



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

TESIS DE MAGÍSTER

**Implementación numérica para la
resolución de un problema isoperimétrico
no-local con término de Riesz**

Autor: Xavier Carrera Carrasco

*Tesis presentada a la Facultad de Matemáticas de la
Pontificia Universidad Católica de Chile para optar al grado de
Magíster en Matemáticas*

Comisión de Tesis:

Mircea Petrache (Pontificia Universidad Católica de Chile)
Duvan Henao (Universidad de O'Higgins)
Andrés Zúñiga (Universidad de O'Higgins)

Octubre 2023
Santiago, Chile

Dedicada a mi familia.

Agradecimientos

Quiero partir agradeciendo profundamente a los profesores Andrés y Duvan por su inmenso apoyo, compromiso y valiosa ayuda que me entregaron a lo largo de este trabajo. Fue un proceso extenso, lleno de aprendizajes y con constantes reuniones y viajes, que sin duda, jamás olvidaré. Al profesor Mircea, gracias por su excelente disposición y por aceptar ser parte de la comisión. A los profesores Gonzalo Muñoz y Alex Di Genova, gracias por guiarnos en el eje central de nuestra investigación como lo fue el manejo del solver IPOPT y en el acceso al centro de cómputo de alto rendimiento de la Universidad de O'Higgins. Esto no habría sido posible sin ustedes, muchas gracias.

Agradecer a mis padres Barbarita y Rodolfo, por el cariño, la dedicación y por entregar a mis hermanos y a mí, las mejores enseñanzas y herramientas para desempeñarnos en la vida. Gracias por estar siempre.

Para terminar, a la Facultad de Matemáticas le agradezco la oportunidad de participar en el programa de Magíster, y proporcionar un entorno enriquecedor para el aprendizaje y la investigación. Ha sido una experiencia formativa inigualable, y estoy seguro de que los conocimientos adquiridos y las habilidades desarrolladas aquí, serán una base sólida sobre la cual construiré mi carrera como docente e investigador.

Esta tesis fue parcialmente financiada por ANID a través de los proyectos FONDECYT Iniciación 11201259 (IR Andrés Zúñiga), FONDECYT Regular 1190018 (IR Duvan Henao) y FONDECYT Regular 1231401 (IR Duvan Henao).

Introducción

En la siguiente tesis trabajamos en proporcionar un método numérico para abordar el problema isoperimétrico no local

$$e(\lambda) := \inf\{\mathcal{E}_\lambda(E) : |E| = m\}, \quad (1)$$

sobre conjuntos de perímetro finito $E \subset \mathbb{R}^n$ con volumen dado, donde $|\cdot|$ denota la medida de Lebesgue en \mathbb{R}^n , y el funcional de energía \mathcal{E}_λ es definido por

$$\mathcal{E}_\lambda(E) := \mathcal{P}er(E) + \lambda \mathcal{V}_\alpha(E) \quad (2)$$

donde

- $\mathcal{P}er(E)$ es el perímetro de E ,
- $\mathcal{V}_\alpha(E) := \int_{E \times E} \frac{1}{|x - y|^{n-\alpha}} dx dy$ es la energía de interacción no local de tipo Riesz,
- $\lambda > 0$ es un parámetro que controla el término de Riesz,
- n es la dimensión del espacio ambiente,
- $m > 0$ es la masa,
- $\alpha \in (0, n)$ es una constante que controla el orden (homogeneidad) del término de Riesz.

Nuestro trabajo comienza con el estudio del problema variacional

$$e_{\mathbf{a}}(\lambda) := \inf\{\mathcal{E}_{\mathbf{a},\lambda}(E) : |E| = 1\}, \quad (3)$$

con

$$\mathcal{E}_{\mathbf{a},\lambda}(E) := \mathcal{P}er_{\mathbf{a}}(E) + \lambda \mathcal{V}_\alpha(E) \quad (4)$$

sobre conjuntos $E \subset \mathbb{R}^n$ con perímetro finito y volumen $|E| = 1$. $\mathcal{P}er_{\mathbf{a}}(E)$ denota el perímetro de E en \mathbb{R}^n con una densidad $\mathbf{a}(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty)$. Cuando la densidad $\mathbf{a}(x) \equiv 1$ escribiremos $\mathcal{P}er(E)$. El problema que estudiamos (1) es un caso particular de (3) para $\mathbf{a}(x) \equiv 1$ y conjuntos $E \subset \mathbb{R}^n$ con volumen $|E| = m > 0$.

En [1] demuestran que para una amplia clase de funciones de densidad $\mathbf{a}(x)$, el problema (3) admite un minimizador (acotado) para cualquier valor de λ . También se prueba que para densidades monomiales de la forma $\mathbf{a}(x) = |x|^p$, y cuando λ es suficientemente pequeño, el único minimizador es dado por una bola de volumen 1.

La minimización del problema (3) es una variante del clásico modelo de gotas líquidas de Gamow [2] cuando $\mathbf{a}(x) \equiv 1$. La principal característica de este problema geométrico variacional es la competencia directa de los términos presentes en el funcional de energía. Cuando $\mathbf{a}(x) \equiv 1$, la energía superficial es minimizada por una bola mientras que el término repulsivo no admite un minimizador y prefiere minimizar las secuencias con múltiples componentes pequeñas que se separan infinitamente para dispersar la masa. El parámetro λ establece una escala de longitud entre estas fuerzas que compiten e impulsa la competencia entre las interacciones de corto y largo alcance. Este problema generó un considerable interés en la comunidad del cálculo de variaciones con importantes artículos que estudian reglas de existencia y no existencia de minimizadores (ver [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]). Resultados de [7, 11, 13], por ejemplo, muestran que para valores grandes de λ , la energía (4) con $\mathbf{a}(x) \equiv 1$ no admite un minimizador. También hay varios estudios [3, 4, 12] que caracterizan las secuencias de minimización incluso cuando los minimizadores no existen. En particular, en [3], el autor usa una regularización de la energía agregando un potencial externo atractivo que garantiza la existencia de minimizadores para todos los valores de λ .

En el año 2018, François Généraux y Edouard Oudet [16] presentan un método para la minimización numérica de (1) con $\lambda = 1$, es decir

$$\inf_{E \subset \mathbb{R}^n} \{Per(E) + \mathcal{V}_\alpha(E) : |E| = m\}, \quad (5)$$

y lo utilizaremos en esta tesis para todo $\lambda > 0$. Este método consiste en realizar una serie de tres modificaciones al problema variacional para llegar a un problema variacional de dimensión finita el cual puede ser resuelto numéricamente. Todos los pasos son justificados por Γ -convergencia [17] y resultados de compacidad.

- Paso 1. Trabajamos con el perímetro ocupando el teorema clásico de Modica-Mortola para relajar el funcional sobre conjuntos de \mathbb{R}^n . Esto permite utilizar la estructura de espacio vectorial de funciones, y después de la discretización (Paso 3), las herramientas usuales de optimización de funcionales en \mathbb{R}^n .
- Paso 2. Para el término no-local \mathcal{V}_α se reemplaza el espacio ambiente \mathbb{R}^n por un cuadrado grande con condiciones periódicas de borde, cuyo tamaño es un nuevo parámetro de relajación. Entonces podemos aproximar el término no local \mathcal{V}_α mediante una expresión en una variable de Fourier.
- Paso 3. Se discretiza el problema considerando sólo funciones trigonométricas con frecuencias menores que algún entero N , y se calculan las integrales mediante sumas de Riemann.

La minimización numérica es hecha usando el solver IPOPT [18]. Interior Point Optimizer (IPOPT) es un paquete de software de código abierto para la optimización no lineal a gran escala. Se puede utilizar para resolver problemas generales de programación no lineal de la forma

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

sujeto a las restricciones

$$g^L \leq g(x) \leq g^U$$

$$x^L \leq x \leq x^U,$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ son las variables de optimización (posiblemente con límites inferior y superior, $x^L \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$ y $x^U \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$) con $x^L \leq x^U$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es la función objetivo, y $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ son las restricciones, generales no lineales. Las funciones $f(x)$ y $g(x)$ pueden ser lineales o no lineales y convexas o no-convexas (pero deben ser dos veces continuamente diferenciables). Las funciones de restricción, $g(x)$, tienen límites inferior y superior, $g^L \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^m$ y $g^U \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^m$ con $g^L \leq g^U$.

También realizamos una implementación numérica parcial de (1) con solamente el funcional de perímetro a través de NGSolve con el método de elementos finitos. El método de elementos finitos es una técnica numérica utilizada para resolver problemas de ingeniería y física en los que se busca encontrar aproximaciones numéricas a soluciones de ecuaciones diferenciales parciales o problemas de valor en la frontera. El método divide el dominio del problema en elementos más pequeños y discretiza las ecuaciones diferenciales en cada elemento, luego resuelve el sistema de ecuaciones resultante para obtener una aproximación de la solución global. Este método es muy útil para modelar y analizar sistemas complejos que no tienen soluciones analíticas exactas. El software NGSolve es una biblioteca de elementos finitos de código abierto desarrollada en el lenguaje de programación C++ y Python. Está diseñada para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales utilizando el método de elementos finitos. Ofrece una interfaz amigable para trabajar con geometrías complejas y mallas, lo que facilita la descripción de regiones de interés y la generación de discretizaciones adecuadas para la resolución numérica. Además, se integra bien con otras bibliotecas y herramientas de análisis numérico lo que amplía su utilidad y versatilidad.

Esta tesis se divide en siete capítulos que se desarrollan de la siguiente forma:

- Capítulo 1: Aspectos preliminares del problema variacional en estudio.
- Capítulo 2: Se describe el método de minimización numérica propuesto por François Généaux y Edouard Oudet.
- Capítulo 3: Minimización numérica en Matlab a través de los solver de programación cuadrática quadprog y programación no lineal fmincon.
- Capítulo 4: Minimización numérica en Julia con el solver IPOPT.
- Capítulo 5: Minimización numérica del funcional de perímetro en NGSolve.
- Capítulo 6: Conclusiones y futuras direcciones de investigación.
- Capítulo 7: Apéndice con los códigos utilizados en las implementaciones.

Esperamos que este trabajo sea del agrado del lector.

Índice general

1. Aspectos Preliminares	7
2. Método de Minimización Numérica de Génériaux y Oudet	13
2.1. Gamma Convergencia	13
2.2. Discretización del perímetro	16
2.3. Discretización del término no local	16
2.4. Discretización del problema variacional	17
2.5. Resultados Numéricos	18
3. Minimización Numérica en Matlab: Quadprog y Fmincon	22
3.1. Quadprog y Fmincon	22
3.2. Implementación en Matlab	24
4. Minimización Numérica en Julia: IPOPT	47
4.1. IPOPT	47
4.2. Implementación en Julia	56
4.3. Simulaciones	75
5. Minimización Numérica con NGSolve	102
5.1. NGSolve	102
5.2. Resolución Espacial	103
5.3. Minimización del Perímetro	109
6. Conclusiones y Futuras Direcciones de Investigación	123
7. Apéndice	127

Capítulo 1

Aspectos Preliminares

Antes de comenzar nuestro estudio enunciamos definiciones y teoremas para comprender el problema variacional en estudio (1).

Definición 1.0.1. Sea $F \subseteq \mathbb{R}^n$ un conjunto abierto y sea $f \in L^1(F)$. Se define

$$\int_F |Df| = \sup \left\{ \int_F f \operatorname{div}(X(x)) \, dx : X \in C_c^1(F; \mathbb{R}^n) \right. \\ \left. \text{y } |X(x)| \leq 1 \text{ para } x \in F \right\},$$

donde $\operatorname{div} X = \sum_{i=1}^n \frac{\partial X_i}{\partial x_i}$.

Ejemplo 1.0.1. Si $f \in C^1(F)$, entonces por integración por partes

$$\int_F f \operatorname{div}(X(x)) \, dx = - \int_F \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} X_i \, dx$$

para cada $X \in C_c^1(F; \mathbb{R}^n)$, entonces

$$\int_F |Df| = \int_F |\operatorname{grad} f| \, dx,$$

donde $\operatorname{grad} f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$.

Más generalmente, si f pertenece al espacio de Sobolev $W^{1,1}(F)$, entonces

$$\int_F |Df| = \int_F |\operatorname{grad} f| \, dx$$

donde $\operatorname{grad} f = (f_1, f_2, \dots, f_n)$ y f_1, f_2, \dots, f_n son las derivadas generalizadas de f .

Definición 1.0.2. Una función $f \in L^1(F)$ se dice que es de variación acotada en F si $\int_F |Df| < \infty$. Se define $BV(F)$ como el espacio de todas las funciones en $L^1(F)$ con variación acotada.

Ejemplo 1.0.2. Se puede ver en el Ejemplo 1.0.1 que $W^{1,1}(F) \subseteq BV(F)$. El hecho que los dos espacios no son iguales se puede ver en el siguiente ejemplo. Suponga que $E \subseteq \mathbb{R}^n$ tiene borde C^2 y considere \mathcal{X}_E , la función característica de E , que se define por

$$\mathcal{X}_E(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in E \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R}^n - E \end{cases}$$

Si adicionalmente E es acotado, entonces

$$\int_F \mathcal{X}_E \, dx = |E \cap F| = \text{medida de Lebesgue de } E \cap F$$

y $\mathcal{X}_E \in L^1(F)$. Sin embargo, \mathcal{X}_E no pertenece a $W^{1,1}(F)$.

Suponga que $X \in C_c^1(F, \mathbb{R}^n)$. Entonces por el Teorema de Gauss-Green,

$$\int_F \mathcal{X}_E \operatorname{div}(X(x)) \, dx = \int_{E \cap F} \operatorname{div}(X(x)) \, dx = \int_{\partial E \cap F} X(x) \cdot \nu(x) \, d\mathcal{H}^{n-1},$$

donde $\nu(x)$ es el vector unitario normal a ∂E en x y \mathcal{H}^{n-1} es la medida de Hausdorff $(n-1)$ -dimensional.

Ahora $|\nu(x)| = 1$, entonces, si $|X(x)| \leq 1$ y $X \in C_c^1(F, \mathbb{R}^n)$, entonces

$$\int_{\partial E} X(x) \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1} \leq \mathcal{H}^{n-1}(\partial E \cap F),$$

y por lo tanto

$$\int_F |D\mathcal{X}_E| = \sup \left\{ \int_F \mathcal{X}_E \operatorname{div}(X(x)) \, dx : X \in C_c^1(F, \mathbb{R}^n), |X(x)| \leq 1 \right\} \leq \mathcal{H}^{n-1}(F \cap \partial E) < \infty.$$

De este modo $\mathcal{X}_E \in BV(F)$ y de hecho

$$\int_F |D\mathcal{X}_E| = \mathcal{H}^{n-1}(\partial E \cap F)$$

para probar esto sólo necesitamos mostrar que

$$\int_F |D\mathcal{X}_E| \geq \mathcal{H}^{n-1}(\partial E \cap F)$$

Ya que E es de borde C^2 , $\nu(x)$ será una función vectorial C^1 de x con $|\nu(x)| = 1$ y por lo que puede extenderse a una función N , definido en la totalidad de \mathbb{R}^n , tal que $N \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ y $|N(x)| \leq 1$ para todo x . Ahora si $\eta \in C_c^\infty(F)$ y $|\eta| \leq 1$, entonces tenemos, estableciendo que $X = N\eta$,

$$\int_{E \cap F} \operatorname{div}(X(x)) \, dx = \int_{\partial E \cap F} \eta \, d\mathcal{H}^{n-1}$$

de modo que

$$\int_F |D\mathcal{X}_E| \geq \sup \left\{ \int_{\partial E \cap F} \eta \, d\mathcal{H}^{n-1} : \eta \in C_c^\infty(F), |\eta| \leq 1 \right\} = \mathcal{H}^{n-1}(\partial E \cap F).$$

Es importante notar que si $f \in BV(F)$ y Df es el gradiente de f en el sentido distribucional, entonces Df es una medida de Radon y $\int_F |Df|$ es la variación total de Df en F . Entonces podemos ampliar la definición de $\int_A |Df|$ para incluir casos en los que $A \subset F$ no es necesariamente abierto.

En el Ejemplo 1.0.2 consideramos una clase particular de funciones en $BV(F)$, llamadas funciones características de conjuntos con borde suave. Ahora extendemos estas ideas a conjuntos más generales.

Definición 1.0.3. Sea E un conjunto de Borel y F un conjunto abierto en \mathbb{R}^n . Se define el perímetro de E en F como

$$\mathcal{P}er(E, F) = \int_F |D\mathcal{X}_E| = \sup \left\{ \int_E \operatorname{div}(X(x)) \, dx : X \in C_c^1(F; \mathbb{R}^n), |X(x)| \leq 1, \forall x \in F \right\}.$$

Si $F = \mathbb{R}^n$, denotamos $\mathcal{P}er(E) = \mathcal{P}er(E, \mathbb{R}^n)$. Diremos que un conjunto de Borel E tiene perímetro finito si $\mathcal{P}er(E, F) < \infty$ para todo conjunto abierto acotado F , o equivalentemente si $\mathcal{X}_E \in BV(F)$. Todo conjunto de Borel E que tiene perímetro localmente finito es llamado un conjunto de Caccioppoli.

Los conjuntos Caccioppoli tienen las siguientes propiedades

- (i) Si $F_1 \subseteq F_2$, $\mathcal{P}er(E, F_1) \leq \mathcal{P}er(E, F_2)$.
- (ii) $\mathcal{P}er(E_1 \cup E_2, F) \leq \mathcal{P}er(E_1, F) + \mathcal{P}er(E_2, F)$.
- (iii) Si $|E| = 0$, entonces $\mathcal{P}er(E) = 0$ y en particular,
Si $|E_1 \Delta E_2| = |(E_1 - E_2) \cup (E_2 - E_1)| = 0$, entonces $\mathcal{P}er(E_1) = \mathcal{P}er(E_2)$.

Si $\mathbf{a}(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty)$ es una función densidad, el perímetro ponderado por \mathbf{a} o el \mathbf{a} -perímetro de E en F se define por

$$\mathcal{P}er_{\mathbf{a}}(E, F) = \sup \left\{ \int_E \operatorname{div}(\mathbf{a}(x)X(x)) \, dx : X \in C_c^\infty(F; \mathbb{R}^n), \|X\|_{L^\infty} \leq 1 \right\}.$$

Notemos que $\mathcal{P}er_{\mathbf{a}}(E, F) = \mathcal{H}_{\mathbf{a}}^{n-1}(\partial^*E \cap F)$ con $\mathcal{H}_{\mathbf{a}}^{n-1}(E) := \int_E \mathbf{a}(y) \, d\mathcal{H}^{n-1}(y)$, donde ∂^*E denota el borde reducido de E (colección de puntos de ∂E para los que la normal $\nu_E(x) \in \mathbb{S}^{n-1}$ está definida en medida). Al igual que antes, diremos que $\mathcal{X}_E \in BV_{\mathbf{a}}(F)$ si $\mathcal{P}er_{\mathbf{a}}(E, F) < \infty$. Los perímetros con densidad de conjuntos en todo el espacio, es decir, cuando $F = \mathbb{R}^n$ es denotado por $\mathcal{P}er_{\mathbf{a}}(E)$ o $\int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{a}(x) |D\mathcal{X}_E(x)|$. Denotaremos el perímetro Euclidiano (cuando $\mathbf{a}(x) \equiv 1$) por $\mathcal{P}er(E)$, es decir, el perímetro usual.

La inclusión de una densidad de confinamiento en el funcional de perímetro proporciona un tipo diferente de “regularización” del problema (3). El primer resultado de [1] establece la compacidad de cualquier sucesión minimizante con convergencia global a un minimizador para todo $\lambda \geq 0$, y para una amplia clase de densidades, que satisfacen una condición de coercitividad simple:

(A1) $\mathbf{a} \in C^0(\mathbb{R}^n)$, $\mathbf{a}(0) = 0$, $\mathbf{a}(x) > 0$ para todo $x \neq 0$, y $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \mathbf{a}(x) = +\infty$.

Para enunciar el resultado de existencia, recordemos que conjuntos $E_n \rightarrow E$ globalmente si $|E_n \Delta E| \rightarrow 0$, esto es, sus funciones características $\mathcal{X}_{E_n} \rightarrow \mathcal{X}_E$ en la norma $L^1(\mathbb{R}^n)$.

Teorema 1.0.1. (Existencia de minimizadores) Sea \mathbf{a} una densidad que satisface (A1), y sea $\lambda \geq 0$ fijo. Entonces cualquier sucesión minimizante $\{E_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ para el problema (3) admite una subsucesión que converge globalmente a un minimizador $E_\lambda \subset \mathbb{R}^n$ con $|E_\lambda| = 1$ y $\mathcal{X}_{E_\lambda} \in BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$.

Para la demostración del Teorema (1.0.1) ver [1, págs 6-8].

Se observa que la naturaleza coerciva de \mathbf{a} en el infinito asegura la existencia de minimizadores para (3), esencialmente porque la división de la masa en el infinito (la razón principal para la falta de compacidad en el problema isoperimétrico no local) es demasiado costosa. Sin embargo, no garantiza que los minimizadores deban ser conjuntos conexos. En efecto, para λ grande las interacciones no locales deberían volverse lo suficientemente grandes como para favorecer la fragmentación de conjuntos, que se repelerán pero estarán contenidos a una distancia finita. Este comportamiento es también observado en problemas isoperimétricos no locales con un término de confinamiento [3].

El resultado de existencia se basa en una versión modificada de la desigualdad isoperimétrica relativa en anillos y requiere sólo la suposición mínima (A1) sobre las densidades $\mathbf{a}(x)$. Por otra parte, probar el acotamiento de minimizadores es un paso técnico y se demuestra bajo uno de los siguientes supuestos estructurales adicionales:

(A2a) $\mathbf{a} \in C_{\text{loc}}^{0,1}(\mathbb{R}^n)$ y existen constantes $C_{\mathbf{a}} \geq 1$ y $R_{\mathbf{a}} \geq 1$ tal que para cada $R \geq R_{\mathbf{a}}$ se tiene

$$0 < \sup_{B_{2R} \setminus B_R} \mathbf{a} \leq C_{\mathbf{a}} \inf_{B_{2R} \setminus B_R} \mathbf{a}.$$

(A2b) $\mathbf{a} \in C_{\text{loc}}^{0,1}(\mathbb{R}^n)$, $\mathbf{a}(x) = \mathbf{a}(|x|)$ y existe $R_{\mathbf{a}} \geq 1$ tal que \mathbf{a} es no-decreciente para $|x| \geq R_{\mathbf{a}}$.

Para densidades que satisfagan cualquiera de las condiciones adicionales (A2a) o (A2b), utilizando resultados de regularidad de cuasi-minimizadores, se obtiene la acotación de minimizadores para el problema (3).

Teorema 1.0.2. (Acotamiento de minimizadores) Para una densidad $\mathbf{a}(x)$ que satisface (A1) y (A2a) o (A2b), y para cualquier $\lambda \geq 0$, todo minimizador E_λ de (3) es esencialmente acotado.

La demostración del Teorema (1.0.2) se puede encontrar en [1, págs. 8 - 20].

Se requiere la suposición (A1) en Teorema (1.0.2) sólo para obtener la existencia de un minimizador de (3). Si la existencia de un minimizador pudiera obtenerse bajo otras condiciones, (A2a) o (A2b) serían suficientes para obtener la acotación de los minimizadores.

Teorema 1.0.3. (Minimizadores globales para λ pequeño) Sea $\mathbf{a}(x) = |x|^p$ con $p > 0$. Para λ suficientemente pequeño, la bola $B \subset \mathbb{R}^n$ de volumen 1, centrada en el origen es el único minimizador de (3).

La demostración del Teorema (1.0.3) (ver en [1, págs. 20 - 25]) se basa en una técnica de penalización, similar a la usada en varios problemas geométricos variacionales que involucran el funcional de perímetro. Utilizando resultados de la teoría de regularidad para perímetros con densidad, se reducen los minimizadores del problema no local a conjuntos casi esféricos o isoperimétricos en el régimen cuando λ es pequeño. Sin embargo, la novedad aquí es que no se puede aplicar directamente los resultados de la literatura debido a la degeneración de la densidad \mathbf{a} en el origen y la posibilidad de pequeños componentes no lisos de $\partial^* E_\lambda$ cerca del origen. Una vez que se reduce el problema a conjuntos casi esféricos, se ocupa un argumento tipo Fuglede (ver [19]) para controlar los déficits isoperimétricos y no locales entre los minimizadores y la bola y mostrar que para pequeños $\lambda > 0$ estas cantidades tienen que ser idénticamente cero.

El régimen cuando λ es grande es también muy interesante, pero este análisis requiere un enfoque muy diferente. Mientras que la existencia de minimizadores es garantizada por Teorema (1.0.1), en el régimen cuando $\lambda \gg 1$, el término no local es dominante y prefiere que los minimizadores se rompan en pedazos más pequeños distribuidos en un conjunto compacto cuyo tamaño está determinado por el término de confinamiento \mathbf{a} . Por lo tanto, la caracterización de minimizadores (es decir, la forma de las componentes disconexas, así como su ubicación) depende del delicado equilibrio entre las formas preferidas dictadas por el perímetro con densidad y las interacciones entre componentes. Un fenómeno similar es visto en modelos de mezclas de copolímeros/homopolímeros. Si bien la existencia de minimizadores se obtiene para todos los valores de m en [20], solo en el régimen cuando m es pequeño los minimizadores se caracterizan de manera única, lo que deja abierta la pregunta de la morfología precisa de las configuraciones de minimización para m grande.

En el modelo de gotas líquidas (George Gamow 1930), se demostró que para el problema variacional

$$\inf_{E \subset \mathbb{R}^n} \{ \mathcal{P}er(E) + \mathcal{V}_\alpha(E) : |E| = m \},$$

existen constantes $0 < m_1^* \leq m_2^*$ tal que para

- Masas pequeñas: $\forall m \in (0, m_1^*)$ la bola de volumen m es el único minimizador. Ver [11], [4].
- Masas grandes: Si $m > m_2^*$ y $\alpha \in (0, 2)$ no existen minimizadores. Ver [13]

La conjetura de Choksi-Peletier (2011) establece que: $m_1^* = m_2^*$.

El caso tridimensional que tiene relevancia para la física nuclear, es estudiado en [21], donde consideran un conjunto medible $E \subseteq \mathbb{R}^3$, y un funcional de energía definido por

$$I(E) := \mathcal{P}er(E) + \frac{1}{2} \int_E \int_E G(\vec{x}, \vec{y}) \, d\vec{x}d\vec{y} \quad (1.1)$$

con $G(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|}$, bajo la restricción de volumen $|E| = V := 40\pi\chi$, donde χ es llamado parámetro de fisibilidad, y $\mathcal{P}er(E)$ denota la superficie de E (en el caso 2-dimensional es el perímetro usual de E). Bajo la restricción de volumen, una bola minimiza el primer término de perímetro de (1.1) debido a la desigualdad isoperimétrica, pero maximiza el segundo término debido a la desigualdad de Riesz. Para $\chi \ll 1$, el primer término es dominante, y el minimizador global E de $I = I(E)$ se espera que sea una bola. Para $\chi \gg 1$, el segundo término es dominante, y se espera que E se divida en muchos fragmentos para evitar que el segundo término crezca demasiado. En efecto, cuando χ excede $\chi_2 := (\sqrt[3]{2} + \sqrt[3]{4})^{-1} \approx 0.351$ una sola bola empieza a tener mayor energía que dos bolas de radios iguales separadas infinitamente.

De acuerdo a [22, Pág. 4437 y Teorema 3.4] y [23], existe $0 < \chi_2^- \leq \chi_2^+ \leq 4/5$ tal que:

- Para $\chi < \chi_2^-$, una bola es el único minimizador global,
- para $\chi = \chi_2^-$, una bola es un minimizador global,
- para $\chi > \chi_2^-$, una bola no es un minimizador global,
- para $\chi \in (0, \chi_2^+] \setminus O$, con algún conjunto abierto $O \subseteq (\chi_2^-, \chi_2^+)$, hay un minimizador global,
- para $\chi \in (\chi_2^+, \infty) \cup O$, no existe un minimizador global.

Evidentemente $\chi_2^- \leq \chi_2$. Existe la creencia generalizada, aunque no probada, de que $\chi_2^- = \chi_2^+ = \chi_2$. Para χ no muy pequeño, el minimizador global no se conoce rigurosamente. Sin embargo, se conocen varios resultados cualitativos conocidos. De acuerdo a [24] y [4, Teorema 2.7], cualquier minimizador local tiene bordes reducidos C^∞ y es esencialmente acotado con un número finito de componentes conexas; más aún, cualquier minimizador global es conexo. Aunque no exista un minimizador global para $\chi \in (\chi_2^+, \infty) \cup O$, siempre existe un minimizador global generalizado, que consiste en una colección finita de componentes conexas que están infinitamente alejados entre sí.

Nuestras motivaciones en esta tesis son

- Estudiar numéricamente los minimizadores del problema isoperimétrico no local (1) en el caso dos dimensional, y establecer un rango de existencia de minimizadores para diferentes valores de m y λ .
- Estudiar la conjetura de Choksi-Peletier sobre el rango de masas intermedias para la convergencia en el caso dos dimensional.
- Estudiar numéricamente el problema con pesos (3) cuando tenemos un perímetro con densidad $\mathbf{a}(x)$.

Capítulo 2

Método de Minimización Numérica de G en eraux y Oudet

Este cap ıtulo consiste en aplicar el m etodo de minimizaci on num erica desarrollado por Fran ois G en eraux y Edouard Oudet [16] a nuestro problema variacional (1). Primero, hablaremos de las herramientas claves como la Γ -convergencia y la compacidad, y luego describimos los pasos de la discretizaci on. Por  ultimo, se muestran los resultados num ericos que obtuvieron G en eraux y Oudet en su art ıculo.

2.1. Gamma Convergencia

En lo que sigue, X es un espacio m etrico con distancia d . Para la definici on de Γ -convergencia necesitamos lo siguientes preliminares:

Definici on 2.1.1. Sea $\mathcal{F} : X \rightarrow [-\infty, \infty]$. Se define el l ımite inferior de \mathcal{F} en x como

$$\liminf_{y \rightarrow x} \mathcal{F}(y) = \inf \left\{ \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}(x_k) : x_k \in X, x_k \rightarrow x, \exists \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}(x_k) \right\},$$

y el l ımite superior de \mathcal{F} en x como

$$\limsup_{y \rightarrow x} \mathcal{F}(y) = \sup \left\{ \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}(x_k) : x_k \in X, x_k \rightarrow x, \exists \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}(x_k) \right\}.$$

Definici on 2.1.2. Una funci on $\mathcal{F} : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ se dice semicontinua inferior en $x \in X$, si para toda sucesi on (x_k) que converge a x , cumple que

$$\mathcal{F}(x) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}(x_k),$$

o, en otras palabras, $\mathcal{F}(x) = \min \{ \lim_{k \rightarrow \infty} \inf \mathcal{F}(x_k) : x_k \rightarrow x \}$. Diremos que \mathcal{F} es semicontinua inferior (en X) si es semicontinua inferior para todo $x \in X$.

Note que las siguientes condiciones son equivalentes:

1. \mathcal{F} es semicontinua inferior
2. $\mathcal{F}(x) = \lim_{y \rightarrow x} \inf \mathcal{F}(y)$ para todo $x \in X$,

3. para todo $t \in \mathbb{R}$ el conjunto de subnivel $\{\mathcal{F} \leq t\}$ es cerrado.

Una función $\mathcal{F} : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ es llamada semicontinua superior si $-\mathcal{F}$ es semicontinua inferior.

Ahora podemos enunciar la definición de Γ -convergencia.

Definición 2.1.3. (Γ -convergencia) Diremos que una sucesión $\mathcal{F}_k : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ Γ -converge en X a $\mathcal{F}_0 : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ si para todo $x \in X$ se tiene

(i) (desigualdad lím ínf) Para cada sucesión (x_k) que converge a x ,

$$\mathcal{F}_0(x) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k);$$

(ii) (desigualdad lím sup) existe una sucesión (x_k) que converge a x tal que

$$\mathcal{F}_0(x) \geq \limsup_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k)$$

La función \mathcal{F}_0 es llamada el Γ -límite de \mathcal{F}_k , y escribimos $\mathcal{F}_0 = \Gamma - \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k$.

Definición Puntual: La definición anterior también se puede dar en un punto fijo $x \in X$. Diremos que \mathcal{F}_k Γ -converge en x al valor $\mathcal{F}_0(x)$ si se cumple (i) y (ii). En tal caso escribimos $\mathcal{F}_0(x) = \Gamma - \lim_k \mathcal{F}_k(x)$. En esta notación, \mathcal{F}_k Γ -converge a \mathcal{F}_0 si y sólo si $\mathcal{F}_0(x) = \Gamma - \lim_k \mathcal{F}_k(x)$ para todo $x \in X$.

