

## Facultad de Ciencias

# 5 ELECTRONES (5 electrons)

# Trabajo de Fin de Máster para acceder al

# MÁSTER EN MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

Autor: Ujué Etayo Rodríguez

**Director: Carlos Beltrán Álvarez** 

Junio - 2015

#### Resumen

Imaginemos un conjunto de cinco electrones moviéndose en la superficie de una esfera. En un primer instante, pueden encontrarse todos juntos entorno a un punto de la superficie, luego, pueden moverse hacia los lados, pueden situarse los cinco en una circunferencia sobre la superficie, pueden separarse más y más... De hecho ¿cuánto es lo máximo que pueden separarse unos de otros? Dicho de una manera algo más formal, ¿cual es el máximo del producto de las distancias entre cada dos pares de electrones? Esta pregunta, de fácil enunciado no fue contestada correctamente hasta hace apenas dos años, nada en comparación con los cien años que llevaba abierta. La pregunta forma parte de un conjunto de muchas otras que se interrogan sobre la buena colocación de un número fijo de puntos en la esfera. A lo largo de este trabajo abordaremos la cuestión para el caso de cinco puntos, estudiaremos las respuestas parciales que se han aportado e intentaremos hacer, nosotros también, nuestra propia aportación a este bonito problema.

#### Abstract

Think about five electrons moving on the surface of a sphere, it is easy to imagine. They can be placed all together on the north pole, or they can be more separated. Actually, how much separated can they be? Let us be a little more rigorous, what is the maximal product of their mutual distances? (that is called, the Riesz energy of order zero). Well, it seems to be an easy question, but in fact, more than a hundred years have passed until we have finally had the answer. What if we want to know the minimal sum of their distances? And the minimal sum of the inverse of their mutual distances? In this project, we will explore the answer of the first question we made, as well as other similar questions that have to do with the placement of five points on a two-dimensional sphere.

Palabras clave: energía de Riesz, problema 7 de la lista de Smale, energía logarítmica, problema de Whyte.

**Key words:** Riesz's energy, 7th problem of the list of Smale, logarithmic energy, Whyte's problem.

# Índice general

Li	ta de figuras	$\mathbf{e}$
In	roducción	1
1.	Preliminares	6
	1.1. Un poco de geometría diferencial	. 6
	1.2. Condicionamiento de problemas numéricos	. 9
2.	Estudio de dos modelos de configuración	14
	2.1. Introducción	. 14
	2.2. Estudio del modelo bipiramidal	. 15
	2.3. Estudio del modelo piramidal	. 16
	2.3.1. Altura de la pirámide	. 19
	2.3.2. Propiedades del modelo piramidal	. 29
	2.4. Comparación del modelo piramidal y bipiramidal	. 31
	2.4.1. Cruce de las gráficas	. 32
3.	Energía logarítmica	33
	3.1. Introducción	. 33
	3.2. Fórmula de Armentano-Beltrán-Shub	. 34
	3.3. Energía logarítmica de cinco puntos	. 36
	3.3.1. Estructura bipiramidal	. 36
	3.3.2. Estructura piramidal	. 38
	3.3.3. Comparación de ambas estructuras	. 40
4.	Una pequeña incursión en los problemas abiertos	42
	4.1. En relación al problema de Thomson para 5 puntos	. 42
	4.2. Comparación entre las estructuras piramidal y bipiramidal.	. 43
	4.3. En relación a la fórmula Armentano-Beltrán-Shub	
Bi	oliografía	<b>51</b>
Aı	exo 1. Programas utilizados	<b>52</b>



# Índice de figuras

1. 2.	Granos de polen a través de un microscopio electrónico
1.1.	Representación de una carta
1.2.	Representación de la variedad solución $\mathcal{V}$
2.2.	Esquema del estado del arte del problema
2.3.	Estructura bipiramidal
2.4.	Distintas distancias de la estructura bipiramidal
2.5.	Gráfico de $\mathcal{E}_s^{\Diamond}$ para $s \in (0,30)$
2.6.	Estructura piramidal con $h = 1, \dots, 17$
2.7.	Distintas distancias de la estructura piramidal con $h = 1, \dots, 18$
2.8.	Intervalo en el que varía $h(s)$ representado en la esfera unidad 21
2.9.	Función $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}$ para distintos valores de $s$
2.10.	Gráfico de la función $h(s)$ para $s \in (0,30)$
2.11.	Gráfico de $\mathcal{E}_s^{\triangle}$ para $s \in (0, 30)$
	Gráficas de la energía de Riesz en ambas estructuras
	Gráfico de la función $D(s)$
3.1.	Proyección estereográfica
3.2.	Estructura bipiramidal original y tras la rotación
3.3.	Proyección estereográfica de la estructura bipiramidal
3.4.	Estructura piramidal original y tras la rotación
3.5.	Proyección estereográfica de la estructura piramidal con $h = \frac{5}{4}$ 39
4.1.	El área delimitada por la proyección $C$ está en blanco
4.2.	Gráfico de la función $C(s)$
4.3.	Proyección estereográfica de la estructura piramidal en función de $h$ 46
4.4.	Gráfico de la norma de Weyl del polinomio $f^{\triangle}$ en función de $h$
4.5.	Gráficos del condicionamiento de $\mu(f^{\triangle}, z)$ en función de $h$ 47
4.6	Gréficos del condicionamiento de $M^{\triangle}$ y $M^{\triangle}$

¿Cómo determinamos la organización de las proteínas que recubren los virus esféricos? ¿La estructura de las gotas de metal confinadas en las *Paul traps*? ¿Cómo se organizan las grandes estructuras de fullerenos, tan importantes para la nanotecnología? ¿Cual es la encapsulación óptima de ingredientes activos como drogas, nutrientes o células vivas? ¿Cómo se distribuyen los agujeros en las partículas de polen de tal forma que optimicen la germinación?



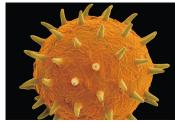




Figura 1: Granos de polen a través de un microscopio electrónico.

Todos estos problemas tienen distintas formulaciones matemáticas, muchas de las cuales se aproximan por el problema que sigue. Dado un  $n \in \mathbb{Z}_+$ , hallar la s-energía minimal asociada a un conjunto de n puntos  $\omega_n = (x_1, ..., x_n)$ . La s-energía o energía de Riesz viene dada por la siguiente fórmula

$$\sum_{i,j=1, i < j}^{n} \frac{1}{||x_i - x_j||^s}$$

y por lo tanto, el problema de minimizar la energía de Riesz es

$$\min \mathcal{E}_s(\omega_n) = \min \sum_{i=1, i < j}^n \frac{1}{||x_i - x_j||^s}$$
 Minimal s-energy problem

en el caso en que s > 0, o su equivalente, maximizar la s-energía en el caso en que s < 0.

Introducci'on 2

$$\max \mathcal{E}_s(\omega_n) = \max \sum_{i,j=1,i< j}^n \frac{1}{||x_i - x_j||^s} \qquad \textit{Maximal s-energy problem}$$

El problema en su totalidad, es decir, para todo s>0 y todo  $n\in\mathbb{Z}_+$  es ciertamente muy difícil de estudiar. De hecho, un resultado bastante impresionante de Leech [Lee57] muestra que aunque se conociera la solución para un número concreto de puntos  $n\in\mathbb{Z}_+$  y cada s>0, esta solución no es suficiente para dar la solución del problema para todos los casos de interés práctico.

De forma independiente, a lo largo de la historia se han planteado diferentes problemas motivados por algún fenómeno físico que responden al problema de s-energía minimal para algún s fijo.

Así, para s=1 obtenemos el conocido problema de Thomson, que consiste en determinar la mínima energía potencial electrostática en una configuración de n electrones en la superficie de la esfera unidad que se repelen los unos a los otros en virtud de la ley de Coulomb. En 1904 J.J. Thomson expone el problema [F.R04] tras proponer el modelo atómico del  $plum\ pudding$ , basado en el conocimiento de la existencia de electrones con carga negativa, pero sin conocer las partículas sin carga eléctrica (los neutrones). El problema de Thomson admite la siguiente formulación

$$\min \mathcal{E}_1(\omega_n) = \min \sum_{i,j=1,i< j}^n \frac{1}{||x_i - x_j||}$$
 Thomson's problem

y se ha dado respuesta para los valores  $2 \le n \le 6$  y n=12. Cabe destacar que el caso n=5 ha sido probado recientemente [Sch13] a través de una compleja prueba computacional.

El problema cuando  $s \longrightarrow 0$  se conoce como el problema de Whyte, y fue propuesto por L.L. Whyte en 1952. En su artículo [Why52], Whyte lanza una pregunta, ¿nos ayudará el conocer las estructuras de puntos que minimizan la energía de Riesz cuando  $s \longrightarrow 0$  a comprender la estructura nuclear? Aunque todo se quedó en una conjetura, el problema de Whyte ha intentado resolverse desde entonces.

El problema recibe normalmente el siguiente enunciado:

$$\min \mathcal{E}_0(\omega_n) = \min \sum_{i,j=1, i < j}^n \ln \left( \frac{1}{||x_i - x_j||} \right)$$
 Whyte's problem

Dicho problema está resuelto para los casos  $2 \le n \le 6$  y n = 12; el caso n = 5 puede encontrarse resuelto en [DLT02], con una prueba completamente distinta a la del caso s = 1.

El problema opuesto, minimizar la energía de Riesz cuando  $s \to \infty$  se conoce como el problema de Tammes. Tammes era un botánico alemán que estudiaba la distribución de poros en los granos de polen. Su pregunta original era cuál era el mayor diámetro de n círculos iguales que pueden dibujarse en la superficie de una esfera con intersección nula entre ellos, cómo colocar los círculos para alcanzar dicho máximo y si esa forma de colocarlos es esencialmente única. Esta pregunta resulta equivalente a la siguiente.

$$\min \mathcal{E}_{s \longrightarrow \infty}(\omega_n) = \min \sum_{i,j=1,i < j}^{n} \frac{1}{||x_i - x_j||^s}$$
 Tammes problem

El problema de Tammes está resuelto para los casos  $2 \le n \le 12$  y n = 24, la solución para n = 5 se puede consultar en [BHS14]. Una forma alternativa de pensar en el problema de Tammes consiste en considerar el problema del minimal packing que tiene, por supuesto, su versión en la esfera y para la cual parece que la solución más acertada es la división en celdas hexagonales. Sin embargo, estas celdas no pueden ser solución para cualquier  $n \in \mathbb{Z}_+$ , y es por eso que necesitan de heptágonos y pentágonos para ser una malla.

Además de los problemas aquí descritos, existen muchos otros que tratar de la correcta distribución de puntos en la esfera. La pregunta es ¿correcta respecto a qué?

Así, cuando los puntos maximizan el producto de sus distancias mutuas se conocen como *puntos elípticos de Fekete*.

$$\underset{i,j=1,i< j}{\operatorname{argmax}} \prod_{i,j=1,i< j}^{n} ||x_i - x_j|| \qquad \textit{Elliptic Fekete points}$$

Se puede deducir fácilmente que el problema de maximizar el producto de las distancias mutuas es equivalente al problema de Whyte, pues

$$\min \mathcal{E}_0(\omega_n) = \min \sum_{i,j=1,i< j}^n \ln \left( \frac{1}{||x_i - x_j||} \right) = \min \left( -\ln \left( \prod_{i,j=1,i< j}^n ||x_i - x_j|| \right) \right)$$
$$= \max \left( \ln \left( \prod_{i,j=1,i< j}^n ||x_i - x_j|| \right) \right) = \max \prod_{i,j=1,i< j}^n ||x_i - x_j||.$$

De hecho, el problema número 7 de la lista de Smale consiste en encontrar puntos elípticos de Fekete en la esfera. Concretamente, el problema propone lo siguiente:

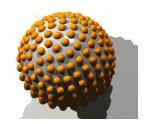
**0.1 Problema 7º** de la lista de Smale ([Sma98]). Sea  $\mathcal{E}(x_1,...,x_n) = -\sum_{i < j} \ln(||x_i - x_j||) \ y \ m_n = \min_{x_1,...,x_n \in \mathbb{S}} \mathcal{E}(x_1,...,x_n).$ 

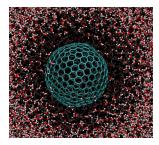
Encontrar  $X = (x_1, ..., x_n)$  tales que:

$$\mathcal{E}(X) - m_n \le c \ln(n)$$

con c una constante universal.

Una de las motivaciones de Smale para estudiar el problema de los puntos elípticos de Fekete es encontrar polinomios cuyos ceros estén bien condicionados, para más información, se recomienda [Bel15].





(b) Solución numérica del problema de

(a) Puntos bien distribuidos en una esfera. Tammes.

Figura 2: Distintas configuraciones de puntos en la esfera.

Evidentemente, todos estos problemas admiten soluciones iguales para cierto número de puntos, por ejemplo, la solución del problema de 5 puntos para  $s \longrightarrow 0$  es la misma solución que para s = 1; son parecidas para otros y completamente diferentes en algunos casos.

Por supuesto, el problema de colocar puntos en una superficie que minimicen cierta función no tiene porqué restringirse a la esfera, sino que podemos plantearnos el problema de los puntos bien distribuidos en practicamente cualquier variedad diferencial.

Tras realizar esta enumeración de problemas abiertos tan interesantes, nuestro objetivo será centrarnos en un único número de puntos. Vamos a estudiar como varía la energía de Riesz en una configuración formada por 5 puntos. En el reciente survey [BG15] encontramos un resumen del estado del arte del problema que transcribimos a continuación.

The smallest only partly resolved problem is the five point problem on  $\mathbb{S}^2$ . Five points cannot form a universally optimal system. Melnyk et al. identified two basic configurations: triangular

bi-pyramid is the putative energy minimising configuration for  $2 \le s \le 15,048077392...$  whereas for higher values of s it seems to be the square pyramid (with adjusted height); (...). Moreover, it is shown in that there are sequences of s-energy minimising configurations that tend to a square pyramid best packing configuration as  $s \to \infty$ . In general, five point problem is a difficult problem to analyse rigorously. Recently, the papers (for the coulomb case s = 1 and for s = 2) and (for sum of distances, s = -1) provided computer-assisted proofs that the triangular bi-pyramid is optimal, whereas in the logarithmic case a conventional proof was also given.

De la lectura de este párrafo, podemos concluir que un problema de tan fácil enunciado es, en realidad, de muy difícil resolución. Como dice el autor, el problema sólo cuenta de momento con soluciones parciales y aproximadas, salvo tres excepciones:  $s \longrightarrow 0$ , s=1 y s=2, para las que conocemos la solución real. A lo largo de este trabajo estudiaremos las diferentes soluciones propuestas e intentaremos probar algunos resultados relacionados.

Durante la elaboración de este trabajo, nos hemos visto varias veces necesitados de herramientas computacionales. Para resolver estos problemas, hemos implementado todos los métodos que han sido necesarios en el programa SAGE. Adjuntamos todos esos métodos en el Anexo 1.

# Capítulo 1

# **Preliminares**

Comenzamos el trabajo haciendo un breve repaso de conceptos y resultados necesarios para el posterior desarrollo del mismo. El cometido principal de este primer capítulo no es tanto mostrar una materia nueva, ya que todo lo aquí expuesto se presupone estudiado en un máster en matemáticas; sino más bien, presentar y unificar notación y recordar caracterizaciones que podrán sernos útiles más adelante. Por este motivo, no realizaremos ninguna demostración de los resultados aquí expuestos, sino que en su lugar, daremos uno o dos libros de referencia para cada sección.

### 1.1. Un poco de geometría diferencial

Para esta sección, hemos tomado como libro de referencia el de Guillemin-Pollack [GP10], aunque también puede servir el apéndice sobre geometría diferencial que encontraremos en [BC13]. Comenzamos la sección recordando la definición de variedad diferenciable. Para entenderla, primero tenemos que conocer los conceptos de carta y atlas.

