{2} - \log 2\right) N.$$

De nuevo, los cálculos se presentan en la sección 5.2.1. Como se puede comprobar, este valor es mejor que el mostrado para la distribución uniforme.

En segundo lugar, se ha empleado la distribución uniforme en S^2 junto con la contraimagen de la fibración de Hopf para obtener puntos distribuidos sobre S^3. Los puntos distribuidos uniformemente en S^2 son de la forma

$$\begin{cases} x = \sqrt{1-u^2}\cos\phi \\ y = \sqrt{1-u^2}\operatorname{sen}\phi \\ z = u \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \phi \in [0, 2\pi] \text{ uniforme,} \\ u \in [-1, 1] \text{ uniforme.} \end{cases}$$

A partir de estos y mediante el empleo de la ecuación (2.3) se ha podido calcular (como se muestra en la sección 5.2.2) la siguiente expansión asintótica de la energía:

$$E = \frac{-1}{4}N^2 + (1 - 2\log 2)N.$$

Por último, un argumento de simetría similar al empleado con la distribución uniforme en S^3 puede usarse ahora. Sin embargo, surgen ahora dos posibilidades. Por un lado, se podría emplear la simetría central en S^3, con los puntos en las fibras de Hopf. Sin embargo, al ser las fibras círculos máximos, la simetría central situaría más puntos en la misma fibra. Esto resultaría contrario a la elección del número de puntos óptimo por fibra. Se ha elegido por tanto emplear la simetría en S^2, para tener puntos mejor distribuidos en S^2 y calcular las fibras después. Se ha obtenido entonces la siguiente expansión asintótica de la energía:

$$E = \frac{-1}{4}N^2 + \left(\frac{7}{2}(1 - \log 2) - \log 7\right) N.$$

De nuevo, el cálculo de esta expansión asintótica de la energía se muestra en 5.2.2.

Comparando los términos lineales se puede ver como los mejores resultados se obtienen con la distribución uniforme en S^2 y posterior simetría central y distribución en S^3 mediante la fibración de Hopf. Dicha comparación se muestra en la tabla 4.1:

Distribución	Término lineal
Uniforme S^3	$1/4$
Uniforme S^3 y simetría	$\frac{1}{2} - \log 2 = -0{,}193...$
Uniforme S^2 y fibras	$1 - 2\log 2 = -0{,}386...$
Uniforme S^2, simetría y fibras	$\frac{7}{2}(1 - \log 2) - \log 7 = -0{,}871...$

Tabla 4.1: Términos lineales de las distintas distribuciones uniformes.

4.2. Procesos de puntos determinantales

En esta sección se introducen los procesos de puntos determinantales, con el objetivo de emplear el proceso determinantal *spherical ensemble* junto con la fibración de Hopf para distribuir puntos en S^3. Se presentan por tanto los fundamentos teóricos básicos para poder llevar a cabo el cálculo de la expansión asintótica de la energía dada por dicho conjunto. Un desarrollo exhaustivo queda fuera de los objetivos de este trabajo, y puede encontrarse en [12].

Definición 4.2.1. *Un espacio polaco es un espacio topológico separable completamente metrizable.*

Definición 4.2.2. *Sea Λ un espacio topológico localmente compacto, polaco, dotado de una medida de Radón μ. Un proceso simple de N puntos en Λ es una variable aleatoria en Λ^N (o lo que es equivalente, N variables aleatorias elegidas simultáneamente en Λ).*

Un proceso simple de puntos es por tanto aquel con un N fijo y finito. Algunos procesos de puntos tienen asociadas las denominadas funciones de intensidad, definidas a continuación.

Definición 4.2.3. *Sean Λ y $\mathcal{X}$ un espacio y un proceso de puntos como en la definición anterior. Las funciones de intensidad son funciones*

$$\rho_k : \Lambda^k \to [0, \infty), k \geq 1$$

tales que para cualquier familia de subconjuntos $D_1, ..., D_k$ de Λ disjuntos dos a dos se tiene

$$\mathbb{E}_{x \sim \mathcal{X}} \left[\prod_{i=1}^{k} \sharp(x \cap D_i) \right] = \int_{\prod D_i} \rho_k(x_1, ..., x_k) d\mu(x_1, ..., x_k).$$

Proposición 4.2.4. *Sean Λ y $\mathcal{X}$ un espacio y un proceso de puntos con función de intensidad como en la definición anterior. Se verifica para cualquier función $f : \Lambda^k \to [0, \infty), k \geq 1$ medible:*

$$\mathbb{E}_{x \sim \mathcal{X}} \left[\sum_{i_1, ..., i_k \ distintos} f(x_{i_1}, ..., x_{i_k}) \right] = \int_{y_1, ..., y_k \in \Lambda} f(y_1, ..., y_k) \rho_k(y_1, ..., y_k) d\mu(y_1, ..., y_k).$$

Demostración. Se remite a [13], ecuación (1.13). □

Ciertos procesos de puntos cumplen además que su función de intensidad es de la forma:

$$\rho_k(x_1, ..., x_k) = \det \left(K(x_i, x_j)_{1 \leq i,j \leq k} \right). \tag{4.1}$$

Los procesos de puntos con función de intensidad verificando (4.1) se denominan procesos de puntos determinantales. Comparándolo con una distribución uniforme, se tiene que los puntos generados mediante estos procesos presentan repulsión local.

Una vez presentados los procesos de puntos determinantales, es momento de introducir aquel que se empleará en este trabajo, el *spherical ensemble*.

El proceso determinantal *spherical ensemble* se introduce en [2]. Se muestra como tomando dos matrices A y B con entradas gaussianas, los puntos vienen dados por los autovalores de $A^{-1}B$. Denotemos el *spherical ensemble* por $\mathcal{X}_*$. Se tiene entonces la siguiente proposición.

Proposición 4.2.5. *Sean $L \geq 0$ y sea r de la forma $r = L + 1$. Se tiene entonces que la proyección de los puntos obtenidos mediante $\mathcal{X}_*$ con*

$$\begin{aligned} \psi : \mathbb{C} &\longrightarrow \mathbb{P}(\mathbb{C}^2) \\ \mathbf{z} &\longmapsto (\mathbf{z}, 1) \end{aligned}$$

es un proceso determinantal en $\mathbb{P}(\mathbb{C}^2)$ de kernel

$$\left|K_*^{(r)}(p,q)\right| = \frac{r}{\pi}\left|< \frac{p}{||p||}, \frac{q}{||q||} >\right|^L.$$

Demostración. La demostración se remite a [14], lema 3.2. □

A partir de la proposición 4.2.5 se ha podido calcular la expansión asintótica de la energía logarítmica. Los cálculos se muestran en la sección 5.3. Se ha obtenido así la siguiente expansión:

$$E = -\frac{N^2}{4} - N\log k + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}k^{3/2} - \frac{k^2}{4} + k^2 O\left(\sqrt{\frac{k}{N}}\right),$$

donde k hace referencia al número de puntos por fibra. La correcta selección de k en función del número de puntos N ha permitido obtener la expansión asintótica

$$E = -\frac{N^2}{4} - \frac{1}{3}N\log N + \frac{N}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) - \frac{4}{3^{4/3}\pi^{2/3}}N^{2/3} + O(N^{1/3}).$$

Sin embargo, esta expansión representa una construcción imposible, pues se da para valores de k no necesariamente enteros positivos. En cualquier caso, como se explica en la sección 5.3, estos términos se pueden aproximar con precisión arbitraria (aunque esto suponga restricciones sobre el número de puntos).

Comparación con el *harmonic ensemble*

Este resultado se puede comparar con el obtenido en [3], donde se presenta el *harmonic ensemble*, un proceso de puntos determinantal cuya expansión asintótica de la energía logarítmica es

$$E_{\log} = \frac{-1}{4}N^2 - \frac{1}{3}N\log N + CN + o(N),$$

con

$$C = \frac{1}{3}\log\frac{1}{3} + \log 2 + \psi_0\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{1}{3},$$

donde $\psi_0 = (\log\Gamma)'$ es la función digamma.

Se tiene que las expansiones asintóticas dadas por ambos conjuntos coinciden hasta el término lineal, pues ambas reproducen correctamente el término en N^2 y el término en $N\log N$ vistos en la ecuación (1.2). Comparando los términos lineales en N de ambas expansiones se tiene

$$\hat{C}_1 = \frac{1}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) = 0{,}394... \quad \leq \quad C = \frac{1}{3}\log\frac{1}{3} + \log 2 + \psi_0\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{1}{3} = 0{,}696...$$

Esto permite concluir que el *spherical ensemble* junto con la fibración de Hopf proporcionan una distribución de puntos en S^3 con menor energía logarítmica que el *harmonic ensemble*.