Diferentes formas de escribir la desigualdad lím sup : Note que si (x_k) satisface la desigualdad lím sup, entonces tenemos

$$\mathcal{F}_0(x) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k) \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k) \leq \mathcal{F}_0(x),$$

de modo que $\mathcal{F}_0(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k)$; por lo tanto, (ii) puede ser sustituido por

(ii)' (existencia de una sucesión de recuperación) existe una sucesión (x_k) convergente a x tal que

$$\mathcal{F}_0(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k).$$

(ii)'' (desigualdad lím sup aproximada) para todo $\varepsilon > 0$ existe una sucesión (x_k) convergente a x tal que

$$\mathcal{F}_0(x) \geq \limsup_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}_k(x_k) - \varepsilon.$$

Todas las condiciones (ii), (ii)' y (ii)'' se denominan igualmente desigualdad lím sup o existencia de una sucesión de recuperación.

Definición 2.1.4. Un subconjunto compacto K de X cumple que todas las sucesiones en K admiten una subsucesión convergente a algún punto en K . Es decir

$$\forall(x_k) \subset K, \exists x \in K, \exists(x_{k_j}) : x_{k_j} \rightarrow x.$$

Un conjunto $K \subset X$ es llamado precompacto si su clausura es compacta, esto es, todas las sucesiones en K , admiten una subsucesión convergente (pero su límite puede estar también fuera de K), es decir,

$$\forall(x_k) \subset K, \exists(x_{k_j}) : x_{k_j} \text{ converge en } X.$$

Lema 2.1.1. Si \mathcal{F}_k Γ -converge a \mathcal{F} , entonces

1. \mathcal{F} es semicontinua inferior.
2. Para $K \subset X$ compacto,

$$\inf_{x \in K} \mathcal{F}(x) \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \inf_{x \in K} \mathcal{F}_k(x)$$

3. Para $U \subset X$ abierto,

$$\inf_{x \in U} \mathcal{F}(x) \geq \lim_{k \rightarrow \infty} \sup_{x \in U} \inf_{x \in U} \mathcal{F}_k(x)$$

Definición 2.1.5. Una sucesión de funciones $\mathcal{F}_k : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ se dice equi-coerciva si toda sucesión u_k en X con $\mathcal{F}_k(u_k) \leq C < \infty$ tiene una subsucesión convergente para todo k .

Teorema 2.1.1. (Teorema Fundamental de la Γ -convergencia) Sea (X, d) un espacio métrico completo y considere $\mathcal{F}_k : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ una sucesión de funcionales equi-coerciva. Suponga que la sucesión Γ -converge a \mathcal{F}_0 , entonces

Si u_0 es un minimizador local aislado de \mathcal{F}_0 , es decir, si $\mathcal{F}_0(v) > \mathcal{F}_0(u_0)$ cuando $0 < d(u_0, v) \leq \delta$ para algún $\delta > 0$, entonces hay una sucesión $\{u_k\}$ de minimizadores locales de \mathcal{F}_k , definida para todo k suficientemente grande, tal que $d(u_k, u_0) \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow \infty$.

En [25] construyen minimizadores locales para problemas variacionales de la forma

$$\mathcal{F}_\varepsilon(u) = \int_E \left[\varepsilon |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} (u^2 - 1)^2 \right] dx.$$

con un método basado en el Teorema Fundamental de la Γ -convergencia (2.1.1). Se demuestra que en ciertos dominios no convexos $E \subset \mathbb{R}^n$ y para $\varepsilon > 0$ pequeño, existen minimizadores locales no constantes u^ε que satisfacen $u^\varepsilon \approx \pm 1$ excepto en una fina fase de transición. La ubicación de la fase se determina mediante el requisito de que en el límite $u^\varepsilon \rightarrow u^0$, la hypersuperficie que separa los estados $u^0 = 1$ y $u^0 = -1$ minimiza localmente la superficie. Más detalles en [25].

Diremos que una familia de funcionales $(\mathcal{F}_\varepsilon)_{\varepsilon > 0}$ definida en un espacio métrico X tiene propiedades de compacidad (C), si para cualquier familia $(u_\varepsilon)_{\varepsilon > 0}$ de elementos de X tal que $(\mathcal{F}_\varepsilon(u_\varepsilon))_{\varepsilon > 0}$ es acotado, entonces hay una subsucesión de $(u_\varepsilon)_{\varepsilon > 0}$ que converge en X .

Si una familia de funcionales $(\mathcal{F}_\varepsilon)_{\varepsilon > 0}$ tiene propiedades de compacidad (C) y Γ -converge a un funcional límite \mathcal{F} cuando ε tiende a 0, entonces sabemos que para ε pequeño, existe una familia de minimizadores de \mathcal{F}_ε que son cercanos a los minimizadores de \mathcal{F} . A continuación se describen y justifican cada paso de la discretización de manera precisa.

2.2. Discretización del perímetro

Usamos el clásico teorema de Modica-Mortola para sustituir este problema sobre subconjuntos de \mathbb{R}^n , es decir, funciones que toman sólo valores 0 ó 1, por un problema sobre funciones que toman cualquier valor entre 0 y 1. Más concretamente, dado un conjunto acotado abierto suave Ω (grande) y un $\varepsilon > 0$ (pequeño), se define el conjunto X y los funcionales $\mathcal{F}_\varepsilon : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ y $\mathcal{F} : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ de la siguiente forma

$$X := \left\{ u \in L^1(\Omega, [0, 1]) : \int u = m \right\},$$

$$\mathcal{F}_\varepsilon(u) = \begin{cases} \varepsilon \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^n} W(u) + \lambda \mathcal{V}_\alpha(u) & \text{si } u \in H^1(\mathbb{R}^n), \\ +\infty & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\mathcal{F}(u) = \begin{cases} P(\{u = 1\}) + \lambda \mathcal{V}_\alpha(u) & \text{si } u \in BV(\Omega; \{0, 1\}), \\ +\infty & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2.2)$$

donde se usa la notación natural $\mathcal{V}_\alpha(u) = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \frac{u(x)u(y)}{|x-y|^{n-\alpha}} dx dy$, y W es el siguiente potencial de doble pozo en $[0, 1]$: $W(x) = x(1-x)$. Entonces por el teorema de Modica-Mortola y el hecho de que el último término de los funcionales \mathcal{F}_ε y \mathcal{F} es continuo en X , se tiene

$$\mathcal{F}_\varepsilon \xrightarrow[\varepsilon \rightarrow 0]{\Gamma} \mathcal{F}, \quad \text{y } (\mathcal{F}_\varepsilon) \text{ tiene propiedades de compacidad (C).}$$

Note que considerando funciones sobre un conjunto abierto acotado Ω no es restrictivo siempre que Ω sea lo suficientemente grande, ya que los minimizadores de (1) están necesariamente acotados.

2.3. Discretización del término no local

Queremos reducir el dominio a un cuadrado (grande) con condiciones periódicas de borde. En efecto, el término repulsivo no-local tiene una expresión sencilla en una variable de Fourier:

$$\mathcal{V}_\alpha(u) = \frac{C(n, \alpha)}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} |\xi|^{-\alpha} |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi \quad (2.3)$$

con \hat{u} la transformada de Fourier de u , $C(n, \alpha) := \frac{2^\alpha \pi^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{\alpha}{2})}{\Gamma(\frac{n-\alpha}{2})}$, y Γ la función gamma usual. Esto se puede comprobar observando que $\mathcal{V}_\alpha(u) = \int u \mathcal{I}_\alpha(u)$ con $\mathcal{I}_\alpha(u)$ el potencial de Riesz de u y utilizando la expresión de Fourier del potencial de Riesz (ver [26, pág. 13, V]). Así, aproximaremos $\mathcal{V}_\alpha(u)$ por

$$\mathcal{V}_{\alpha, T}(u) := \frac{C(n, \alpha)}{T^n} \sum_{k \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}} \left| \frac{2k\pi}{T} \right|^{-\alpha} |c_{k, T}(u)|^2, \quad (2.4)$$

donde $c_{k,T}(u) := \int_{[-T/2, T/2]^n} u(x) e^{-\frac{2ik\pi x}{T}} dx$ es el k -ésimo coeficiente de Fourier de u en $[-T/2, T/2]^n$ para algún $T > 0$ (grande). Más concretamente, se define el funcional $\mathcal{F}_{\varepsilon, T} : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ por

$$\mathcal{F}_{\varepsilon, T}(u) = \begin{cases} \varepsilon \int |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int W(u) + \lambda \mathcal{V}_{\alpha, T}(u) & \text{si } u \in H^1(\mathbb{R}^n), \\ +\infty & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.5)$$

Entonces se tiene que

$$\mathcal{F}_{\varepsilon, T} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \mathcal{F}_{\varepsilon}, \quad \text{y } (\mathcal{F}_{\varepsilon, T})_{T>0} \text{ tiene propiedades de compacidad (C).}$$

Para que la propiedad (C) sea válida, es necesario suponer que todas las funciones estén soportadas en un determinado conjunto acotado Ω .

2.4. Discretización del problema variacional

En este paso final, se discretiza el problema variacional. Primero se extiende $\mathcal{F}_{\varepsilon, T}$ a las funciones $u \in H^1([-T/2, T/2]^n)$ que no están soportadas en Ω fijando $\mathcal{F}_{\varepsilon, T}(u) = +\infty$ en este caso. Para $N \in 2\mathbb{N}$ grande, en lugar de considerar todo el espacio $H^1([-T/2, T/2]^n)$, sólo consideramos el espacio

$$E_N = \begin{cases} u \in \text{Span} \left(e^{\frac{2i\pi}{T} kx} \right)_{k \in \left\{ -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} \right\}^n} : \forall \mathbf{j} \in \left\{ -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} \right\}^n, \\ u(\mathbf{j}T/N) \in [0, 1], \quad u(\mathbf{j}T/N) = 0 \quad \text{si } \mathbf{j}T/N \notin \Omega, \quad \text{y} \quad \int u = m. \end{cases} \quad (2.6)$$

Para $u \in E_N$, establecemos

$$\mathcal{W}_N(u) = (T/N)^n \sum_{\mathbf{j} \in \left\{ -N/2, \dots, N/2 \right\}^n} W(u(\mathbf{j}T/N)). \quad (2.7)$$

Entonces definimos el funcional $\mathcal{F}_{\varepsilon, T, N} : H^1([-T/2, T/2]^n) \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ de la forma

$$\mathcal{F}_{\varepsilon, T, N}(u) = \begin{cases} \varepsilon \int |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{W}_N(u) + \lambda \mathcal{V}_{\alpha, T}(u), & \text{si } u \in E_N, \\ +\infty & \text{, en otro caso} \end{cases} \quad (2.8)$$

Tenemos en el sentido de la topología débil de H^1 que

$$\mathcal{F}_{\varepsilon, T, N} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \mathcal{F}_{\varepsilon, T}, \quad \text{y } (\mathcal{F}_{\varepsilon, T, N}) \text{ tiene propiedades de compacidad (C).}$$

2.5. Resultados Numéricos

Généraux y Oudet en su artículo, para conseguir minimizadores bajo diferentes restricciones de volumen de (5)

$$\inf_{E \subset \mathbb{R}^n} \{\mathcal{P}er(E) + \mathcal{V}_\alpha(E) : |E| = m\}$$

fijan la restricción de volumen en 1 y agregan una constante c_m al término no local \mathcal{V}_α . En efecto, minimizan

$$\inf_{E \subset \mathbb{R}^n} \{\mathcal{P}er(E) + c_m \mathcal{V}_\alpha(E) : |E| = 1\}$$

con

$$c_m = m^{\frac{1+\alpha}{n}}. \quad (2.9)$$

y es equivalente a minimizar (5).

La elección de T se hace de forma que, si $\mathcal{X}_{B[1]}^N$ es la discretización de la bola de volumen 1 con paso lateral T/N , se tenga que

$$\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])} \leq 1\%$$

Dado un número de puntos de discretización $N = 2^{11}$, T no puede aumentar demasiado, de lo contrario, la discretización de los minimizadores candidatos es cada vez menos precisa. Por ejemplo, para $\alpha = 1$ y $n = 2$, se tiene

- Para $T = 5\pi$: $\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])} \simeq 0.08$,
- Para $T = 10\pi$: $\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])} \simeq 0.04$,
- Para $T = 20\pi$: $\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])} \simeq 0.01$.

Por lo tanto, estas estimaciones numéricas hacen elegir $T = 20\pi$. Ver en [16, Apéndice B] el método utilizado para calcular $\mathcal{V}_\alpha(B[1])$.

Es importante notar que $\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])}$ no se ve alterado si consideramos una bola centrada en otro punto. Lo demostraremos con el siguiente Lema

Lema 2.5.1. Si la bola $B[1]$, se cambia por una bola $B_{x_0}[1]$ centrada un punto x_0 , entonces

$$\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])} = \frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B_{x_0}[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B_{x_0}[1])}.$$

Demostración:

Notemos que $\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y) = \mathcal{X}_{x_0+B[1]}(y)$

con

$$\mathcal{X}_{x_0+B[1]}(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } y \in x_0 + B[1] \\ 0 & \text{si } y \notin x_0 + B[1] \end{cases}$$

luego se tiene que

$$\mathcal{X}_{x_0+B[1]}(y) = \mathcal{X}_{B[1]}(y - x_0)$$

y por lo tanto

$$\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y) = \mathcal{X}_{B[1]}(y - x_0). \quad (2.10)$$

Ahora notemos que

$$\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}^N) = \frac{C(2,\alpha)}{T^2} \sum_{k \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}} \left| \frac{2k\pi}{T} \right|^{-\alpha} |c_{k,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y))|^2$$

con

$$|c_{k,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y))| = \left| \int_{[-T/2, T/2]^2} \mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y) e^{\frac{-2\pi ki}{T}y} dy \right|$$

por (2.10) se tiene que

$$|c_{k,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y))| = \left| \int_{[-T/2, T/2]^2} \mathcal{X}_{B[1]}(y - x_0) e^{\frac{-2\pi ki}{T}y} dy \right|$$

Si $y - x_0 = w \in B[1]$ entonces

$$|c_{k,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y))| = \left| \int_{[-T/2, T/2]^2} \mathcal{X}_{B[1]}(w) e^{\frac{-2\pi ki}{T}(w)} dw \right| = \left| \int_{B[1]} 1 \cdot e^{\frac{-2\pi ki}{T}w} dw \right| \quad (2.11)$$

Ahora vemos que,

$$\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) = \frac{C(2,\alpha)}{T^2} \sum_{k \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}} \left| \frac{2k\pi}{T} \right|^{-\alpha} |c_{k,T}(\mathcal{X}_{B[1]}(y))|^2$$

con

$$\begin{aligned} |c_{k,T}(\mathcal{X}_{B[1]}(y))| &= \left| \int_{[-T/2, T/2]^2} \mathcal{X}_{B[1]}(y) e^{\frac{-2\pi ki}{T}y} dy \right| \\ &= \left| \int_{B[1]} 1 \cdot e^{\frac{-2\pi ki}{T}y} dy \right|. \end{aligned}$$

Por lo tanto por (2.11)

$$|c_{k,T}(\mathcal{X}_{B[1]}(y))| = |c_{k,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}(y))|,$$

obtenemos que

$$\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) = \mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}^N).$$

Por otro lado

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}_\alpha(B_{x_0}[1]) &= \int_{B_{x_0}[1]} \int_{B_{x_0}[1]} \frac{1}{|x-y|^{2-\alpha}} \, dx dy \\
&= \int_{x_0+B[1]} \int_{x_0+B[1]} \frac{1}{|x-y|^{2-\alpha}} \, dx dy \\
&= \int_{B[1]} \int_{B[1]} \frac{1}{|(x+x_0)-(y+x_0)|^{2-\alpha}} \, dx dy \\
&= \int_{B[1]} \int_{B[1]} \frac{1}{|x-y|^{2-\alpha}} \, dx dy \\
&= \mathcal{V}_\alpha(B[1]).
\end{aligned}$$

Entonces

$$\mathcal{V}_\alpha(B_{x_0}[1]) = \mathcal{V}_\alpha(B[1]).$$

Concluimos que

$$\frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B_{x_0}[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B_{x_0}[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B_{x_0}[1])} = \frac{\mathcal{V}_{\alpha,T}(\mathcal{X}_{B[1]}^N) - \mathcal{V}_\alpha(B[1])}{\mathcal{V}_\alpha(B[1])},$$

y por lo tanto no se altera el error al cambiar el centro de la bola $B[1]$. \square

Los resultados obtenidos para $\alpha = 1$ y $c_m = 1.5, 1.6$ son

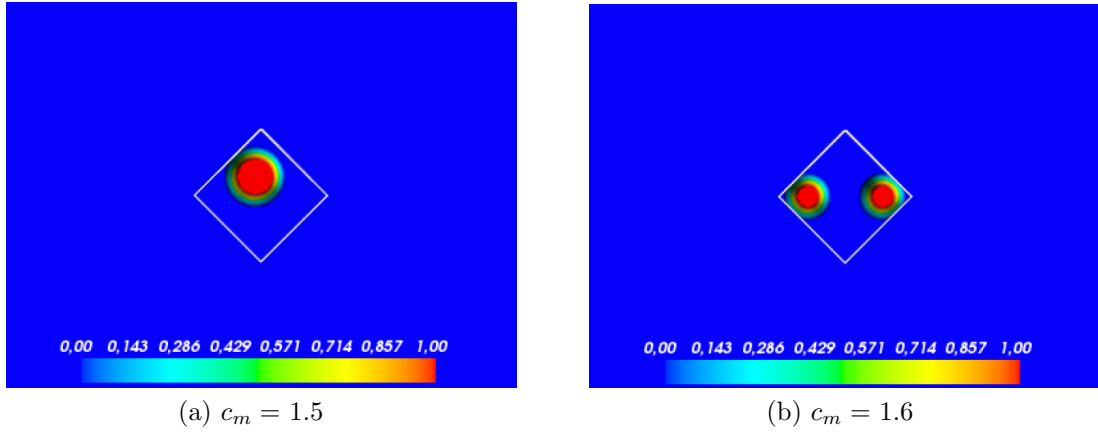


Figura 2.1: $\alpha = 1$, Ω es un cuadrado.

Aquí se ha elegido que el conjunto Ω que soporta todas las funciones sea un cuadrado de longitud diagonal π (y es representada por líneas blancas).

Se enfatiza que Ω es necesario para obtener los minimizadores correctos, tanto teórica como numéricamente. Teóricamente, la condición de que las funciones estén soportadas en un conjunto fijo acotado es necesaria para que se cumpla la propiedad de compacidad (C), tanto en el Paso 1 como en el Paso 2, ya que se deja que el tamaño del dominio T llegue a infinito. Numéricamente, sin Ω , para $c_m = 1.5$ las simulaciones arrojan dos bolas (en lugar de una como se muestra en la Figura (2.1a))

que se alejan cada vez más entre sí a medida que aumenta T . Pero la configuración no converge a un candidato admisible, por lo que definitivamente no converge a un minimizador.

Se observa que para $c_m = 1.6$ se obtienen dos bolas en esquinas opuestas del cuadrado Ω lo cual es consistente con el comportamiento repulsivo esperado del término no local \mathcal{V}_α .

Es importante señalar que teóricamente Généraux y Oudet obtienen que existen minimizadores hasta $c_m \approx 1.67$. Numéricamente, obtienen minimizadores hasta una constante $c_m \in (1.5, 1.6)$, que es relativamente cercano a 1.67.

La minimización numérica se realiza usando el solver IPOPT [18] con un número de puntos de discretización $N = 2^{11}$ en cada dirección. El tiempo de cálculo en un computador estándar es de aproximadamente una hora.

Capítulo 3

Minimización Numérica en Matlab: Quadprog y Fmincon

En este capítulo implementamos el método de minimización numérica de Génériaux y Oudet a nuestro problema variacional (1) en la plataforma de programación Matlab. La minimización numérica la haremos a través del solver de programación cuadrática quadprog y de programación no lineal fmincon.

3.1. Quadprog y Fmincon

Quadprog es un solver de Matlab para funciones objetivo cuadráticas con restricciones lineales, donde encuentra un mínimo para un problema especificado por

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^T H x + f^T x$$

tal que

$$\begin{aligned} A x &\leq b \\ Aeq x &= beq \\ lb &\leq x \leq ub \end{aligned}$$

donde

- H (Término objetivo cuadrático): Representa el término cuadrático en la función objetivo, especificado como una matriz real simétrica. Si H no es simétrica, quadprog emite una advertencia y utiliza en su lugar la versión simetrizada $(H + H')/2$, con $H' = H^T$.
- f (Término objetivo lineal): Es un vector real que representa el término lineal de la función objetivo.
- A (Restricciones de desigualdad lineales): A es una matriz real de M por N , donde M es el número de desigualdades y N es el número de variables. A codifica las M desigualdades lineales de la forma

$$A x \leq b,$$

donde x es el vector columna de N variables y b es un vector columna con M elementos.

- b : Es un vector real de M elementos relacionado con la matriz A .
- Aeq (Restricciones de igualdad lineales): Aeq es una matriz real de M_e por N , donde M_e es el número de igualdades y N es el número de variables. Aeq codifica las M_e igualdades lineales de la forma

$$Aeq x = beq,$$

donde x es el vector columna de N variables y beq es un vector columna con M_e elementos.

- beq : Es un vector real de M_e elementos relacionado con la matriz Aeq .
- lb (Límites inferiores) y ub (Límites superiores): lb y ub son vectores reales que acotan a la variable x de la forma

$$lb(i) \leq x(i) \leq ub(i), \text{ para todo } i.$$

Por otra parte, `Fmincon` es un solver de programación no lineal de Matlab que encuentra el mínimo de una función multivariable no lineal restringida de la siguiente forma:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

tal que

$$\begin{aligned} c(x) &\leq 0 \\ ceq &= 0 \\ A x &\leq b \\ Aeq x &= beq \\ lb &\leq x \leq ub, \end{aligned}$$

donde A , Aeq , b , beq , lb y ub se definen al igual que en `quadprog`. Además tiene los siguientes argumentos

- $fun = f(x)$: Función objetivo que se desea minimizar, especificada como un identificador de función o un nombre de función. fun es una función que acepta un vector o un arreglo x y devuelve un escalar real f , con la función objetivo evaluada en x . A diferencia de `quadprog`, la función objetivo tenemos que definirla.
- x_0 (Punto inicial): Es el punto inicial desde el cual comienza la búsqueda.
- `nonlcon` (Restricciones no lineales): Es una función que define las restricciones no lineales. `nonlcon` es una función que acepta un vector o arreglo x y devuelve dos arreglos, $c(x)$ y $ceq(x)$.
 - $c(x)$ es el arreglo de restricciones de desigualdad no lineales que `fmincon` intenta satisfacer.
 - $c(x) \leq 0$ para todas las entradas de c .

A continuación modelamos el problema utilizando `Quadprog` y `Fmincon`.

3.2. Implementación en Matlab

Tomando como referencia las simulaciones de Généraux y Oudet, consideraremos $n = 2$, $\alpha = 1$, $T = 20\pi$, $N \in 2\mathbb{N}$ y la constante c_m definida en (2.9) (para estos parámetros es igual a la masa). Además Ω es un cuadrado de confinamiento de diagonal π .

En esta implementación, la estrategia es considerar una función objetivo cuadrática con restricciones lineales para modelar el problema. De esta forma, representaremos el funcional $\mathcal{F}_{\varepsilon, T, N}(2.8)$ que nos da el método numérico mediante la función

$$\frac{1}{2}x^T Hx + f^T x$$

donde

- x son los coeficientes de Fourier,
- f es el término lineal de $\frac{1}{\varepsilon}\mathcal{W}_N(u)$,
- $H = H_W + H_{\text{riesz}} + H_{\text{grad}}$,

con H_W , H_{riesz} y H_{grad} las matrices asociadas a la formas cuadráticas de $\varepsilon \int |\nabla u|^2$, $\frac{1}{\varepsilon}\mathcal{W}_N(u)$ y $\lambda\mathcal{V}_{\alpha, T}(u)$.

Para la implementación consideraremos la siguiente función $u \in E_N$

$$u(x, y) = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[a(k_1, k_2) \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) + b(k_1, k_2) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) \right].$$

con $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$, $I_{\mathbf{k}} = \{-\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}\} \times \{-\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}\}$ y $\forall \mathbf{j} \in \{-\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}\}^2$. sujeta a las restricciones

- $u(\mathbf{j}T/N) \in [0, 1]$
- $u(\mathbf{j}T/N) = 0$ si $\mathbf{j}T/N \notin \Omega$
- $\iint_{[-T/2, T/2]^2} u = m$

Son equivalentes

$$u(\mathbf{j}T/N) = u(j_1T/N, j_2T/N) = u(x, y).$$

A continuación se presentan las formas cuadráticas H_W , H_{riesz} , H_{grad} que obtenemos junto al término lineal f y las matrices que modelan las restricciones de nuestro problema.

En lo que sigue consideraremos el siguiente Lema:

Lema 3.2.1. Para las familias de funciones indexadas

$$\{\phi_{k_1, k_2}(x, y)\}_{k_1, k_2 \in I_{\mathbf{k}}} \quad , \quad \{\psi_{k_1, k_2}(x, y)\}_{k_1, k_2 \in I_{\mathbf{k}}}$$

consideremos

$$E(x, y) := \sum_{k_1, k_2 \in I_{\mathbf{k}}} (a(k_1, k_2) \cdot \phi_{k_1, k_2} + b(k_1, k_2) \cdot \psi_{k_1, k_2}).$$

Definiendo el vector ampliado $\mathbf{c}^T := [a(k_1, k_2)(p) | b(k_1, k_2)(p)]_p$, donde la indexación se hace usando la función $p = \text{sub2ind}(k_1, k_2)$, y por ende $(k_1, k_2) = \text{ind2sub}(p)$ y se define por conveniencia

$$\phi_{k_1, k_2}(x, y; p) := \phi_{k_1(p), k_2(p)}(x, y)$$

donde $(k_1(p), k_2(p)) := \text{ind2sub}(p)$.

La expresión cuadrática equivale a

$$\begin{aligned} (E(x, y))^2 &= \sum_{p=1}^{N^2} \sum_{q=1}^{N^2} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \cdot \phi_{k_1, k_2}(x, y; q) \right) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\ &+ \sum_{p=1}^{N^2} \sum_{q=N^2+1}^{2N^2} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \cdot \psi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) \right) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\ &+ \sum_{p=N^2+1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{N^2} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p - N^2) \cdot \phi_{k_1, k_2}(x, y; q) \right) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\ &+ \sum_{p=N^2+1}^{2N^2} \sum_{q=N^2+1}^{2N^2} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p - N^2) \cdot \psi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) \right) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q, \end{aligned}$$

y esta expresión se reduce a la forma cuadrática

$$(E(x, y))^2 = \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} Q_{pq}(x, y) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q = \mathbf{c}^T Q \mathbf{c}$$

en donde

$$Q_{pq}(x, y) = \begin{cases} \phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \cdot \phi_{k_1, k_2}(x, y; q) & \text{si } p \leq N^2, q \leq N^2 \\ \phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \cdot \psi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) & \text{si } p \leq N^2, N^2 + 1 \leq q \\ \psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p - N^2) \cdot \phi_{k_1, k_2}(x, y; q) & \text{si } N^2 + 1 \leq p, q \leq N^2 \\ \psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p - N^2) \cdot \psi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) & \text{si } N^2 + 1 \leq p, N^2 + 1 \leq q \end{cases}$$

Esta matriz se puede representar por bloques de tamaño $N^2 \times N^2$ como sigue

$$Q = \begin{pmatrix} \phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \phi_{k_1, k_2}(x, y; q) & \phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \psi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) \\ \psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p) \phi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) & \psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(x, y; p - N^2) \psi_{k_1, k_2}(x, y; q - N^2) \end{pmatrix}_{p, q}$$

la cual tiene tamaño $2N^2 \times 2N^2$.

Demostración:

$$\begin{aligned}
(E(x, y))^2 &= \left[\sum_{(k_1, k_2) \in I_{\mathbf{k}}} (a(k_1, k_2)\phi_{k_1, k_2} + b(k_1, k_2)\psi_{k_1, k_2}) \right] \\
&\quad \left[\sum_{(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) \in I_{\mathbf{k}}} (a(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} + b(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}) \right] \\
&= \sum_{(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{(k_1, k_2) \in I_{\mathbf{k}}} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \phi_{k_1, k_2} \right) a(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) a(k_1, k_2) \\
&+ \sum_{(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{(k_1, k_2) \in I_{\mathbf{k}}} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \psi_{k_1, k_2} \right) a(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) b(k_1, k_2) \\
&+ \sum_{(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{(k_1, k_2) \in I_{\mathbf{k}}} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \phi_{k_1, k_2} \right) b(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) a(k_1, k_2) \\
&+ \sum_{(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{(k_1, k_2) \in I_{\mathbf{k}}} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \psi_{k_1, k_2} \right) b(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) b(k_1, k_2) \\
&= \sum_{\ell=1}^{N^2} \sum_{r=1}^{N^2} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(\ell) \phi_{k_1, k_2}(r) \right) \mathbf{c}_{\ell} \mathbf{c}_r \\
&+ \sum_{\ell=1}^{N^2} \sum_{r=1}^{N^2} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(\ell) \psi_{k_1, k_2}(r) \right) \mathbf{c}_{\ell} \mathbf{c}_{r+N^2} \\
&+ \sum_{\ell=1}^{N^2} \sum_{r=1}^{N^2} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(\ell) \phi_{k_1, k_2}(r) \right) \mathbf{c}_{\ell+N^2} \mathbf{c}_r \\
&+ \sum_{\ell=1}^{N^2} \sum_{r=1}^{N^2} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(\ell) \psi_{k_1, k_2}(r) \right) \mathbf{c}_{\ell+N^2} \mathbf{c}_{r+N^2} \\
&= \sum_{\ell=1}^{N^2} \sum_{r=1}^{N^2} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(\ell) \phi_{k_1, k_2}(r) \right) \mathbf{c}_{\ell} \mathbf{c}_r \\
&+ \sum_{\ell=1}^{N^2} \sum_{q=N^2+1}^{2N^2} \left(\phi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(\ell) \psi_{k_1, k_2}(q - N^2) \right) \mathbf{c}_{\ell} \mathbf{c}_q \\
&+ \sum_{p=N^2+1}^{2N^2} \sum_{r=1}^{N^2} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(p - N^2) \phi_{k_1, k_2}(r) \right) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_r \\
&+ \sum_{p=N^2+1}^{2N^2} \sum_{q=N^2+1}^{2N^2} \left(\psi_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2}(p - N^2) \psi_{k_1, k_2}(q - N^2) \right) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\
&:= \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} Q_{pq}(x, y) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q. \quad \square
\end{aligned}$$

Forma Cuadrática del Potencial Cuadrático

Si $W(u) = u(1 - u)$ se tiene que

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_N(u) &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} W\left(u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)\right) \\ &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right) + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[-\left(u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)\right)^2\right] \\ &=: I + II\end{aligned}$$

Para I, reemplazando en $x = j_1 T/N$ e $y = j_2 T/N$ y recordando el vector ampliado

$$\mathbf{c}^T := [a(k_1, k_2)(\alpha) | b(k_1, k_2)(\alpha)]_\alpha$$

tenemos

$$\begin{aligned}I &:= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right) \\ &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sum_{k_1, k_2} [\cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N})\right) \cdot a(k_1, k_2) + \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N})\right) \cdot b(k_1, k_2)] \\ &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[\sum_{\ell=1}^{N^2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); \ell\right) \cdot \mathbf{c}_\ell + \sum_{r=N^2+1}^{2N^2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); r\right) \cdot \mathbf{c}_r \right] \\ &= \sum_{\ell=1}^{N^2} \left[\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); \ell\right) \right] \mathbf{c}_\ell \\ &+ \sum_{r=N^2+1}^{2N^2} \left[\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); r\right) \right] \mathbf{c}_r \\ &= \sum_{p=1}^{2N^2} f_p(k_1, k_2) \mathbf{c}_p =: f^T \mathbf{c}\end{aligned}$$

Multiplicando por $\frac{1}{\varepsilon}$ obtenemos que

$$f(k_1, k_2) := \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); p\right) & \text{si } 1 \leq p \leq N^2, \\ \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); p\right) & \text{si } N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2. \end{cases}$$

Para el segundo término, usamos las mismas notaciones anteriores. Entonces haciendo uso del Lema (3.2.1), obtenemos

$$\begin{aligned}II &:= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[-\left(u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)\right)^2\right] \\ &= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[\sum_{k_1, k_2} [\cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \cdot a(k_1, k_2) + \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \cdot b(k_1, k_2)] \right]^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[\sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} Q_{pq}(x, y) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \right] \\
&= \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} \left[-\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} Q_{pq}(x, y) \right] \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\
&= \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} H_W \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q =: \mathbf{c}^T H_W \mathbf{c}
\end{aligned}$$

Multiplicando por $\frac{1}{\varepsilon}$ obtenemos que

$$H_w = \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T} (\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}); p\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{T} (k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); q\right) \\ \text{si } \begin{cases} 1 \leq p \leq N^2 \\ 1 \leq q \leq N^2 \end{cases} , \\ \\ -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T} (\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}); p\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{T} (k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); q - N^2\right) \\ \text{si } \begin{cases} 1 \leq p \leq N^2 \\ N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2 \end{cases} , \\ \\ -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T} (\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}); p - N^2\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{T} (k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); q\right) \\ \text{si } \begin{cases} N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2 \\ 1 \leq q \leq N^2 \end{cases} , \\ \\ -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T} (\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}); p - N^2\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{T} (k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); q - N^2\right) \\ \text{si } \begin{cases} N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2 \\ N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2 \end{cases} . \end{cases}$$

Por lo tanto el funcional $\frac{1}{\varepsilon} \mathcal{W}_N(u)$ corresponde a

$$\frac{1}{\varepsilon} \mathcal{W}_N(u) = H_w + f$$

con

$$f(k_1, k_2) := \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T} (k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); p\right) & \text{si } 1 \leq p \leq N^2, \\ \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T} (k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}); p - N^2\right) & \text{si } N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2. \end{cases}$$

$$H_W = \begin{cases} -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T} \left(\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}\right); p\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{T} \left(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}\right); q\right) \\ \text{si } \begin{matrix} 1 \leq p \leq N^2 \\ 1 \leq q \leq N^2 \end{matrix} , \\ \\ -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \cos\left(\frac{2\pi}{T} \left(\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}\right); p\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{T} \left(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}\right); q - N^2\right) \\ \text{si } \begin{matrix} 1 \leq p \leq N^2 \\ N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2 \end{matrix} , \\ \\ -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T} \left(\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}\right); p - N^2\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{T} \left(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}\right); q\right) \\ \text{si } \begin{matrix} N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2 \\ 1 \leq q \leq N^2 \end{matrix} , \\ \\ -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sin\left(\frac{2\pi}{T} \left(\tilde{k}_1 j_1 \frac{T}{N} + \tilde{k}_2 j_2 \frac{T}{N}\right); p - N^2\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{T} \left(k_1 j_1 \frac{T}{N} + k_2 j_2 \frac{T}{N}\right); q - N^2\right) \\ \text{si } \begin{matrix} N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2 \\ N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2 \end{matrix} . \end{cases}$$

Forma Cuadrática del Potencial de Riesz

Recordemos que

$$\mathcal{V}_{\alpha, T}(u) = \frac{C(2, \alpha)}{T^2} \sum_{k_1, k_2} \left| \frac{2\pi}{T}(k_1, k_2) \right|^{-\alpha} |c_{k_1, k_2, T}(u)|^2$$

donde $c_{k_1, k_2, T}(u) := \iint_{[-T/2, T/2]^2} u(x) e^{-\frac{2\pi i}{T}(k_1 x + k_2 y)} = a(k_1, k_2) + i \cdot b(k_1, k_2)$ es el k -ésimo coeficiente de Fourier. Esto es,

$$\mathcal{V}_{\alpha, T}(u) = \frac{C(2, \alpha)}{T^2} \left| \frac{2\pi}{T} \right|^{-\alpha} \sum_{k_1, k_2} ((k_1)^2 + (k_2)^2)^{-\alpha/2} [(a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2]$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\alpha, T}(u) &= \frac{C(2, \alpha)}{(2\pi)^\alpha} T^{\alpha-2} \left(\sum_{k_1, k_2} ((k_1)^2 + (k_2)^2)^{-\alpha/2} (a(k_1, k_2))^2 \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k_1, k_2} ((k_1)^2 + (k_2)^2)^{-\alpha/2} (b(k_1, k_2))^2 \right) \\ &= \sum_{p=1}^{N^2} \left(\frac{C(2, \alpha)}{(2\pi)^\alpha} T^{\alpha-2} ((k_1)^2 + (k_2)^2; p)^{-\alpha/2} \right) (\mathbf{c}_p)^2 \\ &\quad + \sum_{p=N^2+1}^{2N^2} \left(\frac{C(2, \alpha)}{(2\pi)^\alpha} T^{\alpha-2} ((k_1)^2 + (k_2)^2; p - N^2)^{-\alpha/2} \right) (\mathbf{c}_p)^2 \\ &= \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} H_{\text{riesz}} \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q =: \mathbf{c}^T H_{\text{riesz}} \mathbf{c} \end{aligned}$$

Multiplicando por λ obtenemos que

$$H_{\text{riesz}} = \begin{cases} \lambda \frac{C(2,\alpha)}{(2\pi)^\alpha} T^{\alpha-2} ((k_1)^2 + (k_2)^2; p)^{-\alpha/2} & \text{si } p = q, 1 \leq p, q \leq N^2 \\ \lambda \frac{C(2,\alpha)}{(2\pi)^\alpha} T^{\alpha-2} ((k_1)^2 + (k_2)^2; p - N^2)^{-\alpha/2} & \text{si } p = q, N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2 \\ 0 & \text{si } p \neq q, 1 \leq p, q \leq 2N^2. \end{cases}$$

Por lo tanto, H_{riesz} es la forma cuadrática asociada a $\lambda \mathcal{V}_{\alpha,T}(u)$.