- **1.1 Definición.** Dado un espacio topológico M, llamaremos carta de dimensión m en M a un par  $(U, \Phi)$  donde U es un abierto de M y  $\Phi : U \to \mathbb{R}^m$  es una aplicación que verifica que  $\Phi(U)$  es un abierto y  $\Phi$  es un homeomorfismo.
- **1.2 Definición.** Un atlas es una familia de cartas  $\{(U_i, \Phi_i)\}_i$   $i \in I$  tal que:
  - Cubren el espacio por completo,  $\bigcup_i U_i = M$ .
  - Si el dominio de dos cartas se superpone,  $U_{i,j} = U_i \cap U_j \neq \emptyset$  (con  $i \neq j$ ), entonces ambas cartas son compatibles entre sí: la función  $\Phi_{i,j} = \Phi_i \Phi_j^{-1} : \Phi_j(U_{i,j}) \longrightarrow \Phi_i(U_{i,j})$  es un homeomorfismo entre abiertos de  $\mathbb{R}^m$ .

Exigiendo que las funciones de transición  $\Phi_{ij}$  sean difeomorfismos de clase  $\mathcal{C}^k$ , obtendríamos un atlas de clase  $\mathcal{C}^k$ .

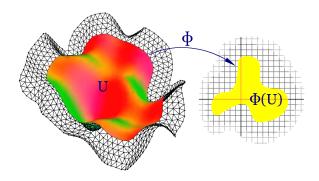


Figura 1.1: Representación de una carta.

Ahora sí, podemos presentar la definición de variedad diferencial.

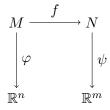
**1.3 Definición.** Una variedad diferencial M de dimensión n es un espacio topológico Haussdorf que tiene una base numerable, junto con una clase de equivalencia de atlas n-dimensionales y tal que los cambios de carta son difeomorfismos entre abiertos de  $\mathbb{R}^n$ . Decimos que n es la dimensión de M.

Si los atlas están construidos sobre los complejos, entonces además de diferenciables necesitamos que sean holomorfos y diremos que la *variedad diferenciable* es *compleja*.

Las variedades diferenciales verifican ciertas propiedades, como que si M y N son variedades diferenciales, también lo es  $M \times N$ , y pueden clasificarse en orientables y no orientables, (las variedades diferenciales complejas siempre son orientables).

Asociada a una definición de variedad abstracta, tenemos también una definición de aplicación diferenciable.

**1.4 Definición.** Dadas dos variedades diferenciables M y N, sean  $(U,\varphi)$  una carta de un atlas de M y  $(V,\psi)$  una carta de un atlas de N. Entonces decimos que una aplicación  $f:M\longrightarrow N$  es diferenciable si  $f_{U,V}:\psi\circ f\circ \varphi^{-1}:\varphi(U)\longrightarrow \phi(V)$  es diferenciable para todas las cartas del atlas de M y todas las cartas del atlas de N, y esto ocurre para todos los atlas de M y todos los atlas de N.



Una vez que sabemos qué es una aplicación diferenciable, vamos a presentar la siguiente noción: una subvariedad M de el espacio euclídeo  $\mathbb{R}^n$  es un subconjunto difeomorfo a  $\mathbb{R}^k$  localmente en torno a cualquier punto de M. Dicho de manera más formal:

- **1.5 Definición.** Sea  $M \subset \mathbb{R}^n$ , decimos que M es una subvariedad k-dimensional si, para todo  $x \in M$  existe un difeomorfismo  $\varphi$  de un entorno abierto de  $x, U \subset \mathbb{R}^n$  en un entorno abierto de  $0, V \subset \mathbb{R}^n$  tal que  $\varphi(M \cap U) = (\mathbb{R}^k \times 0) \cap V$ .
- **1.6 Definición.** Sea M una variedad,  $p \in M$ ,  $\gamma : \mathbb{R} \longrightarrow M$  una aplicación diferenciable tal que  $\gamma(0) = p$  que parametriza una curva en M que pasa por p. Entonces un  $vector\ tangente$  a M en p viene dado por

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial \gamma}{\partial t}(0)$$

El espacio tangente a M en p es el conjunto de todos los vectores tangentes a M en p y se denota por  $T_pM$ , es un subespacio vectorial de M de dimensión k.

Dadas dos variedades diferenciables M y N,  $(U, \varphi)$ , una aplicación  $f: M \longrightarrow N$  diferenciable, su diferencial  $Df(x): T_xM \to T_{f(x)}N$ , y dos puntos  $x \in M$ ,  $y \in N$ , diremos que:

- x es un punto regular de f si rank  $Df(x) = \dim(N)$ .
- y es un valor regular de f si para todo  $x \in f^{-1}(y)$ , x es un punto regular de f.
- y es un valor crítico de f si no es un valor regular.

Inmediatamente de las definiciones se deduce que si  $\dim(M) < \dim(N)$  entonces f no tiene puntos regulares; además, estas definiciones nos permiten enunciar uno de los teoremas más importantes de Geometría Diferencial.

**1.7 Teorema del valor regular.** Sean M y N  $variedades diferenciales con <math>\dim(M) = m \ge n = \dim(N)$ ,  $f: M \longrightarrow N$  una aplicación diferenciable,  $y \in f(M)$  un valor regular de f. Entonces  $f^{-1}(y)$  es una subvariedad diferenciable de M de dimensión m-n y su espacio tangente <math>a viene definido por  $T_x f^{-1}(y) = \ker Df(x)$ .

Hemos presentado las variedades diferenciales desde dos puntos de vista: como un subconjunto de  $\mathbb{R}^n$  y de forma abstracta, sin embargo, por el teorema del embebimiento de Whitney [Ada93, p. 53] sabemos que toda variedad diferencial abstracta se puede expresar como una subvariedad de  $\mathbb{R}^n$ .

Si además de esta estructura diferenciable, M tiene un producto escalar definido en cada espacio tangente que varía de forma diferenciable con el

punto, se dice que M es una variedad Riemanniana. En este caso, podemos dotar a la diferencial de una norma

$$||D\varphi(x)|| = \max_{||\dot{x}||=1} ||D\varphi(x)\dot{x}||.$$

Otros resultados importantes son los teoremas de la función implícita y de la función inversa, que también utilizaremos a lo largo de este trabajo.

El teorema de la función implícita nos permite desarrollar un método para hallar raíces de polinomios conocido como *método de homotopía* que hace uso de una construcción llamada *variedad solución*. Utilizaremos dicha construcción varias veces a lo largo de nuestro trabajo, así que vamos a explicar brevemente en qué consiste, para el caso de polinomios. Comenzamos recordando la definición de polinomio homogéneo.

**1.8 Definición.** Sea f un polinomio de  $\mathbb{C}[x]$ ,  $f = \sum_{i=0}^{d} a_i x^i$ , entonces el polinomio homogéneo asociado a f en  $\mathbb{C}[x;z]$  es  $h = \sum_{i=0}^{d} a_i x^i z^{d-i}$ .

Al igual que lo hemos hecho en una variable, este mismo proceso se puede realizar en  $\mathbb{C}[x_1,...,x_n]$ , completando con una variable cada monomio hasta que el grado de cada monomio sea igual que el grado total del polinomio. Denotaremos por  $\mathcal{H}_n$  al conjunto de polinomios homogéneos de grado n.

Podemos presentar ahora la noción de variedad solución.

**1.9 Definición.** Sea  $\mathcal{H}_m$  el conjunto de polinomios homogéneos de grado m y sean  $Q: \mathcal{H}_m \times \mathbb{C}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^n$  de clase  $\mathcal{C}^{\infty}$ ,  $f, f_0 \in \mathcal{H}_m$  y  $\zeta, \zeta_0 \in \mathbb{C}^2$  tales que  $f(\zeta) = 0 = f_0(\zeta_0)$ . Consideramos el conjunto de ceros asociado al problema:

$$\mathcal{V} = \{(x,y) \in \mathcal{H}_m \times \mathbb{C}^2 : Q(x,y) = 0\} \subset \mathcal{H}_m \times \mathbb{C}^2$$

es una variedad de dimensión n+1 y recibirá entonces el nombre de variedad solución.

Si  $\frac{\partial Q}{\partial \zeta}(f,\zeta)$  tiene rango n para todo  $(f,\zeta) \in \mathcal{V}$ , entonces, el teorema de la función implícita nos dice que para todo f suficientemente próximo a  $f_0$  existe un único cero  $\zeta$  de f próximo a  $\zeta_0$  y además  $\zeta$  es una función diferenciable.

### 1.2. Condicionamiento de problemas numéricos

En esta segunda sección realizaremos una introducción al condicionamiento de problemas numéricos. Nos adentramos de esta forma en el mundo del análisis numérico y el cálculo computacional. Para ello, utilizaremos un

único libro, [BC13]. Como ya mencionamos en la introducción, una de las motivaciones de Smale para estudiar el problema de los puntos elípticos de Fekete es encontrar polinomios cuyos ceros estén bien condicionados; esta introducción nos ayudará a comprender qué significa exactamente estar bien condicionado.

Cuando hablamos del condicionamiento de problemas numéricos podemos hablar de dos tipos, el condicionamiento absoluto y el condicionamiento relativo. A continuación, vamos a definirlos.

- **1.10 Definición.** Sean X, Y dos espacios vectoriales de dimensión finita sobre  $\mathbb{R}$  o  $\mathbb{C}$  y D un subconjunto abierto de X, sea  $\varphi : D \longrightarrow Y$ . En estas condiciones podemos definir:
  - Número de condición relativo:

$$\operatorname{cond}^{\varphi}(x) = \lim_{\delta \to 0} \sup_{\operatorname{RelError}(x) \le \delta} \frac{\operatorname{RelError}(\varphi(x))}{\operatorname{RelError}(x)}$$

donde, por Rel Error(x) entendemos el error relativo de <br/> x, Rel Error(x) =  $\frac{|x-\bar{x}|}{|x|}$ 

• Número de condición absoluto:

$$\operatorname{acond}^{\varphi}(x) = \lim_{\delta \to 0} \sup_{||\bar{x} - x|| \le \delta} \frac{||\varphi(\bar{x}) - \varphi(x)||}{||\bar{x} - x||}$$

Claramente, estas dos cantidades están relacionadas.

**1.11 Proposición.** Se verifica que cond<sup> $\varphi$ </sup> $(x) = acond^{\varphi}(x) \frac{||x||}{||\varphi(x)||}$ .

Además, existe una caracterización de los números de condición cuando trabajamos con aplicaciones diferenciales.

**1.12 Proposición.** Sean X, Y dos espacios vectoriales de dimensión finita sobre  $\mathbb{R}$  o  $\mathbb{C}$  y D un subconjunto abierto de X, sea  $\varphi : D \longrightarrow Y$  una aplicación diferenciable. Entonces se verifica que

$$\operatorname{acond}^{\varphi}(x) = ||D\varphi(x)||$$
$$\operatorname{cond}^{\varphi}(x) = ||D\varphi(x)|| \frac{||x||}{||\varphi(x)||}$$

Nota. Cabe destacar que el condicionamiento depende fuertemente de la norma elegida.

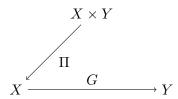
Consideremos ahora la variedad solución en la línea de la vista en el apartado anterior,

$$V = \{(x, y) \in X \times Y : F(x, y) = 0\}$$

y definamos el conjunto

$$\Sigma' = \{(x, y) \in \mathcal{V} : \operatorname{rank} \frac{\partial F}{\partial y}(x, y) < n\}.$$

Sean  $(x_0, y_0) \in \mathcal{V} \setminus \Sigma'$ ,  $\Pi : X \times Y \longrightarrow X$  la proyección en la primera componente, U un entorno del punto  $x_0$  en  $X y U' = \Pi^{-1}(U)$  un entorno de  $(x_0, y_0)$  en  $X \times Y$ . Entonces por el teorema de la función inversa  $\Pi : U' \cap V \longrightarrow U$  es biyectiva y su inversa viene dada por  $\Pi^{-1}(x) = (x, G(x))$ .



En estas condiciones, el condicionamiento del problema en el punto x viene dado por  $DG: X \longrightarrow Y$ ,  $DG(x_0)$  es la matriz de condición en el punto  $x_0$  y, al igual que antes, el número de condición viene dado por:

$$\operatorname{acond}^{\varphi}(x) = ||DG(x)||$$
$$\operatorname{cond}^{\varphi}(x) = ||DG(x)|| \frac{||x||}{||G(x)||}$$

El número de condición para todos los puntos  $(x,y) \in \Sigma'$  será  $+\infty$ .

Nota. Dado F, por el teorema de la función implícita,

$$DG(x) = -\left(\frac{\partial F}{\partial y}(x,y)\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial x}(x,y).$$

En su artículo [DS91], Shub y Smale definen un cierto número de condición asociado a un polinomio para medir la estabilidad y la complejidad de los algoritmos para calcular raíces de polinomios. Antes de presentar ese número de condición, vamos a dotar al anillo de polinomios  $\mathbb{C}[x]$  de una norma conveniente.

**1.13 Definición.** Sea  $f = z^n + a_{n-1}z^{n-1} + ... + a_1z + a_0$  un polinomio de  $\mathbb{C}[x]$ , entonces definimos la norma de Weyl o norma de Bombieri de f por:

(1.1) 
$$||f||^2 = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j}^{-1} |a_j|^2$$

Como podemos observar, la norma de Weyl da más peso a los coeficientes de los extremos. A partir de este momento, y salvo que indiquemos lo contrario, siempre que trabajemos en el anillo de polinomios  $\mathbb{C}[x]$ , éste estará dotado de la norma de Weyl, a la que denotaremos de la forma usual ||f||.

**1.14 Definición.** Dado un polinomio homogéneo de grado n en  $\mathbb{C}[x;z]$  dotado de la norma de Weyl-Bombieri (1.1)

$$h(x,z) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k z^{n-k}, \quad a_k \in \mathbb{C}, \quad a_n \neq 0$$

y una de sus raíces  $\zeta \in \mathbb{P}^2_{\mathbb{C}}$ , entonces el *número de condición* de h en  $\zeta$  viene definido por

$$\mu(h,z) = \left\{ \begin{array}{ll} \infty & \text{si } \not \exists (Dh(\zeta)|_{\zeta^{\perp}})^{-1} \\ \sqrt{n} & ||h|| & ||(Dh(\zeta)|_{\zeta^{\perp}})^{-1}|| & ||\zeta||^{n-1} \end{array} \right. \quad \text{si } \not \exists (Dh(\zeta)|_{\zeta^{\perp}})^{-1}$$

donde  $Dh(\zeta)|_{\zeta^{\perp}}$  es la restricción de la diferencial al espacio ortogonal tangente a  $\mathcal{V}$  en  $\zeta$ .

También podemos definir el número de condicionamiento asociado a un polinomio, sin tener en cuenta una raíz particular.

**1.15 Definición.** Definimos  $\mu(h)$  como el máximo número de condicionamiento en todas sus raíces:

$$\mu(h) = \max_{\zeta \in \mathbb{P}^2_{\mathbb{C}}: h(\zeta) = 0} \mu(h,\zeta)$$

De igual manera, podemos definir un número de condicionamiento para polinomios no homogéneos con raíces en  $\mathbb{C}$ .

**1.16 Definición.** Sea  $f \in \mathbb{C}[t]$  un polinomio de grado n dotado de la norma de Weyl-Bombieri (1.1)

$$f(t) = \sum_{k=0}^{n} a_k t^k, \quad a_k \in \mathbb{C}, \quad a_n \neq 0$$

y una de sus raíces  $z \in \mathbb{C}$ , entonces el número de condición de f en z viene definido por

$$\mu(f,z) = \mu(h,(z,1)); \qquad \mu(f) = \max_{z \in \mathbb{C}: f(z) = 0} \mu(f,z)$$

donde h es el polinomio homogeneizado de f.