Capítulo 5

Cálculos y demostraciones de los resultados principales

5.1. Fibras del conjunto diamante

Se tiene que la contraimagen de la fibración de Hopf, de acuerdo con la ecuación (2.3), viene dada por

$$h^{-1}((x,y,z)) = \frac{1}{\sqrt{2(1+x)}} \left((1+x)\cos t, (1+x)\sin t, y\sin t - z\cos t, y\cos t + z\sin t\right),$$

donde $t \in [0, 2\pi)$ representa el ángulo en la fibra. Como se puede ver, la contraimagen no está definida si se tiene $x = -1$. Para evitar esto, se ha elegido rotar el conjunto diamante y evitar poner puntos en los polos. Con esta rotación sobre la ecuación (3.1) los puntos del conjunto diamante son de la forma

$$\mathbf{x}_j^i = \left(z_j, \sqrt{1-z_j^2}\cos\left(\frac{2\pi i}{r_j}+\theta_j\right), \sqrt{1-z_j^2}\sin\left(\frac{2\pi i}{r_j}+\theta_j\right)\right),$$

cuya fibra por la fibración de Hopf es

$$\begin{aligned} h^{-1}(\mathbf{x}_j^i) = \frac{1}{\sqrt{2(1+z_j)}} \Bigg(& (1+z_j)\cos t, (1+z_j)\sin t, \\ & \sqrt{1-z_j^2}\left(\sin(t)\cos\left(\frac{2\pi i}{r_j}+\theta_j\right) - \cos(t)\sin\left(\frac{2\pi i}{r_j}+\theta_j\right)\right), \\ & \sqrt{1-z_j^2}\left(\cos(t)\cos\left(\frac{2\pi i}{r_j}+\theta_j\right) + \sin(t)\sin\left(\frac{2\pi i}{r_j}+\theta_j\right)\right)\Bigg). \end{aligned}$$

Simplificando se tiene

$$h^{-1}(\mathbf{x}_j^i) = \frac{1}{\sqrt{2(1+z_j)}}$$
$$\left((1+z_j)\cos t, (1+z_j)\sin t, \sqrt{1-z_j^2}\sin\left(t - \frac{2\pi i}{r_j} - \theta_j\right), \sqrt{1-z_j^2}\cos\left(t - \frac{2\pi i}{r_j} - \theta_j\right)\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{1+z_j}\cos t, \sqrt{1+z_j}\sin t, \sqrt{1-z_j}\sin\left(t - \frac{2\pi i}{r_j} - \theta_j\right), \sqrt{1-z_j}\cos\left(t - \frac{2\pi i}{r_j} - \theta_j\right)\right).$$

Una vez se tienen las fibras resulta lógico calcular las distancias entre dos puntos dados en S^3, obtenidos a partir del conjunto diamante en S^2 y la fibración de Hopf. Es importante recordar aquí que en las fibras se tomarán raíces de la unidad desplazadas por un ángulo aleatorio con distribución uniforme.

Por simplicidad en los cálculos, se denotará el ángulo azimutal en S^2 como ϕ. Es decir, se tiene

$$t = \frac{2\pi l}{k} + \psi_j^i \quad , \quad \phi = \frac{2\pi i}{r_j} + \theta_j,$$

con $1 \leq l \leq k$, siendo k un entero con positivo con valor por fijar.

Al calcular la distancia entre dos puntos entonces se tiene

$$\begin{aligned}
||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2||^2 = \frac{1}{2}\Big[&\left[\sqrt{1+z_1}\cos t_1 - \sqrt{1+z_2}\cos t_2\right]^2 + \left[\sqrt{1+z_1}\sin t_1 - \sqrt{1+z_2}\sin t_2\right]^2 \\
&+ \left[\sqrt{1-z_1}\sin(t_1-\phi_1) - \sqrt{1-z_2}\sin(t_2-\phi_2)\right]^2 \\
&+ \left[\sqrt{1-z_1}\cos(t_1-\phi_1) - \sqrt{1-z_2}\cos(t_2-\phi_2)\right]^2\Big] \\
&= \frac{1}{2}\left[2 + z_1 + z_2 - 2\sqrt{1+z_1}\sqrt{1+z_2}\cos(t_1-t_2)\right. \\
&\left. +2 - z_1 - z_2 - 2\sqrt{1-z_1}\sqrt{1-z_2}\cos((t_1-t_2)) - (\phi_1-\phi_2))\right] \\
&= 2 - \sqrt{1+z_1}\sqrt{1+z_2}\cos(t_1-t_2) - \sqrt{1-z_1}\sqrt{1-z_2}\cos((t_1-t_2)) - (\phi_1-\phi_2)).
\end{aligned}$$

Por lo que se tiene entonces

$$||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|| = \left[2 - \sqrt{1+z_1}\sqrt{1+z_2}\cos(t_1-t_2) - \sqrt{1-z_1}\sqrt{1-z_2}\cos((t_1-t_2)) - (\phi_1-\phi_2))\right]^{1/2}$$

Retomando la notación presentada con el conjunto diamante

$$||\mathbf{x}_{j_1}^{i_1 l_1} - \mathbf{x}_{j_2}^{i_2 l_2}|| = \Bigg[2 - \sqrt{1+z_{j_1}}\sqrt{1+z_{j_2}} \cos\left(\frac{2\pi}{k}(l_1 - l_2) + \psi_{j_1}^{i_1} - \psi_{j_2}^{i_2} \right)$$
$$- \sqrt{1-z_{j_1}}\sqrt{1-z_{j_2}} \cos\left(\frac{2\pi}{k}(l_1 - l_2) - \frac{2\pi i_1}{r_{j_1}} + \frac{2\pi i_2}{r_{j_2}} + \psi_{j_1}^{i_1} - \psi_{j_2}^{i_2} - \theta_{j_1} + \theta_{j_2} \right) \Bigg]^{1/2}$$

Se tiene entonces que el cálculo de la energía se corresponderá con la suma de dos cantidades:

- La energía logarítmica de los puntos que se encuentren en la misma fibra, que se denotará como cantidad A.
- La esperanza de la energía logarítmica de los puntos pertenecientes a distintas fibras, que se denotará como cantidad B.

5.1.1. Cálculo de la cantidad A

Lema 5.1.1. *El producto de las distancias de las $k-1$ raíces k-ésimas de la unidad distintas de 1 a 1 es k:*

$$\prod_{l=1}^{k-1} (1 - e^{\underline{i}\frac{2\pi l}{k}}) = k,$$

donde $\underline{i}$ denota la unidad imaginaria.

Demostración. Las k-ésimas raíces de la unidad son las raíces del polinomio $x^k - 1$. Es decir, se tiene que

$$x^k - 1 = \prod_{l=0}^{k-1} (x - e^{\underline{i}\frac{2\pi l}{k}}).$$

Al dividir ambos lados de la igualdad entre $x - 1$ se tiene

$$\frac{x^k - 1}{x - 1} = x^{k-1} + x^{k-2} + ... + x + 1 = \prod_{l=1}^{k-1} (x - e^{\underline{i}\frac{2\pi l}{k}}),$$

y basta sustituir $x = 1$ para obtener el resultado deseado:

$$n = \prod_{l=1}^{k-1} (1 - e^{\underline{i}\frac{2\pi l}{k}}).$$

□

Proposición 5.1.2. *La energía logarítmica asociada a una fibra con k raíces de la unidad es $-k \log k$.*

Demostración. Se tiene que la energía de una fibra dada será

$$\sum_{\substack{l_1,l_2=0\\l_1\neq l_2}}^{k} -\log ||\mathbf{x}^{l_1}-\mathbf{x}^{l_2}|| = k\sum_{l=1}^{k-1} -\log ||1-e^{i\frac{2\pi l}{k}}|| = -k\log\left(\prod_{l=1}^{k-1}(1-e^{i\frac{2\pi l}{k}})\right).$$

Aplicando el lema 5.1.1 se tiene entonces

$$\sum_{\substack{l_1,l_2=0\\l_1\neq l_2}}^{k} -\log ||\mathbf{x}^{l_1}-\mathbf{x}^{l_2}|| = -k\log k,$$

como se quería ver. □

Proposición 5.1.3. *La energía logarítmica asociada al total de fibras de Hopf dadas por el conjunto diamante (y por tanto la cantidad A) es igual a* $-N\log k$.

Demostración. Al ser todas las fibras circunferencias máximas, su energía será igual. Basta por tanto tener en cuenta el número total de fibras:

$$A = -(k\log k)\sum_{j=1}^{p} r_j = -N\log k.$$

□

5.1.2. Cálculo de la cantidad *B*

Antes de pasar al cálculo de la cantidad B, resulta necesario introducir el siguiente lema:

Lema 5.1.4.

$$\int_0^\pi \log(a+b\cos x)dx = \pi\log\frac{a+\sqrt{a^2-b^2}}{2} \quad , \quad si\ \ a\geq |b|>0.$$

Demostración. Fórmula obtenida de [15]. □

Una vez introducido el lema 5.1.4, es momento de pasar al cálculo de la cantidad B. Con la intención de simplificar la notación, se denotará la distancia entre dos puntos cualesquiera pertenecientes a distintas fibras de la siguiente forma:

$$||\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|| = \sqrt{2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi_i-\psi_j)-\sqrt{1-z_i}\sqrt{1-z_j}\cos((\psi_i-\psi_j)-(\theta_i-\theta_j))},$$

donde ψ indica el ángulo en la fibra y θ el ángulo en el paralelo de la esfera S^2.