Forma Cuadrática del Término de gradiente al cuadrado

Buscamos la forma cuadrática de

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} |\nabla u|^2.$$

Notemos que

$$\begin{aligned} &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} (\partial_x u)^2 dx dy + \iint_{[-T/2, T/2]^2} (\partial_y u)^2 dx dy \\ &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left[\sum_{k_1, k_2} \left(-\frac{2\pi}{T} k_1 \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \cdot a(k_1, k_2) + \frac{2\pi}{T} k_1 \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \cdot b(k_1, k_2) \right) \right]^2 \\ &+ \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left[\sum_{k_1, k_2} \left(-\frac{2\pi}{T} k_2 \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \cdot a(k_1, k_2) + \frac{2\pi}{T} k_2 \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \cdot b(k_1, k_2) \right) \right]^2 \\ &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left[\sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} Q_{pq}^{(\partial_1)}(x, y) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \right] dx dy \\ &+ \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left[\sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} Q_{pq}^{(\partial_2)}(x, y) \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \right] dx dy \\ &= \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} \left[\iint_{[-T/2, T/2]^2} Q_{pq}^{(\partial_1)}(x, y) dx dy \right] \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\ &+ \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} \left[\iint_{[-T/2, T/2]^2} Q_{pq}^{(\partial_2)}(x, y) dx dy \right] \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\ &= \sum_{p=1}^{2N^2} \sum_{q=1}^{2N^2} \left[\iint_{[-T/2, T/2]^2} [Q_{pq}^{(\partial_1)}(x, y) + Q_{pq}^{(\partial_2)}(x, y)] dx dy \right] \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \\ &= \sum_{p, q} H_{\text{grad}} \mathbf{c}_p \mathbf{c}_q \end{aligned}$$

en donde para cualquier $j \in \{1, 2\}$:

$$Q_{pq}^{(\partial_j)}(x, y) := \begin{cases} \left(\frac{2\pi}{T} \right)^2 \tilde{k}_j(p) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p\right) \cdot k_j(q) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q\right) \\ \text{si } p \leq N^2, q \leq N^2 \\ \\ -\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 \tilde{k}_j(p) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p\right) \cdot k_j(q - N^2) \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q - N^2\right) \\ \text{si } p \leq N^2, N^2 + 1 \leq q \\ \\ -\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 \tilde{k}_j(p - N^2) \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p - N^2\right) \cdot k_j(q) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q\right) \\ \text{si } N^2 + 1 \leq p, q \leq N^2 \\ \\ \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 \tilde{k}_j \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p - N^2\right) \cdot k_j \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q - N^2\right) \\ \text{si } N^2 + 1 \leq p, N^2 + 1 \leq q \end{cases}$$

Denotemos las funciones del argumento:

$$\theta_{\mp}^{\pm}(x, y) = \frac{2\pi}{T}((\tilde{k}_1 \pm k_1)x + (\tilde{k}_2 \mp k_2)y),$$

Vemos que cuando $p, q \in \{1, \dots, N^2\}$ son tales que $\tilde{k}_1(p) \neq k_1(q)$ y $\tilde{k}_2(p) \neq k_2(q)$:

$$\begin{aligned} & \iint_{[-T/2, T/2]^2} [Q_{pq}^{\partial_1}(x, y) + Q_{pq}^{\partial_2}(x, y)] dx dy = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) \\ & \cdot \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p\right) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q\right) \right] dx dy \\ & = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\ & \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\cos\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 - k_1)x + (\tilde{k}_2 - k_2)y]\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 + k_1)x + (\tilde{k}_2 + k_2)y]\right) \right] dx dy \right\} \\ & = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\ & \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_{-}^-(x, y)) dx dy - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_{+}^+(x, y)) dx dy \right\} \end{aligned}$$

Notemos que la segunda integral depende de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) :

Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$- \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_{+}^+(x, y)) dx dy = - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(0) dx dy = -T^2.$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\begin{aligned} - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_{+}^+(x, y)) dx dy &= -T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)x\right) dx \\ &= -T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} [\sin(\theta_{+}^+(\frac{T}{2}, 0)) - \sin(\theta_{+}^+(-\frac{T}{2}, 0))] \\ &= -2T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_1 + k_1)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned} - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= -T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)y\right) dy \\ &= -T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} [\sin(\theta_-(0, \frac{T}{2})) - \sin(\theta_-(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= -2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_2 + k_2)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$: Usando la paridad del coseno,

$$\begin{aligned} - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= -\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\sin(\theta_+^+(\frac{T}{2}, y) - \sin(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, y))] dy \\ &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} [\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}) \\ &\quad - \cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}) + \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\ &= \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [2 \cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) - 2 \cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\ &= \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [2 \cos(\pi(\tilde{k}_1 + k_1 + \tilde{k}_2 + k_2)) - 2 \cos(\pi(\tilde{k}_1 + k_1 - \tilde{k}_2 - k_2))] \\ &= 2 \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [(-1)^{\tilde{k}_1 + k_1 + \tilde{k}_2 + k_2} - (-1)^{\tilde{k}_1 + k_1 - \tilde{k}_2 - k_2}] \\ &= 2 \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) (-1)^{\tilde{k}_1 + k_1} \underbrace{[(-1)^{\tilde{k}_2 + k_2} - (-1)^{-\tilde{k}_2 - k_2}]}_{=0} \equiv 0. \end{aligned}$$

Del mismo modo, la primera integral si depende de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) :

Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(0) dx dy = T^2.$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)x\right) dx \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} [\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, 0)) - \sin(\theta_-(\frac{T}{2}, 0))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_1 - k_1)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)y\right) dy \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} [\sin(\theta_-(0, \frac{T}{2})) - \sin(\theta_-(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_2 - k_2)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta^-(x, y)) dx dy &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\sin(\theta^-(\frac{T}{2}, y)) - \sin(\theta^-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] dy \\
&= \left(\Pi_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [-\cos(\theta^-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) + \cos(\theta^-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) \\
&\quad + \cos(\theta^-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) - \cos(\theta^-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\
&= \left(\Pi_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [2\cos(\theta^-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - 2\cos(\theta^-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))] \\
&= \left(\Pi_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [2\cos(\pi(\tilde{k}_1 - k_1 - \tilde{k}_2 + k_2)) - 2\cos(\pi(\tilde{k}_1 - k_1 + \tilde{k}_2 - k_2))] \\
&= 2 \left(\Pi_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [(-1)^{\tilde{k}_1 - k_1 - \tilde{k}_2 + k_2} - (-1)^{\tilde{k}_1 - k_1 + \tilde{k}_2 - k_2}] \\
&= 2 \left(\Pi_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) (-1)^{\tilde{k}_1 - k_1} \underbrace{[(-1)^{-\tilde{k}_2 + k_2} - (-1)^{\tilde{k}_2 - k_2}]}_{=0} \equiv 0.
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
H_{\text{grad}} &= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\quad \cdot \left\{ \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1} \cdot \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2} (-T^2) + \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1} \cdot \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2} T^2 + 0 \right\}
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$H_{\text{grad}} = \begin{cases} 2\pi^2(\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) & \text{si } \tilde{k}_1 = k_1, \tilde{k}_2 = k_2 \text{ \& } 1 \leq p, q \leq N^2 \\ -2\pi^2(\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) & \text{si } \tilde{k}_1 = -k_1, \tilde{k}_2 = -k_2, \text{ \& } 1 \leq p, q \leq N^2. \end{cases}$$

FORMULA 1: Caso $1 \leq p, q \leq N^2$

Analicemos ahora el caso en que $p \in \{1, \dots, N^2\}$ y $q \in \{N^2 + 1, \dots, 2N^2\}$.

$$\begin{aligned}
\iint_{[-T/2, T/2]^2} [Q_{pq}^{\partial_1}(x, y) + Q_{pq}^{\partial_2}(x, y)] dx dy &= -\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p)k_2(q - N^2)) \\
&\quad \cdot \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q - N^2\right) \right] dx dy \\
&= -\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p)k_2(q - N^2)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\quad \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\sin\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 - k_1)x + (\tilde{k}_2 - k_2)y]\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 + k_1)x + (\tilde{k}_2 + k_2)y]\right) \right] dx dy \right\} \\
&= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p)k_2(q - N^2)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\quad \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} [-\sin(\theta^-(x, y))] dx dy + \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} [-\sin(\theta^+(x, y))] dx dy \right\}
\end{aligned}$$

Notemos que la segunda integral depende de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) :

1. Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+^+(x, y)) dx dy = - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(0) dx dy = 0.$$

2. Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} -\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)x\right) dx \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} [\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, 0)) - \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, 0))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0 \end{aligned}$$

3. Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} -\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)y\right) dy \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} [\cos(\theta_+^+(0, \frac{T}{2})) - \cos(\theta_+^+(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0 \end{aligned}$$

4. Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, y)) - \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, y))] dy \\ &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} \underbrace{[\sin(\theta_+^+(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) - \sin(\theta_+^+(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - \sin(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))]}_{=0} \\ &\quad + \sin(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) \\ &= \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [\sin(\pi(\tilde{k}_1 + k_1 + \tilde{k}_2 + k_2)) + \sin(\pi(-\tilde{k}_1 - k_1 - \tilde{k}_2 - k_2))] \\ &= \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [0 + 0] \equiv 0. \end{aligned}$$

Similarmente, la primera integral también depende de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) :

■ Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_-^-(x, y)) dx dy = - \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(0) dx dy = 0.$$

- Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_-(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} -\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)x\right) dx \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} [\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, 0)) - \cos(\theta_-(\frac{T}{2}, 0))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0 \end{aligned}$$

- Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_-(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} -\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)y\right) dy \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} [\cos(\theta_-(0, \frac{T}{2})) - \cos(\theta_-(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0 \end{aligned}$$

- Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_-(x, y)) dx dy &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, y)) - \cos(\theta_-(\frac{T}{2}, y))] dy \\ &= \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) - \underbrace{\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - \sin(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))}_{=0} \\ &\quad + \sin(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\ &= \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [\sin(\pi[(\tilde{k}_1 - k_1) - (\tilde{k}_2 - k_2)]) + \sin(\pi[-(\tilde{k}_1 - k_1) - (\tilde{k}_2 - k_2)])] \\ &= \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [0 + 0] \equiv 0. \end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} H_{\text{grad}} &= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p)k_2(q - N^2)) \cdot \frac{1}{2} \\ &\cdot \left\{ \left(\delta_{k_1}^{\tilde{k}_1} \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + (1 - \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1}) \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1} (1 - \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 + (1 - \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1}) (1 - \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 \right) \right. \\ &\left. \left(\delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1} \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + (1 - \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1}) \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1} (1 - \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 + (1 - \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1}) (1 - \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 \right) \right\} \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\boxed{H_{\text{grad}} \equiv 0, \quad \forall 1 \leq p \leq N^2, N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2.}$$

FORMULA 2: Caso $1 \leq p \leq N^2, N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2$.

Analicemos ahora el caso en que $p \in \{N^2 + 1, \dots, 2N^2\}$ y $q \in \{1, \dots, N^2\}$.

$$\begin{aligned}
& \iint_{[-T/2, T/2]^2} [Q_{pq}^{\partial_1}(x, y) + Q_{pq}^{\partial_2}(x, y)] dx dy = -\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q)) \\
& \cdot \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p\right) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q - N^2\right) \right] dx dy \\
& = -\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\
& \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[-\sin\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 - k_1)x + (\tilde{k}_2 - k_2)y]\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 + k_1)x + (\tilde{k}_2 + k_2)y]\right) \right] dx dy \right\} \\
& = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\
& \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} [\sin(\theta_-(x, y))] dx dy + \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} [-\sin(\theta_+(x, y))] dx dy \right\}
\end{aligned}$$

Observemos que el segundo término se calcula dependiendo de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) . En efecto,

- Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+(x, y)) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(0) dx dy = 0.$$

- Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} -\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)x\right) dx \\
&= T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} [\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, 0)) - \cos(\theta_+(\frac{T}{2}, 0))] \\
&= 2T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0
\end{aligned}$$

- Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} -\sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)y\right) dy \\
&= T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} [\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, 0)) - \cos(\theta_+(\frac{T}{2}, 0))] \\
&= 2T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0
\end{aligned}$$

- Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned}
& \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} -\sin(\theta_+^+(x, y)) dx dy = \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, y) - \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, y))] dy \\
& = \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} \underbrace{[\sin(\theta_+^+(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}) - \sin(\theta_+^+(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - \sin(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))}_{=0} \\
& + \sin(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\
& = \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [\sin(\pi(\tilde{k}_1 + k_1 + \tilde{k}_2 + k_2)) + \sin(\pi(-\tilde{k}_1 - k_1 - \tilde{k}_2 - k_2))] \\
& = \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) \cdot 0 \equiv 0.
\end{aligned}$$

Similarmente, la primera integral si depende de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) :

- Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(\theta_-(x, y)) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(0) dx dy = 0.$$

- Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\begin{aligned}
& \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(\theta_-(x, y)) dx dy = T \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)x\right) dx \\
& = T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} [-\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, 0)) + \cos(\theta_-(\frac{T}{2}, 0))] \\
& = 2T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0
\end{aligned}$$

- Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned}
& \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(\theta_-(x, y)) dx dy = T \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)y\right) dy \\
& = T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} [-\cos(\theta_-(0, \frac{T}{2})) + \cos(\theta_-(0, \frac{T}{2}))] \\
& = 2T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0
\end{aligned}$$

- Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned}
& \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(\theta_-(x, y)) dx dy = \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [-\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, y) + \cos(\theta_-(\frac{T}{2}, y))] dy \\
& = \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [-\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) + \underbrace{\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) + \sin(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))}_{=0} \\
& - \sin(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\
& = \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) \underbrace{[-\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) - \sin(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))]}_{=0} \equiv 0
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
H_{pq}^\nabla &= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\cdot \left\{ \left(\delta_{k_1}^{\tilde{k}_1} \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + (1 - \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1}) \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1} (1 - \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 + (1 - \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1}) (1 - \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 \right) \right. \\
&\left. \left(\delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1} \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + (1 - \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1}) \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2} 0 + \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1} (1 - \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 + (1 - \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1}) (1 - \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2}) 0 \right) \right\}
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\boxed{H_{\text{grad}} \equiv 0, \quad \forall N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2, \quad 1 \leq q \leq N^2.}$$

FORMULA 3: Caso $N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2, \quad 1 \leq q \leq N^2$

Vemos ahora el caso en que $p \in \{N^2 + 1, \dots, 2N^2\}$ y $q \in \{N^2 + 1, \dots, 2N^2\}$.

$$\begin{aligned}
&\int_{[-T/2, T/2]} [Q_{pq}^{\partial_1}(x, y) + Q_{pq}^{\partial_2}(x, y)] dx dy = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \\
&\cdot \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 x + \tilde{k}_2 y); p\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y); q\right) \right] dx dy \\
&= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\cos\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 - k_1)x + (\tilde{k}_2 - k_2)y]\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{T}[(\tilde{k}_1 + k_1)x + (\tilde{k}_2 + k_2)y]\right) \right] dx dy \right\} \\
&= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\left\{ \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} [\cos(\theta_-(x, y)) + \cos(\theta_+(x, y))] dx dy \right\}
\end{aligned}$$

Observemos que el segundo término se calcula dependiendo de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) . En efecto,

Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_+(x, y)) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(0) dx dy = T^2.$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 = -k_2$:

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_+(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)x\right) dx \\
&= T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} [\sin(\theta_+(\frac{T}{2}, 0)) - \sin(\theta_+(-\frac{T}{2}, 0))] \\
&= 2T \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_1 + k_1)) \equiv 0
\end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 = -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)y\right) dy \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} [\sin(\theta_-(0, \frac{T}{2})) - \sin(\theta_+(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_2 + k_2)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq -k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq -k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_+^+(x, y)) dx dy &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\sin(\theta_+^+(\frac{T}{2}, y) - \sin(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, y))] dy \\ &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 + k_1)\right)^{-1} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 + k_2)\right)^{-1} [-\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) + \cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) + \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) \\ &\quad - \cos(\theta_+^+(-\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\ &= \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [2\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - 2\cos(\theta_+^+(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))] \\ &= 2 \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [\cos(\pi(\tilde{k}_1 + k_1 - \tilde{k}_2 - k_2)) - \cos(\pi(\tilde{k}_1 + k_1 + \tilde{k}_2 + k_2))] \\ &= 2 \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) [(-1)^{\tilde{k}_1+k_1-\tilde{k}_2-k_2} - (-1)^{\tilde{k}_1+k_1+\tilde{k}_2+k_2}] \\ &= 2 \left(\prod_{j=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_j + k_j)\right)^{-1}\right) (-1)^{\tilde{k}_1+k_1} \underbrace{[(-1)^{-\tilde{k}_2-k_2} - (-1)^{\tilde{k}_2+k_2}]}_{=0} \equiv 0 \end{aligned}$$

Similarmente, la primera integral si depende de la igualdad entre las coordenadas de $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y (k_1, k_2) :

Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(0) dx dy = T^2.$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 = k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)x\right) dx \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} [\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, 0)) - \sin(\theta_-(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_1 - k_1)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 = k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)y\right) dy \\ &= T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} [\sin(\theta_-(0, \frac{T}{2})) - \sin(\theta_-(0, -\frac{T}{2}))] \\ &= 2T\left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_2 - k_2)\right)^{-1} \sin(\pi(\tilde{k}_2 - k_2)) \equiv 0 \end{aligned}$$

Caso $\tilde{k}_1 \neq k_1$ y $\tilde{k}_2 \neq k_2$:

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(\theta_-(x, y)) dx dy &= \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_1 - k_1)\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} [\sin(\theta_-(\frac{T}{2}, y)) - \sin(\theta_-(\frac{-T}{2}, y))] dy \\
&= \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [-\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2})) + \cos(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) + \cos(\theta_-(\frac{-T}{2}, \frac{T}{2})) \\
&\quad - \cos(\theta_-(\frac{-T}{2}, -\frac{T}{2}))] \\
&= \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [2\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2})) - 2\cos(\theta_-(\frac{T}{2}, \frac{T}{2}))] \\
&= 2 \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [\cos(\pi(\tilde{k}_1 - k_1 - \tilde{k}_2 + k_2)) - \cos(\pi(\tilde{k}_1 - k_1 + \tilde{k}_2 - k_2))] \\
&= 2 \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) [(-1)^{\tilde{k}_1 - k_1 - \tilde{k}_2 + k_2} - (-1)^{\tilde{k}_1 - k_1 + \tilde{k}_2 - k_2}] \\
&= 2 \left(\prod_{i=1,2} \left(\frac{2\pi}{T}(\tilde{k}_i - k_i)\right)^{-1}\right) (-1)^{\tilde{k}_1 - k_1} \underbrace{[(-1)^{-\tilde{k}_2 + k_2} - (-1)^{\tilde{k}_2 - k_2}]}_{=0} \equiv 0.
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
H_{pq}^\nabla &= \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 (\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) \cdot \frac{1}{2} \\
&\quad \cdot \left\{ \delta_{-k_1}^{\tilde{k}_1} \cdot \delta_{-k_2}^{\tilde{k}_2} T^2 + \delta_{k_1}^{\tilde{k}_1} \cdot \delta_{k_2}^{\tilde{k}_2} T^2 + 0 \right\}
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$H_{\text{grad}} = \begin{cases} 2\pi^2(\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \\ \quad \text{si } \tilde{k}_1 = k_1, \tilde{k}_2 = k_2 \text{ \& } N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2 \\ \\ 2\pi^2(\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \\ \quad \text{si } \tilde{k}_1 = -k_1, \tilde{k}_2 = -k_2, \text{ \& } N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2. \end{cases}$$

FORMULA 4: Caso $N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2$

Concluimos que la forma cuadrática H_{grad} del término de gradiente al cuadrado

$$\varepsilon \iint_{[-T/2, T/2]^2} |\nabla u|^2 \text{ es de la forma}$$

Caso 1: $1 \leq p, q \leq N^2$

$$H_{\text{grad}} = \begin{cases} 2\varepsilon\pi^2(\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) & \text{si } \tilde{k}_1 = k_1, \tilde{k}_2 = k_2 \text{ \& } 1 \leq p, q \leq N^2 \\ -2\varepsilon\pi^2(\tilde{k}_1(p)k_1(q) + \tilde{k}_2(p)k_2(q)) & \text{si } \tilde{k}_1 = -k_1, \tilde{k}_2 = -k_2, \text{ \& } 1 \leq p, q \leq N^2. \end{cases}$$

Caso 2: $1 \leq p \leq N^2, N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2$

$$H_{\text{grad}} \equiv 0, \quad \forall 1 \leq p \leq N^2, N^2 + 1 \leq q \leq 2N^2.$$

Caso 3: $N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2$, $1 \leq q \leq N^2$

$$H_{\text{grad}} \equiv 0, \quad \forall N^2 + 1 \leq p \leq 2N^2, 1 \leq q \leq N^2.$$

Caso 4: $N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2$

$$H_{\text{grad}} = \begin{cases} 2\varepsilon\pi^2(\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \\ \quad \text{si } \tilde{k}_1 = k_1, \tilde{k}_2 = k_2 \text{ \& } N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2 \\ 2\varepsilon\pi^2(\tilde{k}_1(p - N^2)k_1(q - N^2) + \tilde{k}_2(p - N^2)k_2(q - N^2)) \\ \quad \text{si } \tilde{k}_1 = -k_1, \tilde{k}_2 = -k_2, \text{ \& } N^2 + 1 \leq p, q \leq 2N^2. \end{cases}$$

Restricciones

1) Desigualdad

La restricción de desigualdad $u(\mathbf{j}T/N) \in [0, 1]$, la modelamos considerando la matriz A y los vectores c y b de la forma

$$A = \left(\begin{array}{c|c} \cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \\ \hline -\cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & -\sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \end{array} \right)$$

$$c = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

donde la desigualdad

$$Ac \leq b$$

contienen ambas restricciones

$$u(\mathbf{j}T/N) \leq 1 \quad \text{y} \quad -u(\mathbf{j}T/N) \leq 0, \quad \forall \mathbf{j}.$$

2) Pertenencia

La restricción de pertenencia $u(\mathbf{j}T/N) = 0$ si $\mathbf{j}T/N \notin \Omega$, la modelamos de una manera similar a la primera restricción, mediante el producto $A_{eq} c = b_{eq}$ donde

$$A_{eq} = \left(\begin{array}{c|c} \cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \\ \hline \cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \end{array} \right)$$

$$c = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$$b_{eq} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Notamos que si $(x, y) \in \Omega$ entonces se cumple

$$\begin{aligned}
y + x &\leq \frac{\pi}{2} \\
y + x &\geq -\frac{\pi}{2} \\
y - x &\leq \frac{\pi}{2} \\
y - x &\geq -\frac{\pi}{2}.
\end{aligned}$$

3) Igualdad

Queremos definir la restricción $\int u = m$

Notamos que

$$\begin{aligned}
m &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} u \\
&= \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} u(x, y) dx dy \\
&= \sum_{k_1=-N/2+1}^{N/2} \sum_{k_2=-N/2+1}^{N/2} a(k_1, k_2) \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx dy \\
&+ \sum_{k_1=-N/2+1}^{N/2} \sum_{k_2=-N/2+1}^{N/2} b(k_1, k_2) \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx dy
\end{aligned}$$

Calculamos la integral $\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx dy$. Hay 4 casos que analizar:

Caso 1: $k_1 = 0$ y $k_2 = 0$. Este caso es directo

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(0x + 0y)\right) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(0) dx dy = T^2$$

Caso 2 y Caso 3: $k_\ell \neq 0$ y $k_s = 0$, donde $\{\ell, s\} = \{1, 2\}$.

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell x\right) dx_\ell dx_s &= T \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell y\right) dx_\ell \\
&= T \left(\frac{2\pi}{T}k_\ell\right)^{-1} [\sin\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell \frac{T}{2}\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell \left(-\frac{T}{2}\right)\right)] \\
&= T \left(\frac{2\pi}{T}k_\ell\right)^{-1} \cdot 2 \sin(\pi k_\ell) \equiv 0.
\end{aligned}$$

Caso 4: $k_1 \neq 0$ y $k_2 \neq 0$.

Consideramos el cambio de variable $v = \frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)$, $dv = \frac{2\pi k_1}{T}dx$ se tiene:

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \left(\int_{-T/2}^{T/2} \cos \left(\frac{2\pi}{T} (k_1 x + k_2 y) \right) dx \right) dy &= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} \left(\int_{\frac{2\pi}{T}(-k_1 T/2 + k_2 y)}^{\frac{2\pi}{T}(k_1 T/2 + k_2 y)} \cos(v) dv \right) dy \\
&= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} \left[\sin \left(\frac{2\pi}{T} (k_1 T/2 + k_2 y) \right) \right. \\
&\quad \left. - \sin \left(\frac{2\pi}{T} (-k_1 T/2 + k_2 y) \right) \right] dy
\end{aligned}$$

Si consideramos los cambios de variable

$$w = \frac{2\pi}{T} (k_1 T/2 + k_2 y),$$

$$\tilde{w} = \frac{2\pi}{T} (-k_1 T/2 + k_2 y)$$

por lo tanto $dw = \frac{2\pi k_2}{T} dy$, $d\tilde{w} = \frac{2\pi k_2}{T} dy$ y se obtiene que

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T} \right)^{-1} \left[\int_{\frac{2\pi}{T}(k_1 T/2 - k_2 T/2)}^{\frac{2\pi}{T}(k_1 T/2 + k_2 T/2)} \sin(w) dw \right. \\
&\quad \left. - \int_{\frac{2\pi}{T}(-k_1 T/2 - k_2 T/2)}^{\frac{2\pi}{T}(-k_1 T/2 + k_2 T/2)} \sin(\tilde{w}) d\tilde{w} \right] \\
&= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T} \right)^{-1} \left[\int_{\pi(k_1 - k_2)}^{\pi(k_1 + k_2)} \sin(w) dw \right. \\
&\quad \left. - \int_{\pi(-k_1 - k_2)}^{\pi(-k_1 + k_2)} \sin(\tilde{w}) d\tilde{w} \right] \\
&= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T} \right)^{-1} \left[-\cos(\pi(k_1 + k_2)) + \cos(\pi(k_1 - k_2)) \right. \\
&\quad \left. + \cos(\pi(-k_1 + k_2)) - \cos(\pi(-k_1 - k_2)) \right] \\
&= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T} \right)^{-1} \left[-\cos(\pi(k_1 + k_2)) + \cos(\pi(k_1 - k_2)) \right. \\
&\quad \left. + \cos(-\pi(k_1 - k_2)) - \cos(-\pi(k_1 + k_2)) \right] \\
&= \left(\frac{2\pi k_1}{T} \right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T} \right)^{-1} \left[-2\cos(\pi(k_1 + k_2)) + 2\cos(\pi(k_1 - k_2)) \right] \\
&= \left(\frac{T^2}{2\pi^2 k_1 k_2} \right) \left[-\cos(\pi(k_1 + k_2)) + \cos(\pi(k_1 - k_2)) \right] \\
&= \left(\frac{T^2}{2\pi^2 k_1 k_2} \right) \left[-\cos(\pi k_1) \cos(\pi k_2) + \sin(\pi k_1) \sin(\pi k_2) + \cos(\pi k_1) \cos(\pi k_2) \right. \\
&\quad \left. + \sin(\pi k_1) \sin(\pi k_2) \right] \\
&= \left(\frac{T^2}{\pi^2 k_1 k_2} \right) \sin(\pi k_1) \sin(\pi k_2) = \left(\frac{T^2}{\pi^2 k_1 k_2} \right) \cdot 0 \cdot 0 \equiv 0
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx dy = \delta_0^{k_1} \delta_0^{k_2} T^2.$$

Ahora calculamos la integral $\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx dy$. Hay que tomar

4 casos:

Caso 1: $k_1 = 0$ y $k_2 = 0$. Este caso es directo

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(0x + 0y)\right) dx dy = \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin(0) dx dy = 0.$$

Caso 2 y Caso 3: $k_\ell \neq 0$ y $k_s = 0$, donde $\{\ell, s\} = \{1, 2\}$

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell x_\ell\right) dx_\ell dx_s &= T \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell x_\ell\right) dx_\ell \\ &= T \left(\frac{2\pi}{T}k_\ell\right)^{-1} \left[-\cos\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell \frac{T}{2}\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{T}k_\ell \left(-\frac{T}{2}\right)\right)\right] \\ &= T \left(\frac{2\pi}{T}k_\ell\right)^{-1} \cdot 0 \equiv 0. \end{aligned}$$

Caso 4: $k_1 \neq 0$ y $k_2 \neq 0$

Consideramos el cambio de variable $v = \frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)$, $dv = \frac{2\pi k_1}{T} dx$ se tiene:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \left(\int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx \right) dy &= \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} \left(\int_{\frac{2\pi}{T}(-k_1T/2+k_2y)}^{\frac{2\pi}{T}(k_1T/2+k_2y)} \sin(v) dv \right) dy \\ &= \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \int_{-T/2}^{T/2} \left[-\cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1T/2 + k_2y)\right) \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(\frac{2\pi}{T}(-k_1T/2 + k_2y)\right) \right] dy \end{aligned}$$

Ahora consideramos los cambios de variable

$$w = \frac{2\pi}{T}(k_1T/2 + k_2y),$$

$$\tilde{w} = \frac{2\pi}{T}(-k_1T/2 + k_2y)$$

por lo tanto $dw = \frac{2\pi k_2}{T} dy$, $d\tilde{w} = \frac{2\pi k_2}{T} dy$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T}\right)^{-1} \left[\int_{\frac{2\pi}{T}(k_1T/2-k_2T/2)}^{\frac{2\pi}{T}(k_1T/2+k_2T/2)} -\cos(w) dw \right. \\ &\quad \left. + \int_{\frac{2\pi}{T}(-k_1T/2-k_2T/2)}^{\frac{2\pi}{T}(-k_1T/2+k_2T/2)} \cos(\tilde{w}) d\tilde{w} \right] \\ &= \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T}\right)^{-1} \left[\int_{\pi(k_1-k_2)}^{\pi(k_1+k_2)} -\cos(w) dw \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\pi(-k_1-k_2)}^{\pi(-k_1+k_2)} \cos(\tilde{w}) d\tilde{w} \Big] \\
& = \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T}\right)^{-1} \left[-\sin(\pi(k_1+k_2)) + \sin(\pi(k_1-k_2)) \right. \\
& \quad \left. + \sin(\pi(-k_1+k_2)) - \sin(\pi(-k_1-k_2)) \right] \\
& = \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T}\right)^{-1} \left[-\sin(\pi(k_1+k_2)) + \sin(\pi(k_1-k_2)) \right. \\
& \quad \left. + \sin(-\pi(k_1-k_2)) - \sin(-\pi(k_1+k_2)) \right] \\
& = \left(\frac{2\pi k_1}{T}\right)^{-1} \left(\frac{2\pi k_2}{T}\right)^{-1} \left[-\sin(\pi(k_1+k_2)) + \sin(\pi(k_1-k_2)) \right. \\
& \quad \left. - \sin(\pi(k_1-k_2)) + \sin(\pi(k_1+k_2)) \right] \\
& = 0
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1x + k_2y)\right) dx dy = 0.$$

Concluimos que

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} u = T^2 \cdot a(k_1 = 0, k_2 = 0) = m.$$

Resultados de la Implementación

Con las matrices definidas A y Aeq de restricciones, los vectores f, b, beq y la forma cuadrática $H = H_W + H_{riesz} + H_{grad}$, modelamos nuestro problema con la función objetivo cuadrática $\frac{1}{2}x^T Hx + f^t x$ sujeta a las restricciones lineales $Ax \leq b$ y $Aeqx = beq$. El comando para utilizar Quadprog es

$$x = \text{quadprog}(H, f_w, A, b, Aeq, beq);$$

donde x es el vector solución de coeficientes de Fourier. Lamentablemente no obtenemos resultados ya que una vez ejecutado el código nos aparece que el problema no es convexo y Quadprog sólo soluciona problemas cuadráticos convexos.