Tras realizar ciertos cálculos, podemos concluir (ver [Bel15]) lo siguiente.

**1.17 Proposición.** Sea  $f \in \mathbb{C}[t]$  un polinomio de grado n dotado de la norma de Weyl-Bombieri (1.1) y  $z \in \mathbb{C}$  una de sus raíces, entonces el número de condición de f en z está definido por

(1.2) 
$$\mu(f,z) = \frac{\sqrt{n(1+|z|^2)^{\frac{n-2}{2}}}}{|f'(z)|}||f||$$

Mostraremos una última característica útil de el número de condición.

**1.18 Proposición.** Sean  $h \in \mathbb{C}[x]$ ,  $z \in \mathbb{C}$  raíz de h, y  $a, b \in \mathbb{C}$ ,  $a \neq 0 \neq b$ . Entonces se verifica:

$$\mu(ah, bz) = \mu(h, z)$$

Pero lo que realmente hace de  $\mu$  una cantidad interesante es la siguiente característica. Sean  $h \in \mathcal{H}_n$ ,  $z \in \mathbb{P}^2_{\mathbb{C}}$  y sea  $\mathcal{V} = \{(h, z) : h(z) = 0\} \subset \mathcal{H}_n \times \mathbb{P}^2_{\mathbb{C}}$  la variedad solución.

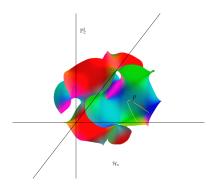
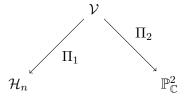


Figura 1.2: Representación de la variedad solución  $\mathcal{V}$ .

Consideremos también las proyecciones:



1.19 Proposición. En las condiciones anteriores se verifica que:

$$\Pi_1$$
 es invertible en  $(h,z) \iff \mu(h,z) < \infty$ 

$$Y \ además, \ ||D(\Pi_2 \circ \Pi_1^{-1})(h)|| = \frac{\mu(h,z)}{\sqrt{n}}$$

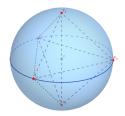
Esta proposición tiene un claro sentido geométrico, si  $\mu(h,z)$  es muy grande, entonces z puede variar mucho al variar ligeramente h. Si, por el contrario  $\mu(h,z)$  está acotado, por ejemplo por  $n^2$ , entonces z varía más lentamente.

# Capítulo 2

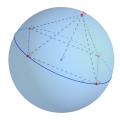
# Estudio de dos modelos de configuración

#### 2.1. Introducción

A lo largo de este capítulo estudiaremos dos modelos conocidos para minimizar la s-energía con n=5, dos construcciones a las que llamaremos, por razones obvias, estructura bipiramidal y piramidal.



(a) Estructura bipiramidal



(b) Estructura piramidal

Dichas estructuras son las soluciones para el problema de Whyte (cuando  $s \to 0$ ) y el problema de Tammes (cuando  $s \to \infty$ ), respectivamente. Además, se ha probado que la estructura bipiramidal también es solución para el problema de Thomson (s = 1) y para s = 2.

Nuestro objetivo consiste en minimizar la s-energía cuando s varía entre  $0 \text{ y} + \infty$ . Para ello, estudiaremos el valor de la s-energía mínima cuando los puntos siguen una estructura piramidal y una estructura bipiramidal, compararemos cuál de las dos estructuras es mejor para cada s e intentaremos probar si efectivamente la s-energía mínima se alcanza siempre en alguna de esas dos estructuras o si por el contrario, existe otra estructura que minimice la s-energía para un s concreto.

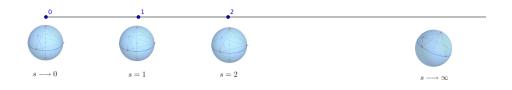


Figura 2.2: Esquema del estado del arte del problema.

### 2.2. Estudio del modelo bipiramidal

Comenzamos estudiando la estructura bipiramidal.

**2.1 Definición.** Diremos que los puntos  $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5) \in \mathbb{S}^2$  se encuentran en posición *bipiramidal* si dos de ellos (aquí tomaremos  $P_1$  y  $P_5$ ) están situados en los polos y los otros tres forman un triángulo equilátero en el ecuador.

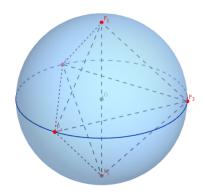


Figura 2.3: Estructura bipiramidal.

Si los puntos se encuentran distribuidos en posición bipiramidal, las distancias entre dos puntos distintos vienen dadas por:

$$p = d(P_1, P_5) = 2$$

$$q = d(P_1, P_2) = d(P_1, P_3) = d(P_1, P_4) = d(P_2, P_5) = d(P_3, P_5) = d(P_4, P_5) = \sqrt{2}$$

$$r = d(P_2, P_3) = d(P_2, P_4) = d(P_3, P_4) = \sqrt{3}$$

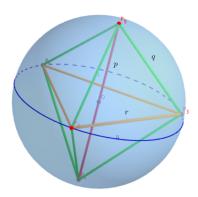


Figura 2.4: Distintas distancias de la estructura bipiramidal.

Luego, la energía de Riesz asociada a una estructura bipiramidal es la siguiente:

$$\mathcal{E}_s(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5) = \sum_{i=1, i < j}^5 \frac{1}{||P_i - P_j||^s} = \frac{1}{2^s} + \frac{6}{\sqrt{2}^s} + \frac{3}{\sqrt{3}^s}$$

Notación. A partir de ahora denotaremos por  $\mathcal{E}_s^{\Diamond}$  a la energía de Riesz asociada a una estructura bipiramidal.

Para observar como varía la energía de Riesz dependiendo de s no tenemos más que hacer variar s en  $(0, \infty)$  y obtenemos la gráfica 2.5.

**2.2 Proposición.**  $\mathcal{E}_s^{\Diamond}$  es estrictamente decreciente.

Demostración.Basta con comprobar que la derivada de  $\mathcal{E}_s^\lozenge$  es negativa.

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\Diamond}}{\partial s} = \frac{-\ln(2)}{2^s} - \frac{3\ln(2)}{\sqrt{2}^s} - \frac{3\ln(3)}{2\sqrt{3}^s} < 0$$

**2.3 Corolario.**  $\mathcal{E}_s^{\Diamond}$  pertenece al intervalo  $(\mathcal{E}_{\infty}^{\Diamond}, \mathcal{E}_0^{\Diamond}) = (0, 10)$ .

### 2.3. Estudio del modelo piramidal

A continuación, estudiaremos la estructura piramidal.

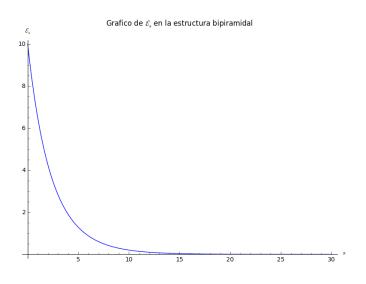


Figura 2.5: Gráfico de  $\mathcal{E}_s^{\Diamond}$  para  $s \in (0, 30)$ .

**2.4 Definición.** Diremos que los puntos  $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5) \in \mathbb{S}^2$  se encuentran en posición *piramidal* (con altura h) si cuatro de ellos forman un cuadrado y el otro punto pertenece a la recta perpendicular al plano por el centro del cuadrado definido por dicho cuadrado y tiene altura h sobre el mismo.

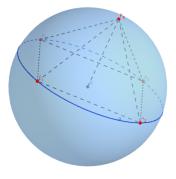


Figura 2.6: Estructura piramidal con h = 1.

En este caso, las distancias vienen dadas por:

$$p = d(P_1, P_2) = d(P_1, P_3) = d(P_1, P_4) = d(P_1, P_5) = \sqrt{2h}$$

$$q = d(P_2, P_3) = d(P_3, P_4) = d(P_4, P_5) = d(P_2, P_5) = \sqrt{2h(2-h)}$$

$$r = d(P_2, P_4) = d(P_3, P_5) = 2\sqrt{h(2-h)}$$

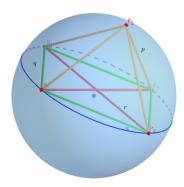


Figura 2.7: Distintas distancias de la estructura piramidal con h = 1.

Y la energía de Riesz asociada a una estructura piramidal de altura h resulta:

$$\mathcal{E}_s(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5) = \sum_{i=1, i < j}^{5} \frac{1}{||P_i - P_j||^s} = \frac{4}{\sqrt{2h^s}} + \frac{4}{\sqrt{2h(2-h)^s}} + \frac{2}{(2\sqrt{h(2-h)})^s}$$

Notación. Abusando ligeramente de la notación, a partir de ahora denotaremos por  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  a la energía de Riesz asociada a una estructura piramidal de altura h.

Notemos que el denominador de  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  toma el mismo valor que el de  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(2-h)$ ; sin embargo, el valor del numerador es mayor si  $h \in (0,1)$  que si  $h \in (1,2)$ . Como queremos minimizar la función  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  para cada s, podemos restringirnos a tomar  $h \in (1,2)$ .

La primera pregunta que nos hacemos es:

**2.5 Problema.** Para un s fijo, ¿existe un único  $h_s \in (1,2)$  que minimice  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$ ?

#### 2.3.1. Altura de la pirámide

Para estudiar la unicidad, vamos a estudiar la convexidad de la función de la energía de Riesz  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  respecto a la variable h (es decir, para un s fijo).

**2.6 Proposición.** Para cada  $s \in (0, \infty)$  fijo, la función  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  es convexa, es más,  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2} > 0$ .

Demostración. Consideremos las siguientes funciones:

$$\mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}(h) = \frac{4}{\sqrt{2h^s}}$$

$$\mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}(h) = \frac{4}{\sqrt{2h(2-h)^s}}$$

$$\mathcal{E}_{s,3}^{\triangle}(h) = \frac{2}{(2\sqrt{h(2-h)})^s}$$

Todas son de clase  $C^{\infty}$  en (1,2), así que podemos estudiar el signo de su segunda derivada.

$$\begin{split} \mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}(h) &= 4(2h)^{\frac{-s}{2}} \\ \frac{\partial \mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}}{\partial h} &= -4s(2h)^{\frac{-s}{2}-1} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}}{\partial h^2} &= 8s(\frac{s}{2}+1)(2h)^{\frac{-s}{2}-2} \end{split}$$

Como cada uno de los factores de  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}}{\partial h^2}(h)$  es positivo para todo  $s \in (0, \infty)$  y para todo  $h \in (1,2)$ , podemos concluir que  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}}{\partial h^2} \geq 0 \ \forall h \in (1,2)$  y por lo tanto,  $\mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}(h)$  es convexa.

$$\begin{split} \mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}(h) &= 4(2h(2-h))^{\frac{-s}{2}} \\ \frac{\partial \mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}}{\partial h} &= 2s(4h-4)(2h(2-h))^{\frac{-s}{2}-1} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}}{\partial h^2} &= 8s(2h(2-h))^{\frac{-s}{2}-1} + 2s(4h-4)^2(\frac{s}{2}+1)(2h(2-h))^{\frac{-s}{2}-2} \end{split}$$

Al igual que en el caso anterior, cada uno de los factores es positivo y por lo tanto,  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}}{\partial h^2} \geq 0 \ \, \forall h \in (1,2)$ , luego  $\mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}(h)$  también es convexa.

$$\mathcal{E}_{s,3}^{\triangle}(h) = 2(4h(2-h))^{\frac{-s}{2}}$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{s,3}^{\triangle}}{\partial h} = s(8h-8)(4h(2-h))^{\frac{-s}{2}-1}$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_{s,3}^{\triangle}}{\partial h^2} = 8s(4h(2-h))^{\frac{-s}{2}-1} + s(8h-8)^2(\frac{s}{2}+1)(4h(2-h))^{\frac{-s}{2}-2}$$

Por la misma razón que en los otros dos casos,  $\mathcal{E}_{s,3}^{\triangle}(h)$  también es convexa. Como  $\mathcal{E}_{s}^{\triangle}(h) = \mathcal{E}_{s,1}^{\triangle}(h) + \mathcal{E}_{s,2}^{\triangle}(h) + \mathcal{E}_{s,3}^{\triangle}(h)$  es la suma de tres funciones convexas,  $\mathcal{E}_{s}^{\triangle}(h)$  también es convexas.

#### 2.7 Proposición.

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = (2h)^{\frac{-s}{2} - 1} \left[ (2s)(4h - 4)(2 - h)^{\frac{-s}{2} - 1} (1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) - 4s \right]$$

Demostración.

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = -4s(2h)^{\frac{-s}{2}-1} + 2s(4h-4)(2h(2-h))^{\frac{-s}{2}-1} + 2s(4h-4)(4h(2-h))^{\frac{-s}{2}-1}$$

$$= -4s(2h)^{\frac{-s}{2}-1} + 2s(4h-4)(2h)^{\frac{-s}{2}-1}(2-h)^{\frac{-s}{2}-1}(1+2^{\frac{-s}{2}-1})$$

$$= (2h)^{\frac{-s}{2}-1} \left[ (2s)(4h-4)(2-h)^{\frac{-s}{2}-1}(1+2^{\frac{-s}{2}-1}) - 4s \right]$$

**2.8 Corolario.** Para cada  $s \in (0, \infty)$ ,  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  alcanza un único mínimo, que denotaremos por  $h_s$ , en (1,2). Es más,  $h_s \in (1,\frac{4}{3})$ .

Demostración. En el resultado anterior hemos visto que  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  es convexa para  $h \in (1,2)$ , luego estudiar la existencia de un h que minimice  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  en (1,2) equivale a estudiar la existencia de una raíz de  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}$  con  $h \in (1,2)$ .

Para ello, veremos que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(1) < 0 \ \forall s \in (0, +\infty)$  y que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(\frac{4}{3}) > 0$   $\forall s \in (0, +\infty)$ . Como  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}$  es continua, por el teorema de Bolzano podemos concluir que la función tiene un cero en  $\left(1, \frac{4}{3}\right) \subset (1, 2)$ , que al tratarse  $\mathcal{E}_s^{\triangle}$  de una función convexa es, además, el único mínimo de  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}$ .

Consideremos la derivada de la energía de Riesz respecto de h, por la Proposición 2.7 sabemos que es

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = (2h)^{\frac{-s}{2} - 1} \left[ (2s)(4h - 4)(2 - h)^{\frac{-s}{2} - 1} (1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) - 4s \right]$$

Entonces tenemos que:

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(1) = \frac{-4s}{2\sqrt{2}^s}$$

Luego para todo  $s \in (0, \infty), \frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(1) < 0.$ Calculemos ahora  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(\frac{4}{3}).$ 

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} \left( \frac{4}{3} \right) = \frac{3}{8}^{\frac{s}{2}+1} (4s) \left[ 2 \left( \frac{3}{2} \right)^{\frac{s}{2}+1} + 2 \left( \frac{3}{4} \right)^{\frac{s}{2}+1} - 1 \right]$$

Por un lado, dado  $0 < s < \infty$  tenemos que  $\frac{3}{8}^{\frac{s}{2}+1}(4s) > 0$ ; además,  $(\frac{3}{2})^{\frac{s}{2}+1} > 1$  y  $2(\frac{3}{4})^{\frac{s}{2}+1}) > 0$ , luego la expresión contenida en el corchete es positiva. Tenemos entonces que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^\triangle}{\partial h}(\frac{4}{3}) > 0$  para todo  $0 < s < \infty$ , con lo que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^\triangle}{\partial h}(\frac{4}{3}) > 0$  para todo  $s \in (0,\infty)$ .

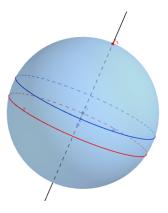


Figura 2.8: Intervalo en el que varía h(s) representado en la esfera unidad.

Nota. Para calcular dicho mínimo, no tenemos más que utilizar algún método de aproximación de ceros, nosotros hemos utilizado un método de bisección implementado en SAGE que mostramos en el Anexo 1.