Dados dos puntos pertenecientes a distintas fibras, el cálculo de la esperanza de su energía logarítmica permitirá calcular la cantidad B.

$$\mathbb{E}_{\theta_i,\theta_j,\psi_i,\psi_j}\left[-\log(||\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j||)\right]=\frac{1}{(2\pi)^4}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}$$
$$-\log\left(\sqrt{2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi_i-\psi_j)-\sqrt{1-z_i}\sqrt{1-z_j}\cos((\psi_i-\psi_j)-(\theta_i-\theta_j))}\right)d\theta_i d\theta_j d\psi_i d\psi_j$$
$$=\frac{-(2\pi)^2}{2^5\pi^4}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\log\left(2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi)-\sqrt{1-z_i}\sqrt{1-z_j}\cos(\psi-\theta)\right)d\theta d\psi.$$

Aplicando el lema 5.1.4 se tiene

$$\mathbb{E}_{\theta_i,\theta_j,\psi_i,\psi_j}\left[-\log(||\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j||)\right]=\frac{-\pi}{4\pi^2}\int_0^{2\pi}$$
$$\log\left(\frac{2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi)+\sqrt{(2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi))^2-(\sqrt{1-z_i}\sqrt{1-z_j})^2}}{2}\right)d\psi.$$

Simplificando la expresión se tiene

$$\mathbb{E}_{\theta_i,\theta_j,\psi_i,\psi_j}\left[-\log(||\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j||)\right]$$
$$\frac{-1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\log\left(\frac{2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi)+\sqrt{(2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi))^2-(1-z_i)(1-z_j)}}{2}\right)d\psi$$
$$=\frac{-1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\log\left(2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi)+\sqrt{(2-\sqrt{1+z_i}\sqrt{1+z_j}\cos(\psi))^2-(1-z_i)(1-z_j)}\right)d\psi+$$
$$+\frac{\log 2}{2}.$$

Sin embargo, no ha sido posible resolver la última integral de manera analítica. Esto se ha intentado por medios manuales, computacionales y recurriendo a tablas de integrales (como por ejemplo [15]), siempre con resultados negativos.

Como consecuencia, se ha abandonado esta aproximación para el cálculo analítico de la expansión asintótica. Se pasado entonces a un enfoque numérico.

5.2. Puntos obtenidos mediante distribuciones uniformes

5.2.1. Distribución uniforme en S^3

Los puntos en S^3 vienen dados por

$$\begin{cases} x = \sqrt{1-v^2}\sqrt{1-u^2}\cos\phi \\ y = \sqrt{1-v^2}\sqrt{1-u^2}\operatorname{sen}\phi \\ z = \sqrt{1-v^2}u \\ t = v \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \phi \in [0, 2\pi] \text{ uniforme}, \\ u \in [-1, 1] \text{ uniforme}, \\ v \in [-1, 1] \text{ con función de densidad } f_{\mathbb{V}}(v), \end{cases}$$

con

$$f_{\mathbb{V}}(v) = \frac{2}{\pi}\sqrt{1-v^2}.$$

Al calcular la distancia entre dos puntos se tiene

$$||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|| = \left[2 - 2\sqrt{1-v_i^2}\sqrt{1-v_j^2}\left(\sqrt{1-u_i^2}\sqrt{1-u_j^2}\cos(\phi_i - \phi_j) + u_i u_j\right) - 2v_i v_j\right]^{1/2}.$$

Se va a calcular a continuación la esperanza de la energía logarítmica de una pareja de puntos. Sin embargo, al ser la distribución sobre S^3 uniforme y ser esta homogénea, se puede simplificar la distancia tomando $\mathbf{x}_i = (0, 0, 0, 1)$. Se tiene entonces:

$$||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|| = \sqrt{2 - 2v_j}.$$

Calculando la esperanza para la energía logarítmica:

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}_{\phi_j, u_j, v_j}[-\log ||(0, 0, 0, 1) - \mathbf{x}_j||] \\ &\qquad = -\int_{-1}^{1} \frac{2}{\pi}\sqrt{1-v^2}\log(\sqrt{2-2v_j})dv_j \\ &\qquad\qquad = \frac{-1}{\pi}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-v^2}\log(2-2v)dv = \frac{-1}{\pi}\frac{\pi}{4} = \frac{-1}{4}, \end{aligned}$$

donde se ha calculado la última integral mediante el *sofware* de integración [16] de *Python*.

Se tiene entonces que la esperanza de la energía logarítmica para un total de N puntos será

$$E = \frac{-1}{4}N(N-1) = \frac{-1}{4}N^2 + \frac{1}{4}N.$$

Cálculo con los puntos antipodales

El objetivo ahora es hacer uso de la simetría central para distribuir la mitad de los puntos. Se obtendrán por lo tanto $N/2$ puntos mediante una distribución uniforme en S^3. Para cada uno de estos puntos, situar un punto mediante simetría central supondrá un distanciamiento óptimo del par de puntos. Además, para el resto de los puntos el simétrico seguirá obedeciendo una distribución uniforme en S^3. De esta manera, la expansión asintótica de la energía logarítmica vendrá dada por dos términos:

- La energía dada por los puntos antipodales.
- La energía dada por los puntos no antipodales.

Fijando un punto $\mathbf{x}_i$, se ha visto antes que

$$\mathbb{E}[-\log ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||] = \frac{-1}{4}$$

para cualquier $\mathbf{x_j}$ dado por la distribución uniforme en S^3. Además, para el punto antipodal se tendrá

$$\mathbb{E}[-\log ||\mathbf{x}_i - (-\mathbf{x}_i)||] = -\log ||2\mathbf{x}_i|| = -\log 2.$$

Teniendo en cuenta ambos términos, la expansión asintótica de la energía logarítmica será entonces

$$E = \frac{-1}{4}N(N-2) - N\log 2 = \frac{-1}{4}N^2 + \left(\frac{1}{2} - \log 2\right)N.$$

5.2.2. Distribución uniforme en S^2 y fibras

Se tratará en esta sección de obtener puntos mediante la distribución uniforme en la esfera S^2 y luego, a partir de estos, fibras en la esfera S^3. Esto permitirá situar en dichas fibras puntos mediante las raíces de la unidad.

Los puntos distribuidos uniformemente en S^2 serán de la forma

$$\begin{cases} x = \sqrt{1-u^2}\cos\phi \\ y = \sqrt{1-u^2}\operatorname{sen}\phi \\ z = u \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \phi \in [0, 2\pi] \text{ uniforme,} \\ u \in [-1, 1] \text{ uniforme.} \end{cases}$$

A partir de estos y mediante la fibración de Hopf se tendrán los puntos

$$\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{1+u}\cos t, \sqrt{1+u}\sin t, \sqrt{1-u}\sin(t-\phi), \sqrt{1-u}\cos(t-\phi)\right),$$

y se puede calcular la distancia

$$||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|| = \left[2 - \sqrt{1+u_i}\sqrt{1+u_j}\cos(t_i - t_j) - \sqrt{1-u_i}\sqrt{1-u_j}\cos((t_i - t_j) - (\phi_i - \phi_j))\right]^{1/2}.$$

De manera similar a S^3, se puede tomar $\mathbf{x}_i = (1, 0, 0, 0)$ para simplificar los cálculos. Se tiene así que la distancia es

$$||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|| = \sqrt{2 - \sqrt{2(1+u_j)}\cos t_j}.$$

La esperanza de la energía logarítmica de una pareja de puntos pertenecientes a distintas fibras será entonces

$$\mathbb{E}_{\phi_j,u_j,t_j}[-\log||(1,0,0,0)-\mathbf{x}_j||] = \frac{-1}{4\pi}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}\log\left(\sqrt{2-\sqrt{2(1+u_j)}\cos t_j}\right)dt_j du_j$$
$$= \frac{-1}{4\pi}\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}\log(2-\sqrt{2(1+u)}\cos t)dtdu = \frac{-2}{8\pi}\int_{-1}^{1}\pi\log\left(\frac{2+\sqrt{4-2(1+u)}}{2}\right)du$$
$$= \frac{-1}{4}\int_{-1}^{1}\log\left(1+\frac{\sqrt{2-2u}}{2}\right)du = \frac{-1}{4}.$$

donde se ha empleado el lema (5.1.4) en la tercera igualdad.

Para el cálculo de la esperanza de la energía logarítmica total se ha de tener en cuenta también los puntos pertenecientes a la misma fibra. En este caso se tendrá que la energía se corresponderá con las raíces de la unidad, por lo que de acuerdo con la proposición 5.1.2 se tendrá

$$E_{=fibra} = -\log k$$

para cada punto de la fibra. Entonces la energía será

$$E = N[E_{=fibra} + E_{\neq fibra}] = N\left[\frac{-1}{4}(N-k) - \log k\right] = \frac{-1}{4}N^2 + \frac{1}{4}Nk - N\log k,$$

donde se ha tenido en cuenta que para cada punto hay $N-k$ puntos en otras fibras.