The problem is non-convex.

En la minimización numérica con el solver Fmincon, el modelamiento del problema es exactamente igual que en Quadprog, pero primero tenemos que definir la función objetivo (utilizamos la misma de antes) y una condición inicial

```
fun = @(x) 1/2*x'*H_reducida*x + f_w_reducida'*x ;
c0 = zeros(2*(N/2+1)^2,1);
```

Al igual que antes, consideramos las matrices A y A_{eq} de restricciones, los vectores f, b, beq y la forma cuadrática $H = H_W + H_{riesz} + H_{grad}$. La orden para utilizar `fmincon` es

```
c = fmincon(fun,c0,A_reducida,b,Aeq_reducida,beq);
```

Luego de ejecutarlo el solver no nos da un resultado, pero nos recomienda agregar en la instrucción el comando `options`. Las opciones utilizadas son opciones de algoritmos de punto interior y básicamente cuando las opciones `EnableFeasibilityMode` es `true` y la opción `SubproblemAlgorithm` está en "cg" el algoritmo busca la mejor forma de encontrar una solución factible.

```
options = optimoptions("fmincon",...
    "Algorithm","interior-point",...
    "EnableFeasibilityMode",true,...
    "SubproblemAlgorithm","cg");

c = fmincon(fun,c0,A_reducida,b,Aeq_reducida,beq);
```

Aún así, luego de ejecutar el programa, el resultado es el siguiente:

```
Converged to an infeasible point.

fmincon stopped because the size of the current
step is less than the value of the step size
tolerance but constraints are not satisfied
to within the value of the constraint tolerance.

<stopping criteria details>
```

En el Apéndice se encuentran los códigos utilizados en esta implementación.

Capítulo 4

Minimización Numérica en Julia: IPOPT

4.1. IPOPT

El solver IPOPT (Interior Point Optimizer) es una biblioteca de software para la optimización no lineal a gran escala de sistemas continuos. IPOPT implementa un algoritmo de punto interior primal-dual con un método de búsqueda lineal de filtros. En esta sección haremos una descripción del algoritmo, el método de filtro de búsqueda lineal y correcciones de segundo orden basándonos en [18].

Notación:

La i -ésima componente de un vector $v \in \mathbb{R}^n$ es escrita por $v^{(i)}$. Las normas $\|\cdot\|$ denotan una norma vectorial fija y es compatible con la norma matricial salvo que se indique explícitamente. Además se introduce la notación $X := \text{diag}(x)$ para un vector x (similarmente $Z := \text{diag}(z)$), y e representa el vector de todos los unos para la dimensión ocupada.

Se considera un método de barrera primal-dual para resolver problemas de optimización no lineal de la forma

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

sujeto a $c(x) = 0$ con $x_L \leq x \leq x_U$, donde $x_L \in [-\infty, \infty)^n$ y $x_U \in (-\infty, \infty]^n$, con $x_L^{(i)} \leq x_U^{(i)}$, los límites inferior y superior de las variables x . La función objetivo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ y la restricción de igualdad $c : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, con $m \leq n$, se asumen dos veces diferenciables. Los problemas con restricciones de desigualdad no lineales generales, $d(x) \leq 0$, se pueden reformular en la forma anterior introduciendo variables de holgura.

El Enfoque de Barrera Primal-Dual

Para simplificar notación, se describe el método para la formulación del problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{1a}$$

sujeto a

$$c(x) = 0 \quad (1b)$$

$$x \geq 0. \quad (1c)$$

Como método de barrera, el algoritmo propuesto calcula soluciones (aproximadas) para una sucesión de problemas de barrera

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \varphi_\mu(x) := f(x) - \mu \sum_{i=1}^n \ln(x^{(i)}) \quad (2a)$$

sujeto a

$$c(x) = 0 \quad (2b)$$

para una sucesión decreciente de parámetros de barrera μ que convergen a cero. Equivalentemente, esto puede ser interpretado como la aplicación de un método de homotopía a las ecuaciones primal-dual,

$$\nabla f(x) + \nabla c(x)\lambda - z = 0 \quad (3a)$$

$$c(x) = 0 \quad (3b)$$

$$XZe - \mu e = 0, \quad (3c)$$

con un parámetro de homotopía μ , que se lleva a cero. Aquí, $\lambda \in \mathbb{R}^m$ y $z \in \mathbb{R}^n$ corresponden a los multiplicadores Lagrangianos para las restricciones de igualdad (1b) y la restricción de borde (1c), respectivamente. Notemos que las ecuaciones (3) para $\mu = 0$ junto con $x, z \geq 0$, son las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) para el problema original (1). Estas son las condiciones para la optimalidad de primer orden para (1) si se cumplen las restricciones.

El método presentado calcula una solución aproximada del problema de barrera (2) para un valor fijo de μ , luego disminuye el parámetro de barrera, y continúa la solución del siguiente problema de barrera a partir de la solución aproximada del anterior.

Utilizando las partes individuales de las ecuaciones primal-dual (3), se define el error de optimalidad para el problema de barrera como

$$E_\mu(x, \lambda, z) := \max \left\{ \frac{\|\nabla f(x) + \nabla c(x)\lambda - z\|_\infty}{s_d}, \|c(x)\|_\infty, \frac{\|XZe - \mu e\|_\infty}{s_c} \right\} \quad (4.1)$$

con parámetros de escala $s_d, s_c \geq 1$ definidos a continuación. Si $\mu = 0$ denotaremos $E_\mu(x, \lambda, z)$ por $E_0(x, \lambda, z)$; esto mide el error de optimización del problema original (1). El algoritmo general termina si una solución aproximada $(\tilde{x}_*, \tilde{\lambda}_*, \tilde{z}_*)$ (incluidas las estimaciones del multiplicador) satisface

$$E_0(\tilde{x}_*, \tilde{\lambda}_*, \tilde{z}_*) \leq \varepsilon_{\text{tol}} \quad (4.2)$$

donde $\varepsilon_{\text{tol}} > 0$ es la tolerancia de error proporcionada por el usuario.

Incluso si el problema original está bien escalado, los multiplicadores λ y z pueden llegar a ser muy grandes, por ejemplo, cuando los gradientes de las restricciones activas son (casi) linealmente dependientes en una solución de (1). En tal caso, el algoritmo podría encontrar dificultades numéricas para satisfacer las ecuaciones primal-dual no escaladas (3) con una tolerancia ajustada. Para adaptar los criterios de terminación a estas circunstancias, se eligen los factores de escala en (4.1).

$$s_d = \text{máx} \left\{ s_{\text{max}}, \frac{\|\lambda\|_1 + \|z\|_1}{(m+n)} \right\} / s_{\text{max}} \quad s_c = \text{máx} \left\{ s_{\text{max}}, \frac{\|z\|_1}{n} \right\} / s_{\text{max}}$$

De este modo, se escala un componente del error de optimalidad, cada vez que el valor medio de los multiplicadores se hace mayor que un número fijo $s_{\text{max}} \geq 1$ ($s_{\text{max}} = 100$ en la implementación). Obsérvese también, en el caso que los multiplicadores divergen, $E_0(x, \lambda, z)$ sólo puede hacerse pequeño si se aproxima a un punto de Fritz-John para (1), o si las variables primarias también divergen.

Para lograr una convergencia local rápida (a una solución local de (1) que satisfaga las fuertes condiciones de optimalidad suficientes de segundo orden), se sigue el enfoque propuesto por Byrd, Liu y Nocedal que se ha demostrado que da lugar a una convergencia superlineal bajo condiciones suficientes de segundo orden estándar. Denotando por j el contador de iteración para el “loop externo”, se requiere que la solución aproximada $(\tilde{x}_{*,j+1}, \tilde{\lambda}_{*,j+1}, \tilde{z}_{*,j+1})$ al problema de barrera (2), para un valor dado de μ_j , satisfaga la tolerancia

$$E_{\mu_j}(\tilde{x}_{*,j+1}, \tilde{\lambda}_{*,j+1}, \tilde{z}_{*,j+1}) \leq \kappa_\varepsilon \mu_j \quad (4.3)$$

para una constante $\kappa_\varepsilon > 0$, antes de que el algoritmo continúe con la solución del siguiente problema de barrera. El nuevo parámetro de barrera se obtiene por

$$\mu_{j+1} = \text{máx} \left\{ \frac{\varepsilon_{\text{tol}}}{10}, \text{mín} \{ \kappa_\mu \mu_j, \mu_j^{\theta_u} \} \right\} \quad (4.4)$$

con constantes $\kappa_\mu \in (0, 1)$ y $\theta_\mu \in (1, 2)$. En este sentido, el parámetro de barrera disminuye a un ritmo superlineal. Por otra parte, la regla de actualización (4.4) no permite que μ sea menor de lo necesario dada la tolerancia deseada ε_{tol} , evitando así dificultades numéricas al final del procedimiento de optimización.

Para una referencia posterior, también elegimos un parámetro de “fracción hasta la frontera”

$$\tau_j = \text{máx} \{ \tau_{\text{mín}}, 1 - \mu_j \} \quad (4.5)$$

donde $\tau_{\text{mín}} \in (0, 1)$ es su valor mínimo.

Solución del Problema de Barrera

Para resolver el problema de barrera (2) para un valor fijo u_j del parámetro de barrera, se aplica un método de Newton amortiguado a las ecuaciones primal-dual (3). Se utiliza k para denotar el contador de iteraciones del “bucle interno”. Dado un

iterado (x_k, λ_k, z_k) con $x_k, z_k > 0$, las direcciones de búsqueda $(d_k^x, d_k^\lambda, d_k^z)$ se obtienen a partir de la linealización de (3) en (x_k, λ_k, z_k) , a saber

$$\begin{bmatrix} W_k & A_k & -I \\ A_k^T & 0 & 0 \\ Z_k & 0 & X_k \end{bmatrix} \begin{pmatrix} d_k^x \\ d_k^\lambda \\ d_k^z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla f(x_k) + A_k \lambda_k - z_k \\ c(x_k) \\ X_k Z_k e - \mu_j e \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Aquí $A_k := \nabla c(x_k)$, y W_k denota el Hesiano $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k, z_k)$ de la función Lagrangiana (para el problema original (1)),

$$\mathcal{L}(x, \lambda, z) := f(x) + c(x)^T \lambda - z. \quad (4.7)$$

En lugar de resolver directamente el sistema lineal no simétrico (4.6), el método propuesto calcula la solución de manera equivalente resolviendo primero el sistema lineal simétrico más pequeño

$$\begin{bmatrix} W_k + \sum_k & A_k \\ A_k^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} d_k^x \\ d_k^\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla \varphi_{\mu_j}(x_k) + A_k \lambda_k \\ c(x_k) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

con $\sum_k := X_k^{-1} Z_k$ derivado de (4.6) eliminando la última fila del bloque. El vector d_k^z se obtiene a partir de

$$d_k^z = \mu_j X_k^{-1} e - z_k - \sum_k d_k^x. \quad (4.9)$$

Luego en la implementación, se resuelve el sistema lineal

$$\begin{bmatrix} W_k + \sum_k + \delta_w^I & A_k \\ A_k^T & -\delta_c I \end{bmatrix} \begin{pmatrix} d_k^x \\ d_k^\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla \varphi_{\mu_j}(x_k) + A_k \lambda_k \\ c(x_k) \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

para $d_w, d_c \geq 0$. Una vez calculadas las direcciones de búsqueda de (4.9) y (4.10), hay que determinar los pasos de tamaño $\alpha_k, \alpha_k^z \in (0, 1]$ para obtener la siguiente iteración como

$$x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k^x \quad (4.11)$$

$$\lambda_{k+1} := \lambda_k + \alpha_k d_k^\lambda \quad (4.12)$$

$$z_{k+1} := z_k + \alpha_k^z d_k^z. \quad (4.13)$$

Notemos que se permite un tamaño de paso en las variables z diferente al de las demás variables. En las experiencias de los autores, esto es más eficiente ya que no restringe innecesariamente los pasos.

Dado que x y z son ambos positivos en una solución óptima del problema de barrera (2), esta propiedad se mantiene para todos los iterados. Se alcanza utilizando la regla de la *fracción a la frontera*

$$\alpha_k^{\max} := \max\{\alpha \in (0, 1] : x_k + \alpha d_k^x \geq (1 - \tau_j) x_k\} \quad (4.14)$$

$$\alpha_k^z := \max\{\alpha \in (0, 1] : z_k + \alpha d_k^z \geq (1 - \tau_j) z_k\} \quad (4.15)$$

donde el parámetro τ_j es definido en (4.5). Note que α_k^z es el tamaño de paso actual usado en (4.13). Para garantizar la convergencia global, el tamaño de paso $\alpha_k \in (0, \alpha_k^{\max}]$ para las variables restantes se determina mediante un procedimiento de búsqueda lineal de retroceso que explora una sucesión decreciente de tamaños

de paso de prueba $\alpha_{k,l} = 2^{-l}\alpha_k^{\max}$ (con $l = 0, 1, 2, \dots$). Se utiliza una variante de búsqueda lineal del método de filtro de Fletcher y Leyffer [27], que es presentado y analizado en [28]. En particular, en [28] se demuestra que este procedimiento es globalmente convergente bajo supuestos apropiados (suaves).

Método de Filtro de Búsqueda Lineal

Los Métodos de Filtro fueron propuestos originalmente por Fletcher y Leyffer [27]. En el contexto de resolver el problema de barrera (2) para μ_j , la idea básica de este enfoque es interpretar (2) como un problema de optimización bi-objetivo con el objetivo de minimizar la función objetivo $\varphi_{\mu_j}(x)$ y la violación de la restricción $\theta(x) := \|c(x)\|$ (con cierto énfasis en esta última cantidad). Siguiendo este paradigma, podríamos considerar aceptable un punto de prueba $x_k(\alpha_{k,l}) := x_k + \alpha_{k,l}d_k^x$ durante la búsqueda de la línea de retroceso, si conduce a un progreso suficiente hacia cualquiera de los objetivos en comparación con el iterado actual, es decir, si

$$\theta(x_k(\alpha_{k,l})) \leq (1 - \gamma_\theta)\theta(x_k) \quad \text{o} \quad \varphi_{\mu_j}(x_k(\alpha_{k,l})) \leq \varphi_{\mu_j}(x_k) - \gamma_\varphi\theta(x_k) \quad (4.16)$$

para constantes fijas $\gamma_\theta, \gamma_\varphi \in (0, 1)$. Sin embargo, el criterio anterior se reemplaza por requerir suficiente progreso en la función objetivo de barrera, siempre que para la iteración actual tengamos $\theta(x_k) \leq \theta^{\min}$, para alguna constante $\theta^{\min} \in (0, \infty]$, y la siguiente condición de cambio

$$\nabla\varphi_{\mu_j}(x_k)^T d_k^x < 0 \quad \text{y} \quad \alpha_{k,l}[-\nabla\varphi_{\mu_j}(x_k)^T d_k^x]^{s_\varphi} > \delta[\theta(x_k)]^{s_\theta}, \quad (4.17)$$

con constantes $\delta > 0, s_\theta > 1, s_\varphi \geq 1$. Si $\theta(x_k) \leq \theta^{\min}$ y (4.17) se cumple para el paso de tamaño actual $\alpha_{k,l}$, el punto de prueba tiene que satisfacer la condición de Armijo

$$\varphi_{\mu_j}(x_k(\alpha_{k,l})) \leq \varphi_{\mu_j}(x_k) + \eta_\varphi\alpha_{k,l}\nabla\varphi_{\mu_j}(x_k)^T d_k^x, \quad (4.18)$$

en lugar de (4.16), para que sea aceptable. Aquí $\eta_\varphi \in (0, \frac{1}{2})$ es una constante. Si la proyección de la matriz superior izquierda de (4.10) sobre el espacio nulo de A_k^T es uniformemente definida positiva, puede demostrarse que la condición (4.17) se cumple si se aproxima a un punto factible, pero no óptimo. Si se impone la disminución de la función objetivo mediante (4.18), se impide que el método converja a dicho punto. De acuerdo a publicaciones anteriores sobre métodos de filtro, se puede llamar a un tamaño de paso de prueba $\alpha_{k,l}$ para el que (4.17) se cumple, un “tamaño de paso φ ”.

El algoritmo también mantiene un filtro, un conjunto

$$\mathcal{F}_k \subseteq \{(\theta, \phi) \in \mathbb{R}^2 : \theta \geq 0\}$$

para cada iteración k . El filtro \mathcal{F}_k contiene aquellas combinaciones de valores de violación de la restricción θ y los valores de la función objetivo φ , que están “prohibidos” para un punto de prueba exitoso en la iteración k : Durante la búsqueda de línea, se rechaza un punto de prueba $x_k(\alpha_{k,l})$, si $(\theta(x_k(\alpha_{k,l})), \varphi_{\mu_j}(x_k(\alpha_{k,l}))) \in \mathcal{F}_k$. Entonces se dice que el punto de prueba no es aceptable para el filtro actual. Al principio de la optimización, el filtro se inicializa con

$$\mathcal{F}_0 := \{(\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2 : \theta \geq \theta^{\max}\} \quad (4.19)$$

para algún θ^{\max} , para que el algoritmo nunca permita que se acepten puntos de prueba que tengan una violación de la restricción mayor que θ^{\max} . Posteriormente, el filtro se aumenta, utilizando la fórmula de actualización

$$\mathcal{F}_{k+1} := \mathcal{F}_k \cup \{(\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2 : \theta \geq (1 - \gamma_\theta)\theta(x_k) \text{ y } \varphi \geq \varphi_{\mu_j}(x_k) - \gamma_\varphi\theta(x_k)\}, \quad (4.20)$$

después de cada iteración, en la que el tamaño del paso de prueba aceptado no satisface la condición de cambio (4.17), o en la que la condición de Armijo (4.18) no se cumple. Esto asegura que los iterados no pueden regresar a la vecindad de x_k . Por otro lado, si tanto (4.17) como (4.18) se cumplen para el tamaño del paso aceptado, el filtro permanece sin cambios.

En general, este procedimiento garantiza que el algoritmo no pueda ciclar, por ejemplo, entre dos puntos que disminuyan alternativamente la violación de la restricción y la función objetivo de barrera.

En algunos casos no es posible encontrar un tamaño de paso de prueba $\alpha_{k,l}$ que satisfaga los criterios anteriores. En tal caso nos aproximamos a un tamaño de paso mínimo deseado utilizando modelos lineales de las funciones implicadas. Para ello, se define

$$\alpha_k^{\min} := \gamma_\alpha \cdot \begin{cases} \min \left\{ \gamma_\theta, \frac{\gamma_\varphi\theta(x_k)}{-\nabla\varphi_{u_j}(x_k)^T d_k^x}, \frac{\delta[\theta(x_k)]^s\theta}{[-\nabla\varphi_{u_j}(x_k)^T d_k^x]^s\varphi} \right\} & \text{si } \nabla\varphi_{\mu_j}(x_k)^T d_k^x < 0 \text{ y } \theta(x_k) \leq \theta^{\min} \\ \min \left\{ \gamma_\theta, \frac{\gamma_\varphi\theta(x_k)}{-\nabla\varphi_{u_j}(x_k)^T d_k^x} \right\} & \text{si } \nabla\varphi_{\mu_j}(x_k)^T d_k^x < 0 \text{ y } \theta(x_k) > \theta^{\min} \\ \gamma_\theta & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (4.21)$$

con un factor de seguridad $\gamma_\alpha \in (0, 1]$. Si la búsqueda lineal de retroceso encuentra un tamaño de paso de prueba con $\alpha_{k,l} \leq \alpha_k^{\min}$, el algoritmo vuelve a una fase de restauración de la factibilidad. Aquí, el algoritmo intenta encontrar un nuevo iterado $x_{k+1} > 0$ que sea aceptable para el filtro actual y para el que (4.16) se cumpla, reduciendo la violación de la restricción con algún método iterativo.

Para garantizar la convergencia global del método general, basta con garantizar la convergencia global para cada parámetro de barrera con un valor fijo μ_l . Por lo tanto, el filtro \mathcal{F}_k se restablece a su definición inicial (4.19), cada vez que μ_l disminuye. Podría ser posible reinicializar el filtro de forma que incluya información del problema de barrera anterior, pero en la experiencia de los autores la reinicialización funciona bien en la práctica.

Correcciones de Segundo Orden

Muchos métodos de optimización no lineal utilizan correcciones de segundo orden para mejorar el paso propuesto si se ha rechazado un punto de prueba. Una corrección de segundo orden (SOC) para algún paso \tilde{d}_k^x pretende reducir la inviabilidad

aplicando un paso adicional de tipo Newton para las restricciones en el punto $x_k + \tilde{d}_k^x$, usando el Jacobiano A_k^T en x_k . En el método propuesto, si el primer paso de prueba de tamaño $\alpha_{k,0}$ se ha rechazado y si $\theta(x_k(\alpha_{k,0})) \geq \theta(x_k)$, se calcula una corrección de segundo orden $d_k^{x,\text{soc}}$ (para el paso $\tilde{d}_k^x = \alpha_{k,0}d_k^x$) que satisface

$$A_k^T d_k^{x,\text{soc}} + c(x_k + \alpha_{k,0}d_k^x) = 0. \quad (4.22)$$

La nueva dirección de búsqueda corregida se obtiene entonces de

$$d_k^{x,\text{cor}} = \alpha_{k,0}d_k^x + d_k^{x,\text{soc}}. \quad (4.23)$$

La condición (4.22) no define de forma única la corrección de segundo orden y son posibles diferentes opciones. Para evitar factorizaciones matriciales adicionales, el método propuesto utiliza la misma matriz que en (4.10) para calcular el paso corregido general (4.23) a partir de

$$\begin{bmatrix} W_k + \sum_k + \delta_w^I & A_k \\ A_k^T & -\delta_c I \end{bmatrix} \begin{pmatrix} d_k^{x,\text{cor}} \\ d_k^\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla \varphi_{\mu_j}(x_k) + A_k \lambda_k \\ c_k^{\text{soc}} \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Aquí, se elige

$$c_k^{\text{soc}} = \alpha_{k,0}c(x_k) + c(x_k + \alpha_{k,0}d_k^x), \quad (4.25)$$

que se obtiene a partir de (4.10), (4.22) y (4.23).

Una vez calculada la dirección de búsqueda corregida $d_k^{x,\text{cor}}$, aplicamos de nuevo la regla de fracción a la frontera

$$\alpha_k^{\text{soc}} := \max\{\alpha \in (0, 1] : x_k + \alpha d_k^{x,\text{cor}} \geq (1 - \tau_j)x_k\} \quad (4.26)$$

y se verifica si el punto de prueba resultante $x_k^{\text{soc}} := x_k + \alpha_k^{\text{soc}}d_k^{x,\text{cor}}$ es aceptable para el filtro y satisface los criterios de aceptación del filtro. Note que la dirección de búsqueda original d_k^x se sigue utilizando en (4.17) y la parte derecha de (4.18). Además, x_k^{soc} reemplaza $x(\alpha_k)$ en (4.18).

Si este punto de prueba supera las pruebas, se acepta como nueva iteración. De lo contrario, se aplican correcciones adicionales de segundo orden, a menos que el paso de corrección no haya disminuido la violación de la restricción en una fracción $k_{\text{soc}} \in (0, 1)$ o se haya realizado un número máximo p^{max} de correcciones de segundo orden. En tal caso, se restablece la dirección de búsqueda original d_k^x y se reanuda la búsqueda de línea de retroceso regular con un tamaño de paso más corto $\alpha_{k,1} = \frac{1}{2}\alpha_{k,0}$.

Note que al optar aplicar una corrección de segundo orden en el paso $\tilde{d}_k^x = \alpha_{k,0}d_k^x$ en lugar de, por ejemplo, el paso completo d_k^x , no se requiere ninguna evaluación adicional de las restricciones. Esto también garantiza que las restricciones nunca se evalúan para argumentos que violen las restricciones (1c), en las que podrían no estar definidas.

El Algoritmo

A continuación enunciamos formalmente el algoritmo general de búsqueda lineal de filtros para resolver el problema de barrera (2).

Algoritmo (Método de barrera de filtro de búsqueda lineal).

Dados: Punto inicial (x_0, λ_0, z_0) con $x_0, z_0 > 0$; valor inicial para el parámetro de barrera $\mu_0 > 0$; constantes $\varepsilon_{\text{tol}} > 0$, $s_{\text{max}} \geq 1$; $\kappa_\varepsilon > 0$; $\kappa_\mu \in (0, 1)$; $\theta_\mu \in (1, 2)$; $\tau_{\text{min}} \in (0, 1)$; $\kappa_\Sigma > 1$; $\theta_{\text{max}} \in (\theta(x_0), \infty]$; $\theta_{\text{min}} > 0$; $\gamma_\theta, \gamma_\varphi \in (0, 1)$; $\delta > 0$; $\gamma_\alpha \in (0, 1]$; $s_\theta > 1$; $s_\varphi \geq 1$; $\eta_\varphi \in (0, \frac{1}{2})$; $\kappa_{\text{soc}} \in (0, 1)$; $p^{\text{max}} \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

A-1. *Inicializar.* Inicializar los contadores de iteración $j \leftarrow 0$ y $k \leftarrow 0$, como también el filtro \mathcal{F}_0 de (4.19). Obtener τ_0 de (4.5).

A-2. *Verifique la convergencia para el problema general.* Si $E_0(x_k, \lambda_k, z_k) \leq \varepsilon_{\text{tol}}$ (con el error estimado E_0 definido en (4.1)), entonces STOP [CONVERGE].

A-3. *Verifique la convergencia para el problema de barrera.* Si $E_{\mu_j}(x_k, \lambda_k, z_k) \leq \kappa_\varepsilon \mu_j$, entonces:

A-3.1. Calcular μ_{j+1} y τ_{j+1} de (4.4) y (4.5) y establecer $j \leftarrow j + 1$;

A-3.2. Reinicializar el filtro $\mathcal{F}_k \leftarrow \{(\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2 : \theta \geq \theta^{\text{max}}\}$;

A-3.3. Si $k = 0$ repetir el paso A-3, de lo contrario continuar al A-4.

A-4. *Calcule la dirección de búsqueda.* Calcular $(d_k^x, d_k^\lambda, d_k^z)$ de (4.10), donde δ_w y δ_c son obtenidos en otro algoritmo descrito en [18, Sección 3.1].

A-5. *Búsqueda de línea de retroceso.*

A-5.1. *Inicializar la búsqueda de línea.* Establecer $\alpha_{k,0} = \alpha_k^{\text{max}}$ con α_k^{max} de (4.14), y establecer $l \leftarrow 0$.

A-5.2. *Calcular el nuevo punto de prueba.* Establecer $x_k(\alpha_{k,l}) := x_k + \alpha_{k,l} d_k^x$.

A-5.3. *Comprobar la aceptabilidad del filtro.* Si $(\theta(x_k(\alpha_{k,l})), \varphi_{\mu_j}(x_k(\alpha_{k,l}))) \in \mathcal{F}_k$, rechazar el punto de prueba y pasar al paso A-5.5.

A-5.4. *Comprobar la disminución suficiente con respecto a la iteración actual.*

◦ Caso 1: $\theta(x_k) \leq \theta^{\text{min}}$ y (4.17) se cumple: Si (4.18) se cumple, aceptar el paso de prueba $x_{k+1} := x_k(\alpha_{k,l})$ y pasar a A-6. De lo contrario, continuar a A-5.5.

◦ Caso 2: $\theta(x_k) > \theta^{\text{min}}$ o (4.17) no se cumple: Si (4.16) se cumple, aceptar el paso de prueba $x_{k+1} := x_k(\alpha_{k,l})$ y pasar a A-6. De lo contrario, continuar a A-5.5.

A-5.5. *Inicializa la corrección de segundo orden.* Si $l > 0$ o $\theta(x_{k,0}) < \theta(x_k)$, omitir la corrección de segundo orden (SOC) y continuar a A-5.10. De otra manera, inicializar el contador SOC $p \leftarrow 1$ y c_k^{soc} de (4.25). Inicializar $\theta_{\text{old}}^{\text{soc}} \leftarrow \theta(x_k)$.

A-5.6. *Calcular la corrección de segundo orden.* Calcular $d_k^{x,\text{cor}}$ y d_k^λ de (4.24), α_k^{soc} de (4.26), y $x_k^{\text{soc}} := x_k + \alpha_k^{\text{soc}} d_k^{x,\text{cor}}$.