En los dos gráficos de la figura 2.9 podemos observar cómo  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(h)$  tiene una raíz comprendida entre 1 y  $\frac{4}{3}$ . Es más, el comportamiento de  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(h)$  en los ejemplos que hemos escogido nos marca una clara tendencia: cuando  $s \longrightarrow 0$  las raíces se van aproximando a  $\frac{5}{4}$ . Sin embargo, cuando  $s \longrightarrow \infty$  entonces las raíces se aproximan a 1, o lo que es lo mismo, la altura de la pirámide tiende a 1, lo cual concuerda con los resultados numéricos obtenidos en [BHS14] para el problema de Tammes.

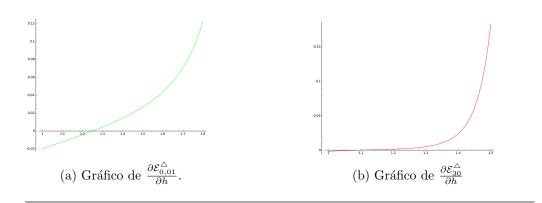


Figura 2.9: Función  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^\triangle}{\partial h}$  para distintos valores de s.

Definimos entonces la función h(s) que a cada  $s \in (0, \infty)$  le hace corresponder  $h_s$ .

**2.9 Definición.** Sea  $s \in (0, \infty)$ , definimos entonces la función

$$h: (0, \infty) \longrightarrow \left(1, \frac{4}{3}\right)$$
 $s \mapsto h_s$ 

En la figura 2.10 dibujamos la gráfica de h(s) para  $s \in (0, 30)$ .

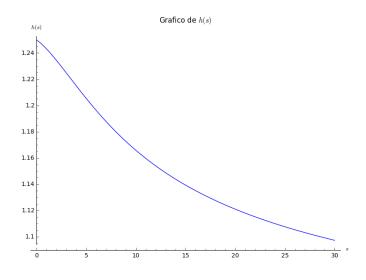


Figura 2.10: Gráfico de la función h(s) para  $s \in (0, 30)$ .

Una vez que tenemos h(s) acotado, vamos a demostrar la continuidad

de h(s). Para ello, utilizaremos el método de la variedad solución explicado en los preliminares.

#### 2.10 Definición. Consideremos la función

$$Q: \left(1, \frac{4}{3}\right) \times (0, \infty) \longrightarrow \mathbb{R}$$
$$(h, s) \mapsto Q(h, s) = \frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(h, s)$$

y la variedad solución  $\mathcal{V} = \{(h,s) : Q(h,s) = 0\} \subset (1,\frac{4}{3}) \times (0,\infty).$ 

**2.11 Proposición.** 
$$\mathcal{V}$$
 es una variedad  $\mathcal{C}^{\infty}$  y  $T_{(h,s)}\mathcal{V} = Span \left(\frac{-\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}, \frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2}\right)$ .

Demostración. Por un lado tenemos que  $\left(1,\frac{4}{3}\right)\times\left(0,\infty\right)$  es una variedad diferencial  $\mathcal{C}^{\infty}$  de dimensión 2, y  $\mathbb{R}$  una variedad diferencial  $\mathcal{C}^{\infty}$  de dimensión 1. Además,

$$Q: \left(1, \frac{4}{3}\right) \times (0, \infty) \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$(h, s) \mapsto Q(h, s)$$

es un difeomorfismo cuyo gradiente

$$\nabla Q = \left(\frac{\partial Q}{\partial h}, \frac{\partial Q}{\partial s}\right) = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{E}^{\triangle}}{\partial h^2}(h, s), \frac{\partial^2 \mathcal{E}^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h, s)\right)$$

no se anula nunca, pues  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}^{\triangle}}{\partial h^2}(h,s) > 0$  para todo  $h \in (1,\frac{4}{3})$  por la Proposición 2.6, y en concreto,  $\nabla Q \neq (0,0)$  para (h(s),s) para todo  $s \in (0,\infty)$ . Luego en particular, rank  $DQ(h(s),s) = 1 = \dim(\mathbb{R})$  y por lo tanto, (h(s),s) es un punto regular de Q. Como  $(h(s),s) = Q^{-1}(0)$ , en particular 0 es un valor regular de  $\mathbb{R}$ .

Podemos aplicar entonces el Teorema del valor regular 1.7 y tenemos que  $\mathcal{V}$  es una subvariedad diferencial  $\mathcal{C}^{\infty}$  de  $\left(1, \frac{4}{3}\right) \times (0, \infty)$  de dimensión 1. Además,

$$T_{(h,s)}\mathcal{V} = \ker DQ(h,s)$$

$$= \{(u,v) \text{ tal que } DQ(h,s)(u,v) = 0\}$$

$$= \{(u,v) \text{ tal que } \langle (u,v), \nabla Q \rangle = 0\}$$

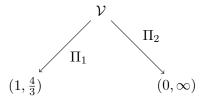
$$= \operatorname{Span} \left(\frac{-\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}, \frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2}\right).$$

#### 2.12 Proposición. La función

$$h:(0,\infty)\longrightarrow (1,\frac{4}{3})$$
  
 $s\mapsto h_s$ 

 $es \ \mathcal{C}^{\infty}.$ 

Demostración. Sabemos que la variedad  $\mathcal{V}$  definida anteriormente es una variedad  $\mathcal{C}^{\infty}$  y tenemos la siguiente construcción



Consideremos la proyección  $\Pi_2: \mathcal{V} \longrightarrow (0, \infty)$  que a cada (h, s) lleva a s. Veamos que la aplicación  $D\Pi_2: T_{(h,s)}\mathcal{V} \longrightarrow T_s(0, \infty)$  es un isomorfismo lineal.

$$D\Pi_2:\left(\frac{-t\partial^2\mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h\partial s}, \frac{t\partial^2\mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2}\right) \longrightarrow T_s(0, \infty) \equiv \mathbb{R}$$

es un isomorfismos si, y sólo si la segunda componente es no nula. De nuevo utilizaremos el hecho de que  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}^{\triangle}}{\partial h^2}(h,s) > 0$  para todo  $h \in (1,\frac{4}{3})$  y por lo tanto,  $D\Pi_2$  es un isomorfismo.

Así que podemos aplicar el teorema de la función inversa y sabemos que existe un entorno de  $(h,s) \in \mathcal{V}$ , denotado U tal que  $\Pi_2$  restringido a U es un difeomorfismo  $\mathcal{C}^{\infty}$  lineal, luego tiene sentido hablar de  $\Pi_2^{-1}(s) = h(s)$ , como  $\Pi_2^{-1}$  es un difeomorfismo, en particular h(s) es  $\mathcal{C}^{\infty}$ .

Hemos visto que h(s) es una función continua, veremos además que es decreciente. Para ello, comenzamos enunciando un lema que nos servirá para hacer las demostraciones.

**2.13 Lema.**  $\frac{1}{2e} < (1 - \frac{1}{s})^s < \frac{1}{e} \ para \ todo \ s \in (2, \infty).$ 

Demostración. La segunda parte del lema no es más que una generalización de un conocido resultado que dice que

$$\left(1 + \frac{c}{s}\right)^s < e^c.$$

Además, la función  $\left(1-\frac{1}{s}\right)^s$  es monótoma creciente, así que para demostrar la primera parte del lema, basta con comprobar que se verifica para s=2.

**2.14 Proposición.** La función h(s) está acotada inferiormente por  $\left(1 - \frac{1}{s}\right)$  para todo  $s \in [4, \infty)$ .

Demostración. Hemos definido la función h(s) como  $h \in (1, \frac{4}{3})$  tal que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = 0$ , así que para ver que h(s) está acotada inferiormente por  $(1 - \frac{1}{s})$  basta con comprobar que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} \left(1 - \frac{1}{s}\right) < 0$ . Por la Proposición 2.7 sabemos que

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = (2h)^{\frac{-s}{2}-1} \left[ (2s)(4h-4)(2-h)^{\frac{-s}{2}-1}(1+2^{\frac{-s}{2}-1}) - 4s \right]$$

así que sustituimos y obtenemos

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{s}^{\triangle}}{\partial h} \left( 1 - \frac{1}{s} \right) = \underbrace{4s(2\left( 1 - \frac{1}{s} \right))^{\frac{-s}{2} - 1}}_{A} \underbrace{\left[ (2\left( 1 - \frac{1}{s} \right) - 2)(2 - \left( 1 - \frac{1}{s} \right))^{\frac{-s}{2} - 1}(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) - 1 \right]}_{B}$$

donde A>0, luego basta con que estudiemos el signo de B. Vamos a ver entonces que

$$\frac{2}{s}\left(1 - \frac{1}{s}\right)^{\frac{-s}{2} - 1} \left(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}\right) < 1$$

donde

$$\frac{2}{s} \left( 1 - \frac{1}{s} \right)^{\frac{-s}{2} - 1} \left( 1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1} \right) = \frac{2}{s} \left( \left( 1 - \frac{1}{s} \right)^{s} \right)^{\frac{-(s+2)}{2s}} \left( 1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1} \right)$$

aplicamos el Lema 2.13 y tenemos que

$$\frac{2}{s} \left( \left( 1 - \frac{1}{s} \right)^s \right)^{\frac{-(s+2)}{2s}} \left( 1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1} \right) < \frac{2\sqrt{2e}\sqrt[s]{2e}}{s} \left( 1 + \frac{1}{2(\sqrt{2})^s} \right)$$

luego nuestro problema se reduce a ver que

$$\frac{2\sqrt{2e}\sqrt[s]{2e}}{s} < \frac{2(\sqrt{2})^s}{1 + 2(\sqrt{2})^s}$$

Lo cual es cierto, para s=4. Además, podemos observar como la parte de la izquierda decrece (su derivada es negativa) mientras que la de la izquierda crece (su derivada es positiva), por lo que podemos concluir que se verifica para todo  $s \in [4, \infty)$ .

**2.15 Proposición.** La función h(s) está acotada inferiormente por  $\frac{23}{19}$  para todo  $s \in (0,4)$ .

Demostración. Al igual que en la demostración de la Proposición 2.14, tenemos que comprobar que  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial s} \left(\frac{23}{19}\right) < 0$ . Por la Proposición 2.7 sabemos que

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = (2h)^{\frac{-s}{2}-1} \left[ (2s)(4h-4)(2-h)^{\frac{-s}{2}-1} (1+2^{\frac{-s}{2}-1}) - 4s \right].$$

Luego tenemos que ver que

$$\frac{8}{19} \left( \frac{15}{19} \right)^{\frac{-s}{2} - 1} \left( 1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1} \right) < 1$$

lo cual ocurre si, y sólo si

$$\left(\frac{19}{15}\right)^{\frac{s}{2}+1} + \left(\frac{19}{30}\right)^{\frac{s}{2}+1} < \frac{19}{8}.$$

Sea

$$g(s) = \left(\frac{19}{15}\right)^{\frac{s}{2}+1} + \left(\frac{19}{30}\right)^{\frac{s}{2}+1}.$$

Entonces

$$g'(s) = \frac{1}{2} \left(\frac{19}{15}\right)^{\frac{s}{2}+1} \ln\left(\frac{19}{15}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{19}{30}\right)^{\frac{s}{2}+1} \ln\left(\frac{19}{30}\right)$$
$$g''(s) = \frac{1}{4} \left(\frac{19}{15}\right)^{\frac{s}{2}+1} \ln^2\left(\frac{19}{15}\right) + \frac{1}{4} \left(\frac{19}{30}\right)^{\frac{s}{2}+1} \ln^2\left(\frac{19}{30}\right)$$

Como g''(s) > 0, g(s) es una función convexa, y como tal, alcanza su valor máximo en los extremos del intervalo, es decir,

$$g(s) = \left(\frac{19}{15}\right)^{\frac{s}{2}+1} + \left(\frac{19}{30}\right)^{\frac{s}{2}+1} \le \max\{g(0), g(4)\} = \left(\frac{19}{15}\right)^3 + \left(\frac{19}{30}\right)^3 < \frac{19}{8}$$

Podemos concluir que

$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial s} \left( \frac{23}{19} \right) < 0$$

para todo  $s \in (0,4)$ .

2.16 Proposición. La función

$$h: (0, \infty) \longrightarrow \left(1, \frac{4}{3}\right)$$
 $s \mapsto h_s$ 

es monótona decreciente.

Demostración. Por la definición de h(s) sabemos que

(2.1) 
$$\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h}(h(s)) = 0$$

Si derivamos a ambos lados de la igualdad (2.1) respecto de s, obtenemos:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2}(h(s))h'(s) + \frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s)) = 0 \Rightarrow h'(s) = \frac{\frac{-\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s))}{\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2}(h(s))}$$

Donde  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2} > 0$  para todo  $h \in (1, \frac{4}{3})$ , pues como vimos anteriormente,  $\mathcal{E}_s^{\triangle}(h)$  es convexa en dicho intervalo. En particular,  $h(s) \in (1, \frac{4}{3})$ , luego lo único que tenemos que comprobar es que  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s)) > 0$ .

Vamos, entonces, a calcular  $\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s))$ . Recordemos que

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{s}^{\triangle}}{\partial h} = \underbrace{4s(2h)^{\frac{-s}{2}-1}}_{A} \underbrace{\left[ (-1) + 2(h-1)(2-h)^{\frac{-s}{2}-1}(1+2^{\frac{-s}{2}-1}) \right]}_{B}$$

Como  $\frac{\partial \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h} = 0$  si h = h(s), y el factor A siempre es positivo, entonces necesariamente, B(h(s)) es igual a 0. Si calculamos ahora:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s)) = \frac{\partial A}{\partial s} B + A \frac{\partial B}{\partial s}$$

El primer término  $\frac{\partial A}{\partial s}B$  se anulará en h(s), pues hemos visto que B(h(s))=0. Así que sólo tenemos que estudiar el signo de  $A\frac{\partial B}{\partial s}$ . Como hemos dicho antes, A siempre es positivo, por lo que de nuevo, el problema se reduce a estudiar el signo de  $\frac{\partial B}{\partial s}(h(s))$ .

$$\frac{\partial B}{\partial s}(h(s)) = (1 - h(s))(2 - h(s))^{\frac{-s}{2} - 1} \left( \ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1} \right)$$

donde  $(1 - h(s))(2 - h(s))^{\frac{-s}{2} - 1} < 0$ , pues  $1 < h(s) < \frac{4}{3}$  para  $0 < s < \infty$ . Vamos a probar ahora que  $\left(\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1}\right) < 0$ .

Para  $s \in [4, \infty)$  podemos aplicar la Proposición 2.14 y obtenemos:

$$\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1}$$

$$< \ln(1 - \frac{1}{s})(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1}$$

$$= \ln\left(\left(1 - \frac{1}{s}\right)^{s^{\frac{1+2^{\frac{-s}{2} - 1}}{s}}}\right) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1}$$

aplicando el Lema 2.13 tenemos

$$\ln\left(\left(1 - \frac{1}{s}\right)^{s\frac{1+2\frac{-s}{2}-1}{s}}\right) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2}-1}$$

$$< \frac{s\ln(2) - 2\sqrt{2}^s - 1}{s2\sqrt{2}^s}$$

donde, si sustituimos s por 4 ya es negativo y podemos observar que la derivada es claramente negativa, luego

$$(2.2) \qquad \ln(2-h(s))(1+2^{\frac{-s}{2}-1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2}-1} < \frac{s\ln(2) - 2\sqrt{2}^s - 1}{s2\sqrt{2}^s} < 0$$

para todo  $s \in [4, \infty)$ .

Consideremos ahora  $s \in (0,4)$ , como

$$\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1} < 0$$

para todo  $s \in [4, \infty)$ , si no lo fuera para todo  $s \in (0, \infty)$  entonces existiría un  $s \in (0, 4)$  tal que

$$\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1} = 0$$

lo cual ocurre si, y solo si

$$\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{s}{2} + 1}) + \ln(2) = 0$$

con lo cual tenemos

$$h(s) = 2 - \frac{1}{1+2^{\frac{s}{2}+1}\sqrt{2}} < 2 - \frac{1}{\sqrt[3]{2}} < \frac{23}{19}$$

lo cual es absurdo.