Una vez obtenida la expansión asintótica de la energía logarítmica, es momento de plantear si existe un valor óptimo de k que minimice la misma. En primer lugar, se busca que el empleo de la distribución uniforme en S^2 y la fibración de Hopf proporcione una energía menor que la distribución uniforme en S^3. Esto propicia la siguiente desigualdad.

$$\frac{-1}{4}N^2 + \frac{1}{4}Nk - N\log k < \frac{-1}{4}N^2 + \frac{1}{4}N$$
$$\Rightarrow k-1 < 4\log k \Rightarrow 1 < k < -4W_{-1}\left(\frac{-1}{4\sqrt[4]{e}}\right) \Rightarrow k \in (1,11).$$

donde W es la función W de Lambert ([17]).

Se tendrá por ello que el valor de k será necesariamente menor que 11. Derivar la energía con respecto a k permite encontrar un valor óptimo:

$$E_k = \frac{1}{4}N - \frac{N}{k}.$$

Igualando a cero se tiene

$$E_k = 0 \Rightarrow k = 4.$$

Por lo tanto, el valor óptimo de puntos en cada fibra será 4. Esto puede resultar contraintuitivo, pues independientemente del número de puntos que se tengan en S^2, el número óptimo de puntos por fibra siempre será 4. La expansión asintótica de la energía logarítmica será entonces

$$E = \frac{-1}{4}N^2 + (1 - 2\log 2)N.$$

Cálculo con los puntos antipodales

De manera similar a la estrategia empleada con la distribución uniforme en S^3, se puede usar también la simetría central para distribuir la mitad de los puntos. Como se ha comentado en el capítulo 4, se ha elegido emplear la simetría en S^2, para tener puntos mejor distribuidos en S^2 y calcular las fibras después.

Como se ha visto antes, los puntos distribuidos uniformemente en S^2 son de la forma

$$\begin{cases} x = \sqrt{1-u^2}\cos\phi \\ y = \sqrt{1-u^2}\,\mathrm{sen}\,\phi \\ z = u \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \phi \in [0, 2\pi] \text{ uniforme} \\ u \in [-1, 1] \text{ uniforme} \end{cases} .$$

Por lo que los puntos antipodales serán la forma

$$\begin{cases} x = \sqrt{1-u^2}\cos(\phi+\pi) \\ y = \sqrt{1-u^2}\,\mathrm{sen}(\phi+\pi) \\ z = -u \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \tilde{\phi} = \phi + \pi \\ \tilde{u} = -u \end{cases} .$$

donde $\tilde{\phi}$ y $\tilde{u}$ denotan las coordenadas de los puntos antipodales. A partir de estos y mediante la fibración de Hopf dada por la ecuación (2.3) se tendrán las fibras

$$\tilde{\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{1-u}\cos t, \sqrt{1-u}\sin t, \sqrt{1+u}\sin(t-\phi-\pi), \sqrt{1+u}\cos(t-\phi-\pi)\right),$$

donde t denota el ángulo en la fibra. Los puntos serán de la forma $t = \frac{2\pi l}{k} + \theta$, con $\theta \in [0, 2\pi)$ aleatorio con distribución uniforme.

De manera análoga a la distribución uniforme en S^3, solo será necesario tener en cuenta la simetría central para las parejas antipodales. Para el resto de puntos será similar a una distribución uniforme en S^2, caso anterior. Se calculará por tanto la distancia entre los puntos dados por la fibra de un punto en S^2 y su antipodal:

$$
\begin{aligned}
||\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}||^2 = \frac{1}{2}\Bigg[&\left[\sqrt{1+u}\cos t-\sqrt{1-u}\cos\tilde{t}\right]^2+\left[\sqrt{1+u}\sin t-\sqrt{1-u}\sin\tilde{t}\right]^2\\
&+\left[\sqrt{1-u}\sin(t-\phi)-\sqrt{1+u}\sin(\tilde{t}-\phi-\pi)\right]^2\\
&+\left[\sqrt{1-u}\cos(t-\phi)-\sqrt{1+u}\cos(\tilde{t}-\phi-\pi)\right]^2\Bigg]\\
&=\frac{1}{2}\Big[\big]4-2\sqrt{1-u^2}\big[\cos t\cos\tilde{t}+\sin t\sin\tilde{t}\\
&+\cos(t-\phi)\cos(\tilde{t}-\phi-\pi)+\sin(t-\phi)\sin(\tilde{t}-\phi-\pi)\big]\big]\\
&=2-\sqrt{1-u^2}\left[\cos(t-\tilde{t})+\cos(t-\tilde{t}+\pi)\right]=2,
\end{aligned}
$$

por lo que se tiene

$$
||\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}||=\sqrt{2}\Longrightarrow -\log||\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}||=\frac{-1}{2}\log 2.
$$

Se tiene entonces que la expansión asintótica de la energía logarítmica será

$$
\begin{aligned}
E=N&\left[E_{=fibra}+E_{\text{fibra antipodal}}+E_{\substack{\neq fibra\\ no\ antipodal}}\right]\\
&=N\left[-\log k+\frac{-\log 2}{2}k+\frac{-1}{4}(N-2k)\right]\\
&=\frac{-1}{4}N^2+\frac{Nk}{2}(1-\log 2)-N\log k.
\end{aligned}
$$

De manera similar al caso anterior, resulta pertinente ahora plantear la elección óptima del número de puntos por fibra, denotado por k.

Derivando con respecto de k se tiene

$$
E_k=\frac{N}{2}(1-\log 2)-\frac{N}{k}.
$$

Igualando a cero

$$
E_k=0\Rightarrow k=\frac{2}{1-\log 2}\approx 6{,}51...
$$

Se tiene además que la segunda derivada es

$$
E_{kk}=\frac{N}{k^2}>0.
$$

Por lo tanto, el mínimo se tendrá con $k=6$ o $k=7$. Sustituyendo y viendo el término lineal:

- $k = 6 \longrightarrow 3(1 - \log 2) - \log 6 \approx -0{,}8712...$
- $k = 7 \longrightarrow \frac{7}{2}(1 - \log 2) - \log 7 \approx -0{,}8719...$

Por lo que el mínimo se dará con $k = 7$ y entonces la expansión será

$$E = \frac{-1}{4} N^2 + \left(\frac{7}{2}(1 - \log 2) - \log 7 \right) N.$$

De nuevo se tiene que el número de puntos por fibra óptimo es fijo e independiente del número total de puntos.

5.3. Proceso de puntos determinantal y fibración

Sean $\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_r \in \mathbb{CP}^1 \approx S^2$ obtenidos mediante un proceso de puntos determinantal con kernel conocido. Sea $\underline{i} = \sqrt{-1}$ la unidad imaginaria. Sean $\mathbf{y}_{ij} = \mathbf{x}_i e^{\underline{i}(\theta_i + \frac{2\pi j}{k})} \in S^3 \subseteq \mathbb{C}^2$ los puntos en las fibras dadas por la fibración de Hopf expresada en su forma compleja.

En el cálculo de la esperanza de la energía logarítmica se verán involucradas dos cantidades:

- La energía dada por los puntos en la misma fibra, sumado sobre el total de fibras. Esta cantidad se denotará J_1.
- La energía dada por los puntos en distintas fibras, que se denotará J_2.

La energía total será la suma de ambas cantidades.

5.3.1. Cálculo de J_1

En S^3 todas las fibras serán círculos máximos con k puntos. Por lo tanto, la cantidad J_1 será igual a la energía de una fibra multiplicada por el número de fibras.

$$J_1 = \sum_{i=1}^{r} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbb{E}_{\theta_i} \left[\sum_{\substack{j_1, j_2 = 0 \\ j_1 \neq j_2}} - \log ||e^{\underline{i}(\theta_i + \frac{2\pi j_1}{k})} \mathbf{x}_i - e^{\underline{i}(\theta_i + \frac{2\pi j_2}{k})} \mathbf{x}_i|| \right] d\theta_i$$

$$= -\frac{2\pi}{2\pi} r \sum_{\substack{j_1, j_2 = 0 \\ j_1 \neq j_2}}^{k-1} \log |e^{\underline{i}\frac{2\pi j_1}{k}} - e^{\underline{i}\frac{2\pi j_2}{k}}| = -rk \log k.$$

En la segunda igualdad se ha aplicado que $||\mathbf{x}_i|| = 1$. En la última igualdad se ha empleado la proposición 5.1.2. Además, se ha tenido en cuenta el hecho de que las distancias no dependen de θ_i, al ser la misma fibra.