- A-5.7. *Comprobar la aceptabilidad del filtro (en SOC).* Si $(\theta(x_k^{\text{soc}}), \varphi_{\mu_j}(x_k^{\text{soc}})) \in \mathcal{F}_k$, rechazar el tamaño de paso de prueba y pasar al paso A-5.10.
- A-5.8. *Comprobar la disminución suficiente con respecto a la iteración actual (en SOC).*
- Caso I: $\theta(x_k) \leq \theta^{\min}$ y (4.17) se cumple (para $\alpha_{k,0}$): Si (4.18) se cumple sustituyendo “ $x_k(\alpha_{k,l})$ ” con “ x_k^{soc} ”, aceptar el paso de prueba $x_{k+1} := x_k^{\text{soc}}$ y pasar a A-6. De lo contrario, continuar a A-5.9.
 - Caso II: $\theta(x_k) > \theta^{\min}$ o (4.17) no se cumple (para $\alpha_{k,0}$): Si (4.16) se cumple sustituyendo “ $x_k(\alpha_{k,l})$ ” con “ x_k^{soc} ”, aceptar el paso de prueba $x_{k+1} := x_k^{\text{soc}}$ y pasar a A-6. De lo contrario, continuar a A-5.9.
- A-5.9. *Siguiente corrección de segundo orden.* Si $p = p^{\max}$ o $\theta(x_k^{\text{soc}}) > \kappa_{\text{soc}} \theta_{\text{old}}^{\text{soc}}$, abortar SOC y continuar a A-5.10. De lo contrario, aumentar el contador SOC $p \leftarrow p + 1$, y establecer $c_k^{\text{soc}} \leftarrow \alpha_k^{\text{soc}} c_k^{\text{soc}} + c(x_k^{\text{soc}})$ y $\theta_{\text{old}}^{\text{soc}} \leftarrow \theta(x_k^{\text{soc}})$. Volver a A-5.6.
- A-5.10. *Seleccione el nuevo tamaño de paso de prueba.* Establecer $\alpha_{k,l+1} = \frac{1}{2} \alpha_{k,l}$ y $l \leftarrow l + 1$. Si el tamaño de paso de prueba es demasiado pequeño, es decir, $\alpha_{k,l} < \alpha_k^{\min}$, con α_k^{\min} definido en (4.21), ir a la fase de restauración de factibilidad en A-9. De lo contrario, volver a A-5.2.
- A-6. *Aceptar el punto de prueba.* Establecer $\alpha_k := \alpha_{k,l}$ (o $\alpha_k := \alpha_k^{\text{soc}}$ si se aceptó el punto SOC en A-5.8), y actualizar las estimaciones del multiplicador λ_{k+1} y z_{k+1} de (4.12) y (4.13) con α_k^z de (4.15).
- A-7. *Aumentar el filtro si es necesario.* Si (4.17) y (4.18) no se cumplen para α_k , aumentar el filtro usando (4.20). En caso contrario, no modificar el filtro, es decir, establecer $\mathcal{F}_{k+1} := \mathcal{F}_k$.
- A-8. *Continuar con la siguiente iteración.* Aumentar el contador de iteraciones $k \leftarrow k + 1$ y volver a A-2.
- A-9. *Fase de restauración de la factibilidad.* Aumentar el filtro usando (4.20), y calcular una nueva iteración $x_{k+1} > 0$ disminuyendo la medida de inviabilidad $\theta(x)$, de modo que x_{k+1} sea aceptable para el filtro aumentado, es decir, $(\theta(x_{k+1}), \varphi_{\mu_j}(x_{k+1})) \notin \mathcal{F}_{k+1}$. Luego continúe con la iteración regular en el Paso A-8.

Si la evaluación de la función objetivo f o de las funciones de restricción c da lugar a un error (tal como Nan, “Not a Number”, o Inf, “Infinity”) para un punto de prueba $x_k(\alpha_{k,l})$, el tamaño del paso se rechaza inmediatamente y el algoritmo de retroceso continúa en el paso A-5.10.

Observe que en cada iteración se probará al menos un punto de prueba antes de que el algoritmo pueda pasar a la fase de restauración. Además, la condición del paso A-3.3 garantiza que, eventualmente, se realice al menos un paso para cada valor decreciente del parámetro barrera. Esto es necesario para lograr una convergencia local rápida en la vecindad de una solución local que satisfaga las condiciones de optimalidad fuerte de segundo orden.

4.2. Implementación en Julia

Julia es un lenguaje de programación de alto rendimiento diseñado para la computación técnica y científica. Fue desarrollado para ser rápido y eficiente al mismo tiempo que es fácil de escribir y leer. Julia se utiliza comúnmente en ámbitos como el análisis de datos, la modelización numérica, la simulación y la visualización. Además, tiene una sintaxis similar a la de Matlab lo que facilitó el proceso de aprender y comenzar a utilizarlo.

Al igual que en Matlab, fijamos $n = 2$, de modo que $\mathbf{j} = (j_1, j_2)$, $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$, $\mathbf{x} = (x, y)$ con $x = \frac{j_1 T}{N}$ y $y = \frac{j_2 T}{N}$, además se definen los valores de $\alpha = 1$, $T = 20\pi$ y consideramos la constante c_m (2.9) que para estos parámetros es igual a la masa. Para simplificar cálculos, se consideran sólo las funciones trigonométricas linealmente independientes, por lo que se define un conjunto de índices admisibles para el vector $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$:

$$I_{\mathbf{k}} = \{-N/2, \dots, N/2\} \times \{1, \dots, N/2\} \cup \{1, \dots, N/2\} \times \{0\}.$$

Por lo tanto, el tamaño del conjunto de índices $I_{\mathbf{k}}$ nos da la cantidad de modos de Fourier:

$$(N + 1) \frac{N}{2} + \frac{N}{2}$$

La función $u = u(\mathbf{j}T/N) = u(x, y) \in E_N$ con la que se trabaja es

$$u(x, y) = \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[a(k_1, k_2) \cos\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) + b(k_1, k_2) \sin\left(\frac{2\pi}{T}(k_1 x + k_2 y)\right) \right].$$

Si ocupamos la notación compleja

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$$

$$\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$$

se tiene

$$\begin{aligned} u(x, y) &= \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[a(k_1, k_2) \frac{e^{\frac{2\pi i}{T}(k_1 x + k_2 y)} + e^{-\frac{2\pi i}{T}(k_1 x + k_2 y)}}{2} + b(k_1, k_2) \frac{e^{\frac{2\pi i}{T}(k_1 x + k_2 y)} - e^{-\frac{2\pi i}{T}(k_1 x + k_2 y)}}{2i} \right] \\ &= \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[a(k_1, k_2) \frac{e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{2} + b(k_1, k_2) \frac{e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{2i} \right] \\ &= \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[a(k_1, k_2) \frac{e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{2} + b(k_1, k_2) i \frac{e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{2} \right] \\ &= \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right], \end{aligned}$$

por lo tanto

$$u(x, y) = \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right].$$

En lo que sigue ocuparemos las siguientes notaciones $a_{\mathbf{k}} = a(k_1, k_2)$, $b_{\mathbf{k}} = b(k_1, k_2)$, $a_{\tilde{\mathbf{k}}} = a(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$, $b_{\tilde{\mathbf{k}}} = b(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$ y $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$, $\tilde{\mathbf{k}} = (\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)$.

Potencial Cuadrático

Para $W(x) = x - x^2$ el potencial de doble pozo, $\mathcal{W}_N(u)$ es de la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_N(u) &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} W\left(u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)\right) \\ &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right) + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[-\left(u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)\right)^2\right] \\ &= I + II \end{aligned}$$

Consideremos ahora el siguiente lema

Lema 4.2.1. Para $\alpha \notin 2\pi\mathbb{Z}$, $\zeta = e^{\alpha i}$ con $\zeta \neq 1$ entonces

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} \zeta^j = e^{\alpha i/2} \frac{\sin(\frac{\alpha N}{2})}{\sin(\frac{\alpha}{2})}.$$

Demostración:

$$\begin{aligned} \sum_{j=-N/2+1}^{N/2} \zeta^j &= \frac{\zeta^{N/2+1} - \zeta^{-N/2+1}}{\zeta - 1} \\ &= \frac{e^{\alpha i(N/2+1)} - e^{\alpha i(-N/2+1)}}{e^{\alpha i} - 1} \\ &= \frac{e^{\alpha i(N/2+1)} - e^{\alpha i(-N/2+1)}}{e^{\alpha i} - 1} \cdot \frac{e^{-\frac{\alpha i}{2}}}{e^{-\frac{\alpha i}{2}}} \\ &= \frac{e^{\alpha i/2(N+1)} - e^{\alpha i/2(-N+1)}}{e^{\alpha i/2} - e^{-\alpha i/2}} \\ &= \frac{e^{\alpha i/2} (e^{\alpha Ni/2} - e^{-\alpha Ni/2})}{2i \sin(\alpha/2)} \\ &= \frac{e^{\alpha i/2} 2i \sin(\alpha N/2)}{2i \sin(\alpha/2)} \\ &= e^{\frac{\alpha i}{2}} \frac{\sin(\alpha N/2)}{\sin(\alpha/2)}. \end{aligned}$$

□

Para el primer término

$$\begin{aligned}
I &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} u\left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right) \\
&= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \left(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}\right)} \right] \right) \\
&= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} \right] \right) \\
&= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \frac{m}{T^2} + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} \right] \\
&= m + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} \right] \\
&= m + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1, j_2} e^{-\frac{2\pi i}{N} (k_1 j_1 + k_2 j_2)} \right] \\
&= m + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} \right]
\end{aligned}$$

Lema 4.2.2. $\sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} = 0$ y $\sum_{j_1} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} = 0$

Demostración: Por Lema 4.2.1 con $\alpha = \frac{2\pi k}{N}$ se tiene

$$\begin{aligned}
\sum_j \left(e^{\frac{2\pi i k}{N}} \right)^j &= e^{\frac{\pi k i}{N}} \frac{\sin(\pi k)}{\sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)} \\
&= 0 \quad (\text{para } k \neq 0)
\end{aligned}$$

y $\sum_j \left(e^{\frac{2\pi i k}{N}} \right)^j = N$ para $k = 0$. Por lo tanto,

$$\sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i k_1}{N} j_1} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i k_2}{N} j_2} = \begin{cases} N^2 & \text{si } k_1 = k_2 = 0 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

pero como $(0, 0) \notin I_k$ se tiene que

$$\sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} = 0$$

La demostración de $\sum_{j_1} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} = 0$ es análoga. \square

Luego se tiene que

$$\begin{aligned} I &= m + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} \cdot 0 + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} \cdot 0 \right] \\ &= m + \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_k} 0. \end{aligned}$$

y por lo tanto $I = m$.

Para el segundo término

$$\begin{aligned} II &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[- \left(u(j_1 \frac{T}{N}, j_2 \frac{T}{N}) \right)^2 \right] \\ &= \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[- \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \right] \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[\left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \right] \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left[\frac{m^2}{T^4} + \frac{2m}{T^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right. \\ &\quad \left. + \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \right] \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \frac{m^2}{T^4} - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \frac{2m}{T^2} \sum_{j_1, j_2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &\quad - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ &= - \frac{m^2}{T^2} - \frac{2m}{N^2} \sum_{j_1, j_2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &\quad - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ &= - \frac{m^2}{T^2} - \frac{2m}{N^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1, j_2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &\quad - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ &= - \frac{m^2}{T^2} - \frac{2m}{N^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} \left] \right. \\ \left. - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \right.$$

Pero por lo que vimos antes en el desarrollo de I sabemos que

$$\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \sum_{j_1} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_1 j_1} \sum_{j_2} e^{-\frac{2\pi i}{N} k_2 j_2} \right] = 0$$

Por lo tanto

$$II = -\frac{m^2}{T^2} - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2.$$

Ahora vamos a desarrollar el término

$$-\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2$$

Notemos que

$$-\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ = -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_k} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right) \cdot \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \right) \\ = -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_k} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2}\right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{2}\right) \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2}\right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{2}\right) \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right. \\ \left. + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2}\right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{2}\right) \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2}\right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{2}\right) \sum_{j_1, j_2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right].$$

Veamos una a una las cuatro integrales discretas de “productos internos” de funciones trigonométricas con frecuencias distintas (las cuales sabemos que son ortogonales)

$$\begin{aligned}
\sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} &= \sum_{j_1=-N/2+1}^{N/2} \sum_{j_2=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \\
&= \sum_{j_1=-N/2+1}^{N/2} \sum_{j_2=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i}{T}(k_1+\tilde{k}_1, k_2+\tilde{k}_2)\cdot(j_1 T/N, j_2 T/N)} \\
&= \sum_{j_1=-N/2+1}^{N/2} \sum_{j_2=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i(k_1+\tilde{k}_1)j_1+2\pi i(k_2+\tilde{k}_2)j_2}{N}} \\
&= \sum_{j_1=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i(k_1+\tilde{k}_1)j_1}{N}} \sum_{j_2=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i(k_2+\tilde{k}_2)j_2}{N}}
\end{aligned}$$

A continuación consideramos el siguiente lema:

Lema 4.2.3. Si $k_1 = k_2 = N/2$ se tiene que $\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1+k_2)i}{N}})^j = N$, en otro caso

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i(k_1+k_2)j}{N}} = 0 \quad \text{y} \quad \sum_{j=-N/2+1}^{N/2} e^{\frac{2\pi i(k_1-k_2)j}{N}} = N\delta_{k_1=k_2}$$

Demostración:

Por Lema 4.2.1 tomando $\alpha = \frac{2\pi(k_1+k_2)}{N}$ tenemos que

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1+k_2)i}{N}})^j = e^{\frac{\pi(k_1+k_2)i}{N}} \frac{\sin(\pi(k_1+k_2))}{\sin(\frac{\pi(k_1+k_2)}{N})}$$

Notemos que $\sin(x) = 0$ si y sólo si $x = \pi m$ con $m \in \mathbb{Z}$. Por lo tanto como $k_1+k_2 \in \mathbb{Z}$, entonces se tiene que

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1+k_2)i}{N}})^j = 0.$$

Hay sólo dos casos donde lo anterior no se cumple y se tiene que $e^{\frac{2\pi(k_1+k_2)i}{N}} = 1$ y por lo tanto

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1+k_2)i}{N}})^j = N$$

que es para $k_1 = k_2 = 0$ y $k_1 = k_2 = N/2$, pero el caso $(0, 0)$ no lo consideramos. Por otra parte, tomando $\alpha = \frac{2\pi(k_1-k_2)}{N}$ se tiene

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1-k_2)i}{N}})^j = e^{\frac{\pi(k_1-k_2)i}{N}} \frac{\sin(\pi(k_1-k_2))}{\sin(\frac{\pi(k_1-k_2)}{N})}$$

Si $k_1 - k_2 = 0$, es decir $k_1 = k_2$ obtenemos

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1-k_2)i}{N}})^j = N$$

En cualquier otro caso, $k_1 - k_2 \in \mathbb{Z}$ y por lo tanto

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1-k_2)i}{N}})^j = 0,$$

y concluimos que

$$\sum_{j=-N/2+1}^{N/2} (e^{\frac{2\pi(k_1-k_2)i}{N}})^j = N\delta_{k_1=k_2}. \quad \square$$

Por lo tanto aplicando el Lema 4.2.3

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{j_1, j_2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right. \\ &+ \left. \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1, j_2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1, j_2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right]. \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i (k_1 + \tilde{k}_1) j_1}{N}} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i (k_2 + \tilde{k}_2) j_2}{N}} \right. \\ &+ \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i (k_1 - \tilde{k}_1) j_1}{N}} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i (k_2 - \tilde{k}_2) j_2}{N}} \\ &+ \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1} e^{\frac{2\pi i (\tilde{k}_1 - k_1) j_1}{N}} \sum_{j_2} e^{\frac{2\pi i (\tilde{k}_2 - k_2) j_2}{N}} \\ &+ \left. \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \sum_{j_1} e^{-\frac{2\pi i (k_1 + \tilde{k}_1) j_1}{N}} \sum_{j_2} e^{-\frac{2\pi i (k_2 + \tilde{k}_2) j_2}{N}} \right]. \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \cdot N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}=(N/2, N/2)} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \right. \\ &+ \left. \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \cdot N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}=(N/2, N/2)} \right] \\ &= - \left(\frac{T}{N}\right)^2 \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \cdot N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}=(N/2, N/2)} + \sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \right. \\ &+ \left. \sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \right) \cdot N^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}=(N/2, N/2)} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}}{2} i \right) \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}}{2} i \right) N^2 + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left(\frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}}{2} i \right) \left(\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}}{2} i \right) N^2 \right. \\
&+ \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) - b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right) \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) + b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right) N^2 \\
&+ \left. \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) + b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right) \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) - b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right) N^2 \right] \\
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \left[2 \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left(\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i}{2} \right) \left(\frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i}{2} \right) N^2 \right. \\
&+ \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) - b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right)^2 N^2 + \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) + b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right)^2 N^2 \left. \right] \\
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \left[\frac{2}{4} N^2 \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} (a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i) (a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i) \right. \\
&+ \left. \left(\left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) - b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right)^2 + \left(\frac{a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) + b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) i}{2} \right)^2 \right) N^2 \right] \\
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \left[\frac{N^2}{2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} (a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i) (a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i) \right. \\
&+ \left. \left(\frac{\left(a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2}{2} - \frac{\left(b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2}{2} \right) N^2 \right] \\
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \left[\frac{N^2}{2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2 \right) + \frac{N^2}{2} \left(\left(a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 - \left(b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 \right) \right] \\
&= -\left(\frac{T}{N}\right)^2 \frac{N^2}{2} \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2 \right) + \left(\left(a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 - \left(b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 \right) \right] \\
&= -\frac{T^2}{2} \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2 \right) + \left(\left(a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 - \left(b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 \right) \right]
\end{aligned}$$

por lo tanto,

$$II = -\frac{m^2}{T^2} - \frac{T^2}{2} \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2 \right) + \left(\left(a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 - \left(b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 \right) \right]$$

y finalmente

$$\mathcal{W}_N(u) = m - \frac{m^2}{T^2} - \frac{T^2}{2} \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2 \right) + \left(\left(a\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 - \left(b\left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right) \right)^2 \right) \right].$$

Luego si ponderamos por $\frac{1}{\varepsilon}$ nos queda que el potencial $\frac{1}{\varepsilon} \mathcal{W}_N(u)$ es

$$\frac{1}{\varepsilon} \mathcal{W}_N(u) = \frac{1}{\varepsilon} \left(m - \frac{m^2}{T^2} \right) - \frac{T^2}{2\varepsilon} \left[\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} ((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2) + \left((a(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}))^2 - (b(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}))^2 \right) \right].$$

Potencial de Riesz

Recordemos que

$$\mathcal{V}_{\alpha,T}(u) = \frac{C(2,\alpha)}{T^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left| \frac{2\pi}{T}(k_1, k_2) \right|^{-\alpha} |c_{k_1, k_2, T}(u)|^2$$

donde $c_{k_1, k_2, T}(u) := \iint_{[-T/2, T/2]^2} u(x) e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x}$.

Notemos que

$$\begin{aligned} u(x) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} &= \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ &= \frac{m}{T^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ &\quad + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ &= \frac{m}{T^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} c_{k_1, k_2, T}(u) &= \frac{m}{T^2} \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} - b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} \\ &\quad + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} + b_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{2} \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x} \end{aligned}$$

Lema 4.2.4. Si $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)$ con $\alpha_1 \neq 0$ y $\alpha_2 \neq 0$ entonces

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x} = \frac{4 \sin\left(\frac{\alpha_1 T}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha_2 T}{2}\right)}{\alpha_1 \alpha_2}.$$

Demostración: Notamos que

$$e^{i \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{x}} = e^{\alpha_1 x i} e^{\alpha_2 y i}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x} &= \int_{-T/2}^{T/2} e^{\alpha_1 x i} \, dx \int_{-T/2}^{T/2} e^{\alpha_2 y i} \, dy \\
&= \frac{e^{\alpha_1 x i} \Big|_{-T/2}^{T/2}}{\alpha_1 i} \frac{e^{\alpha_2 y i} \Big|_{-T/2}^{T/2}}{\alpha_2 i} \\
&= \left(\frac{e^{\alpha_1 \frac{T}{2} i}}{\alpha_1 i} - \frac{e^{\alpha_1 \frac{-T}{2} i}}{\alpha_1 i} \right) \left(\frac{e^{\alpha_2 \frac{T}{2} i}}{\alpha_2 i} - \frac{e^{\alpha_2 \frac{-T}{2} i}}{\alpha_2 i} \right) \\
&= \frac{2 \sin \left(\frac{\alpha_1 T}{2} \right)}{\alpha_1} \frac{2 \sin \left(\frac{\alpha_2 T}{2} \right)}{\alpha_2} \\
&= \frac{4 \sin \left(\frac{\alpha_1 T}{2} \right) \sin \left(\frac{\alpha_2 T}{2} \right)}{\alpha_1 \alpha_2}. \quad \square
\end{aligned}$$

Veamos que se generan los siguientes casos

1. Si $\alpha_1 = 0$ pero $\alpha_2 \neq 0$,

$$\begin{aligned}
\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x} &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \alpha_2 y} \, dy \, dx \\
&= T \frac{2 \sin \left(\frac{\alpha_2 T}{2} \right)}{\alpha_2}.
\end{aligned}$$

2. Si $\alpha_1 \neq 0$ y $\alpha_2 = 0$,

$$\begin{aligned}
\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x} &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \alpha_1 x} \, dx \, dy \\
&= T \frac{2 \sin \left(\frac{\alpha_1 T}{2} \right)}{\alpha_1}.
\end{aligned}$$

3. Si $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$,

$$\begin{aligned}
\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{i \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{x}} \, d\mathbf{x} &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} dy \, dx \\
&= T^2.
\end{aligned}$$

Aplicando el Lema 4.2.4, se obtienen que las integrales que componen $c_{k_1, k_2, T}(u)$ tienen los siguientes valores :

$$\blacksquare \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = 0 :$$

Tomando $\boldsymbol{\alpha} = \frac{-2\pi \mathbf{k}}{T}$ se tiene que si $k_1 \neq 0$ y $k_2 \neq 0$ entonces

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \frac{4 \sin(-\pi k_1) \sin(-\pi k_2)}{\frac{4\pi^2 k_1 k_2}{T^2}} = 0$$

Para los casos donde ($k_1 = 0$ y $k_2 \neq 0$) ó ($k_1 \neq 0$ y $k_2 = 0$) también se obtiene que $\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = 0$. El caso $k_1 = k_2 = 0$ está descartado ya que $(k_1, k_2) \in I_{\mathbf{k}}$.

$$\blacksquare \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = 0 :$$

Para $\boldsymbol{\alpha} = \frac{-2\pi(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{k})}{T}$, si $(\tilde{k}_1 + k_1) \neq 0$ y $(\tilde{k}_2 + k_2) \neq 0$ se obtiene

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = \frac{4 \sin\left(-\pi(\tilde{k}_1 + k_1)\right) \sin\left(-\pi(\tilde{k}_2 + k_2)\right)}{\frac{4\pi^2(\tilde{k}_1 + k_1)(\tilde{k}_2 + k_2)}{T^2}} = 0$$

Para el caso donde $((\tilde{k}_1 + k_1) = 0$ y $(\tilde{k}_2 + k_2) \neq 0)$ ó $((\tilde{k}_1 + k_1) \neq 0$ y $(\tilde{k}_2 + k_2) = 0)$ también tenemos que $\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = 0$.

Por último cuando $(\tilde{k}_1 + k_1) = (\tilde{k}_2 + k_2) = 0$ se tiene que

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = T^2 \text{ y sólo se da cuando } \tilde{k}_1 = -k_1 \text{ y } \tilde{k}_2 = -k_2,$$

es decir, cuando $(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) = (-k_1, -k_2)$ pero por la definición del conjunto $I_{\mathbf{k}}$, $k_2 \geq 0$, por lo tanto $(k_1, k_2) = (-k_1, 0)$. Si $k_1 > 0$ entonces $(-k_1, 0) \notin I_{\mathbf{k}}$, por ende, este caso no es posible.

$$\blacksquare \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = T^2 \delta_{\tilde{k}_1=k_1, \tilde{k}_2=k_2} = T^2 \delta_{\tilde{\mathbf{k}}=\mathbf{k}} :$$

Tomando $\boldsymbol{\alpha} = \frac{2\pi(\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k})}{T}$, si $(\tilde{k}_1 - k_1) \neq 0$ y $(\tilde{k}_2 - k_2) \neq 0$ se obtiene

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = \frac{4 \sin\left(\pi(\tilde{k}_1 - k_1)\right) \sin\left(\pi(\tilde{k}_2 - k_2)\right)}{\frac{4\pi^2(\tilde{k}_1 - k_1)(\tilde{k}_2 - k_2)}{T^2}} = 0$$

Para el caso donde $((\tilde{k}_1 - k_1) = 0$ y $(\tilde{k}_2 - k_2) \neq 0)$ ó $((\tilde{k}_1 - k_1) \neq 0$ y $(\tilde{k}_2 - k_2) = 0)$ también tenemos que $\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = 0$.

Por último cuando $(\tilde{k}_1 - k_1) = (\tilde{k}_2 - k_2) = 0$ se tiene que

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} = T^2 \text{ y sólo se da cuando } \tilde{k}_1 = k_1 \text{ y } \tilde{k}_2 = k_2.$$

Por lo tanto

$$c_{k_1, k_2, T}(u) = \frac{m}{T^2} \cdot 0 + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) - b(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)i}{2} T^2 \delta_{\tilde{\mathbf{k}}=\mathbf{k}} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \frac{a(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) + b(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2)i}{2} \cdot 0$$

$$c_{k_1, k_2, T}(u) = \frac{T^2}{2} (a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i).$$

Luego

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}_{\alpha,T}(u) &= \frac{C(2,\alpha)}{T^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left| \frac{2\pi}{T}(k_1, k_2) \right|^{-\alpha} |c_{k_1, k_2, T}(u)|^2 \\
&= \frac{C(2,\alpha)}{T^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left| \frac{2\pi}{T}(k_1, k_2) \right|^{-\alpha} \left| \frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} T^2 \right|^2 \\
&= \frac{C(2,\alpha)}{T^2} \left| \frac{2\pi}{T} \right|^{-\alpha} \frac{T^4}{4} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} |(k_1, k_2)|^{-\alpha} |a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i|^2 \\
&= C(2,\alpha) \left| \frac{2\pi}{T} \right|^{-\alpha} \frac{T^2}{4} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} |(k_1, k_2)|^{-\alpha} |a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i|^2 \\
&= \frac{C(2,\alpha)}{(2\pi)^\alpha} \frac{T^{\alpha+2}}{4} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} ((k_1)^2 + (k_2)^2)^{-\alpha/2} [(a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2]
\end{aligned}$$

Por lo tanto, el Potencial de Riesz es de la forma $\lambda \mathcal{V}_{\alpha,T}$ es

$$\lambda \mathcal{V}_{\alpha,T}(u) = \lambda \frac{C(2,\alpha)}{(2\pi)^\alpha} \frac{T^{\alpha+2}}{4} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} ((k_1)^2 + (k_2)^2)^{-\alpha/2} ((a(k_1, k_2))^2 + (b(k_1, k_2))^2) \right).$$

Término de gradiente al cuadrado

Queremos saber el valor de $\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} |\nabla u|^2$

Notemos que

$$\begin{aligned}
\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} |\nabla u|^2 &= \iint (\partial_x u)^2 + (\partial_y u)^2 dx dy \\
&= \iint_{[-T/2, T/2]^2} (\partial_x u)^2 dx dy + \iint_{[-T/2, T/2]^2} (\partial_y u)^2 dx dy \\
&= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\partial_x \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \right)^2 dx dy \\
&+ \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\partial_y \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \right)^2 dx dy \\
&= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{2\pi i k_1}{T} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{-2\pi i k_1}{T} \right] \right)^2 dx dy \\
&+ \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{2\pi i k_2}{T} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{-2\pi i k_2}{T} \right] \right)^2 dx dy \\
&= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} i + b_{\mathbf{k}}}{T} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_1 + \frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} i}{T} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_1 \right] \right)^2 dx dy \\
&+ \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} i + b_{\mathbf{k}}}{T} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_2 + \frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} i}{T} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_2 \right] \right)^2 dx dy \\
&= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_k} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} i + b_{\mathbf{k}}}{T} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_1 + \frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} i}{T} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_1 \right) \right. \\
&\quad \cdot \left. \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} e^{\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \pi \tilde{k}_1 + \frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{T} e^{-\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \pi \tilde{k}_1 \right) \right] \\
&+ \iint_{[-T/2, T/2]^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_k} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} i + b_{\mathbf{k}}}{T} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_2 + \frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} i}{T} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \pi k_2 \right) \right. \\
&\quad \cdot \left. \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} e^{\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \pi \tilde{k}_2 + \frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{T} e^{-\frac{2\pi i}{T} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \pi \tilde{k}_2 \right) \right] \\
&= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_k} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}} i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right. \\
&+ \left(\frac{a_{\mathbf{k}} i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \\
&+ \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}} i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \\
&\left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}} i}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) e^{-\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \Big] \\
& + \iint_{[-T/2, T/2]^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right. \\
& + \left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \\
& + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) e^{\frac{2\pi i}{T}(\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \\
& \left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) e^{-\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right] \\
& = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right. \\
& + \left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \\
& + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \\
& \left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right] \\
& + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\tilde{\mathbf{k}}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right. \\
& + \left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \\
& + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \\
& \left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right]
\end{aligned}$$

Notemos que por Lema (4.2.4) para $\boldsymbol{\alpha} = \frac{2\pi(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})}{T}$ se tiene que

$$\begin{aligned}
\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} &= \frac{4 \sin\left(\pi(k_1 + \tilde{k}_1)\right) \sin\left(\pi(k_2 + \tilde{k}_2)\right)}{\frac{4\pi^2(k_1 + \tilde{k}_1)(k_2 + \tilde{k}_2)}{T^2}} \\
&= 0
\end{aligned}$$

ya que el par $(0, 0)$ está descartado.

Por lo tanto

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} = \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} = 0.$$

Por otra parte, para $\boldsymbol{\alpha} = \frac{2\pi(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})}{T}$ se tiene

$$\begin{aligned} \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})\mathbf{x}} &= \frac{4 \sin\left(\pi(k_1 - \tilde{k}_1)\right) \sin\left(\pi(k_2 - \tilde{k}_2)\right)}{\frac{4\pi^2(k_1 - \tilde{k}_1)(k_2 - \tilde{k}_2)}{T^2}} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Salvo para $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}}$, en tal caso

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})\mathbf{x}} = T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}}.$$

Para $\boldsymbol{\alpha} = \frac{2\pi(\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k})}{T}$ el desarrollo es análogo.

Luego

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}} = \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T}(\tilde{\mathbf{k}}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} = T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}}.$$

Por lo anterior, obtenemos que

$$\begin{aligned} \iint_{[-T/2, T/2]^2} |\nabla u|^2 &= \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) \cdot 0 \cdot \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right. \\ &\quad + \left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \\ &\quad + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \\ &\quad \left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) \cdot 0 \cdot \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) \cdot 0 \cdot \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right. \\ &\quad + \left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \\ &\quad + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \\ &\quad \left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) \cdot 0 \cdot \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_1 \tilde{k}_1 \right] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\left(\frac{a_{\mathbf{k}}i + b_{\mathbf{k}}}{T} \right) \left(\frac{b_{\tilde{\mathbf{k}}} - a_{\tilde{\mathbf{k}}}i}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}i}{T} \right) \left(\frac{a_{\tilde{\mathbf{k}}}i + b_{\tilde{\mathbf{k}}}}{T} \right) T^2 \delta_{\mathbf{k}=\tilde{\mathbf{k}}} \pi^2 k_2 \tilde{k}_2 \Big] \\
& = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 k_1 k_1 + ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 k_1 k_1 \right] \\
& + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 k_2 k_2 + ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 k_2 k_2 \right] \\
& = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[2 ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 (k_1)^2 \right] \\
& + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[2 ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 (k_2)^2 \right] \\
& = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} 2 ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \pi^2 ((k_1)^2 + (k_2)^2)
\end{aligned}$$

Luego,

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} |\nabla u|^2 = \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} 2\pi^2 ((k_1)^2 + (k_2)^2) (a(k_1, k_2)^2 + b(k_1, k_2)^2).$$

y por lo tanto

$$\boxed{\varepsilon \iint_{[-T/2, T/2]^2} |\nabla u|^2 = \varepsilon \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} 2\pi^2 ((k_1)^2 + (k_2)^2) (a(k_1, k_2)^2 + b(k_1, k_2)^2).}$$

Restricciones

Notemos que las restricciones para $u(\mathbf{j}T/N)$ son $u(\mathbf{j}T/N) \in [0, 1]$, $u(\mathbf{j}T/N) = 0$ si $\mathbf{j}T/N \notin \Omega$ y $\int u = m$, para todo $j \in \{-N/2 + 1, \dots, N/2\}^2$.

1) Desigualdad

La restricción de desigualdad $u(\mathbf{j}T/N) \in [0, 1]$, la modelamos considerando la matriz A y los vectores c y b de la forma

$$A = \left(\begin{array}{c|c} \cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \\ \hline -\cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & -\sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \end{array} \right)$$

$$c = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{m}{T^2} \\ \frac{m}{T^2} \end{pmatrix}$$

donde la desigualdad

$$Ac \leq b$$

contiene ambas desigualdades

$$u(\mathbf{j}T/N) \leq 1 \quad \text{y} \quad -u(\mathbf{j}T/N) \leq 0, \quad \forall \mathbf{j}.$$

2) Pertenencia

La segunda restricción de pertenencia $u(\mathbf{j}T/N) = 0$ si $\mathbf{j}T/N \notin \Omega$, donde Ω es un cuadrado de diagonal $L = \beta\pi$ con $\beta \in (0, 20)$, la modelamos mediante el producto $Aeq = beq$ donde

$$Aeq = \left(\begin{array}{c|c} \cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \\ \hline -\cos\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) & -\sin\left(\frac{2\pi}{N}(k_1j_1 + k_2j_2)\right) \end{array} \right)$$

$$c = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$$beq = \begin{pmatrix} 0 \end{pmatrix}$$

Notemos que si $(x, y) = \mathbf{j}T/N \in \Omega$ se tiene que cumplir las condiciones

$$y + x \leq \frac{L}{2}$$

$$y + x \geq \frac{-L}{2}$$

$$y - x \leq \frac{L}{2}$$

$$y - x \geq \frac{-L}{2}.$$

3) Igualdad

La última restricción de igualdad $\int u = m$ es inmediata ya que

$$\begin{aligned} \iint_{[-T/2, T/2]^2} u &= \iint_{[-T/2, T/2]^2} \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\ &= m + \iint_{[-T/2, T/2]^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &= m + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \end{aligned}$$

Recordemos que por Lema 4.2.4 para $\alpha = \frac{2\pi \mathbf{k}}{T}$ o $\alpha = -\frac{2\pi \mathbf{k}}{T}$ obtenemos que para $\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}$

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \iint_{[-T/2, T/2]^2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = 0$$

De esta manera

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} u = m + \sum_{\mathbf{k} \in I_{\mathbf{k}}} \left[\frac{a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}i}{2} \cdot 0 + \frac{a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}i}{2} \cdot 0 \right] = m + 0,$$

y se tiene que

$$\iint_{[-T/2, T/2]^2} u = m.$$

El código donde implementamos los potenciales y las restricciones en Julia se encuentra en el Apéndice. A continuación se presentan las simulaciones que se obtienen al minimizar el problema a través del solver IPOPT.