Tenemos entonces

(2.3) 
$$\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1} < 0$$

para todo  $s \in (0,4)$ .

Por (2.2) y (2.3) podemos concluir que

$$\ln(2 - h(s))(1 + 2^{\frac{-s}{2} - 1}) + \ln(2)2^{\frac{-s}{2} - 1} < 0$$

para todo  $s \in (0, \infty)$ . Luego

$$\frac{\partial B}{\partial s} > 0$$

para todo  $s \in (0, \infty)$ . Así que

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s)) > 0$$

para todo  $s \in (0, \infty)$ .

Obtenemos de esta manera que  $h'(s) = \frac{\frac{-\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h^2}(h(s))}{\frac{\partial^2 \mathcal{E}_s^{\triangle}}{\partial h \partial s}(h(s))} < 0$  y por lo tanto, h(s) es decreciente.

Esta proposición nos lleva a una nueva cota.

**2.17 Corolario.** h(s) está contenido en el intervalo  $(1, \frac{5}{4})$ .

 $\begin{array}{l} \textit{Demostraci\'on.} \ \text{Como} \ h(s) \ \text{es una funci\'on continua} \ \ 2.12 \ \text{estrictamente decreciente} \ \ 2.16, \ \text{los valores de} \ \mathcal{E}_s^\triangle(h(s)) \ \text{para el modelo piramidal est\'an contenidos en el intervalo} \ (\mathcal{E}_\infty^\triangle(h(\infty)), \mathcal{E}_0^\triangle(h(0))) = \left(1, \frac{5}{4}\right). \end{array}$ 

Г

## 2.3.2. Propiedades del modelo piramidal

Una vez que hemos construido la función h(s), podemos definir la función  $\mathcal{E}_s^{\triangle} = \mathcal{E}_s^{\triangle}(h(s))$ , en la figura 2.11 dibujamos su gráfica.

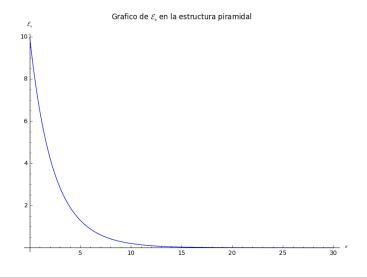


Figura 2.11: Gráfico de  $\mathcal{E}_s^{\triangle}$  para  $s \in (0, 30)$ .

Al igual que en el caso bipiramidal,  $\mathcal{E}_s^{\triangle}$  también es decreciente respecto de s, aunque esta vez quizá no resulte tan evidente con el caso anterior.

## **2.18 Proposición.** $\mathcal{E}_s^{\triangle}$ es una función decreciente.

 $\begin{array}{l} \textit{Demostraci\'on.} \text{ Sea } 0 < s' \leq s < \infty, \text{ por la Proposici\'on } \textbf{2.16} \text{ sabemos que} \\ \text{entonces } h(s') \geq h(s), \text{ por lo que } \mathcal{E}_s^{\triangle} = \mathcal{E}_s^{\triangle}(h(s)) \leq \mathcal{E}_s^{\triangle}(h(s')). \text{ Entonces nos} \\ \text{basta con probar que } \mathcal{E}_s^{\triangle}(h(s')) \leq \mathcal{E}_{s'}^{\triangle}(h(s')) = \mathcal{E}_{s'}^{\triangle}. \end{array}$ 

Sea  $g(s) = \mathcal{E}_s^{\triangle}(h(s'))$ , vamos a probar que para  $0 < s' \le s < \infty$  tenemos  $g(s) \le g(s')$ , es decir, que  $g'(s) \le 0$  para todo  $s \in (0, \infty)$ .

$$g(s) = \frac{4}{\sqrt{2h(s')^s}} + \frac{4}{\sqrt{2h(s')(2 - h(s'))^s}} + \frac{2}{(2\sqrt{h(s')(2 - h(s'))})^s}$$

Definimos las funciones:

$$g_1(s) = \frac{4}{\sqrt{2h(s')^s}}$$

$$g_2(s) = \frac{4}{\sqrt{2h(s')(2 - h(s'))^s}}$$

$$g_3(s) = \frac{2}{(2\sqrt{h(s')(2 - h(s'))})^s}$$

Tenemos entonces que

$$q(s) = q_1(s) + q_2(s) + q_3(s)$$

Comenzamos estudiando la función  $g_1(s)$ .

$$g_1(s) = 4(2h(s))^{\frac{-s}{2}}$$
  
$$g'_1(s) = -2(2h(s'))^{\frac{-s}{2}} \ln(2h(s'))$$

donde  $2 \le 2h(s') \le \frac{8}{3}$ , luego  $(2h(s'))^{\frac{-s}{2}} > 0$ ,  $\ln(2h(s')) > 0$  y -2 < 0. Luego  $g_1'(s) < 0$ . Estudiamos de igual forma la función  $g_2(s)$ .

$$g_2(s) = 4(2h(s')(2 - h(s')))^{\frac{-s}{2}}$$
  
$$g_2'(s) = -2(2h(s')(2 - h(s')))^{\frac{-s}{2}} \ln(2h(s')(2 - h(s')))$$

donde  $1 \le h(s') \le \frac{4}{3}$ , luego  $(2h(s')(2-h(s')))^{\frac{-s}{2}} > 0$ ;  $\frac{16}{9} \le 2h(s')(2-h(s')) \le 2$ , así que  $\ln(2h(s')(2-h(s'))) > 0$  y -2 < 0. Podemos concluir entonces que  $g'_2(s) < 0$ . Por último, estudiaremos  $g_3(s)$ .

$$g_3(s) = 2(4h(s)(2 - h(s)))^{\frac{-s}{2}}$$
  
$$g_3'(s) = 2^{-s}(h(s)(2 - h(s)))^{\frac{-s}{2}}\ln(4h(s)(2 - h(s)))$$

donde  $2^{-s}>0$ ;  $1\leq h(s')\leq \frac{4}{3}$ , luego  $(h(s')(2-h(s')))^{\frac{-s}{2}}>0$  y  $\ln(4h(s')(2-h(s')))>0$ , luego  $g_3'(s)<0$ .

Podemos concluir entonces que

$$g'(s) = g_1'(s) + g_2'(s) + g_3'(s) < 0$$

y por lo tanto, g(s) es decreciente, podemos concluir entonces que  $\mathcal{E}_s^{\triangle}$  es decreciente.

# 2.4. Comparación del modelo piramidal y bipiramidal

Ahora que hemos obtenido las gráficas de la energía de Riesz tanto para el caso piramidal como para el bipiramidal, vamos a proceder a su comparación.

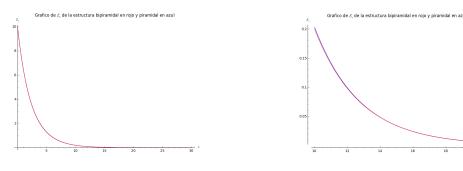


Figura 2.12: Gráficas de la energía de Riesz en ambas estructuras.

Como podemos observar en la figura 2.12, las gráficas son practicamente indiferenciables, pero basta con *hacer zoom* en el gráfico para observar que al principio es menor la energía del modelo bipiramidal y al final (en torno a 20) es menor la energía en el modelo piramidal.

Este hecho nos lleva a plantearnos un segundo problema.

**2.19 Problema.** ¿Existe un único cruce entre las gráficas de la energía mínima de Riesz de los modelos piramidal y bipiramidal?

#### 2.4.1. Cruce de las gráficas

Vamos a ver que existe un  $s \in (0, \infty)$  tal que  $\mathcal{E}_s^{\Diamond} = \mathcal{E}_s^{\triangle}$ , es decir, tal que la mínima energía para el modelo piramidal sea igual que la mínima energía para el modelo bipiramidal.

Para ello, consideremos la función  $D(s) = \mathcal{E}_s^{\triangle} - \mathcal{E}_s^{\lozenge}$ . Emplearemos de nuevo el método de la bisección, es decir, dados los puntos:

- $D(2) \approx 0.0156 > 0$
- $D(20) \approx -0.0001 < 0$

como las funciones  $\mathcal{E}_s^{\triangle}$  y  $\mathcal{E}_s^{\Diamond}$  son continuas<sup>1</sup>, entonces la función D(s) es continua, y de nuevo, por el teorema de Bolzano, podemos afirmar que existe un cero de D(s) en (2,20). Para encontrar la solución, volvemos a utilizar el método de bisección que hemos incluido en el Anexo 1. De esta forma, obtenemos el punto de corte con la precisión que queramos.

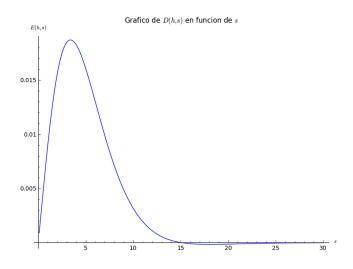


Figura 2.13: Gráfico de la función D(s).

Encontramos que la función D(s) tiene un cero en  $s \approx 15,0481$ . La unicidad del cruce es un problema bastante más difícil que todos los que hemos tratado aquí. No presentaremos ningún resultado concluyente en el trabajo, pero trataremos el problema en el último capítulo.

 $<sup>^1\</sup>mathcal{E}_s^{\Diamond}$  es continua por ser composición de funciones continuas, además, en la sección anterior hemos demostrado que h(s) es continua, por lo tanto,  $\mathcal{E}_s^{\triangle}$  también es composición de funciones continuas.

## Capítulo 3

## Energía logarítmica

#### 3.1. Introducción

Uno de los hallazgos más gratos en matemáticas es descubrir que varias ramas, aparentemente inconexas, se entremezclan entre sí, dando lugar a combinaciones sorprendentes, pero ciertas. Una de estas construcciones es precisamente la que vamos a estudiar a lo largo de este capítulo.

Dedicaremos la primera parte del capítulo a presentar nociones y resultados que, a continuación, pondremos en común en una fórmula que dará un enfoque nuevo al problema de Whyte.

$$\min \sum_{i,j=1,i< j}^{n} \ln \left( \frac{1}{||x_i - x_j||} \right)$$
 Whyte's problem

En la segunda parte del capítulo concretaremos todo lo expuesto anteriormente para dar un nuevo enfoque al problema de Whyte para 5 puntos. Ya comentamos en la introducción que Dragnev, Legg y Townsend dieron la solución para n=5 en [DLT02] y demostraron que la distribucción de los puntos óptima debe tener una estructura bipiramidal.

Notación. A lo largo de este capítulo, y para no hacer demasiado pesada la notación, pasaremos a denominar  $\mathcal{E}_0$  la energía asociada al problema de Whyte, que también recibe el nombre de energía logarítmica.

$$\mathcal{E}_0(\omega_n) = \sum_{i,j=1,i< j}^n \ln\left(\frac{1}{||x_i - x_j||}\right)$$

Recordamos que a los puntos que minimizan la energía logarítmica se los conoce como puntos de Fekete, y que son solución del problema

$$\underset{i,j=1,i< j}{\operatorname{argmax}} \prod_{i,j=1,i< j}^{n} ||x_i - x_j|| \qquad \textit{Elliptic Fekete points}$$

## 3.2. Fórmula de Armentano-Beltrán-Shub

Hasta el momento, hemos trabajado con la esfera de radio unidad y centro el origen de coordenadas. Consideremos en su lugar la esfera de Riemann, una esfera en  $\mathbb{R}^3$  de radio  $\frac{1}{2}$  centrada en el punto  $(0,0,\frac{1}{2})$ .

$$\mathbb{S} = \left\{ (a,b,c) \in \mathbb{R}^3 : a^2 + b^2 + \left(c - \frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4} \right\} = \left\{ (a,b,c) \in \mathbb{R}^3 : a^2 + b^2 + c^2 = c \right\}$$

Resulta evidente que el problema de minimizar la energía logarítmica en la esfera  $\mathbb{S}^2$  y el de minimizar la energía logarítmica la esfera de Riemann  $\mathbb{S}$  son equivalentes. Consideremos ahora la proyección estereográfica de la esfera  $\mathbb{S}$  en el plano complejo.

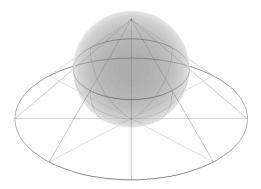


Figura 3.1: Proyección estereográfica.

La proyección, que es una biyección entre  $\mathbb{S}\setminus(0,0,1)$  y  $\mathbb{C}$ , viene dada por la siguiente función.

$$\begin{split} \pi: \mathbb{S}\backslash (0,0,1) &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (a,b,c) &\mapsto \frac{c}{a-ib} \\ (0,0,0) &\mapsto 0 \end{split}$$

De esta forma podemos trasladar los n puntos de la esfera al plano complejo. Consideremos a continuación un polinomio f de grado n mónico cuyos ceros sean precisamente los puntos  $(z_1,...,z_n)$  del plano complejo obtenidos al proyectar los n puntos  $(x_1,...,x_n)$  de la esfera a través de  $\Pi$ .

$$f = \prod_{i=1}^{n} (z - z_i)$$

Un resultado de Shub y Smale [SS93] nos dice que en estas condiciones y suponiendo que  $(x_1,...,x_n)$  son puntos elípticos de Fekete,  $\mu(f) \leq \sqrt{n(n+1)}$ .

En estas condiciones, se verifica la siguiente igualdad:

(3.1) 
$$\mathcal{E}_0(\omega_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \ln(\mu(f, z_i)) + \frac{n}{2} \ln\left(\frac{\prod_{i=1}^n \sqrt{1 + |z_i|^2}}{||f||}\right) - \frac{n}{4} \ln(n)$$

que fue enunciada por Armentano, Beltrán y Shub en [ABS11], pero cuya demostración podemos encontrar en [Bel15]. Vamos a ir analizando los elementos de esta expresión uno a uno.

Para empezar tenemos  $\mathcal{E}_0(\omega_n)$  la energía logarítmica en n puntos. La siguien-

te expresión con la que nos encontramos es  $\sum_{i=1}^n \ln(\mu(f,z_i))$ , para lo cual no tenemos más que calcular al  $\mu$ 

tenemos más que calcular el condicionamiento de f y  $z_i$  para  $1 \le i \le n$ . Mediante las técnicas vistas en la sección 1.2 podemos calcular el número de condicionamiento del polinomio f con respecto a cada una de sus raíces  $(z_1,...,z_n).$ 

$$\mu(f,z) = \frac{\sqrt{n(1+|z|^2)^{\frac{n-2}{2}}}}{|f'(z)|}||f||$$

$$\prod^{n} \sqrt{1 + |z_i|^2}$$

 $\prod_{i=1}^n \sqrt{1+|z_i|^2}$  El término  $\frac{i=1}{||f||}$  es el cociente entre el producto de la norma de Bombieri de los factores de f y la norma de Bombieri de f. Por [BBEM90] sabemos que dicho cociente es siempre mayor que 1, y por lo tanto el logaritmo es positivo.

Los experimentos sugieren que los siguientes problemas son equivalentes:

- 1. Minimizar  $\mathcal{E}_0(\omega_n)$ .
- 2. Minimizar  $\sum_{i=1}^{n} \ln(\mu(f, z_i)).$

3. Maximizar 
$$\frac{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{1+|z_i|^2}}{||f||}.$$

Como 
$$\sum_{i=1}^n \ln(\mu(f,z_i)) = \ln\left(\prod_{i=1}^n \mu(f,z_i)\right)$$
 y l  
n es una función monótoma cre-

ciente, el problema 2, mín  $\sum_{i=1}^{n} \ln(\mu(f,z_i))$  resulta equivalente a mín  $\prod_{i=1}^{n} \mu(f,z_i)$ .