5.3.2. Cálculo de J_2

Antes de proceder al cálculo de la cantidad J_2, resulta importante introducir un lema que se empleará durante dicho cálculo:

Lema 5.3.1. *Sea ψ la aplicación:*

$$\begin{aligned} \psi_d : \mathbb{C} &\longrightarrow \mathbb{P}(\mathbb{C}^2) \\ \mathbf{z} &\longmapsto (\mathbf{z}, 1), \end{aligned}$$

se tiene que su jacobiano normal es:

$$NJac(\psi)(z) = \left(\frac{1}{1 + ||\mathbf{z}||^2} \right)^2 .$$

Demostración. Véase para la demostración [13], lema 1.1.7. □

Una vez introducido el lema 5.3.1, puede procederse a calcular la cantidad J_2. En dicho cálculo se tendrán en cuenta puntos correspondientes a distintas fibras.

$$J_2 = \frac{1}{4\pi^2} \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_r} \left[\sum_{j_1,j_2=0}^{k-1} \sum_{\substack{i_1,i_2=0 \\ i_1 \neq i_2}}^{r} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} - \log \left|\left| e^{i(\theta_{i_1} + \frac{2\pi j_1}{k})} \mathbf{x}_{i_1} - e^{i(\theta_{i_2} + \frac{2\pi j_2}{k})} \mathbf{x}_{i_2} \right|\right| d\theta_{i_1} d\theta_{i_2} \right] .$$

Empleando una identidad trigonométrica se tiene

$$\begin{aligned} J_2 &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_r} \left[\sum_{j_1,j_2=0}^{k-1} \sum_{\substack{i_1,i_2=0 \\ i_1 \neq i_2}}^{r} \frac{2\pi}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} - \log(\sqrt{2 - 2 < \mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_2} > \cos\theta}) d\theta \right] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_r} \left[\sum_{j_1,j_2=0}^{k-1} \sum_{\substack{i_1,i_2=0 \\ i_1 \neq i_2}}^{r} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} - \log(2 - 2 < \mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_2} > \cos\theta) d\theta \right] . \end{aligned}$$

Aplicando el lema 5.1.4

$$\begin{aligned} J_2 &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_r} \left[\sum_{j_1,j_2=0}^{k-1} \sum_{\substack{i_1,i_2=0 \\ i_1 \neq i_2}}^{r} \frac{-1}{2\pi} \pi \log \left(\frac{2 + \sqrt{4 - 4 < \mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_2} >^2}}{2} \right) \right] \\ &= \frac{-k^2}{2} \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_r} \left[\sum_{\substack{i_1,i_2=0 \\ i_1 \neq i_2}}^{r} \log \left(1 + \sqrt{1 - < \mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_2} >^2} \right) \right] . \end{aligned}$$

Usando el hecho de que los puntos $\mathbf{x}_i$ se han obtenido mediante un proceso de puntos determinantal de kernel conocido, se puede aplicar la proposición 4.2.5:

$$
\begin{aligned}
J_2 &= \frac{-k^2}{2} \int_{\mathbb{CP}^1 \times \mathbb{CP}^1} \log\left(1 + \sqrt{1 - <\mathbf{p},\mathbf{q}>^2}\right) \left(K^r(\mathbf{p},\mathbf{p})^2 - |K^r(\mathbf{p},\mathbf{q})|^2\right) d\mathbf{p}d\mathbf{q} \\
&= \frac{-k^2r^2}{2\pi^2} \int_{\mathbb{CP}^1 \times \mathbb{CP}^1} \log\left(1 + \sqrt{1 - <\mathbf{p},\mathbf{q}>^2}\right) \left(1 - |<\mathbf{p},\mathbf{q}>|^{2(r-1)}\right) d\mathbf{p}d\mathbf{q}.
\end{aligned}
$$

Aplicando el hecho de que es un espacio homogéneo y el volumen de $\mathbb{CP}^1$ es π:

$$
J_2 = \frac{-k^2r^2}{2\pi} \int_{\mathbb{CP}^1} \log\left(1 + \sqrt{1 - <\mathbf{e_1},\mathbf{q}>^2}\right) \left(1 - |<\mathbf{e_1},\mathbf{q}>|^{2(r-1)}\right) d\mathbf{q}.
$$

Integrando sobre los números complejos según lo mostrado en el lema 5.3.1:

$$
\begin{aligned}
J_2 = \frac{-k^2r^2}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \\
\log\left(1 + \sqrt{1 - \left\langle \mathbf{e_1}, \frac{(1,\mathbf{z})}{\sqrt{1+||\mathbf{z}||^2}} \right\rangle^2}\right) \left(1 - \left|\left\langle \mathbf{e_1}, \frac{(1,\mathbf{z})}{\sqrt{1+||\mathbf{z}||^2}} \right\rangle\right|^{2(r-1)}\right) \frac{1}{(1+||\mathbf{z}||^2)^2} d\mathbf{z} \\
= \frac{-k^2r^2}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \log\left(1 + \sqrt{1 - \frac{1}{1+||\mathbf{z}||^2}}\right) \left(1 - \frac{1}{(1+||\mathbf{z}||^2)^{r-1}}\right) \frac{1}{(1+||\mathbf{z}||^2)^2} d\mathbf{z}.
\end{aligned}
$$

Realizando ahora un cambio de variable a coordenadas polares:

$$
\begin{aligned}
J_2 &= \frac{-k^2r^2}{2\pi} 2\pi \int_0^\infty \log\left(1 + \sqrt{1 - \frac{1}{1+t^2}}\right) \left(1 - \frac{1}{(1+t^2)^{r-1}}\right) \frac{1}{(1+t^2)^2} t dt \\
&= -k^2r^2 \left[\int_0^\infty \log\left(1 + \sqrt{1 - \frac{1}{1+t^2}}\right) \frac{tdt}{(1+t^2)^2} - \int_0^\infty \log\left(1 + \sqrt{1 - \frac{1}{1+t^2}}\right) \frac{tdt}{(1+t^2)^{r+1}}\right].
\end{aligned}
$$

Separando ambas integrales para su resolución, en primer lugar se tiene que

$$
\int_0^\infty \log\left(1 + \sqrt{1 - \frac{1}{1+t^2}}\right) \frac{tdt}{(1+t^2)^2} = \frac{1}{4}.
$$

Esta integral se ha calculado mediante el *sofware* de integración [16] de *Python*.

En segundo lugar:

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty \log\left(1+\sqrt{1-\frac{1}{1+t^2}}\right)\frac{tdt}{(1+t^2)^{r+1}} \\
&= -\log\left(1+\sqrt{1-\frac{1}{1+t^2}}\right)\frac{1}{2r(t^2+1)^r}\Bigg|_0^\infty + \int_0^\infty \frac{dt}{2r(t^2+1)^r[(t^2+1)(t+\sqrt{1+t^2})]} \\
&= \frac{1}{2r}\int_0^\infty \frac{dt}{(t^2+1)^{r+1}(t+\sqrt{1+t^2})} \\
&= \frac{1}{2r}\left[\frac{-\pi^2\operatorname{sen}(r\pi)\Gamma(1/2-r)+\pi^{3/2}\cos(r\pi)\Gamma(-r)-\pi\Gamma(-r)\Gamma(1/2-r)\Gamma(r+1)}{2\pi^{3/2}\cos(r\pi)\Gamma(1-r)}\right] \\
&= \frac{\Gamma(-r)\left[(-1)^r\sqrt{\pi}-\Gamma(1/2-r)\Gamma(1+r)\right]}{4\sqrt{\pi}r(-1)^r\Gamma(1-r)} = \frac{(-1)^r\Gamma(1/2-r)\Gamma(1+r)-\sqrt{\pi}}{4\sqrt{\pi}r^2},
\end{aligned}
$$

donde se ha tenido en cuenta que $r \in \mathbb{N}$. De nuevo, la integral se ha calculado mediante el *sofware* de integración [16] de *Python*.

De esta manera se tiene que

$$J_2 = -k^2r^2\left[\frac{1}{4} - \frac{(-1)^r\Gamma(1/2-r)\Gamma(1+r)-\sqrt{\pi}}{4\sqrt{\pi}r^2}\right]$$

y entonces

$$E = J_1 + J_2 = -\frac{k^2r^2}{4} - rk\log k + \frac{k^2}{4\sqrt{\pi}}\left[(-1)^r\Gamma\left(\frac{1}{2}-r\right)\Gamma(1+r)-\sqrt{\pi}\right]. \tag{5.1}$$

5.3.3. Simplificación

En esta sección se plantea la simplificación de la expresión mostrada en la ecuación (5.1) para la expansión asintótica de la energía logarítmica. Para ello, se comienza por dos lemas que facilitarán cálculos posteriores.