4.3. Simulaciones

Para las simulaciones se consideraron dos computadores con características:

- Computador 1: 8GB de RAM con procesador de 11th Gen Intel(R) Core(TM) i5-11300H @ 3.10GHz 3.11 GHz.
- Computador 2: 32GB de RAM con procesador de 11th Gen Intel(R) Core(TM) i7-11700 @ 2.50GHz.

y el Clúster IBM-idataPlex de la Universidad de O'Higgins que cuenta con las siguientes características:

- 66 nodos,
- 528 núcleos,
- 3.1 Tb RAM (48Gb/nodo),
- Conexión infiniband (40Gb/s),
- 192 Tb de almacenamiento.

En el Computador 1 se pudo correr hasta un número de puntos de discretización $N = 64$ con un tiempo de cómputo entre 5 y 60 minutos. En el Clúster como en el Computador 2 se logró correr hasta $N = 90$ con instrucciones que demoraron hasta más de un día. Nuestras simulaciones son hasta un máximo de $N = 90$, $\epsilon = 0.3$ y $\lambda \geq 0.3$.

A continuación se presentan los resultados de las simulaciones en Julia a través de heatmaps de valores de la función u evaluada en el vector de solución de coeficientes de Fourier que minimiza el problema. Recordemos que nuestro dominio es $[-10\pi, 10\pi]^2$ y la diagonal de nuestro cuadrado de confinamiento Ω es $L = \beta\pi$ con $\beta \in (0, 20)$.

Simulaciones para $L = \pi$ y $\lambda = 0.3$

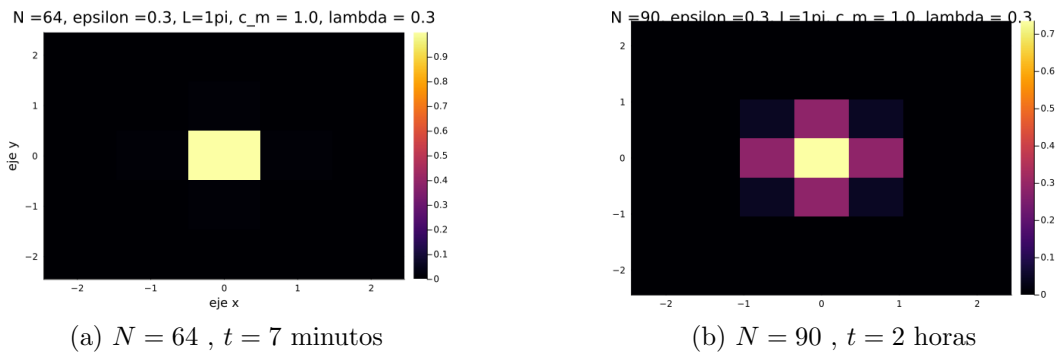


Figura 4.1: $L = \pi$, $c_m = 1.0$, $\lambda = 0.3$

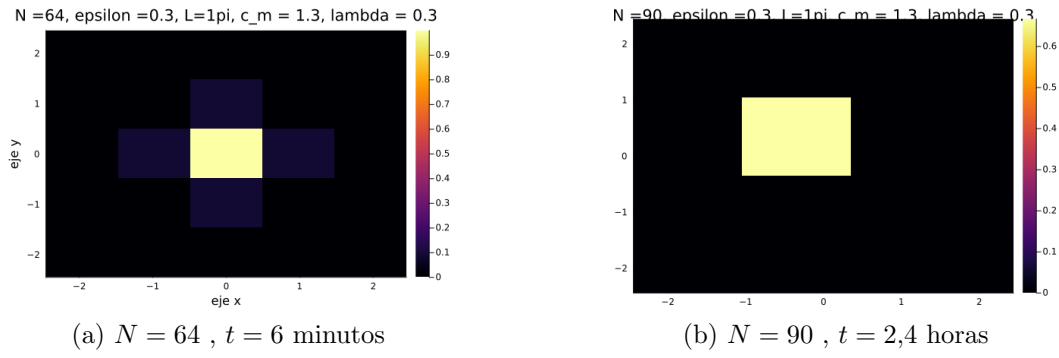


Figura 4.2: $L = \pi$, $c_m = 1.3$, $\lambda = 0.3$

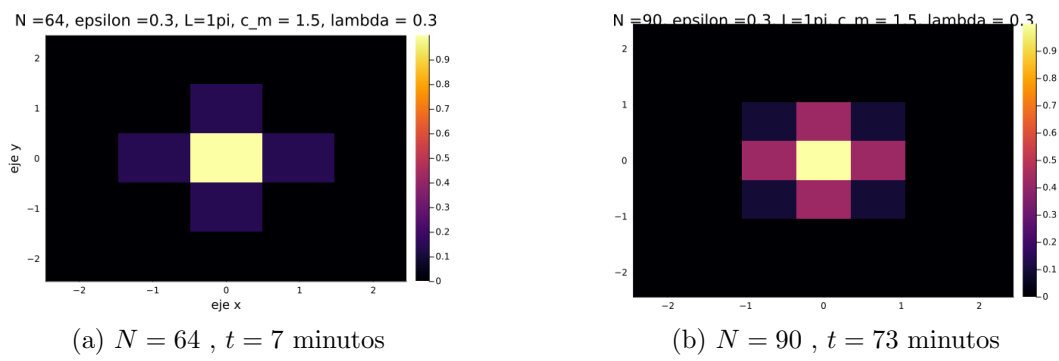


Figura 4.3: $L = \pi$, $c_m = 1.5$, $\lambda = 0.3$

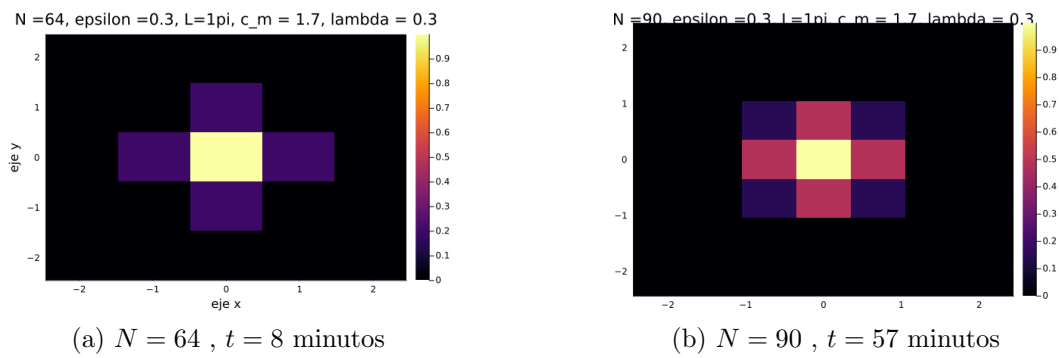


Figura 4.4: $L = \pi$, $c_m = 1.7$, $\lambda = 0.3$

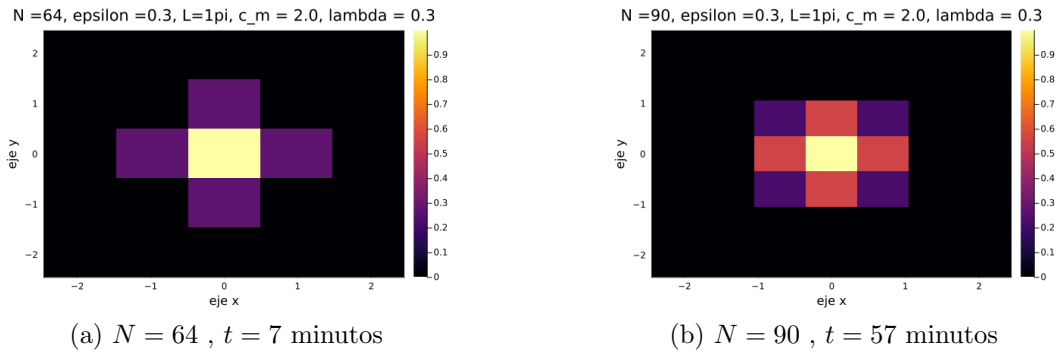


Figura 4.5: $L = \pi$, $c_m = 2.0$, $\lambda = 0.3$

Simulaciones para $L = \pi$ y $\lambda = 1$

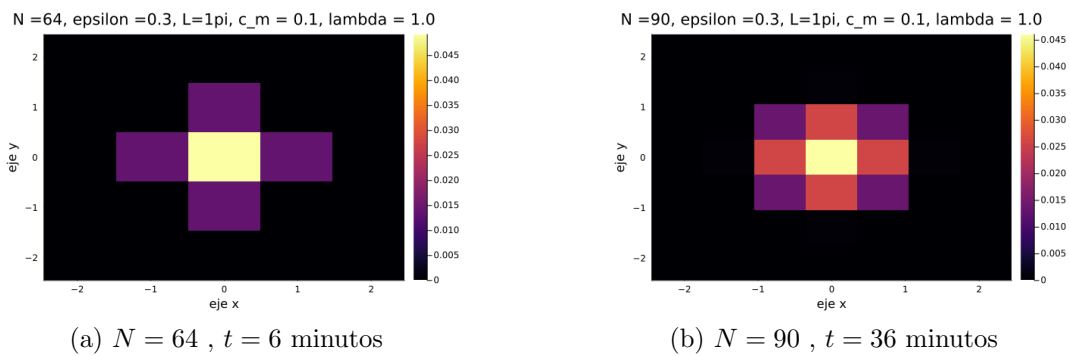


Figura 4.6: $L = \pi$, $c_m = 0.1$, $\lambda = 1$

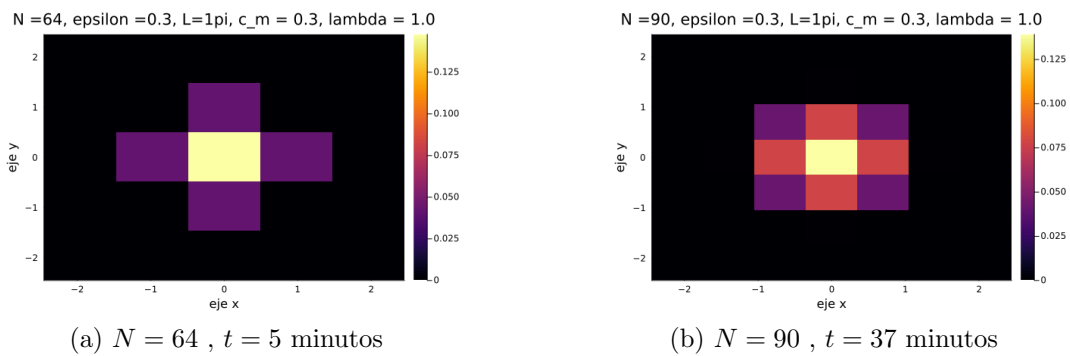


Figura 4.7: $L = \pi$, $c_m = 0.3$, $\lambda = 1$

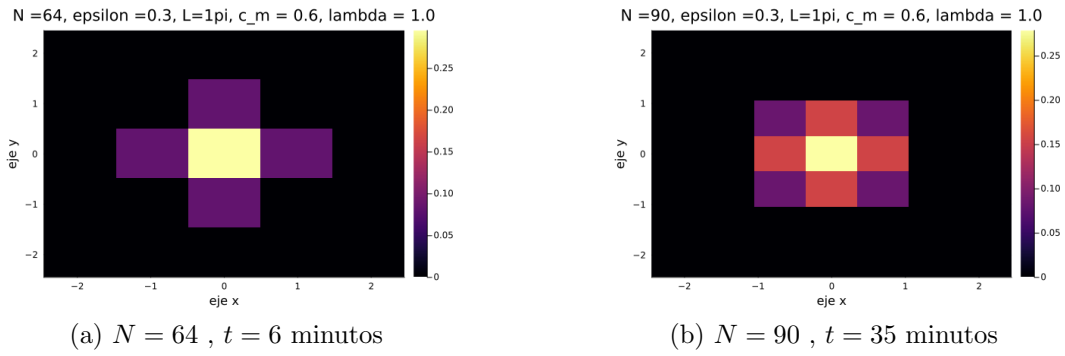


Figura 4.8: $L = \pi$, $c_m = 0.6$, $\lambda = 1$

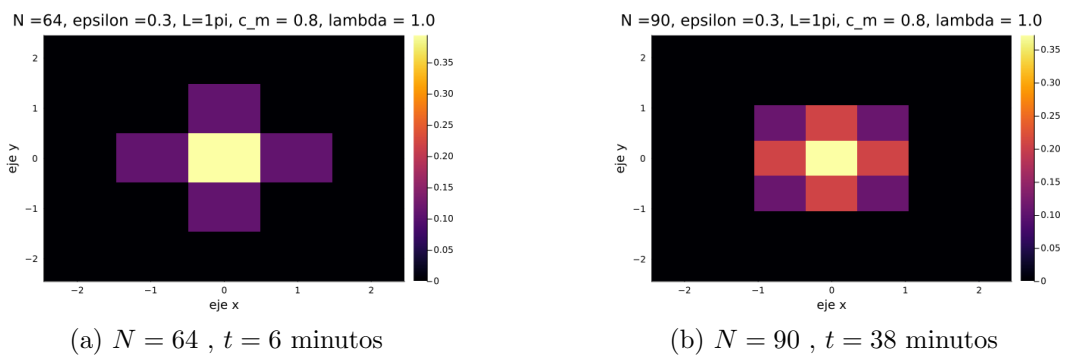


Figura 4.9: $L = \pi$, $c_m = 0.8$, $\lambda = 1$

Simulaciones para $L = 3\pi$ y $\lambda = 0.3$

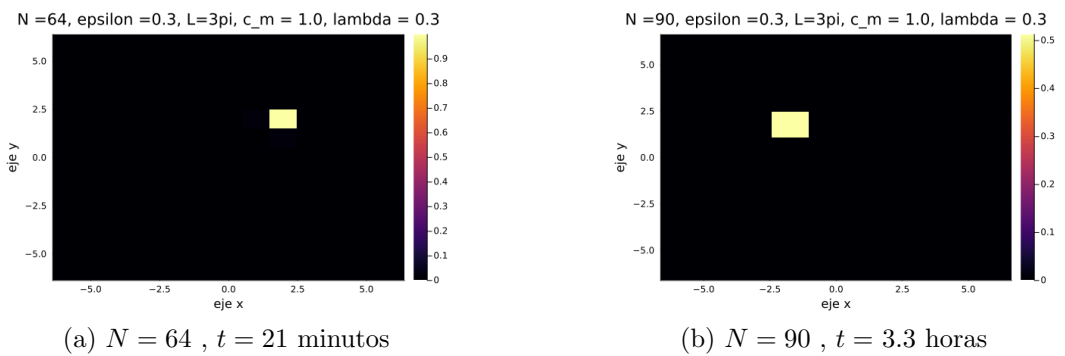


Figura 4.10: $L = 3\pi$, $c_m = 1.0$, $\lambda = 0.3$

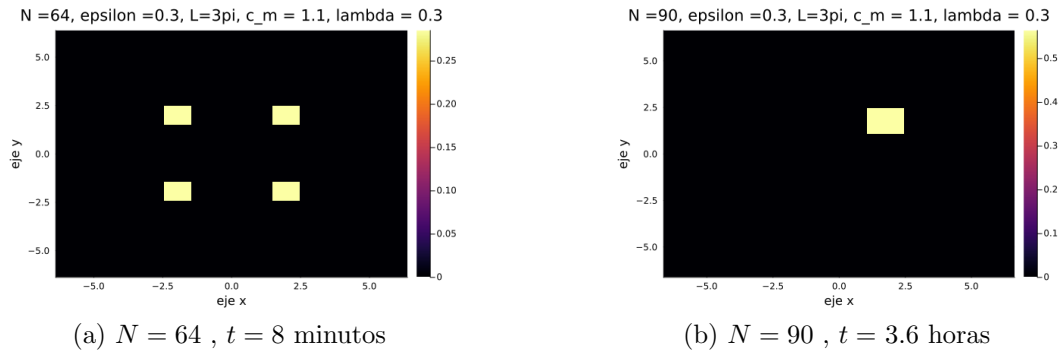


Figura 4.11: $L = 3\pi$, $c_m = 1.1$, $\lambda = 0.3$

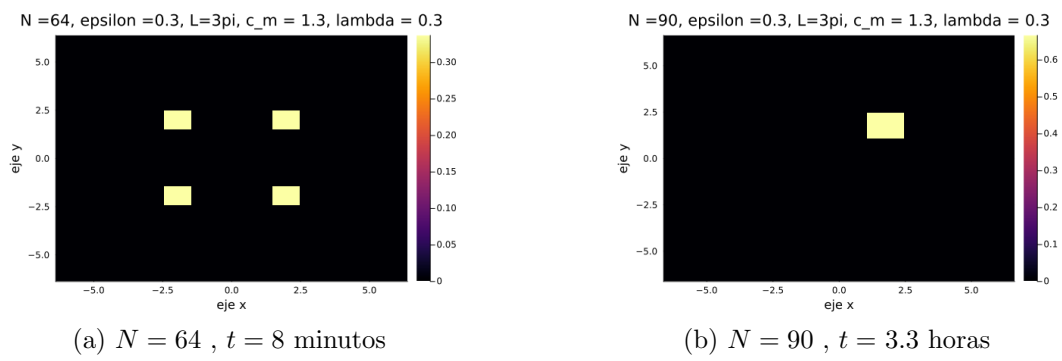


Figura 4.12: $L = 3\pi$, $c_m = 1.3$, $\lambda = 0.3$

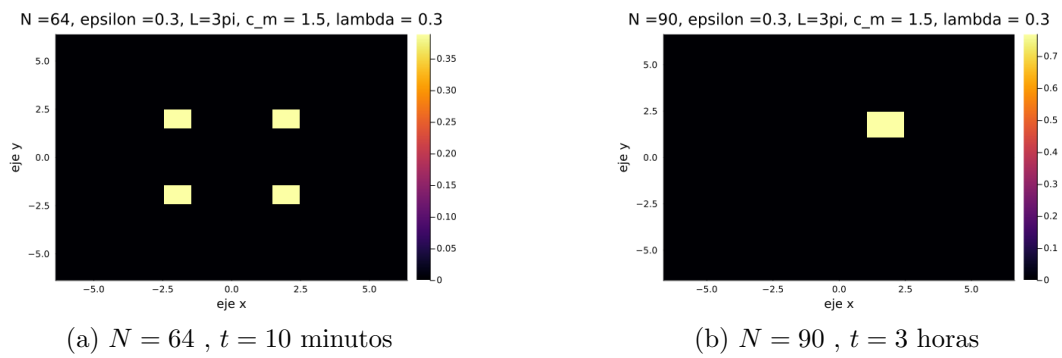


Figura 4.13: $L = 3\pi$, $c_m = 1.5$, $\lambda = 0.3$

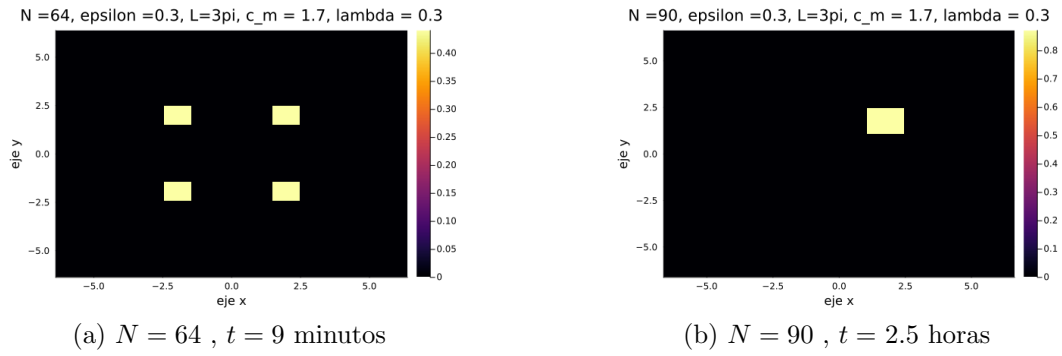


Figura 4.14: $L = 3\pi$, $c_m = 1.7$, $\lambda = 0.3$

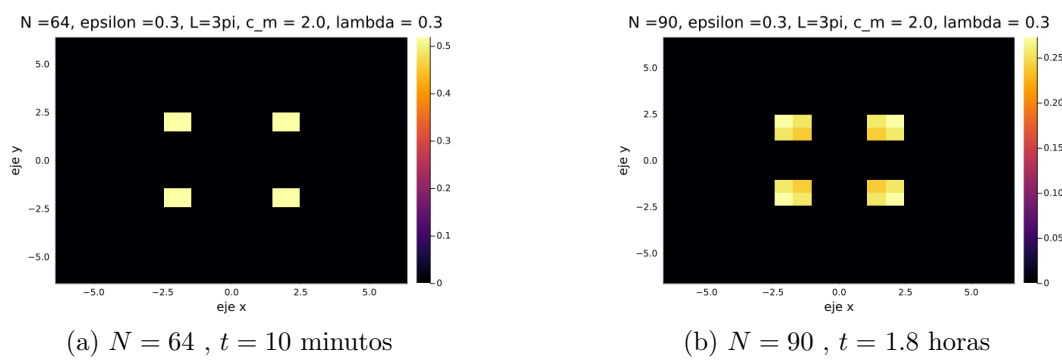


Figura 4.15: $L = 3\pi$, $c_m = 2.0$, $\lambda = 0.3$

Simulaciones para $L = 3\pi$ y $\lambda = 1$

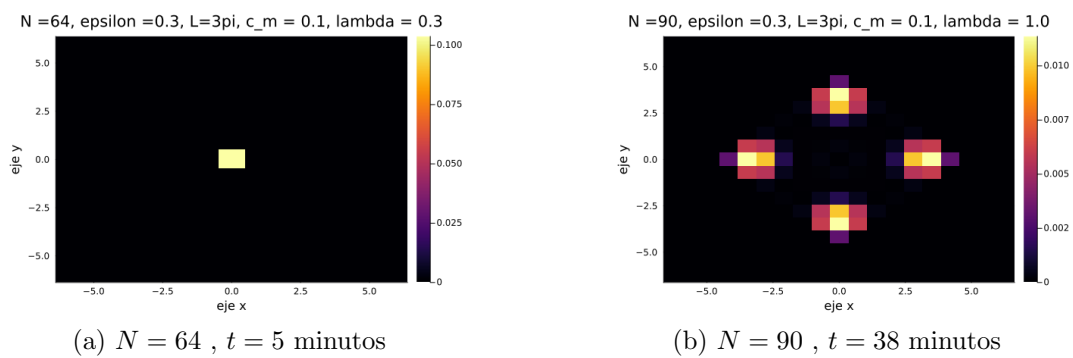


Figura 4.16: $L = 3\pi$, $c_m = 0.1$, $\lambda = 1$

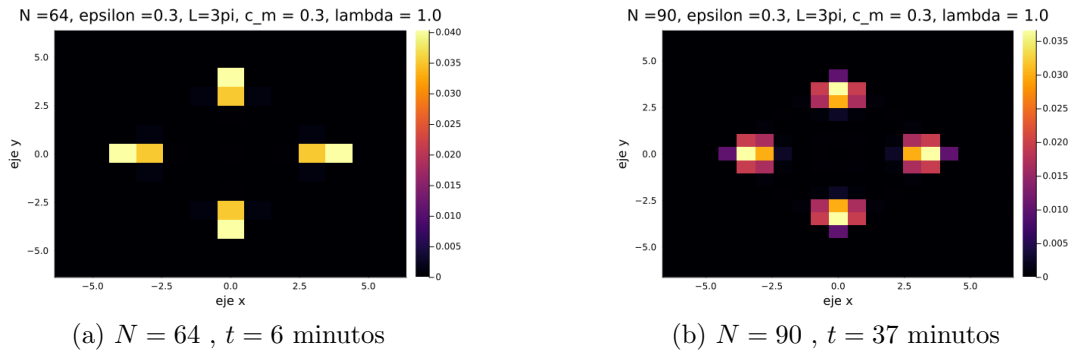


Figura 4.17: $L = 3\pi$, $c_m = 0.3$, $\lambda = 1$

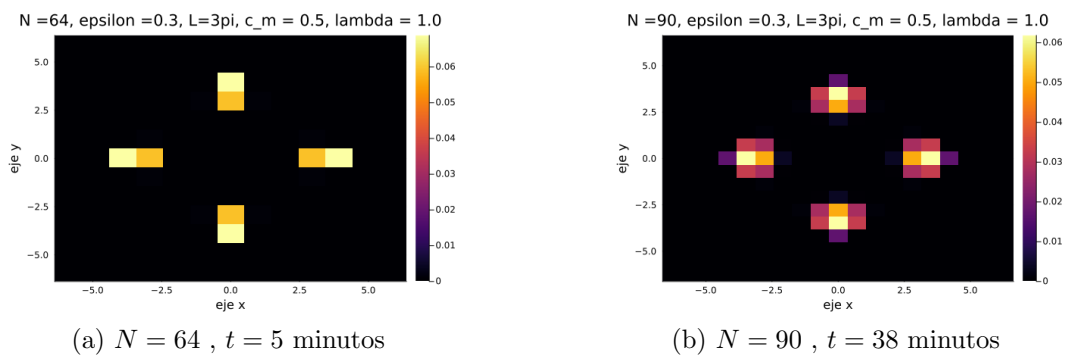


Figura 4.18: $L = 3\pi$, $c_m = 0.5$, $\lambda = 1$

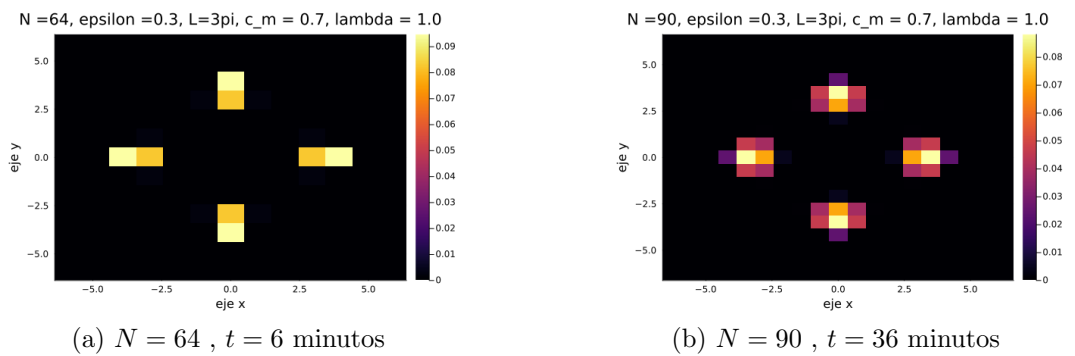


Figura 4.19: $L = 3\pi$, $c_m = 0.7$, $\lambda = 1$

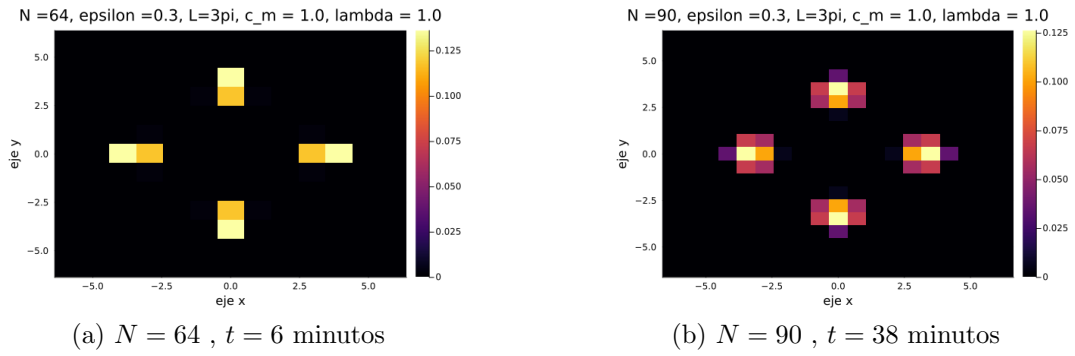


Figura 4.20: $L = 3\pi$, $c_m = 1.0$, $\lambda = 1$

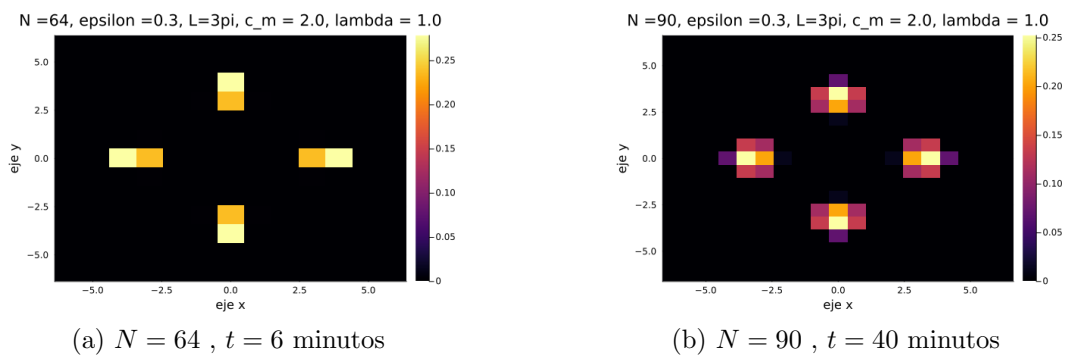


Figura 4.21: $L = 3\pi$, $c_m = 2.0$, $\lambda = 1$

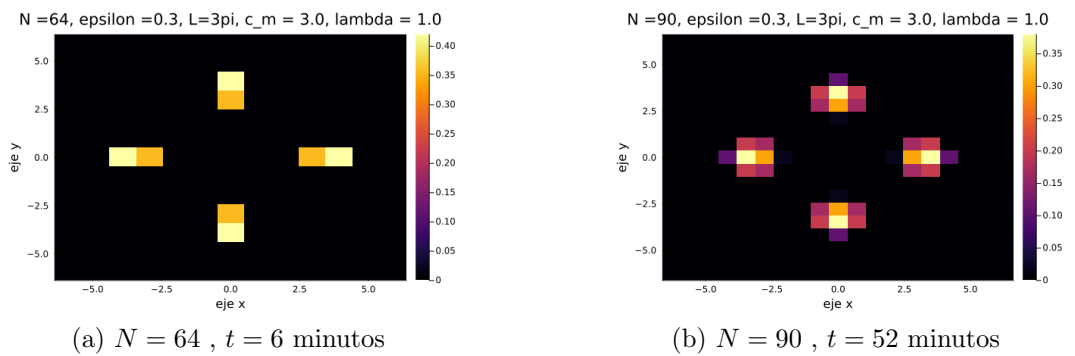


Figura 4.22: $L = 3\pi$, $c_m = 3.0$, $\lambda = 1$

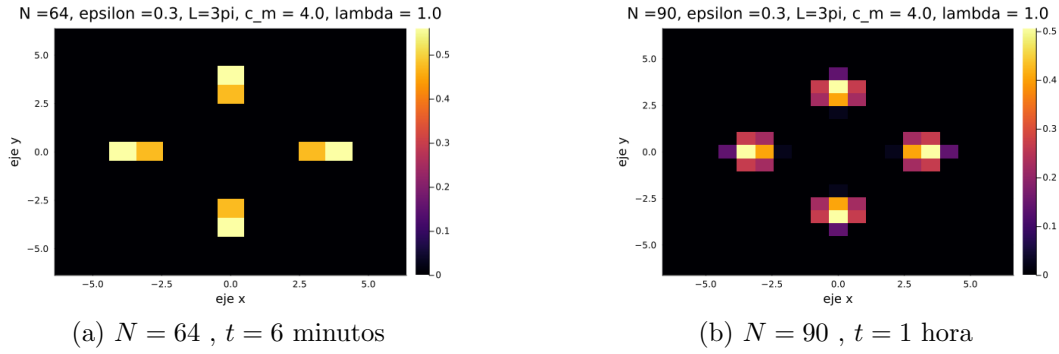


Figura 4.23: $L = 3\pi$, $c_m = 4.0$, $\lambda = 1$

Para $L = \pi$ en el cuadrado Ω sólo hay dentro 5 puntos para $N = 64$ y 13 puntos para $N = 90$. En el caso $L = 3\pi$ hay más puntos dentro de Ω pero no los suficientes. Dado que $N = 90$ es el valor máximo de puntos de discretización que pudimos conseguir, se tomaron valores más grandes de L de manera que existan más puntos dentro de Ω . Las siguientes simulaciones son para $N = 90$ y Ω con diagonal L mayor a 7π .