En cuanto al problema 3, en [BBEM90, Theorem 2.1] vemos que para dos polinomios f y g de grados r y s respectivamente se verifica que:

$$||fg|| \ge \sqrt{\frac{r!s!}{(r+s)!}}||f|| \ ||g||$$

y que además dicha cota se alcanza. Para nuestro caso particular, esta desigualdad implica

$$\frac{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{1+|z_i|^2}}{||f||} \le \sqrt{n!}$$

que, sin embargo, está lejos de ser óptima.

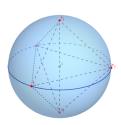
## 3.3. Energía logarítmica de cinco puntos

Vamos a utilizar ahora estas herramientas para dar un nuevo enfoque a nuestro problema original de 5 puntos. Estudiaremos las dos estructuras presentadas en este trabajo y veremos si verifican las equivalencias que acabamos de describir. Al igual que en la sección anterior, en vez de trabajar con la esfera  $\mathbb{S}^2$  trabajaremos con la esfera de Riemann  $\mathbb{S}$ .

#### 3.3.1. Estructura bipiramidal

Comenzamos con la estructura bipiramidal. Lo primero que hacemos es obtener las coordenadas de los puntos  $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5)$  para el modelo bipiramidal. Vemos que el punto  $P_1$  es precisamente el punto (0,0,1), para el cual no hemos definido la proyección, así que tomaremos la misma estructura en la esfera pero sometiéndola a una rotación de  $\frac{\pi}{2}$  radianes respecto del eje x, obteniendo los siguientes puntos, que pasamos al plano complejo mediante la proyección estereográfica.

$$\begin{array}{ccc} & (x,y,z) & \rightarrow \frac{z}{x-iy} \\ P_1 = & (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) & \mapsto 1 \\ P_2 = & (0,\frac{-\sqrt{3}}{4},\frac{3}{4}) & \mapsto -\sqrt{3}i \\ P_3 = & (0,\frac{\sqrt{3}}{4},\frac{3}{4}) & \mapsto \sqrt{3}i \\ P_4 = & (0,0,0) & \mapsto 0 \\ P_5 = & (\frac{-1}{2},0,\frac{1}{2}) & \mapsto -1 \end{array}$$



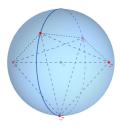
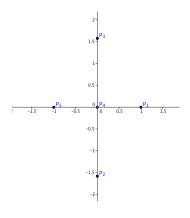


Figura 3.2: Estructura bipiramidal original y tras la rotación.



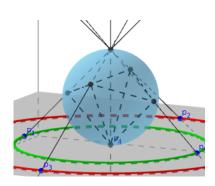


Figura 3.3: Proyección estereográfica de la estructura bipiramidal.

**3.1 Lema.** Sea  $f^{\Diamond}(z) \in \mathbb{C}[z]$  el polinomio asociado a la estructura bipiramidal, entonces:

$$||f^{\Diamond}|| = \frac{4}{\sqrt{5}} y \mu(f^{\triangle}) = \sqrt{2}$$

Demostración. Calculamos el polinomio asociado a los  $z_i, 1 \le i \le 5$ ,

$$f^{\Diamond}(z) = z^5 + 2z^3 - 3z$$

y la norma de Weyl del polinomio  $f^\lozenge$ 

$$||f^{\Diamond}||^{2} = {5 \choose 1}^{-1} (-3)^{2} + {5 \choose 3}^{-1} (2)^{2} + {5 \choose 5}^{-1} 1 = \frac{16}{5} \Rightarrow \boxed{||f^{\Diamond}|| = \frac{4}{\sqrt{5}}}$$

Calculamos ahora el condicionamiento de  $f^{\Diamond}$  respecto de cada una de sus raíces usando la fórmula (1.2).

$$\mu(f^{\Diamond}, 1) = \sqrt{2}$$

$$\mu(f^{\Diamond}, -1) = \sqrt{2}$$

$$\mu(f^{\Diamond}, -\sqrt{3}i) = \frac{4}{3}$$

$$\mu(f^{\Diamond}, \sqrt{3}i) = \frac{4}{3}$$

$$\mu(f^{\Diamond}, 0) = \frac{4}{3}$$

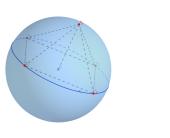
Luego

$$\mu(f^\lozenge) = \max_{z \in \mathbb{C}: f^\lozenge(z) = 0} \mu(f^\lozenge, z) = \mu(f^\lozenge, 1) = \sqrt{2} \approx 1{,}41.$$

## 3.3.2. Estructura piramidal

Al igual que en el caso anterior, vamos a someter a la esfera a una rotación de  $\pi$  radianes, para no tener problemas con el punto del infinito. En el capítulo anterior, cuando estudiamos la estructura piramidal teníamos un h diferente para cada s, como aquí estamos en  $s \longrightarrow 0$ , solamente utilizaremos  $h(s) = \frac{5}{4}$  (ver [DLT02]), pero como estamos trabajando en la esfera de Riemann, reducimos la escala obteniendo  $h = \frac{5}{8}$ .

Comenzamos dando las coordenadas de los puntos en la esfera y luego, mediante la proyección estereográfica los pasamos a puntos del plano.



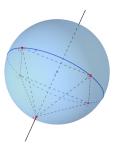


Figura 3.4: Estructura piramidal original y tras la rotación.

$$(x, y, z) \to \frac{z}{x - iy}$$

$$P_1 = (0, \frac{\sqrt{15}}{8}, \frac{5}{8}) \mapsto \sqrt{\frac{5}{3}}i$$

$$P_2 = (\frac{\sqrt{15}}{8}, 0, \frac{5}{8}) \mapsto \sqrt{\frac{5}{3}}i$$

$$P_3 = (0, -\frac{\sqrt{15}}{8}, \frac{5}{8}) \mapsto -\sqrt{\frac{5}{3}}i$$

$$P_4 = (-\frac{\sqrt{15}}{8}, 0, \frac{5}{8}) \mapsto -\sqrt{\frac{5}{3}}i$$

$$P_5 = (0, 0, 0) \mapsto 0$$

Representamos la proyección estereográfica y los puntos en el plano complejo.

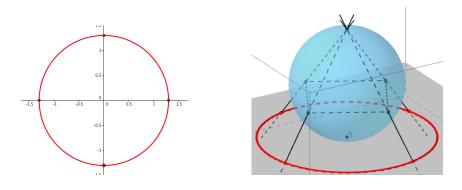


Figura 3.5: Proyección estereográfica de la estructura piramidal con  $h = \frac{5}{4}$ .

Consideremos, pues, 5 puntos de la esfera  $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5)$  y llamemos  $(z_1, z_2, z_3, z_4, z_5)$  a sus imágenes por la proyección estereográfica.

**3.2 Lema.** Sea  $f^{\triangle}(z) \in \mathbb{C}[z]$  el polinomio asociado a la estructura piramidal, entonces:

$$||f^{\triangle}|| = \frac{1}{9}\sqrt{206} \ y \ \mu(f^{\triangle}) = \frac{8}{15}\sqrt{\frac{103}{15}}$$

Demostraci'on. Sea f el polinomio de grado 5 mónico cuyos ceros son precisamente  $z_1,z_2,z_3,z_4$  y  $z_5.$ 

$$f^{\triangle}(z) = z^5 - \left(\frac{25}{9}\right)z$$

Calculamos la norma de Weyl del polinomio f

$$||f^{\triangle}||^2 = {5 \choose 1}^{-1} \left(\frac{5}{3}\right)^4 + {5 \choose 5}^{-1} 1 = \frac{206}{81} \Rightarrow \boxed{||f^{\triangle}|| = \frac{1}{9}\sqrt{206}}$$

y el condicionamiento de  $f^{\triangle}$  respecto de cada una de sus raíces.

$$\begin{split} \mu(f^{\triangle},\sqrt{\frac{5}{3}}) = & \mu(f^{\triangle},-\sqrt{\frac{5}{3}}) = \mu(f^{\triangle},\sqrt{\frac{5}{3}}i) = \mu(f^{\triangle},-\sqrt{\frac{5}{3}}i) = \\ & = \frac{8}{15}\sqrt{\frac{103}{15}} \\ \mu(f^{\triangle},0) = & \frac{1}{5}\sqrt{\frac{206}{5}} \end{split}$$

Luego

$$\mu(f^{\triangle}) = \max_{z \in \mathbb{C}: f^{\triangle}(z) = 0} \mu(f^{\triangle}, z) = \mu(f^{\triangle}, \sqrt{\frac{5}{3}}) = \frac{8}{15} \sqrt{\frac{103}{15}} \approx 1.40.$$

#### 3.3.3. Comparación de ambas estructuras

Recordamos que en la sección anterior vimos que  $\mu(f^{\triangle}) = \frac{8}{15} \sqrt{\frac{103}{15}} \approx$  $1,40 \text{ y } \mu(f^{\Diamond}) = \sqrt{2} \approx 1,41, \text{ luego el condicionamiento es menor en la estruc$ tura piramidal.

Así mismo,  $||f^{\triangle}|| = \frac{1}{9}\sqrt{206} \approx 1,59 < 1,79 \approx \frac{4}{\sqrt{5}} = ||f^{\Diamond}||$ , así que la norma del polinomio es menor en la estructura piramidal.

Ahora vamos a recordar los tres problemas supuestamente equivalentes y vamos a testar su equivalencia en el ejemplo que conocemos: el de 5 puntos.

1. Minimizar  $\mathcal{E}_0(\omega_5)$ .

2. Minimizar 
$$\sum_{i=1}^{5} \ln(\mu(f, z_i)) \equiv \min \max_{i=1}^{5} \mu(f, z_i).$$

$$\prod_{i=1}^{5} \sqrt{1+|z_i|^2}$$

 $\prod_{i=1}^5 \sqrt{1+|z_i|^2}$ 3. Maximizar  $\frac{1}{||f||}$ 

3.3 Proposición. La energía logarítmica  $\mathcal{E}_0$  es menor en la estructura bipiramidal.

Demostración. En [DLT02] se presenta la solución al primer problema, así, sabemos que la estructura bipiramidal es la óptima para minimizar  $\mathcal{E}_0(\omega_5)$ y la energía toma el valor

$$\mathcal{E}_0^{\Diamond}(\omega_5) = 2.511$$

Además, en ese mismo artículo se da una demostración de que la estructura piramidal que minimiza dicha energía es aquella de altura  $h = \frac{5}{4}$  en la esfera  $\mathbb{S}^2$ . Dicha energía toma el valor

$$\mathcal{E}_0^{\triangle}(\omega_5) = 2,520$$

en la esfera de Riemann.

Г

**3.4 Proposición.**  $\mathcal{M} = \prod_{i=1}^{n} \mu(f, z_i)$  es menor en la estructura bipiramidal.

Demostración. No tenemos más que calcular los 10 números de condición utilizando la fórmula (1.2) y obtenemos los siguientes resultados.

$$\mathcal{M}^{\Diamond} = \frac{128}{27} = 4.\widehat{740}$$

$$\mathcal{M}^{\triangle} = \frac{43454464}{284765625} \sqrt{206}\sqrt{5} \approx 4,897$$

3.5 Proposición.  $\mathcal{N}=\frac{\displaystyle\prod_{i=1}^n\sqrt{1+|z_i|^2}}{||f||}$  es mayor en la estructura bipiramidal.

Demostración. Calculamos (3) para la estructura bipiramidal.

$$\mathcal{N}^{\lozenge} = \frac{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{1 + |z_i|^2}}{||f^{\lozenge}||} = 2\sqrt{5} \approx 4,472$$

Por otra parte, tenemos que

$$\mathcal{N}^{\triangle} = \frac{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{1 + |z_i|^2}}{||f^{\triangle}||} = 32\sqrt{\frac{2}{103}} \approx 4,459$$

Podemos concluir que nuestra hipótesis no se contradicen para el problema de los 5 puntos en estas estructuras. En el último capítulo volveremos sobre esta relación, y la estudiaremos más a fondo.

## Capítulo 4

## Una pequeña incursión en los problemas abiertos

Hemos resuelto muy pocos problemas en comparación a todos los que nos hemos ido planteando a lo largo del trabajo. En esta sección queremos resolver algunos más, y, sobre todo, dejar muchos otros planteados.

# 4.1. En relación al problema de Thomson para 5 puntos

Una pregunta que nos acecha desde que empezamos a escribir el trabajo es la siguiente.

**4.1 Problema.** ¿Es posible dar una solución al problema de Thomson sin herramientas computacionales muy pesadas?

Sabemos que la única prueba existente hace uso de una gran maquinaria computacional, sin embargo, tal vez podríamos obtener la solución de una forma similar a cómo hemos trabajado en el Capítulo 3.

Consideremos 5 puntos situados en la superficie de una esfera, podemos suponer que uno de ellos está situado en el polo norte y los otros 4 son móviles. Mediante la proyección estereográfica proyectamos 4 puntos al plano complejo y envíamos el del polo norte al infinito. Entonces definimos la distancia de separación de una n-tupla  $\omega_n = (x_1, ..., x_n)$  de puntos en la esfera por

$$d_{||*||,sep}(\omega_n) = \min_{i \neq j} ||x_i - x_j||$$

Está demostrado [Dra02] que si  $\omega_n = (x_1, ..., x_n)$  es un conjunto de puntos de Fekete, entonces

$$d_{||*||,sep}(\omega_n) \ge \frac{1}{\sqrt{n-1}}$$

Aplicando este resultado a nuestro problema, podemos trazar otra esfera de centro el polo norte de la anterior y de radio  $\frac{1}{\sqrt{5-1}}=\frac{1}{2}$ ; sea C la circunferencia que obtenemos de la intersección de las dos esferas anteriores. Para  $n \geq 4$  C se encuentra en el hemisferio norte. Realizamos la proyección estereográfica de C y tenemos que las proyecciones de los puntos de Fekete se encuentran necesariamente en el círculo de centro 0 y radio acotado por la proyección de C.

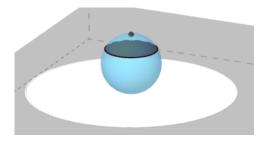


Figura 4.1: El área delimitada por la proyección C está en blanco.

Luego nuestro problema se reduce a minimizar una función en un compacto. Lamentablemente, no se trata de un problema de optimización lineal, lo que nos hubiese permitido utilizar métodos como el simplex, el método del elipsoide o el del punto interior. Por lo tanto, a la hora de afrontarlo numéricamente, sería necesario recurrir a métodos con menores garantías de éxito, como el método del gradiente o métodos heurísticos. Dichos métodos, diseñados específicamente para minimizar funciones no lineales como la nuestra, presentan en numerosos casos prácticos una eficacia y precision muy notables, y es precisamente su uso el que hace a los investigadores conjeturar que la optimización del problema de cinco puntos en la esfera para cualquier potencial se alcanza siempre en una de las dos estructuras discutidas en este trabajo. Sin embargo, no proporcionan pruebas rigurosas, de ahí el esfuerzo para seguir estudiando este problema.

# 4.2. Comparación entre las estructuras piramidal y bipiramidal

Cerramos el Capítulo 2 dejando abierta la siguiente pregunta.

**4.2 Problema.** ¿Las gráficas de los modelos piramidal y bipiramidal se volverán a cruzar o a partir de 15,05 siempre será menor la energía asociada a una estructura piramidal?

Para estudiar el problema, decidimos trabajar con la función cociente

$$C(s) = \frac{\mathcal{E}_s^{\triangle}}{\mathcal{E}_s^{\lozenge}}$$

que representamos en la figura 4.2.

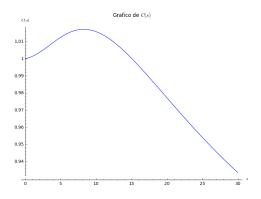


Figura 4.2: Gráfico de la función C(s).