Lema 5.3.2. *Sea $\Gamma(r)$ la función Gamma y sea r un entero positivo. Se tiene que*

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}-r\right) = \frac{(-4)^r r!}{(2r)!}\sqrt{\pi}.$$

Demostración. Aplicando la definición de la función Gamma:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}-r\right) = \int_0^\infty t^{1/2-r-1}e^{-t}dt = \int_0^\infty t^{-r-1/2}e^{-t}dt.$$

Integrando por partes se tiene:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}-r\right) = \left[-t^{-r-1/2}e^{-t}\right]_0^\infty - (r+\frac{1}{2})\int_0^\infty t^{-r-3/2}e^{-t}dt = 0-(r+\frac{1}{2})\Gamma\left(-\frac{1}{2}-r\right).$$

Haciendo el cambio $n = r + 1$ y dividiendo se tiene entonces:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} - n\right) = (-1)\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - n + 1\right)}{\left(n - \frac{1}{2}\right)} = (-1)^2\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - n + 2\right)}{\left(n - \frac{1}{2}\right)\left(n - \frac{3}{2}\right)}$$

$$= (-1)^n\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - n + n\right)}{\left(n - \frac{1}{2}\right)\left(n - \frac{3}{2}\right)\ldots\frac{1}{2}} = \frac{(-1)^n 2^n\sqrt{\pi}}{(2n-1)(2n-3)\ldots(1)} = (-1)^n 2^n\sqrt{\pi}\frac{2^n n!}{(2n)!} = \frac{(-4)^n n!\sqrt{\pi}}{(2n)!},$$

como se quería demostrar.

□

Lema 5.3.3. *Sea r un entero positivo. Se tiene que*

$$\frac{2^{2r}(r!)^2}{(2r)!} = \sqrt{\pi r} + O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right).$$

Demostración. Se aplicará la fórmula de Stirling. Esta establece que

$$n! = \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n\left(1 + O\left(\frac{1}{n}\right)\right) = \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n + O\left(\frac{n^{n-1/2}}{e^n}\right)$$

para n grande. Sustituyendo se tiene

$$\frac{2^{2r}(r!)^2}{(2r)!} = \frac{2^{2r}\left[\sqrt{2\pi r}\left(\frac{r}{e}\right)^r + O\left(\frac{r^{r-1/2}}{e^r}\right)\right]^2}{\sqrt{2\pi 2r}\left(\frac{2r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{(2r)^{2r-1/2}}{e^{2r}}\right)} = \frac{2^{2r}\left[2\pi r\left(\frac{r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{r^{2r-1}}{e^{2r}}\right) + O\left(\frac{r^{2r}}{e^{2r}}\right)\right]}{2\sqrt{\pi r}\left(\frac{2r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{(2r)^{2r-1/2}}{e^{2r}}\right)}$$

$$= \frac{2^{2r}\left[2\pi r\left(\frac{r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{r^{2r}}{e^{2r}}\right)\right]}{2\sqrt{\pi r}\left(\frac{2r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{(2r)^{2r-1/2}}{e^{2r}}\right)}$$

$$= \frac{2\pi r\left(\frac{2r}{e}\right)^{2r}}{2\sqrt{\pi r}\left(\frac{2r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{(2r)^{2r-1/2}}{e^{2r}}\right)} + \frac{2^{2r}O\left(\frac{r^{2r}}{e^{2r}}\right)}{2\sqrt{\pi r}\left(\frac{2r}{e}\right)^{2r} + O\left(\frac{(2r)^{2r-1/2}}{e^{2r}}\right)}$$

$$= \frac{\sqrt{\pi r}}{1 + O\left(\frac{1}{r}\right)} + \frac{1}{O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right) + O\left(\sqrt{r}\right)} = \frac{\sqrt{\pi r}}{1 + O\left(\frac{1}{r}\right)} + \frac{1}{O\left(\sqrt{r}\right)}.$$

Para desarrollar el primer sumando obtenido se empleará lo siguiente:

$$\frac{A}{1} - \frac{A}{1+\epsilon} = \frac{A\epsilon}{1+\epsilon}.$$

Se tiene entonces

$$\frac{\sqrt{\pi r}}{1 + O\left(\frac{1}{r}\right)} = \sqrt{\pi r} - \frac{O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right)}{1 + O\left(\frac{1}{r}\right)}$$

y desarrollando el segundo sumando:

$$\frac{O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right)}{1+O\left(\frac{1}{r}\right)} = O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right) - \frac{O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right)O\left(\frac{1}{r}\right)}{1+O\left(\frac{1}{r}\right)} = O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right).$$

Sustituyendo se tiene

$$\frac{\sqrt{\pi r}}{1+O\left(\frac{1}{r}\right)} = \sqrt{\pi r} + O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right) \Rightarrow \frac{2^{2r}(r!)^2}{(2r)!} = \sqrt{\pi r} + O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right),$$

como se quería demostrar.

$\square$

Una vez planteados los lemas 5.3.2 y 5.3.3, es momento de realizar los cálculos de la expansión asintótica de la energía, que se presentan en la siguiente proposición:

Proposición 5.3.4. *La expansión asintótica de la energía logarítmica para los puntos dados por el proceso de puntos determinantal spherical ensemble y la fibración de Hopf es*

$$E = -\frac{N^2}{4} - N\log k + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}k^{3/2} - \frac{k^2}{4} + k^2 O\left(\sqrt{\frac{k}{N}}\right).$$

Demostración. De momento se tiene

$$\begin{aligned} E = -\frac{k^2r^2}{4} - rk\log k + \frac{k^2}{4\sqrt{\pi}}\left[(-1)^r\Gamma(\frac{1}{2}-r)\Gamma(1+r) - \sqrt{\pi}\right] \\ = -\frac{k^2r^2}{4} - rk\log k - \frac{k^2}{4} + \frac{k^2}{4\sqrt{\pi}}(-1)^r\Gamma(\frac{1}{2}-r)\Gamma(1+r). \end{aligned}$$

Desarrollando el último sumando:

$$\begin{aligned} \frac{k^2}{4\sqrt{\pi}}(-1)^r\Gamma(\frac{1}{2}-r)\Gamma(1+r) = \frac{k^2}{4\sqrt{\pi}}(-1)^r r!\frac{(-4)^r r!}{(2r)!}\sqrt{\pi} \\ = k^2\frac{2^{2r-2}(r!)^2}{(2r)!} = \frac{k^2}{4}\left(\sqrt{\pi r} + O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right)\right), \end{aligned}$$

donde se ha aplicado el lema 5.3.2 en la primera igualdad y el lema 5.3.3 en la última. Sustituyendo en la expansión asintótica de la energía:

$$E = -\frac{k^2r^2}{4} - rk\log k - \frac{k^2}{4} + \frac{k^2\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{r} + k^2 O\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right)$$

y teniendo en cuenta que $N = rk$:

$$
\begin{aligned}
E &= -\frac{k^2r^2}{4} - rk\log k - \frac{k^2}{4} + \frac{k^2\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N/k} + k^2O\left(\sqrt{\frac{k}{N}}\right) \\
&= -\frac{N^2}{4} - N\log k + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}k^{3/2} - \frac{k^2}{4} + k^2O\left(\sqrt{\frac{k}{N}}\right),
\end{aligned}
$$

como se quería demostrar. □

5.3.4. Elección óptima de k

Una vez obtenida la expansión asintótica de la energía logarítmica en función del número de puntos total y el número de puntos por fibra, resulta conveniente escoger k de manera adecuada para así obtener la expansión asintótica en función únicamente del número de puntos. Se desea minimizar la expresión

$$E = -\frac{N^2}{4} - N\log k + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}k^{3/2} - \frac{k^2}{4}$$

en función de k.

Una primera aproximación puede ser derivar la expresión anterior en función del parámetro k, obteniendo así

$$E_k = -\frac{N}{k} + \frac{3\sqrt{\pi}}{8}\sqrt{N}\sqrt{k} - \frac{k}{2}.$$

Sin embargo, igualar esta expresión a cero proporciona soluciones muy complejas que no permiten obtener una expansión asintótica de la energía clara. Se estudiarán por lo tanto varias formas de seleccionar k:

- Tomar $k = cte.$.
- Tomar $k = CN^\alpha$ como el producto de una constante por una potencia de N (se tendrá necesariamente $\alpha \in [0,1]$.
- Tomar $k = C(\log N)^\alpha$, dando lugar a un crecimiento asintótico más lento que el caso anterior.

Tomando un valor constante

Se tiene entonces que el término lineal en N dominará el resto de entre los que interfiere el parámetro k. Dicho término será menor cuanto mayor sea k. Esto hace plantearse otra forma de elegir dicho parámetro.

Tomando $k = CN^{\alpha}$

Se tiene entonces

$$\begin{aligned} E &= -\frac{N^2}{4} - N\log k + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}k^{3/2} - \frac{k^2}{4} \\ &= -\frac{N^2}{4} - N\log(CN^{\alpha}) + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}(CN^{\alpha})^{3/2} - \frac{(CN^{\alpha})^2}{4} \\ &= -\frac{N^2}{4} + N\left[-\log(CN^{\alpha}) + \frac{\sqrt{\pi}}{4}C^{3/2}N^{\frac{3\alpha-1}{2}} - \frac{C^2N^{2\alpha-1}}{4}\right]. \end{aligned}$$

Se quiere que el término entre corchetes sea lo menor posible. Cabe destacar para ello varios hechos. En primer lugar, se tiene que $\frac{3\alpha-1}{2} \geq 2\alpha - 1 \quad \forall\alpha \in [0,1]$. Por lo tanto, el segundo sumando dominará la expresión si se tiene $\frac{3\alpha-1}{2} > 0$. Al ser dicho sumando positivo, se buscará que $\frac{3\alpha-1}{2} \leq 0$, lo cual sucede con $\alpha \in [0, 1/3]$. Se tendrá entonces que el sumando dominante será el primero. Desarrollando este:

$$-\log(CN^{\alpha}) = -\log C - \alpha\log N,$$

que claramente será menor cuanto mayor sea α. Por lo tanto, se tendrá que el valor óptimo será $\alpha = 1/3$.