Simulaciones para $L = 7\pi$ y $\lambda = 0.3$

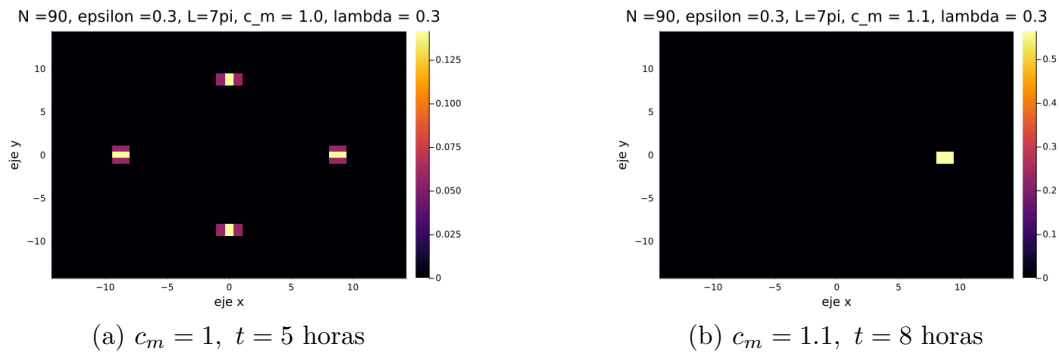


Figura 4.24: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$

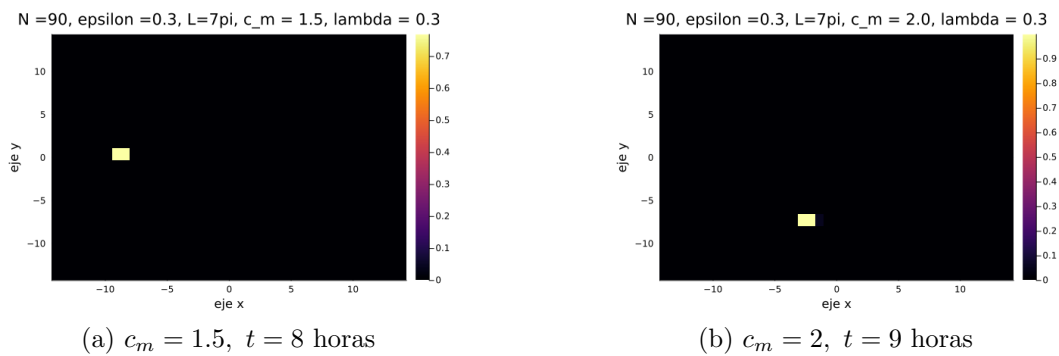
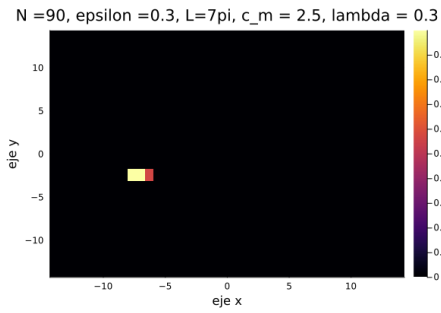
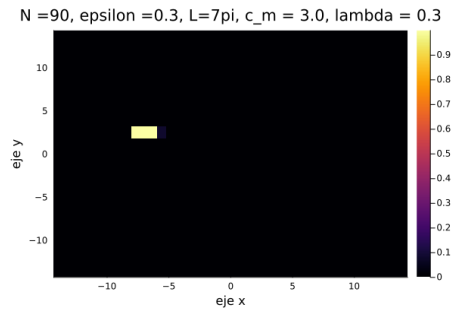
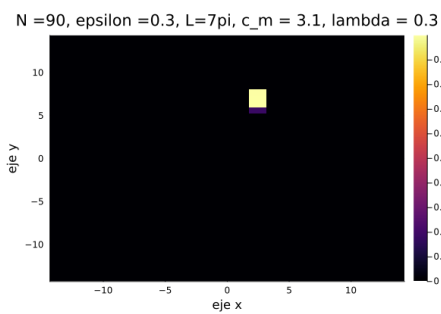
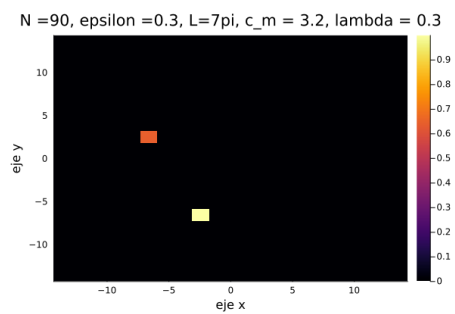
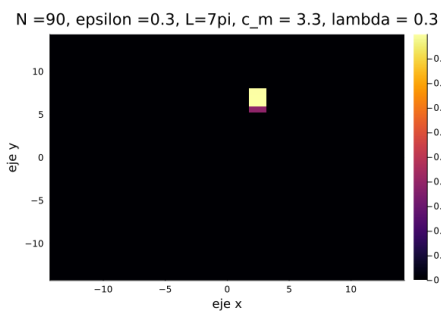
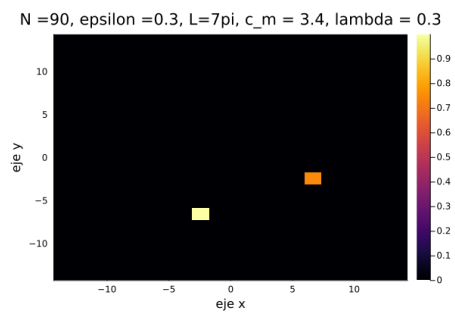
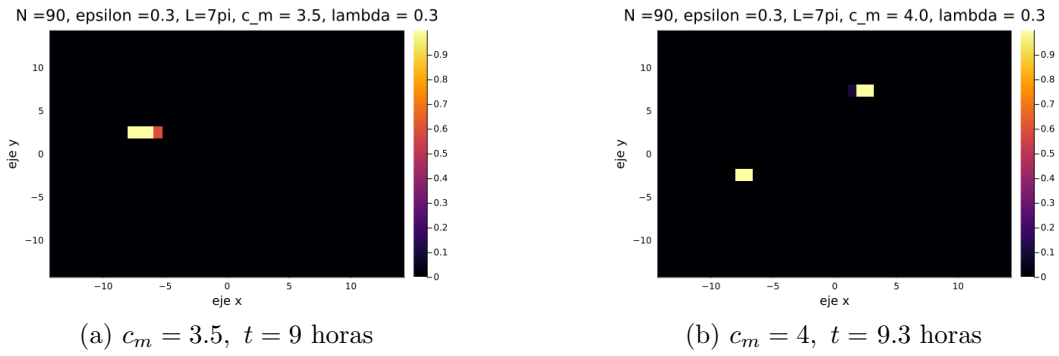
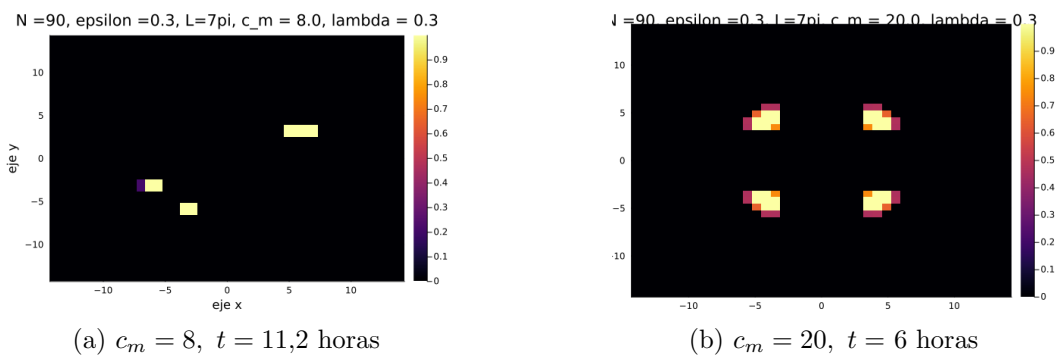
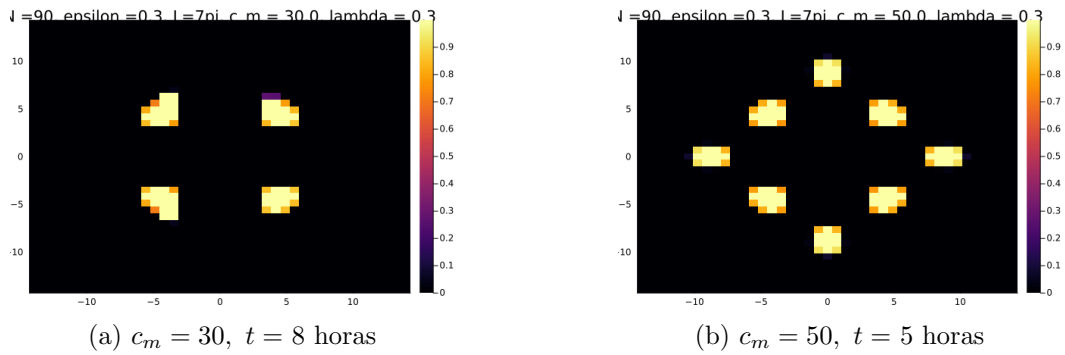


Figura 4.25: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$

(a) $c_m = 2.5$, $t = 9,2$ horas(b) $c_m = 3$, $t = 9.4$ horasFigura 4.26: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$ (a) $c_m = 3.1$, $t = 11$ horas(b) $c_m = 3.2$, $t = 9$ horasFigura 4.27: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$ (a) $c_m = 3.3$, $t = 12$ horas(b) $c_m = 3.4$, $t = 9$ horasFigura 4.28: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$

Figura 4.29: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 0.3$ Figura 4.30: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 0.3$ Figura 4.31: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 0.3$

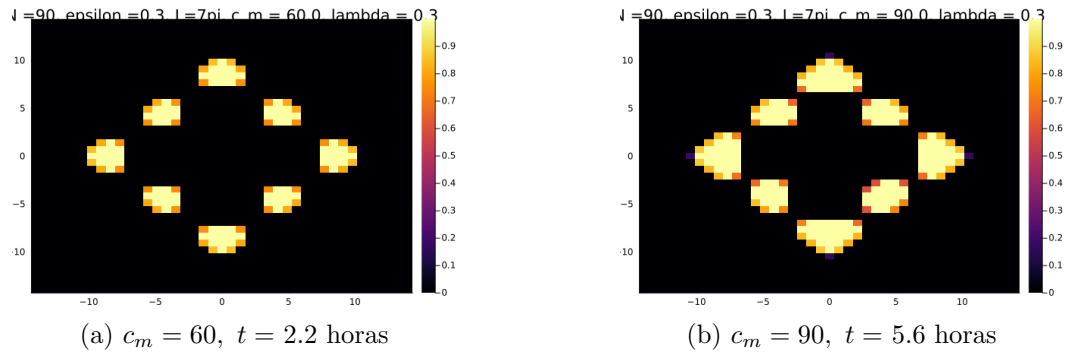


Figura 4.32: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$

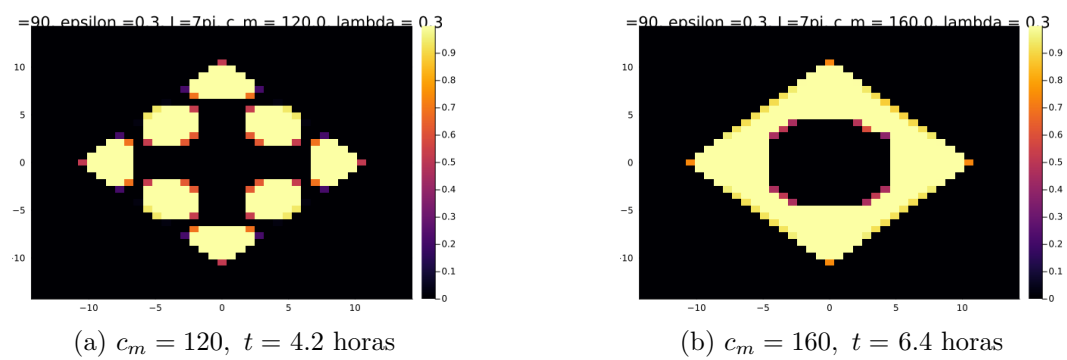


Figura 4.33: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$

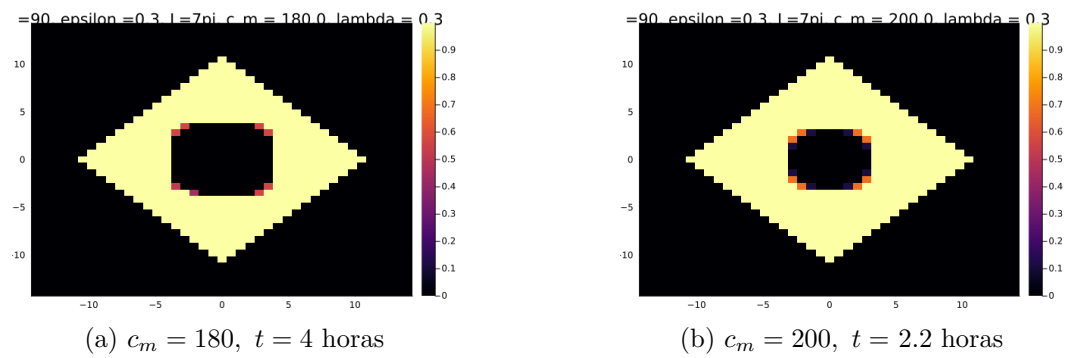


Figura 4.34: $N = 90$, $L = 7\pi$, $\lambda = 0.3$

Simulaciones para $L = 7\pi$ y $\lambda = 1$

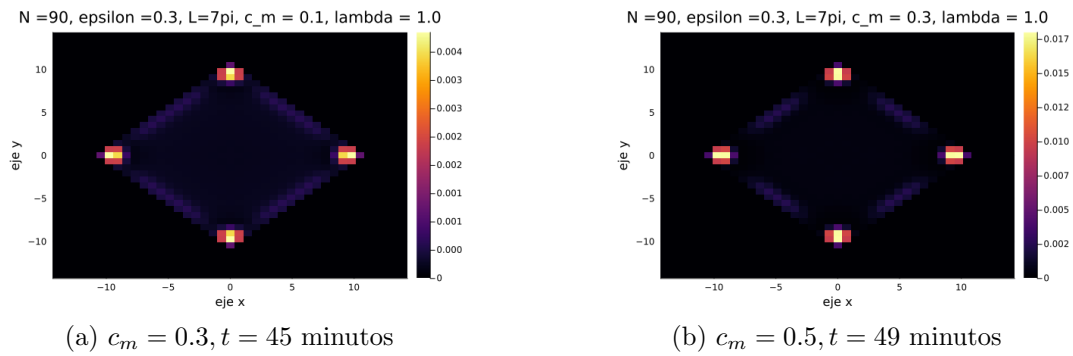


Figura 4.35: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

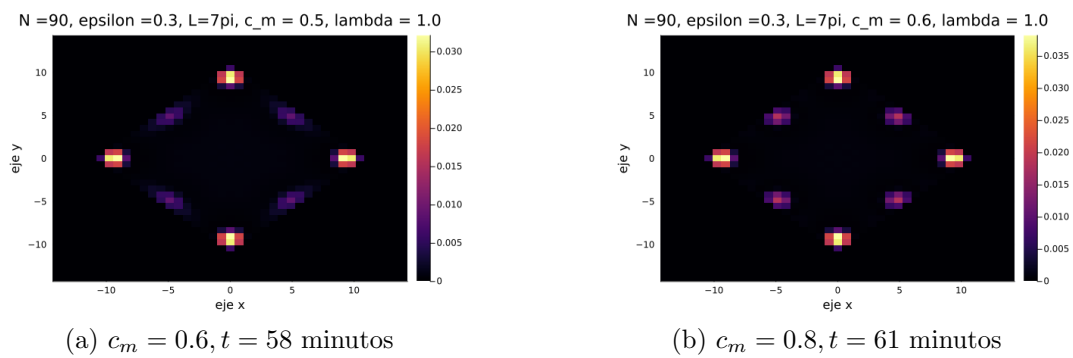


Figura 4.36: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

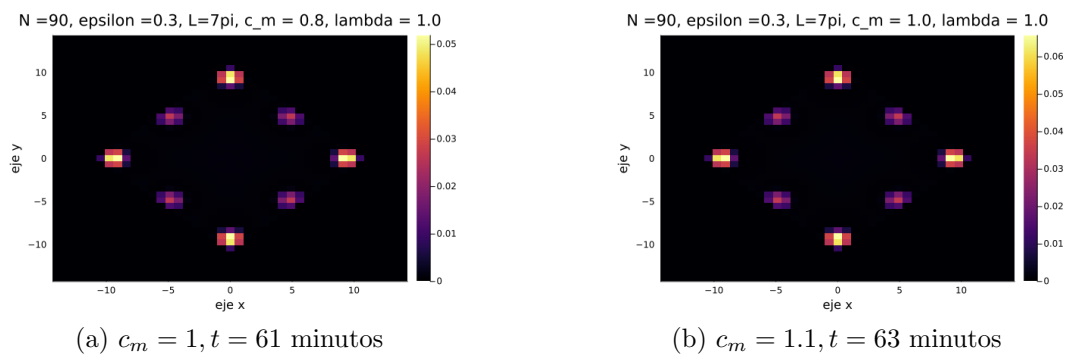
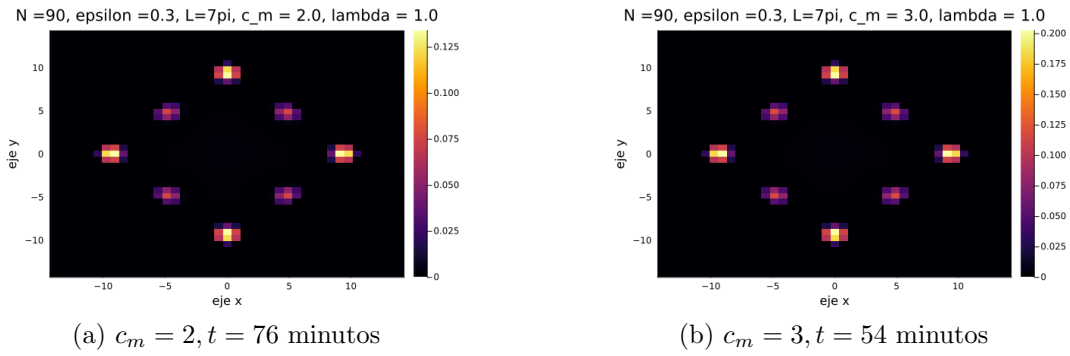
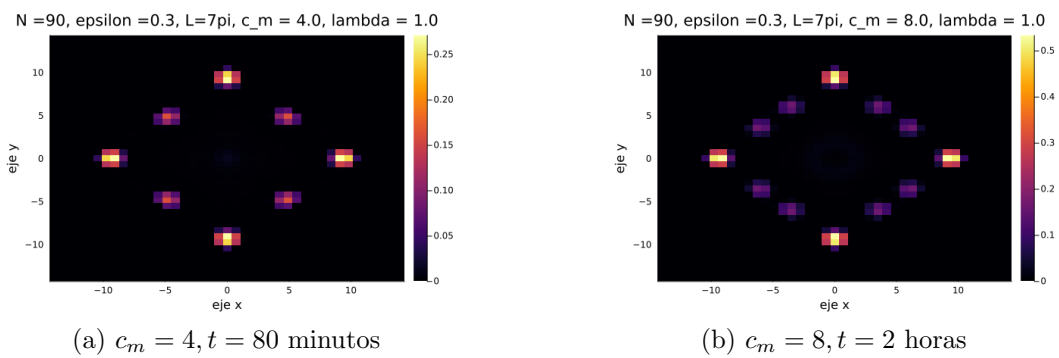
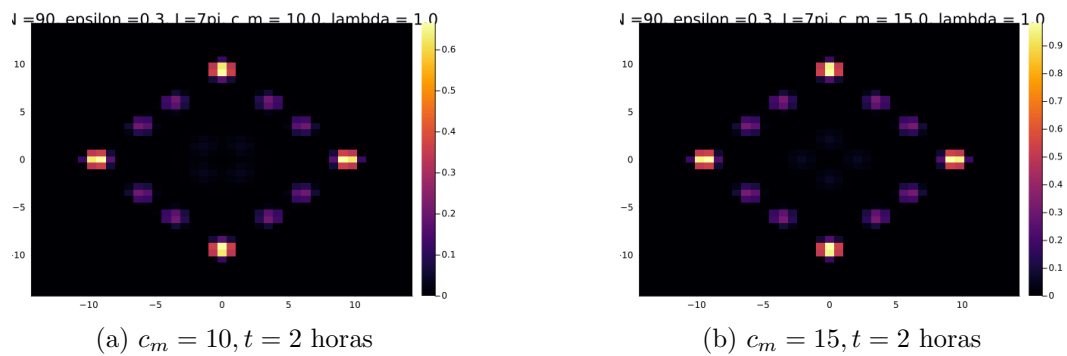


Figura 4.37: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

Figura 4.38: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$ Figura 4.39: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$ Figura 4.40: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