Podemos observar que la función vale 1 para el punto s=15,048077392, lo cual encaja con lo que acabamos de demostrar en el apartado anterior.

La pregunta es sencilla, si C(s) solo toma una vez el valor 1, entonces efectivamente las gráficas sólo se cruzaran una vez. Nuestra intención es demostrar algo más que eso: queremos probar que C(s) es una función monótoma decreciente, y gracias al resultado que nos dice que h(s) es decreciente, esta última afirmación no parece tan dificil de demostrar.

## 4.3. En relación a la fórmula Armentano-Beltrán-Shub

En el Capítulo 3 nos cuestionamos la equivalencia de los siguientes tres problemas:

- 1. Minimizar  $\mathcal{E}_0(\omega_n)$ .
- 2. Minimizar  $\mathcal{M} = \sum_{i=1}^{n} \ln(\mu(f, z_i)).$

3. Maximizar 
$$\mathcal{N} = \frac{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{1 + |z_i|^2}}{||f||}$$
.

y calculamos los valores de  $\mathcal{E}_0$ ,  $\mathcal{M}$  y  $\mathcal{N}$  para las estructuras piramidal y bipiramidal. Sin embargo, para hacer las comprobaciones, tomamos la estructura piramidal con altura  $\frac{5}{8}$  en la esfera de Riemann, que es la que minimiza la energía logarítmica para s = 0, ahora bien,

**4.3 Problema.** ¿La altura que minimiza 
$$\mathcal{M}^{\triangle} = \prod_{i=1}^{5} \mu(f, z_i)$$
 es también  $\frac{5}{8}$ ?

Antes de nada, vamos a calcular las coordenadas en el plano complejo para la estructura piramidal y mediante la proyección estereográfica los pasamos a puntos del plano. Como hicimos en el Capítulo 3, vamos a someter a la esfera a una rotación de  $\pi$  radianes, para no tener problemas con el punto del infinito.

$$(x, y, z) \to \frac{z}{x - iy}$$

$$P_1 = (0, \sqrt{h(1 - h)}, h) \mapsto \sqrt{\frac{h}{1 - h}}i$$

$$P_2 = (\sqrt{h(1 - h)}, 0, h) \mapsto \sqrt{\frac{h}{1 - h}}$$

$$P_3 = (0, -\sqrt{h(1 - h)}, h) \mapsto -\sqrt{\frac{h}{1 - h}}i$$

$$P_4 = (-\sqrt{h(1 - h)}, 0, h) \mapsto -\sqrt{\frac{h}{1 - h}}i$$

$$P_5 = (0, 0, 0) \mapsto 0$$

Como en la estructura piramidal tenemos un h diferente para cada s, lo que vamos a hacer es acotar la zona en la que se mueven los puntos. Como en nuestro problema original h estaba acotado por  $1 \le h \le \frac{5}{4}$ , en este problema, que reduce el radio de la esfera a la mitad, tenemos  $\frac{1}{2} \le h \le \frac{5}{8}$ . En la figura 4.3 representamos la proyección estereográfica y los puntos en el plano complejo. Hemos señalado en rojo el segmento donde puede tomar valores h.

Consideremos, pues 5 puntos de la esfera  $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5)$  y llamemos  $(z_1, z_2, z_3, z_4, z_5)$  a sus imágenes por la proyección estereográfica. Sea f el polinomio de grado 5 mónico cuyos ceros son precisamente  $z_1, z_2, z_3, z_4$  y  $z_5$ .

$$f^{\triangle}(z) = z^5 - \left(\frac{h}{1-h}\right)^2 z$$

Nota. Podemos fijarnos que cuanto mayor es h mayor es es coeficiente del último término.

**4.4 Lema.** Sea  $f^{\triangle}$  el polinomio asociado a la estructura piramidal entonces:

$$||f^{\triangle}|| = \sqrt{1 + \left(\frac{1-h}{h}\right)^4 \frac{1}{5}}$$

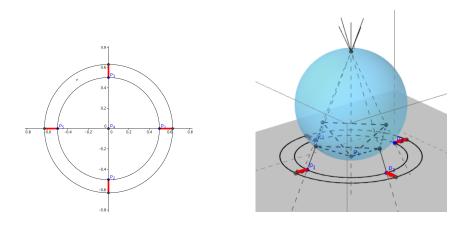


Figura 4.3: Proyección estereográfica de la estructura piramidal en función de h.

Demostración. Calculamos la norma de Weyl del polinomio f.

$$||f^{\triangle}||^{2} = {5 \choose 1}^{-1} \left(\frac{1-h}{h}\right)^{4} + {5 \choose 5}^{-1} 1 = 1 + \left(\frac{1-h}{h}\right)^{4} \frac{1}{5}$$
$$\Rightarrow ||f^{\triangle}|| = \sqrt{1 + \left(\frac{1-h}{h}\right)^{4} \frac{1}{5}}$$



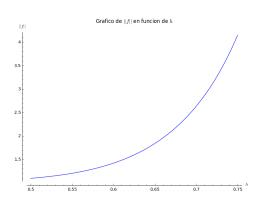


Figura 4.4: Gráfico de la norma de Weyl del polinomio  $f^{\triangle}$  en función de h.

Como vimos en la Nota 4.3, cuanto mayor es h mayor es es coeficiente del último término y por lo tanto, mayor es la norma de Weyl del polinomio  $f^{\triangle}$ . Hemos representado en la figura 4.4 el crecimiento de la norma en relación a h.

**4.5 Lema.** Sea  $f^{\triangle}$  el polinomio asociado a la estructura piramidal entonces:

$$\mu(f^{\triangle}) = \sqrt{5} \left(\frac{1-h}{h}\right)^2 \sqrt{1 + \left(\frac{1-h}{h}\right)^4 \frac{1}{5}}$$

Demostración. Calculamos ahora el condicionamiento de  $f^{\triangle}$  respecto de cada una de sus raíces. Llamamos la atención sobre el hecho de que el condicionamiento de las cuatro puntos (sin contar con el 0) es el mismo.

$$\mu\left(f^{\triangle}, \sqrt{\frac{h}{1-h}}\right) = \mu\left(f^{\triangle}, -\sqrt{\frac{h}{1-h}}\right) = \mu\left(f^{\triangle}, \sqrt{\frac{h}{1-h}}i\right) = \mu\left(f^{\triangle}, -\sqrt{\frac{h}{1-h}}i\right) = \frac{\sqrt{5}}{4}\frac{\sqrt{1-h}}{h^2}||f^{\triangle}|| = \frac{\sqrt{5}\sqrt{1-h}}{4h^2}\sqrt{1+\left(\frac{1-h}{h}\right)^4\frac{1}{5}}$$

$$\mu(f^{\triangle}, 0) = \sqrt{5}\left(\frac{1-h}{h}\right)^2||f^{\triangle}|| = \sqrt{5}\left(\frac{1-h}{h}\right)^2\sqrt{1+\left(\frac{1-h}{h}\right)^4\frac{1}{5}}$$

Como  $\frac{\sqrt{5}\sqrt{1-h}}{4h^2} < \sqrt{5}\left(\frac{1-h}{h}\right)^2$  para todo  $\frac{1}{2} \le h \le \frac{5}{8}$ , podemos concluir que  $\mu(f^{\triangle},0) > \mu\left(f^{\triangle},\sqrt{\frac{h}{1-h}}\right)$ 

Podemos hacer un gráfico que compare el condicionamiento de los puntos distintos de 0 dependiendo de la altura y otro que compare el condicionamiento de los puntos 0 también dependiendo de la altura.

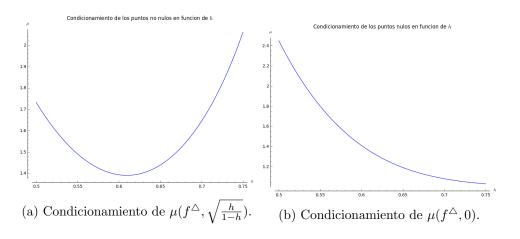


Figura 4.5: Gráficos del condicionamiento de  $\mu(f^{\triangle}, z)$  en función de h.

Lo primero que vamos a ver es que existe una única altura h que minimiza  $\mathcal{M}^{\triangle}$ . Para ello, estudiaremos la función  $\mathcal{M}^{\triangle} = \prod_{i=1}^5 \mu(f, z_i)$  respecto a la

variable h.

$$\mathcal{M}^{\triangle}(h) = \underbrace{\left(\frac{\sqrt{5}\sqrt{1-h}}{4h^2}\sqrt{1+\left(\frac{1-h}{h}\right)^4\frac{1}{5}}\right)^4}_{A}\underbrace{\sqrt{5}\left(\frac{1-h}{h}\right)^2\sqrt{1+\left(\frac{1-h}{h}\right)^4\frac{1}{5}}}_{B}$$

es una función  $\mathcal{C}^{\infty}$  en (0,1) y además es cóncava. En la figura 4.6 mostramos el gráfico de  $\mathcal{M}^{\triangle}$  en función de h.

**4.6 Proposición.** Se tiene que argmin  $\mathcal{M}^{\triangle}(h) \neq \operatorname{argmin} \mathcal{E}_0^{\triangle} = \frac{5}{4}$ .

Demostración. Aunque no proporcionamos aquí una demostración rigurosa de que  $\mathcal{M}^{\triangle}(h)$  tiene un único mínimo en  $(\frac{1}{2},1)$ , hemos calculado computacionalmente dicho mínimo que resulta.

argmin 
$$\mathcal{M}^{\triangle}(h) \approx 0.6289$$

**4.7 Proposición.** El valor de  $\mathcal{M}^{\Diamond}$  es menor que el valor de  $\mathcal{M}^{\triangle}(h)$  para cualquier h.

Demostración.

$$\mathcal{M}^{\triangle}(0.6289)\approx 4.8899 < \frac{128}{7} = \mathcal{M}^{\lozenge}$$

Como continuación natural al problema anterior, nos hacemos la siguiente pregunta.

4.8 Problema. ¿la altura que maximiza 
$$\frac{\displaystyle\prod_{i=1}^n \sqrt{1+|z_i|^2}}{||f||}$$
 es también  $\frac{5}{8}$ ?

Recordamos que la norma de Weyl de  $f^{\triangle}$  en función de h es una función creciente, por lo que  $\frac{1}{||f||}$  es una función decreciente. Vamos a definir la función

(4.1) 
$$\mathcal{N}^{\triangle}(h) = \frac{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{1 + |z_i|^2}}{||f^{\triangle}||} = \frac{1}{(1 - h)^2 \sqrt{1 + \left(\frac{1 - h}{h}\right)^4 \frac{1}{5}}}$$

Hemos representado el gráfico de  $\mathcal{N}^{\triangle}$  en función de h en la figura 4.6.

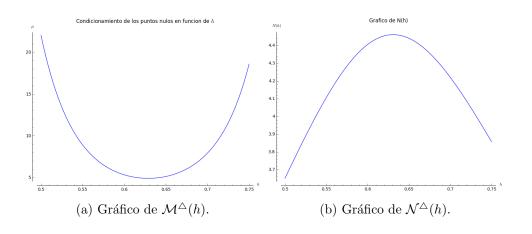


Figura 4.6: Gráficos del condicionamiento de  $\mathcal{M}^{\triangle}$  y  $\mathcal{N}^{\triangle}$ .

que también es una función  $\mathcal{C}^{\infty}$  y convexa.

**4.9 Proposición.** Se tiene que argmin  $\mathcal{N}^{\triangle}(h) \neq \operatorname{argmin} \mathcal{E}_0^{\triangle} = \frac{5}{8}$ .

Demostración. Aunque no proporcionamos aquí una demostración rigurosa de que  $\mathcal{N}^{\triangle}(h)$  tiene un único máximo en  $(\frac{1}{2},1)$ , hemos calculado computacionalmente dicho mínimo que resulta.

$$\operatorname{argmax} \mathcal{N}^{\triangle}(h) \approx 0.6310$$

**4.10 Proposición.** El valor de  $\mathcal{N}^{\Diamond}$  es menor que el valor de  $\mathcal{N}^{\triangle}(h)$  para cualquier h.

Demostración.

$$\mathcal{M}^{\triangle}(0,6310) \approx 4,4612 < 2\sqrt{5} = \mathcal{N}^{\lozenge}$$

Los resultados que hemos visto en esta sección permiten, por lo tanto comprobar la consistencia para el problema de cinco puntos sobre la equivalencia de los tres problemas descritos en la sección 3.2, al menos en lo que se refiere en las dos estructuras que hemos estudiado a lo largo de todo este trabajo.

## Bibliografía

- [ABS11] Diego Armentano, Carlos Beltrán, and Michael Shub. Minimizing the discrete logarithmic energy on the sphere: the role of random polynomials. *Trans. Am. Math. Soc.*, 363(6):2955–2965, 2011.
- [Ada93] M. Adachi. *Embeddings and Immersions*. Translations of mathematical monographs. American Mathematical Society, 1993.
- [BBEM90] Bernard Beauzamy, Enrico Bombieri, Per Enflo, and Hugh L Montgomery. Products of polynomials in many variables. *Journal of Number Theory*, 36(2):219 – 245, 1990.
  - [BC13] Peter Bürgisser and Felipe Cucker. Condition The Geometry of Numerical Algorithms., volume 349 of Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Springer, 2013.
- [BCSS98] Lenore Blum, Felipe Cucker, Michael Shub, and Steve Smale. Complexity and Real Computation. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 1998.
  - [Bel15] Carlos Beltrán. A facility location formulation for stable polynomials and elliptic fekete points. Foundations of Computational Mathematics, 15(1):125–157, 2015.
  - [BG15] Johann S. Brauchart and Peter J. Grabner. Distributing many points on spheres: Minimal energy and designs. *Journal of Complexity*, 31(3):293 326, 2015. Oberwolfach 2013.
- [BHS14] A.V. Bondarenko, D.P. Hardin, and E.B. Saff. Mesh ratios for best-packing and limits of minimal energy configurations. *Acta Mathematica Hungarica*, 142(1):118–131, 2014.
- [DLT02] Peter D Dragnev, DA Legg, and DW Townsend. Discrete logarithmic energy on the sphere. *Pacific journal of mathematics*, 207(2):345–358, 2002.
- [Dra02] Peter D Dragnev. On the separation of logarithmic points on the sphere. 2002.

Bibliografía 51

[DS91] International Business Machines Corporation. Research Division and S. Smale. Complexity of Bezout's Theorem I: Geometric Aspects. 1991.

- [F.R04] J.J. Thomson F.R.S. Xxiv. on the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle; with application of the results to the theory of atomic structure. *Philosophical Magazine Series* 6, 7(39):237–265, 1904.
- [GP10] V. Guillemin and A. Pollack. *Differential Topology*. AMS Chelsea Publishing Series. American Mathematical Soc., 2010.
- [Gri79] Harris Joseph Griffiths, Phillip. Algebraic geometry and local differential geometry. Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure, 12(3):355–452, 1979.
- [Lee57] John Leech. Equilibrium of sets of particles on a sphere. *The Mathematical Gazette*, 41(336):pp. 81–90, 1957.
- [RSZ94] Evguenii A Rakhmanov, EB Saff, and YM Zhou. Minimal discrete energy on the sphere. *Math. Res. Lett*, 1(6):647–662, 1994.
- [Sch13] Richard Evan Schwartz. The five-electron case of Thomson's problem. *Experimental Mathematics*, 22(2):157–186, 2013.
- [Sil89] Joseph H. Silverman. Review: Serge Lang, Introduction to Arakelov theory. Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.), 21(1):171–176, 07 1989.
- [SK97] E.B. Saff and A.B.J. Kuijlaars. Distributing many points on a sphere. *The Mathematical Intelligencer*, 19(1):5–11, 1997.
- [Sma98] Steve Smale. Mathematical problems for the next century. The Mathematical Intelligencer, 20(2):7–15, 1998.
  - [SS93] Michael Shub and Steve Smale. Complexity of Bezout's theorem: III. Condition Number and Packing. *Journal of Complexity*, 9(1):4 14, 1993.
- [Why52] L. L. Whyte. Unique arrangements of points on a sphere. The American Mathematical Monthly, 59(9):pp. 606–611, 1952.