Una vez definido el valor de α, minimizar de nuevo el término lineal proporciona un valor para la constante

$$C = \frac{4}{3^{2/3}\pi^{1/3}}.$$

Se obtiene así una expansión para la energía logarítmica de

$$E = -\frac{N^2}{4} - \frac{1}{3}N\log N + \frac{N}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) - \frac{4}{3^{4/3}\pi^{2/3}}N^{2/3} + O(N^{1/3}).$$

El término lineal en esta expansión es $\frac{1}{3}\left(2 + \log\frac{9\pi}{64}\right) = 0{,}394...$.

Sin embargo, este valor de C proporcionaría una construcción imposible, pues se tendría

$$k = CN^{\alpha} = \frac{4}{3^{2/3}\pi^{1/3}}N^{1/3} \notin \mathbb{N}. \tag{5.2}$$

Se buscará por tanto aproximar el valor de la constante C para que tanto k como N sean enteros positivos.

A partir de la ecuación (5.2) se tiene

$$N = \frac{3^2\pi}{4^3}k^3$$

y se tiene que $\frac{3^2\pi}{4^3} \approx 0{,}44$. Aproximarlo por un número racional permitirá que tanto k como N sean enteros positivos. Dicha aproximación puede ser arbitrariamente buena, aunque esto restringirá las posibilidades en la elección de k. Como ejemplo se aproxima $\frac{3^2\pi}{4^3} \approx \frac{1}{2}$. Entonces se tiene

$$N = \frac{1}{2}k^3 \text{ y tomando } k = 2k' \Rightarrow N = 4k'^3 \in \mathbb{N}.$$

Esta aproximación proporciona un término lineal $\frac{\sqrt{2\pi}}{4} - \log \sqrt[3]{2} = 0{,}396...$. Sin embargo, como se ha comentado ya, se puede aproximar con precisión arbitraria. Por ejemplo, tomando $\frac{3^2\pi}{4^3} \approx \frac{2}{5}$ se tiene un término lineal $\frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt[2]{\frac{5}{2}} - \log\sqrt[3]{\frac{5}{2}} = 0{,}395...$.

Tomando $k = C(\log N)^\alpha$

Sustituyendo en la expresión de la energía

$$E = -\frac{N^2}{4} - N\log[C(\log N)^\alpha]) + \frac{\sqrt{\pi}}{4}\sqrt{N}[C(\log N)^\alpha]^{3/2} - \frac{[C(\log N)^\alpha]^2}{4}.$$

Se tiene que el término $-N\log[C(\log N)^\alpha])$ domina sobre el resto de los términos que dependen de C y α. Por lo tanto, se buscará minimizar dicho término. Se observa que dicho término es menor cuanto mayor sea α, luego no existiría un valor óptimo. Además, al comparar este término con el caso anterior, tomando $k = CN^{1/3}$, se puede ver que siempre será peor que dicho caso.

Bibliografía

[1] Carlos Beltrán y Ujué Etayo. "The Diamond ensemble: A constructive set of spherical points with small logarithmic energy". En: *Journal of Complexity* 59 (ago. de 2020), pág. 101471. ISSN: 0885064X. DOI: 10.1016/j.jco.2020.101471. URL: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0885064X20300145 (visitado 10-06-2022).

[2] Manjunath Krishnapur. *From random matrices to random analytic functions*. Number: arXiv:0711.1378. 8 de nov. de 2007. arXiv: 0711.1378[math-ph]. URL: http://arxiv.org/abs/0711.1378 (visitado 10-06-2022).

[3] Carlos Beltrán, Jordi Marzo y Joaquim Ortega-Cerdà. "Energy and discrepancy of rotationally invariant determinantal point processes in high dimensional spheres". En: *Journal of Complexity* 37 (dic. de 2016), págs. 76-109. ISSN: 0885064X. DOI: 10.1016/j.jco.2016.08.001. arXiv: 1511.02535[math]. URL: http://arxiv.org/abs/1511.02535 (visitado 10-06-2022).

[4] Johann S. Brauchart y Peter J. Grabner. "Distributing many points on spheres: Minimal energy and designs". En: *Journal of Complexity* 31.3 (jun. de 2015), págs. 293-326. ISSN: 0885064X. DOI: 10.1016/j.jco.2015.02.003. URL: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0885064X15000205 (visitado 10-06-2022).

[5] Michael Shub y Steve Smale. "COMPLEXITY OF BEZOUT'S THEOREM. I: GEOMETRIC ASPECTS". En: *JOURNAL OF THE AMERICAN MATHEMATICAL SOCIETY* 6.2 (), pág. 43.

[6] J. S. Brauchart, D. P. Hardin y E. B. Saff. *The next-order term for optimal Riesz and logarithmic energy asymptotics on the sphere*. Vol. 578. 2012. DOI: 10.1090/conm/578. arXiv: 1202.4037[math-ph]. URL: http://arxiv.org/abs/1202.4037 (visitado 16-06-2022).

[7] J. S. Brauchart. "Optimal logarithmic energy points on the unit sphere". En: *Mathematics of Computation* 77.263 (1 de sep. de 2008), págs. 1599-1613. ISSN: 0025-5718, 1088-6842. DOI: 10.1090/S0025-5718-08-02085-1. URL: http://www.ams.org/journal-getitem?pii=S0025-5718-08-02085-1 (visitado 16-06-2022).

[8] Brian O'Sullivan. *Quaternions, Spinors and the Hopf Fibration: Hidden Variables in Classical Mechanics*. Number: arXiv:1601.02569. 5 de dic. de 2021. arXiv: 1601.02569[cond-mat,physics:math-ph,physics:physics,physics:quant-ph]. URL: http://arxiv.org/abs/1601.02569 (visitado 16-06-2022).

[9] José F. Fernando Galván y José Manuel Gamboa. *Geometría lineal : espacios afines y proyectivos*. Alcorcón (Madrid): Sanz y Torres, D.L., 2017. ISBN: 978-84-16466-49-8. URL: `http://catalogo.unican.es/cgi-bin/abnetopac/?TITN=398684`.

[10] *Array programming with NumPy — Nature*. URL: `https://www.nature.com/articles/s41586-020-2649-2` (visitado 11-06-2022).

[11] Siu Kwan Lam, Antoine Pitrou y Stanley Seibert. "Numba: a LLVM-based Python JIT compiler". En: *Proceedings of the Second Workshop on the LLVM Compiler Infrastructure in HPC - LLVM '15*. the Second Workshop. Austin, Texas: ACM Press, 2015, págs. 1-6. ISBN: 978-1-4503-4005-2. DOI: `10.1145/2833157.2833162`. URL: `http://dl.acm.org/citation.cfm?doid=2833157.2833162` (visitado 11-06-2022).

[12] J. Hough y col. *Zeros of Gaussian Analytic Functions and Determinantal Point Processes*. Vol. 51. University Lecture Series. Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 13 de oct. de 2009. ISBN: 978-0-8218-4373-4 978-1-4704-1646-1. DOI: `10.1090/ulect/051`. URL: `http://www.ams.org/ulect/051` (visitado 10-06-2022).

[13] Ujué Etayo. "El problema de la distribución de puntos en la esfera". Tesis doct.

[14] Carlos Beltrán y Ujué Etayo. "The Projective Ensemble and Distribution of Points in Odd-Dimensional Spheres". En: *Constructive Approximation* 48.1 (ago. de 2018), págs. 163-182. ISSN: 0176-4276, 1432-0940. DOI: `10.1007/s00365-018-9426-6`. URL: `http://link.springer.com/10.1007/s00365-018-9426-6` (visitado 10-06-2022).

[15] I. S. Gradshteĭn, I. M. Ryzhik y Alan Jeffrey. *Table of integrals, series, and products*. 7th ed. Amsterdam ; Boston: Academic Press, 2007. 1171 págs. ISBN: 978-0-12-373637-6.

[16] *SymPy: symbolic computing in Python [PeerJ]*. URL: `https://peerj.com/articles/cs-103/` (visitado 10-06-2022).

[17] R. M. Corless y col. "On the LambertW function". En: *Advances in Computational Mathematics* 5.1 (dic. de 1996), págs. 329-359. ISSN: 1019-7168, 1572-9044. DOI: `10.1007/BF02124750`. URL: `http://link.springer.com/10.1007/BF02124750` (visitado 16-06-2022).