# Anexo 1. Programas utilizados

Presentamos una relación de los programas implementados para la realización del trabajo ordenados por capítulos. Como mencionamos en la introducción, todos ellos han sido elaborados para el programa SAGE.

## Capítulo 2. Estudio de dos modelos de configuración

```
# Comenzamos definiendo la energía de Riesz asociada a 5 puntos distribuidos de forma piramidal.
```

```
var('h,s')
E_piramidal(h,s) = 4/(sqrt(2*h)^s) + 4/(sqrt(2*h*(2-h))^s) +
2/(2*sqrt(h*(2-h)))^s
E_piramidal(h,s)
```

# Calculamos la primera derivada de la energía respecto de h y dibujamos su gráfica para s=0.01 y s=30

```
E_piramidal1 = E_piramidal.diff(h)
P1 = plot(E_piramidal1(h,0.01),(1,1.8),rgbcolor=(0,1,0))
P2 = plot(E_piramidal1(h,30),(1,1.5),rgbcolor=(1,0,0))
P1
```

# Definimos un programa que calcule el h mínimo para cada s mediante el método de bisección.

```
def myh_minimal(s):
    a = 1
                              # Porque E'(1,s)<0 para todo 0<s<00
   b = 1.8
                              # Porque E'(1.8,s)>0 para todo 0<s<00
    c = b
    while E_piramidal1(b,s)>0.00000001:
                                           # Podemos poner la
    tolerancia que queramos.
        c = (a+b)/2
        if E_piramidal1(c,s)==0:
            return c
        elif E_piramidal1(c,s)>0:
            b = c
        else:
            a = c
    return c
\color{blue}
\begin{Verbatim}
# Vamos construyendo nuestro ejemplo.
L=[0.01, 0.02, .., 30]
for s in L:
   m = myh_minimal(s)
    L.append([s,m])
P2 = line(L, title = 'Grafico de $h$ que minimiza $E(h({s}),s)$ en
funcion de $s$', axes_labels=['$s$','$h({s})$'])
P2
# Continuamos dibujando la función E(h({s}),s) con h mínimo
para cada s.
G = []
for i in L:
    G.append([i[0],E_piramidal(i[1],i[0])])
P3 = line(G,title = 'Grafico de E(h({s}),s)' en funcion de $s$
para una estructura $piramidal$', axes_labels=['$s$','$E(h,s)$'])
РЗ
# Por último, vamos a comparar los gráficos de E(h,s) para
estructura piramidal y bipiramidal.
```

```
E_bipiramidal(s) = 1/(2^s) + 6/(sqrt(2)^s) + 3/(sqrt(3)^s)
E_bipiramidal(s)
P4 = plot(E_bipiramidal(s),(0,20),title = 'Grafico de $E(s)$ en
funcion de $s$ para una estructura $bipiramidal$', axes_labels=
['$s$','$E(s)$'])
# Dibujamos las dos gráficas juntas.
P = []
for i in L:
    P.append([i[0],E_bipiramidal(i[0])])
P4 = line(P,rgbcolor=(1,0,0),title = 'Grafico de $E(h,s)$ en
funcion de $s$ para una estructura $bipiramidal$ en rojo y
$piramidal$ en azul', axes_labels=['$s$','$E(h,s)$'])
P3 + P4
# Considerando los puntos s=2 y s=20 y el teorema de Bolzano,
podemos concluir que existe una solución en el intervalo (2,20).
Vamos a aproximarla.
# Lo primero que hacemos es definir la función diferencia
D(s)=E(h({s}),s)-E(s)
D(h,s) = E_{piramidal}(h,s) - E_{bipiramidal}(s)
# Que en el ejemplo, resulta:
De = []
j = 0
for i in G:
    De.append([i[0],(i[1]-P[j][1])])
    j = j+1
P5 = line(De,title = 'Grafico de $D(s)$ en funcion de $s$',
axes_labels=['$s$','$E(h,s)$'])
P5
# Vamos a definir ahora una función con el método de
bisección para calcular raíces de D(s)
```

```
def mybiseccion_D(a,b): # Con f(a) positivo y f(b) negativo
    c = b
    h = myh_minimal(c)
    while abs(D(h,c))>0.00000000001:
        c = (a+b)/2
        h = myh_minimal(c)
        if D(h,c)==0:
            return c
        elif D(h,c)>0:
            a = c
        else:
            b = c
    return c
# Y calculamos una raíz
m = mybiseccion_D(15, 16)
numerical_approx(m)
# Consideraremos ahora la función cociente C(s)=E(h(\{s\}),s)/E(s)
C(h,s) = E_piramidal(h,s)/E_bipiramidal(s)
# La dibujamos
C = []
j = 0
for i in G:
    C.append([i[0],(i[1]/P[j][1])])
    j = j+1
P6 = line(C,title = 'Grafico de $C(s)$ en funcion de $s$',
axes_labels=['$s$','$C(s)$'])
P6
# Creo que podemos acotar la función C(s) por log(s)/s; si
fuera así, está claro que la energía piramidal y la bipiramidal
no se vuelven a cruzar.
P7 = plot(0.9 + log(x)/x, (2,60), rgbcolor=(1,0,0))
P6 + P7
```

## Capítulo 3. Energía logarítmica

```
## Comenzamos dando la fórmula de la energía logarítimica. Para
lo cual, tenemos que dar antes una función que calcule la norma.
def my_dif(p,q):
                  # p y q son dos puntos que vienen dados como
una lista de 3 elementos.
   d = sqrt((p[0]-q[0])^(2)+(p[1]-q[1])^(2)+(p[2]-q[2])^(2))
   return d
def E_0(L): # L es una lista de puntos de RR^3
   energia = 1
   for punto in [0,..,len(L)-2]:
        for otro_punto in [punto+1,..,len(L)-1]:
            energia = energia*my_dif(L[punto],L[otro_punto])
    energia = -log(energia)
   return energia
## Vamos a hacer también una función que realice la proyección
estereográfica.
def P_E(punto):
                  # El punto tiene que darse como una lista
    if punto[2] == 0:
       punto_plano = 0
        punto_plano = (punto[2])/(punto[0] - punto[1]*i)
   return punto_plano
## Una función que nos calcule el polinomio asociado a unos puntos.
R.<z> = PolynomialRing(CC)
def my_poly(L): #L es una lista con los puntos que le pasamos
   f = 1
   for punto in L:
       f = f*(z - punto)
   return f
## Una función que devuelva la norma de Weyl de un polinomio.
```

```
R.<z> = PolynomialRing(CC)
def norm_Weyl(f):
                            # f polinomio
   n = f.degree(z)
   Lista_coef = f.coeffs()
   norma = 0
    for coef in Lista_coef:
        j = coef[1]
        a = coef[0]
        norma = norma + (((factorial(n))/(factorial(j)*factorial(n-
        j)))^(-1))*((abs(a))^2)
        j = j+1
    norma = sqrt(norma)
    return norma
## A continuación, daremos una función que calcule el
condicionamiento de un polinomio y una de sus raíces.
R.<z> = PolynomialRing(CC)
def my_cond_raiz(f,z0): # f polinomio y z0 raíz
   n = f.degree(z)
    f1 = derivative(f)
   mu = ((sqrt(n))*((1 + (abs(z0))^2)^((n-2)/(2)))*
    norm_Weyl(f))/(abs(f1(z0)))
    return mu
## Y ahora otro que nos calcule el condicionamiento total.
R.<z> = PolynomialRing(CC)
def my_cond_total(f):
                            # f polinomio
    raices = f.roots()
    condicionamientos = []
    for raiz in raices:
        condicionamientos.append(my_cond_raiz(f,raiz[0]))
    mu = max(condicionamientos)
    return mu
## Un programa que calcule el problema 2. (minimizar
sum(log(mu(f,xi))))
```

```
R.<z> = PolynomialRing(CC)
def my_2(f): # f es el polinomio que estamos considerando
   raices = f.roots()
   prod = 1
   for raiz in raices:
       prod = prod*(my_cond_raiz(f,raiz[0]))
   return prod
## Un programa que calcule posibles soluciones al problema 3.
R. <z> = PolynomialRing(CC)
def my_3(f): # f es el polinomio que estamos considerando
   raices = f.roots()
   prod = 1/(norm_Weyl(f))
   for raiz in raices:
       prod = prod*sqrt(1 + (abs(raiz[0])^(2)))
   return prod
##-----##
## TRANSCRIBIMOS LAS CUENTAS REALIZADAS PARA LAS
## ESTRUCTURAS PIRAMIDAL Y BIPIRAMIDAL
                                                          ##
                          ESTRUCTURA BIPIRAMIDAL
R.<z> = PolynomialRing(CC)
p1 = [1/2, 0, 1/2]
p2 = [0, -sqrt(3)/4, 3/4]
p3 = [0, sqrt(3)/4, 3/4]
p4 = [0,0,0]
p5 = [-1/2, 0, 1/2]
puntos = [p1, p2, p3, p4, p5]; puntos
## Calculamos el valor de la energía para la estructura bipiramidal.
```

```
Eb = E_0([p1,p2,p3,p4,p5])
Eb.numerical_approx()
puntos_plano = []
for punto in puntos:
    puntos_plano.append(P_E(punto))
puntos_plano
f = my_poly(puntos_plano).expand(); f
f.coeffs()
norm_Weyl(f)
for punto in puntos_plano:
    my_cond_raiz(f,punto).simplify()
my_cond_total(f).numerical_approx()
M2b = my_2(f); M2b; M2b.simplify(); M2b.numerical_approx()
M3b = my_3(f); M3b; M3b.simplify(); M3b.numerical_approx()
## Comprobamos que hemos hecho bien las cuentas
\color{black}
\begin{Verbatim}
n = 5
(((1/2)*log(M2b)) + ((n/2)*(log(M3b))) - ((n/4)*log(n))).
numerical_approx(); Eb.numerical_approx()
## Aún es más:
bool((((1/2)*log(M2b)) + ((n/2)*(log(M3b))) - ((n/4)*log(n)))
== Eb)
                            ESTRUCTURA PIRAMIDAL
R.<z> = PolynomialRing(CC)
```

```
p1 = [0, sqrt(15)/8, 5/8]
p2 = [sqrt(15)/8, 0, 5/8]
p3 = [0, -sqrt(15)/8, 5/8]
p4 = [-sqrt(15)/8, 0, 5/8]
p5 = [0,0,0]
puntos = [p1, p2, p3, p4, p5]; puntos
## Calculamos el valor de la energía para la estructura piramidal.
Ep = E_0([p1,p2,p3,p4,p5])
Ep.numerical_approx()
puntos_plano = []
for punto in puntos:
    puntos_plano.append(P_E(punto))
puntos_plano
f = my_poly(puntos_plano).expand(); f
norm_Weyl(f)
for punto in puntos_plano:
    my_cond_raiz(f,punto).simplify()
my_cond_total(f); my_cond_total(f).simplify();
my_cond_total(f).numerical_approx()
M2p = my_2(f); M2p; M2p.simplify(); M2p.numerical_approx()
M3p = my_3(f); M3p; M3p.simplify(); M3p.numerical_approx()
## Comprobamos que hemos hecho bien las cuentas
n = 5
(((1/2)*log(M2p)) + ((n/2)*(log(M3p))) - ((n/4)*log(n))).
numerical_approx(); Ep.numerical_approx()
## Aún es más:
bool((((1/2)*log(M2p)) + ((n/2)*(log(M3p))) - ((n/4)*log(n)))
 == Ep)
```

## Capítulo 4. Líneas de trabajo futuro

```
var('h,z')
R = CC['h']['z']
R.inject_variables()
R.base_ring().inject_variables()
p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
p5 = [0,0,0]
puntos = [p1, p2, p3, p4, p5]; puntos
## Calculamos el valor de la energía para la estructura piramidal.
Ep = E_0([p1,p2,p3,p4,p5])
Ep.factor()
puntos_plano = []
for punto in puntos:
    puntos_plano.append(P_E(punto))
puntos_plano
f = my_poly(puntos_plano).expand(); f
norm_Weyl(f).simplify()
for punto in puntos_plano:
    my_cond_raiz(f,punto).factor()
my_cond_total(f); my_cond_total(f).simplify()
M2p = my_2(f); M2p; M2p.simplify()
M3p = my_3(f); M3p; M3p.simplify()
```

```
## Damos valores a h
H = [0.5, 0.5001, ..., 0.75];
L1 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    m1 = E_0([p1,p2,p3,p4,p5])
    L1.append([i,m1])
P1 = line(L1, title = 'Grafico de la energia logaritmica en
funcion de $h$', axes_labels=['$h$','$E_{0}$'])
P1
L2 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m2 = my_2(f)
    L2.append([i,m2])
P2 = line(L2, title = 'Grafico de $M(h)$', axes_labels=['$h$',
'$M(h)$'])
temp = 10
for i in L2:
    if i[1]<temp:</pre>
        temp = i[1]
        temp2 = i[0]
temp2; temp.numerical_approx()
```

```
L3 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m3 = my_3(f)
    L3.append([i,m3])
P3 = line(L3, title = 'Grafico de N(h)', axes_labels=['$h$',
'$N(h)$'])
temp = 4
for i in L3:
    if i[1]>temp:
        temp = i[1]
        temp2 = i[0]
L4 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m4 = my_cond_total(f)
    L4.append([i,m4])
P4 = line(L4, title = 'Grafico del condicionamiento de $f$ en
funcion de $h$', axes_labels=['$h$','$E_{0}$'])
P4
```

## La pérdida de diferenciabilidad puede deberse a que el mínimo pasa de ser la raiz nula a una de las raices cuadradas!

```
L5 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m5 = norm_Weyl(f)
    L5.append([i,m5])
P5 = line(L5, title = 'Grafico de $||f||$ en funcion de $h$',
axes_labels=['$h$','$||f||$'])
P5
## Grafico del condicionamiento de los puntos no nulos.
L6 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m6 = norm_Weyl(f)
    m6 = (sqrt(5)/4)*(sqrt(1-h)/(h^2))*(m6)
    L6.append([i,m6])
P6 = line(L6, title = 'Condicionamiento de los puntos no nulos en
funcion de $h$', axes_labels=['$h$','$\mu$'])
Р6
```

## Grafico del condicionamiento de los puntos nulos.

```
L7 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m7 = norm_Weyl(f)
    m7 = (sqrt(5))*(((1-h)^2)/(h^2))*(m7)
    L7.append([i,m7])
P7 = line(L7, title = 'Condicionamiento de los puntos nulos en
funcion de $h$', axes_labels=['$h$','$\mu$'])
## Grafico de M hecho a mano.
L8 = []
for i in H:
    h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m8 = norm_Weyl(f)
    m8 = (sqrt(5))*(((1-h)^2)/(h^2))*(m8)*((sqrt(5)/4)*
    (sqrt(1-h)/(h^2))*(m8))^4
    L8.append([i,m8])
P8 = line(L8, title = 'Condicionamiento de los puntos nulos en
funcion de $h$', axes_labels=['$h$','$\mu$'])
```

```
L9 = []
for i in H:
   h = i
    p1 = [0, sqrt(h*(1-h)), h]
    p2 = [sqrt(h*(1-h)), 0, h]
    p3 = [0, -sqrt(h*(1-h)), h]
    p4 = [-sqrt(h*(1-h)), 0, h]
   p5 = [0,0,0]
    puntos_plano = []
    for punto in [p1,p2,p3,p4,p5]:
        puntos_plano.append(P_E(punto))
    f = my_poly(puntos_plano)
    m9 = norm_Weyl(f)
    L9.append([i,m9])
P9 = line(L9, title = 'Grafico de $||f||$ en funcion de $h$',
axes_labels=['$h$','$||f||$'])
```