Apéndice A

Código desarrollado

A.1. Cálculo numérico del conjunto diamante

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from numba import njit

# conjunto diamante dado por el articulo, se ha tomado la eleccion de r mas simple
class R4DiamondEnsemble:
    def __init__(self, p, k):
        assert p % 2 == 1  # p ha de ser impar
        self.p = p
        self.k = k
        self.lista_theta = np.random.rand(p) * 2 * np.pi  # angulo aleatorio en S^2
        self.lista_phi = np.random.rand(p, int(self.r((p + 1) / 2))) * 2 * np.pi  # ↩
            angulo aleatorio en la fibra
        self.array = []

    def __len__(self):
        if len(self.array) != 0:
            return len(self.array)
        n = 0
        for j in range(self.p):
            for i in range(self.r(j)):
                n += self.k
        return n

    def r4_diamond_point(self, j, i, l):
        angulo_fibra = 2 * np.pi * l / self.k + self.phi(j, i)
        angulo_paralelo = 2 * np.pi * i / self.r(j) + self.theta(j)
        x1 = np.sqrt(1 + self.z(j)) * np.cos(angulo_fibra)
        x2 = np.sqrt(1 + self.z(j)) * np.sin(angulo_fibra)
        x3 = np.sqrt(1 - self.z(j)) * np.sin(angulo_fibra - angulo_paralelo)
        x4 = np.sqrt(1 - self.z(j)) * np.cos(angulo_fibra - angulo_paralelo)
        return np.array([x1, x2, x3, x4]) / np.sqrt(2)

    def r(self, j):
        if j > (self.p + 1) / 2:
            return self.r(self.p + 1 - j)
        else:
            return 4 * j

    def theta(self, j):
        return self.lista_theta[j]

    def phi(self, j, i):
        return self.lista_phi[j, i]
```

```python
    def z(self, j):
        rs = [self.r(l) for l in range(1, self.p + 1)]
        N = 2 + sum(rs)
        num = 1 + self.r(j) + 2 * sum(rs[:j-1])
        return 1 - num / (N - 1)

    def create_array(self):
        self.array = []  # making sure it is empty
        for j in range(self.p):
            for i in range(self.r(j)):
                for l in range(self.k):
                    self.array.append(self.r4_diamond_point(j, i, l))

    def distance(self, j1, i1, l1, j2, i2, l2):
        ang_fibra1 = 2 * np.pi * l1 / self.k + self.phi(j1, i1)
        ang_fibra2 = 2 * np.pi * l2 / self.k + self.phi(j2, i2)
        ang_paralelo1 = 2 * np.pi * i1 / self.r(j1) + self.theta(j1)
        ang_paralelo2 = 2 * np.pi * i2 / self.r(j2) + self.theta(j2)
        sum1 = np.sqrt(1 + self.z(j1)) * np.sqrt(1 + self.z(j2)) * np.cos(ang_fibra1 - ↩
            ang_fibra2)
        sum2 = np.sqrt(1 - self.z(j1)) * np.sqrt(1 - self.z(j2)) * np.cos(ang_fibra1 - ↩
            ang_fibra2 - (ang_paralelo1 - ang_paralelo2))
        return np.sqrt(2 - sum1 - sum2)

    def energy(self) -> float:
        self.create_array()
        return energy(np.array(self.array))

    def energy_from_distance(self):
        energy = 0
        for j1 in range(self.p):
            for i1 in range(self.r(j1)):
                for l1 in range(self.k):
                    for j2 in range(self.p):
                        for i2 in range(self.r(j2)):
                            for l2 in range(self.k):
                                if not (j1 == j2 and i1 == i2 and l1 == l2):
                                    energy += np.log(1 / self.distance(j1, i1, l1, j2, ↩
                                        i2, l2))
        return energy

# version de la clase R4DiamondEnsemble con la eleccion de r quasioptima dada por el ↩
    articulo
class R4DiamondEnsembleOptim(R4DiamondEnsemble):

    def __init__(self, p, k):
        assert (p + 1) % 14 == 0
        self.m = int((p + 1) / 14)
        super().__init__(p, k)

    def r(self, j):
        if j > (self.p + 1) / 2:
            return self.r(self.p + 1 - j)
        else:
            if j < 2 * self.m:
                return 2 * j
            elif j < 3 * self.m:
                return 2 * self.m + 5 * j
            elif j < 4 * self.m:
                return 5 * self.m + 4 * j
            elif j < 5 * self.m:
                return 9 * self.m + 3 * j
            elif j < 6 * self.m:
                return 14 * self.m + 2 * j
            elif j < 7 * self.m:
                return 20 * self.m + j
            elif j < 8 * self.m:
                return 34 * self.m - j
            else:
                print(j, self.p, self.m)
```

```
                raise NotImplementedError


# funciones creadas fuera de la clase para poder acelerarlas con numba
@njit()
def euclidean_distance(x, y):
    return np.sqrt(sum((x - y) * (x - y)))


@njit()
def energy(arr) -> float:
    energy = 0
    for i in range(len(arr)):
        for j in range(i+1, len(arr)):
            energy += 2 * np.log(1 / euclidean_distance(arr[i], arr[j]))
    return energy

# funcion creada para obtener el segundo termino de la expansion asintotica
def sec_ord(lista, lens):
    sec_lista = []
    for i in range(len(lista)):
        n = lens[i]
        sec_lista.append((lista[i] + 0.25 * n ** 2 ) / (n * np.log(n)))
    return sec_lista

# funcion creada para obtener el tercer termino de la expansion asintotica
def third_ord(lista, lens):
    third_lista = []
    for i in range(len(lista)):
        n = lens[i]
        third_lista.append((lista[i] + 0.25 * n ** 2 + n * np.log(n) / 3) / n)
    return third_lista


def main():
    # claramente k tiene que ser funcion de p, probamos con distintos exponentes
    dict_sec_term = {}
    dict_n = {}
    for exp in np.linspace(1.1, 1.5, 5):
        dict_sec_term[exp] = []
        dict_n[exp] = []
        for n in range(1, 4):
            p = 14 * n - 1
            diamond = R4DiamondEnsembleOptim(p, int(p**exp))
            e = diamond.energy()
            n = len(diamond)
            dict_sec_term[exp].append((e + 0.25 * n * n)/(n * np.log(n)))
            dict_n[exp].append(n)

    # representamos los resultados para el segundo termino de la expansion
    plt.figure(figsize=(12, 8))
    min_n = max(dict_n[1.1])
    for exp in dict_sec_term.keys():
        plt.plot(dict_n[exp], dict_sec_term[exp], label=exp)
    plt.legend()
    plt.xlim(0, min_n)
    plt.show()

    # representamos los resultados para el segundo termino de la expansion
    plt.figure(figsize=(12, 8))
    min_n = max(dict_n[1.1])
    for exp in dict_sec_term.keys():
        ns = dict_n[exp]
        sec_t = dict_sec_term[exp]
        third_t = (sec_t * (ns * np.log(ns)) + (ns * np.log(ns)) / 3) / ns
        plt.plot(ns, third_t, label=exp)
    plt.legend()
    plt.xlim(0, min_n)
    plt.show()
```

```
    # el mejor exponente es 1.2, representamos con mas puntos
    exp = 1.2
    e_list = []
    ns = []
    for n in range(1, 6):
        p = 14 * n - 1
        diamond = R4DiamondEnsembleOptim(p, int(p**exp))
        e_list.append(diamond.energy())
        ns.append(len(diamond))
    sec_list = sec_ord(e_list, ns)
    third_list = third_ord(e_list, ns)

    # segundo termino
    plt.figure(figsize=(12,6))
    plt.plot(ns, sec_list)
    plt.plot(ns, -np.ones(len(ns))/3, '--')
    plt.xlabel('Numero de puntos')
    plt.ylabel(r'$\left(E+\frac{N^2}{4}\right)/(N\log N)$')

    # tercer termino
    plt.figure(figsize=(12,6))
    plt.plot(ns, third_list)
    plt.plot(ns, np.zeros(len(ns)), '--')
    plt.xlabel('Numero de puntos')
    plt.ylabel(r'$\left(E+\frac{N^2}{4}+\frac{N\log N}{3}\right)/N$')


if __name__=='__main__':
    main()
```

A.2. Integrales calculadas

```
from sympy.integrals import integrate
from sympy import *


def int_1():
    t = Symbol('t')
    f = log(1 + sqrt(1 - 1 / (1 + t**2))) * t / (1 + t**2)**2
    integral = integrate(f, (t, 0, oo))
    integral = simplify(integral)
    print(integral)


def int_2():
    t = Symbol('t')
    r = Symbol('r', positive=True, integer=True)

    f = 1 / ((sqrt(1 + t ** 2) + t) * (1 + t ** 2) ** (r + 1))

    integral = integrate(f, (t, 0, oo)) / (2 * r)
    integral = simplify(integral)
    print(integral)


def main():
    int_1()
    int_2()


if __name__=='__main__':
    main()
```