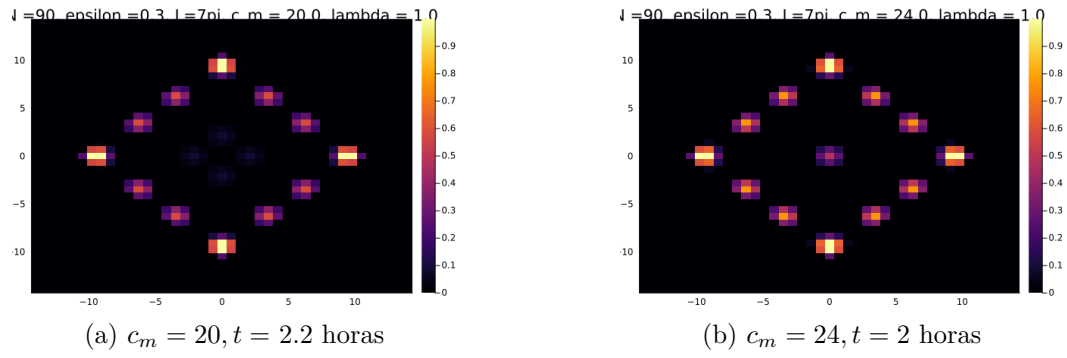


Figura 4.41: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

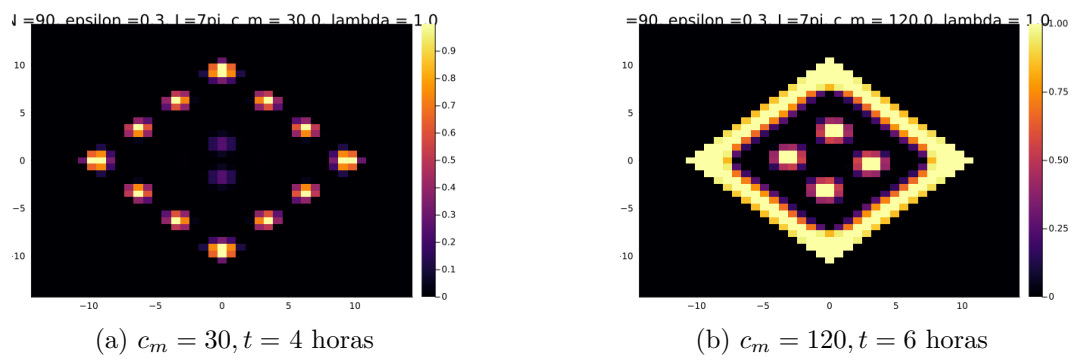


Figura 4.42: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

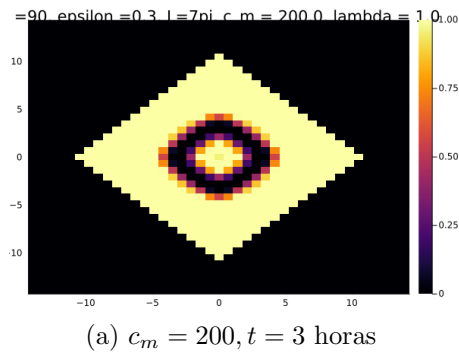


Figura 4.43: $N = 90, L = 7\pi, \lambda = 1$

Simulaciones para $L = 10\pi$ y $\lambda = 0.3$

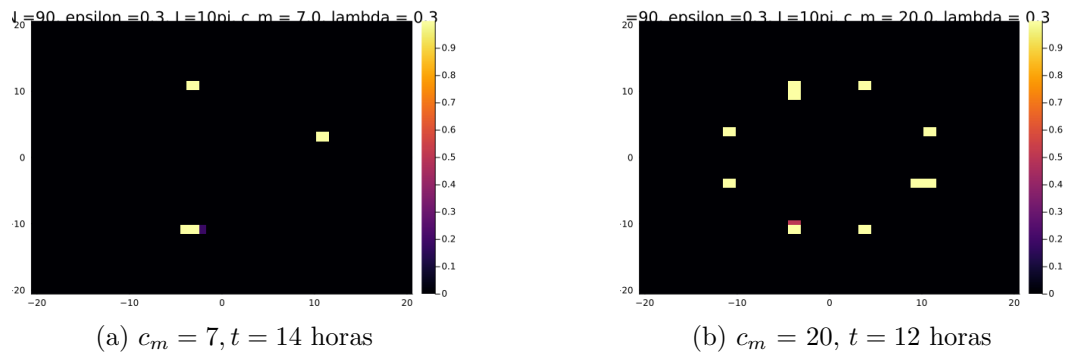


Figura 4.44: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 0.3$

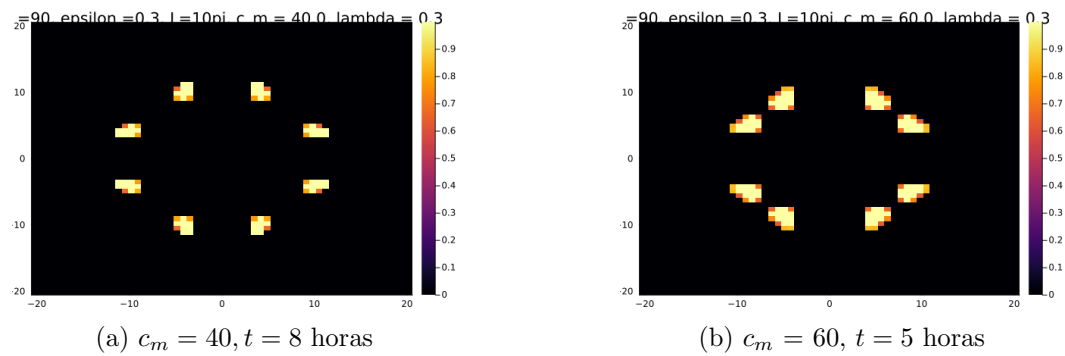


Figura 4.45: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 0.3$

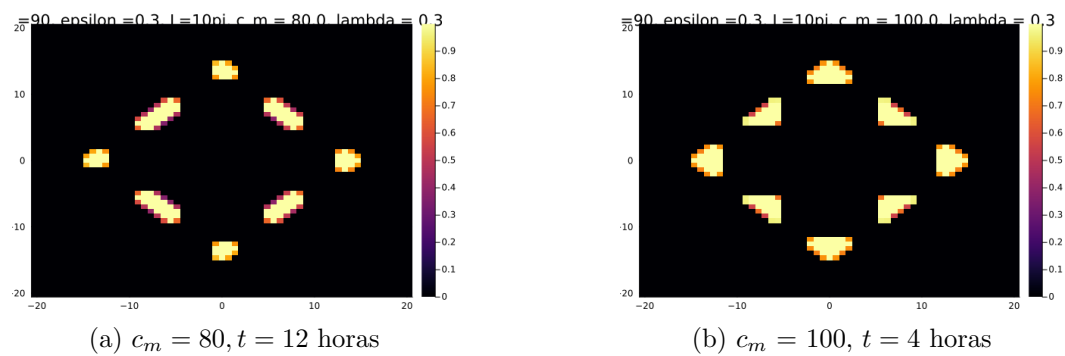


Figura 4.46: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 0.3$

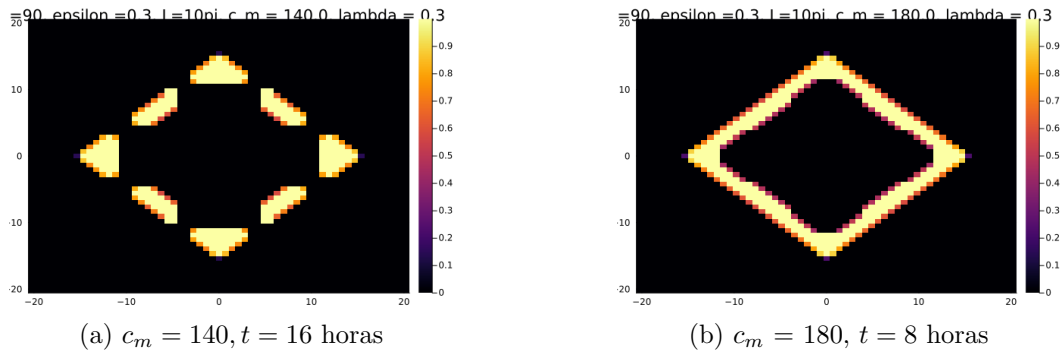


Figura 4.47: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 0.3$

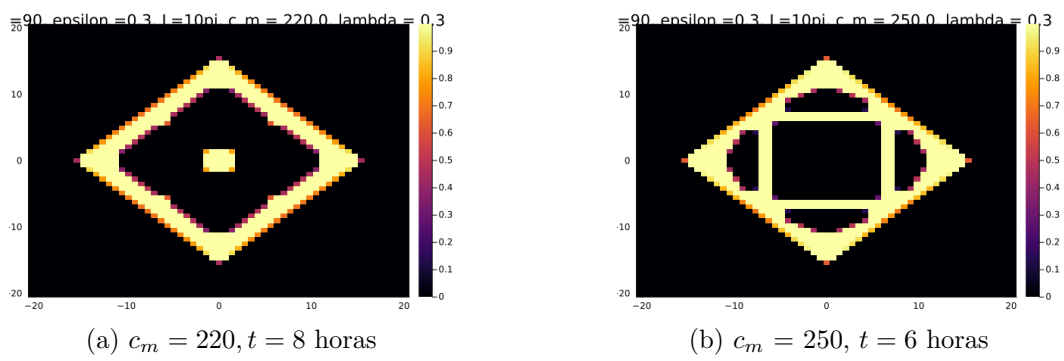


Figura 4.48: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 0.3$

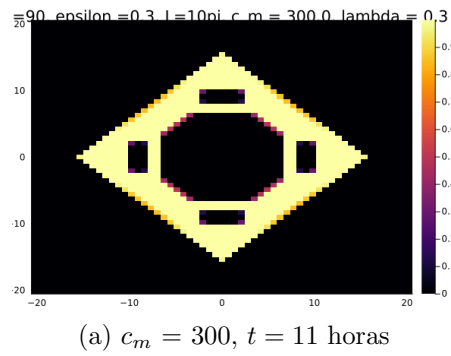


Figura 4.49: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 0.3$

Simulaciones para $L = 10\pi$ y $\lambda = 1$

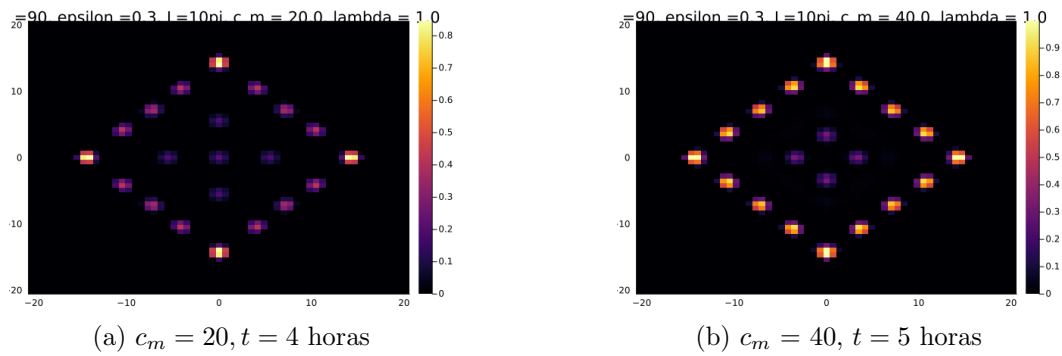


Figura 4.50: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 1$

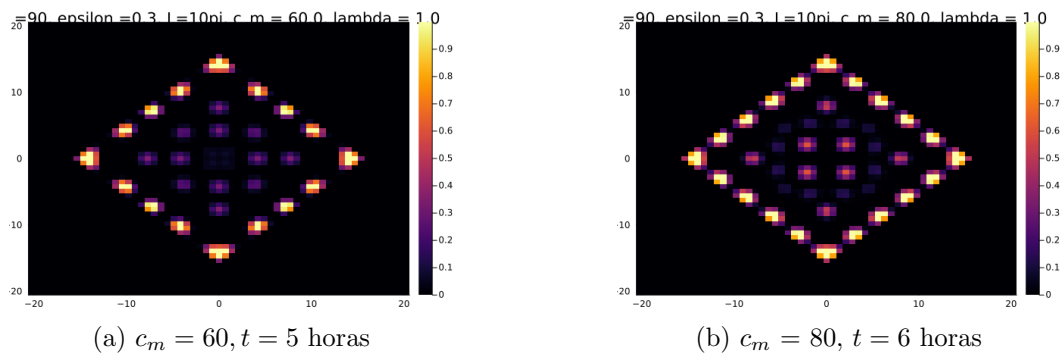


Figura 4.51: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 1$

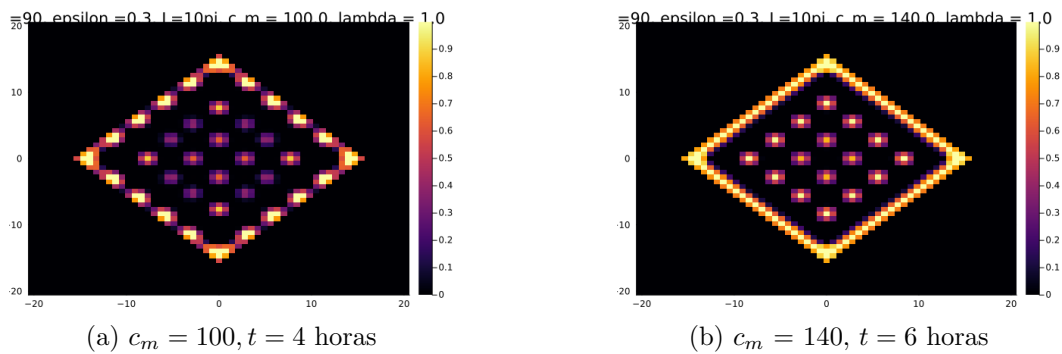
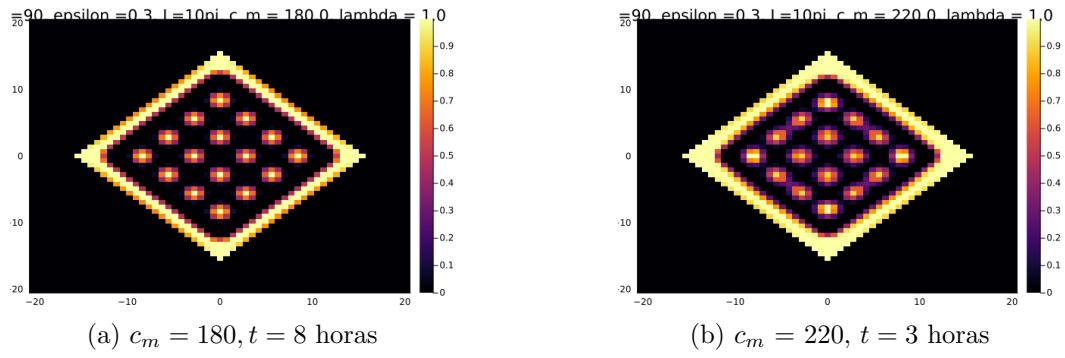
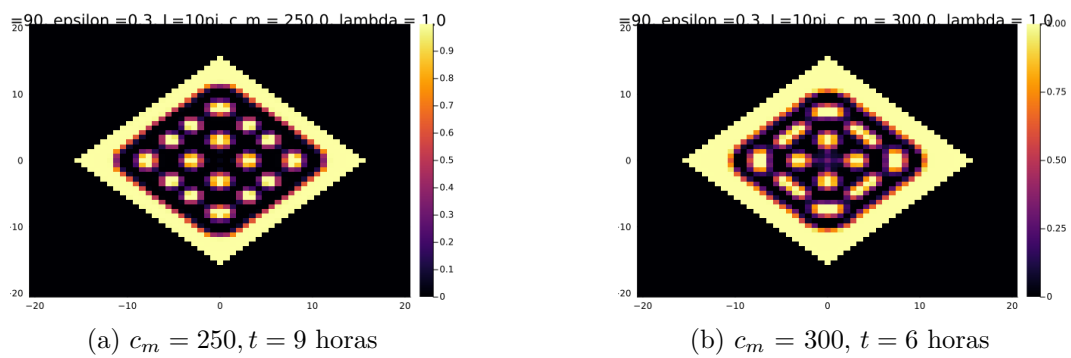
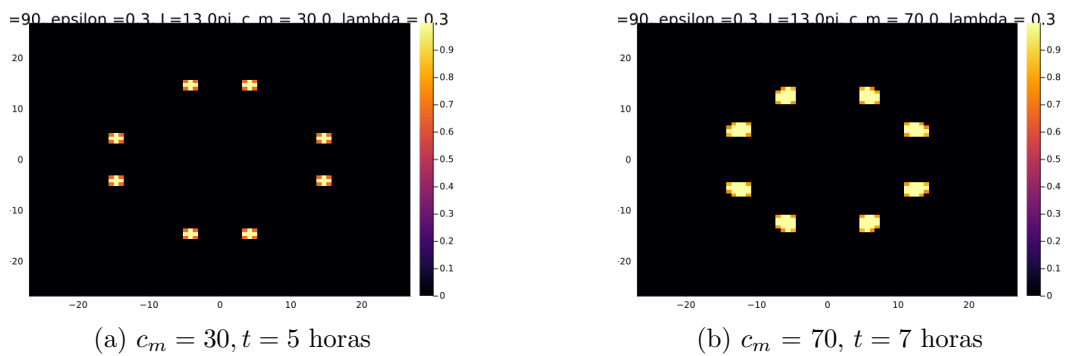


Figura 4.52: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 1$

Figura 4.53: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 1$ Figura 4.54: $N = 90, L = 10\pi, \lambda = 1$

Simulaciones para $L = 13\pi$ y $\lambda = 0.3$

Figura 4.55: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 0.3$

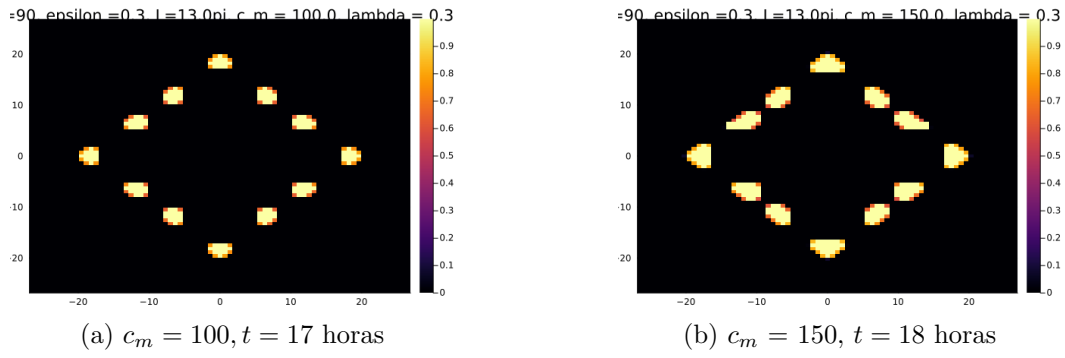


Figura 4.56: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 0.3$

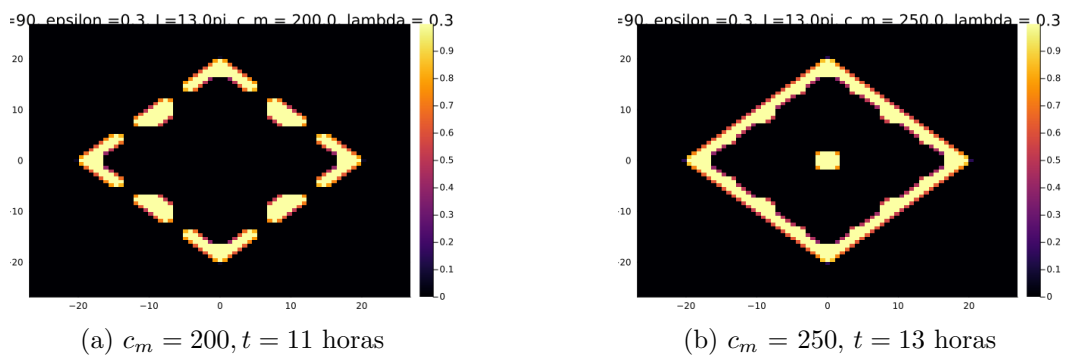


Figura 4.57: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 0.3$

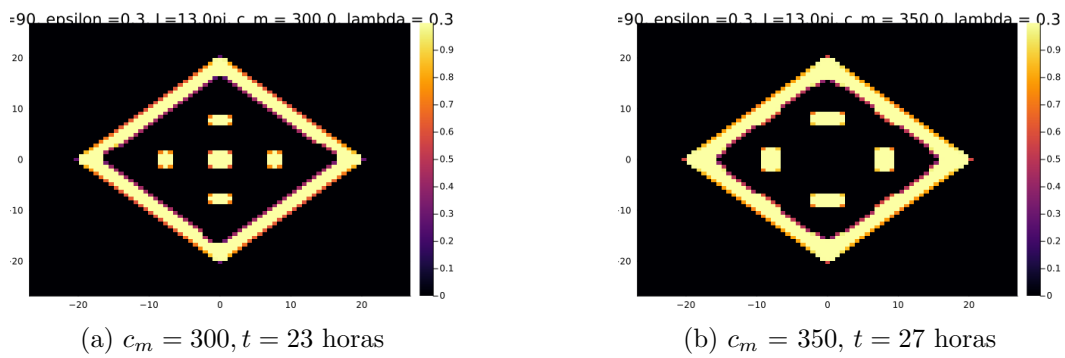


Figura 4.58: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 0.3$

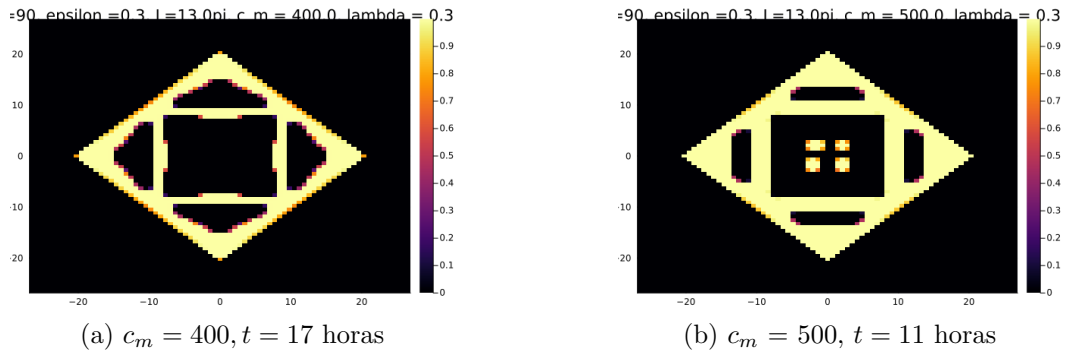


Figura 4.59: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 0.3$

Simulaciones para $L = 13\pi$ y $\lambda = 1$

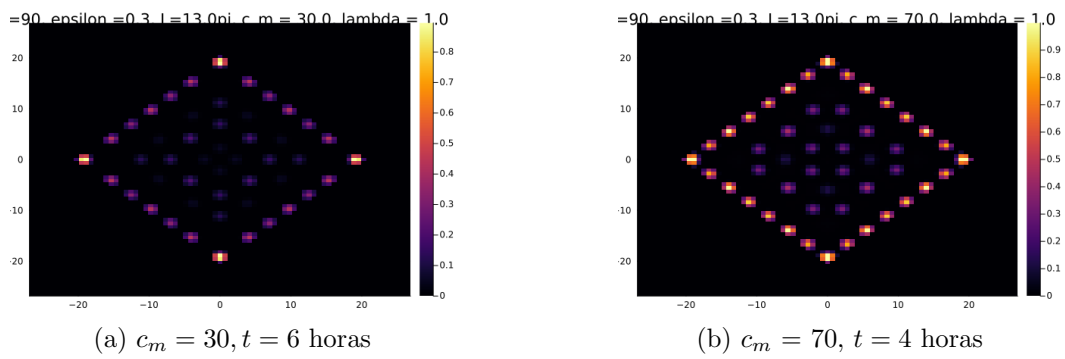


Figura 4.60: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 1$

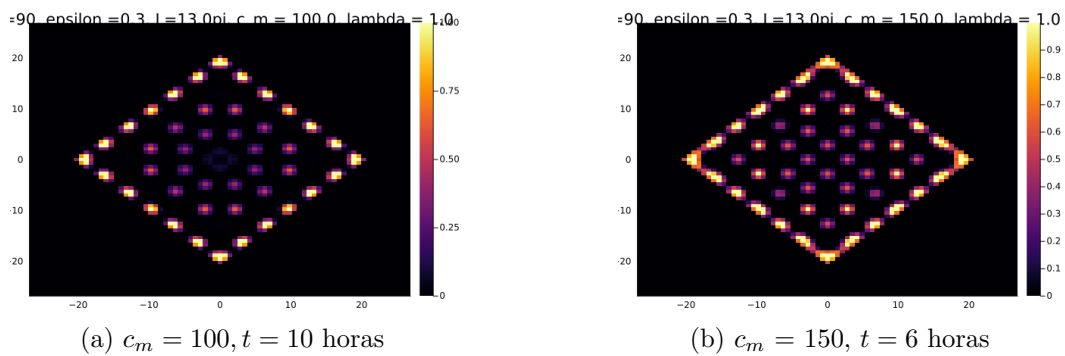
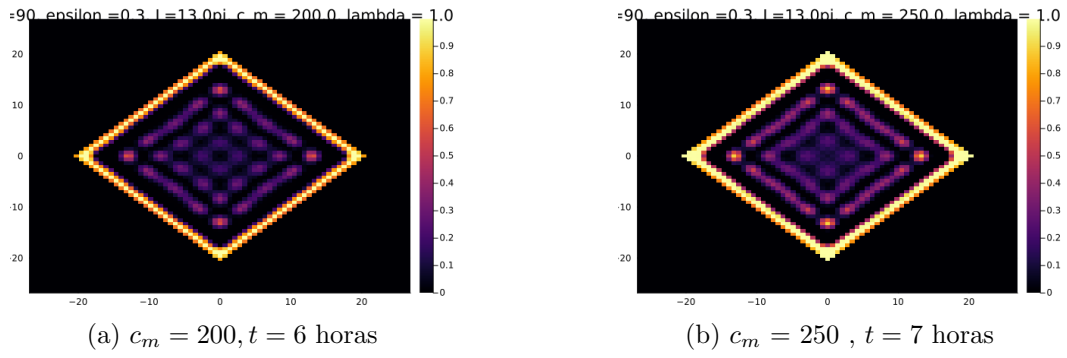
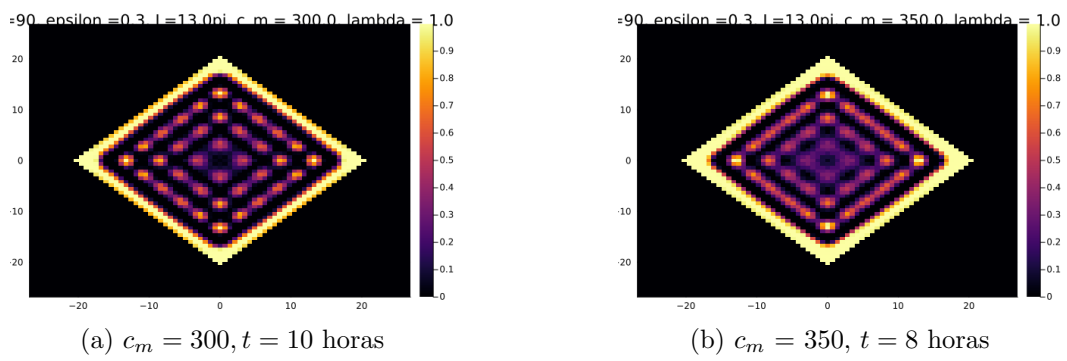
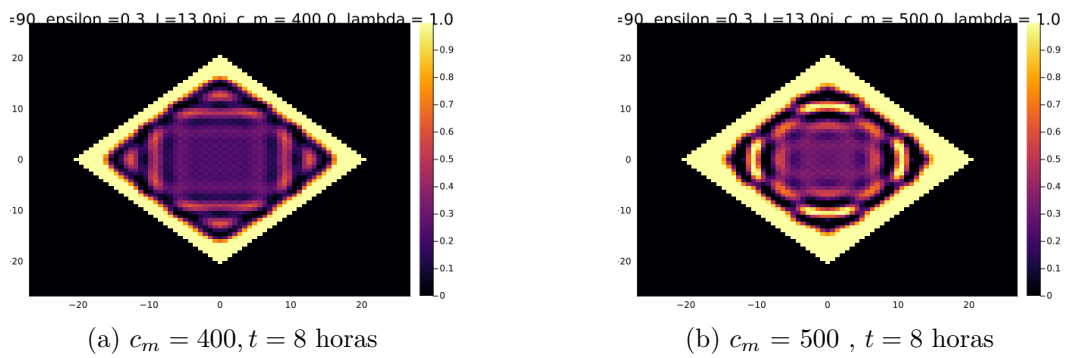


Figura 4.61: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 1$

Figura 4.62: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 1$ Figura 4.63: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 1$ Figura 4.64: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 1$

Simulaciones para $L = 19\pi$ y $\lambda = 0.3$

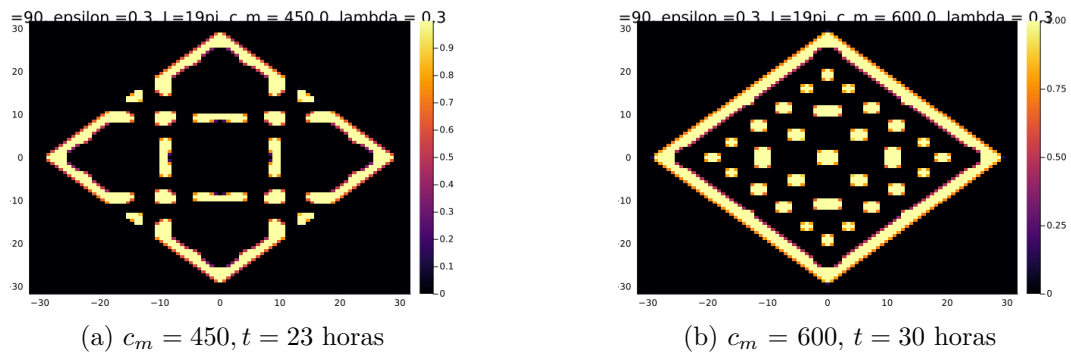


Figura 4.65: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 0.3$

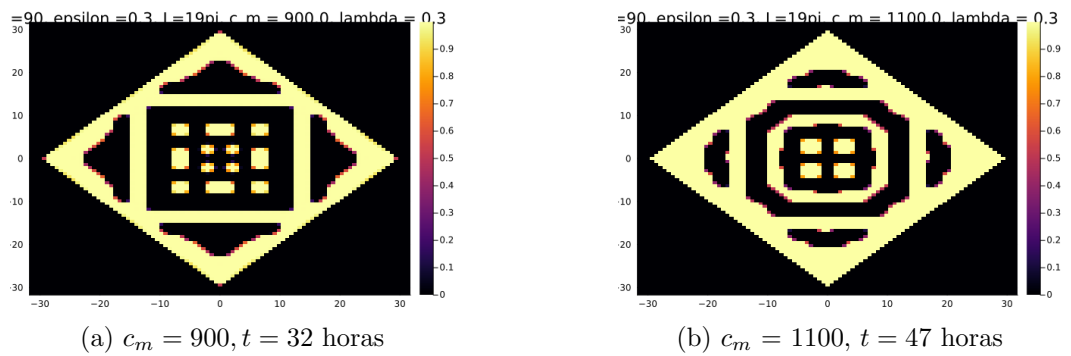


Figura 4.66: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 0.3$

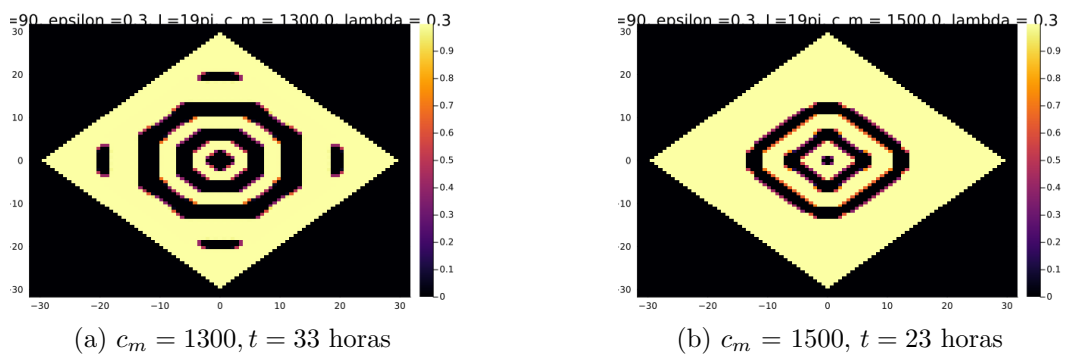


Figura 4.67: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 0.3$

Simulaciones para $L = 19\pi$ y $\lambda = 1$

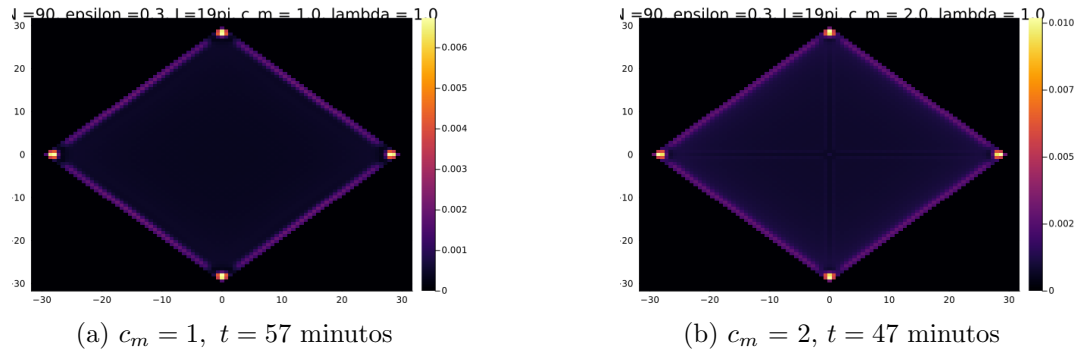


Figura 4.68: $N = 90$, $L = 19\pi$, $\lambda = 1$

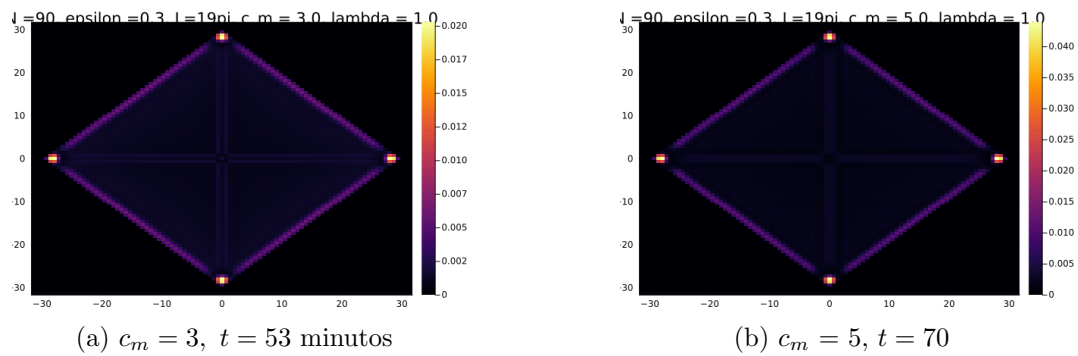


Figura 4.69: $N = 90$, $L = 19\pi$, $\lambda = 1$

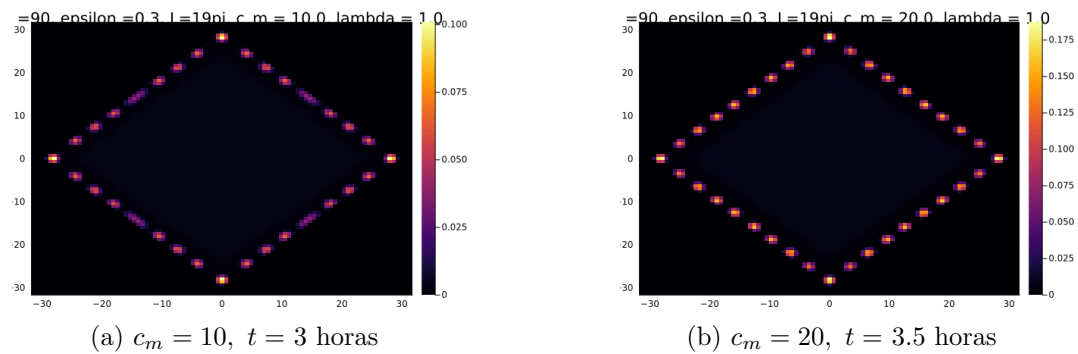


Figura 4.70: $N = 90$, $L = 19\pi$, $\lambda = 1$

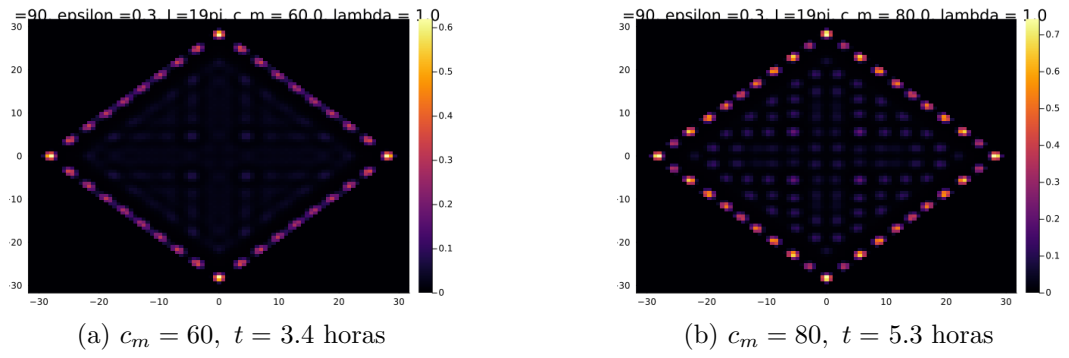


Figura 4.71: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 1$

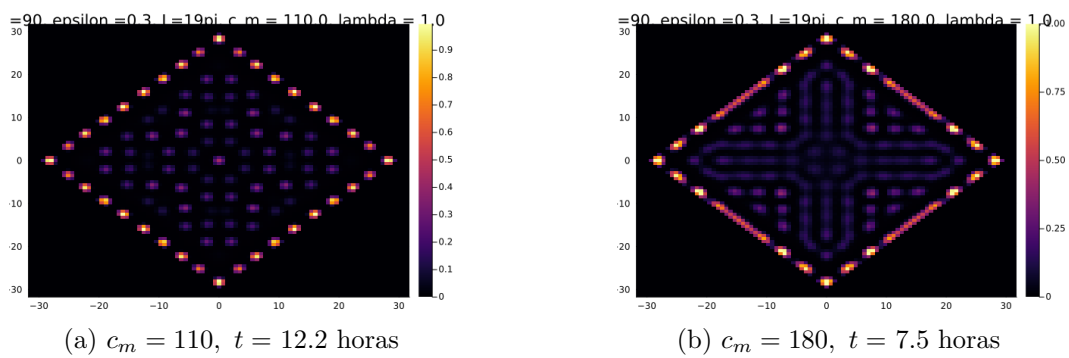


Figura 4.72: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 1$

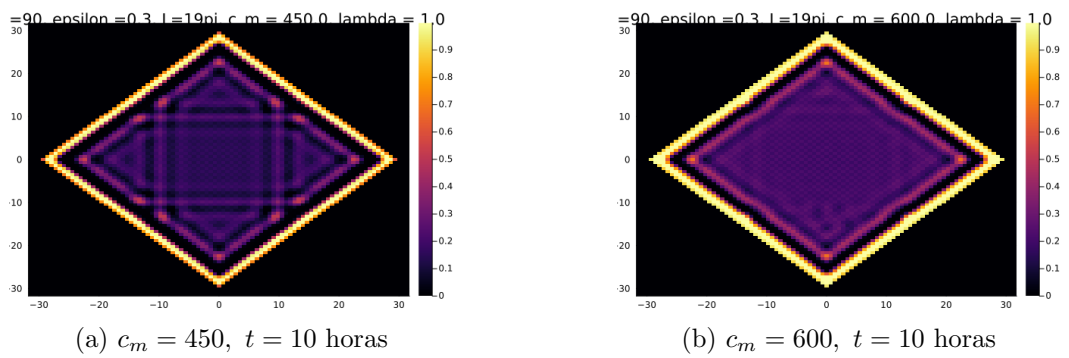
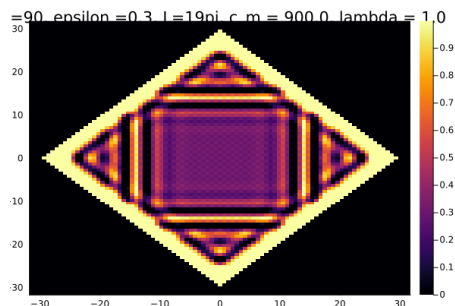
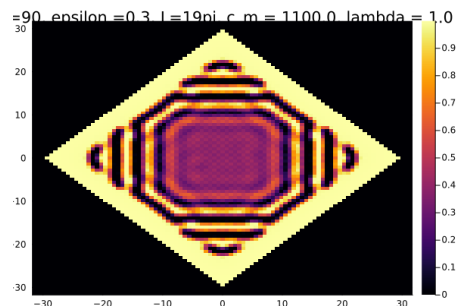
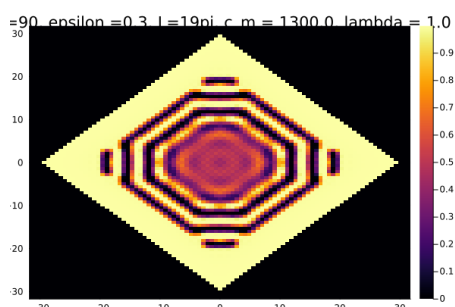
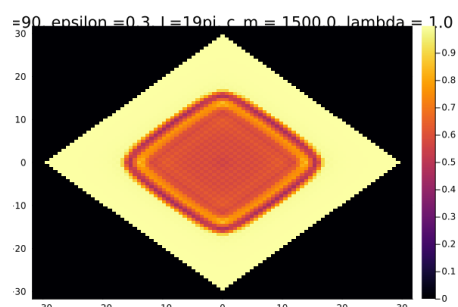


Figura 4.73: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 1$

(a) $c_m = 900$, $t = 17$ horas(b) $c_m = 1100$, $t = 24$ horasFigura 4.74: $N = 90$, $L = 19\pi$, $\lambda = 1$ (a) $c_m = 1300$, $t = 24.4$ horas(b) $c_m = 1500$, $t = 11$ horasFigura 4.75: $N = 90$, $L = 19\pi$, $\lambda = 1$

Nuevo potencial de doble pozo

Dadas las limitantes computaciones por la gran cantidad de restricciones expuestas anteriormente, quisimos explorar la minimización numérica con un potencial de doble pozo distinto $W(u) = u^2(u - 1)^2$ con el fin de eliminar la restricción $0 \leq u(x, y) \leq 1$.

Para implementar $\frac{1}{\varepsilon} \mathcal{W}_N(u)$ con este nuevo potencial de doble pozo $W(u)$, necesitamos calcular $\frac{1}{\varepsilon} \int W(u)$, lo que da por resultado lo siguiente:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\varepsilon} \int W(u) &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{m^4}{T^6} - \frac{2m^3}{T^4} + \frac{m^2}{T^2} \right) \\
&+ \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{3m^2}{T^2} - 3m + \frac{T^2}{2} \right) \sum_{\mathbf{k}} ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \\
&+ \frac{1}{\varepsilon} \left(3m - \frac{3T^2}{2} \right) \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} \right. \\
&\left. + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right) \\
&+ \frac{1}{\varepsilon} \frac{T^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \sum_{\mathbf{k}_4} \left(\delta_{(\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} \right. \\
&+ a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} \\
&- a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} - b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4}) + \frac{3}{4} \delta_{(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \\
&+ a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} \\
&\left. + b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2}) \right).
\end{aligned}$$

con $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \in I_{\mathbf{k}}$.

Si bien con este nuevo $W(u)$ eliminamos la restricción de desigualdad, esto no involucra una optimización del código, ya que estamos ahora considerando un polinomio de grado 4 y requiere de mucha memoria del computador. Es así como para apenas $N = 8$, luego de 2 horas el computador se queda sin memoria, por lo que esta dirección de investigación no prosperó. Los detalles del cálculo de $\frac{1}{\varepsilon} \int W(u)$ se encuentra en el Apéndice.

Capítulo 5

Minimización Numérica con NGSolve

En este capítulo implementamos la minimización numérica del término de perímetro a través del software NGSolve mediante el método de elementos finitos.

5.1. NGSolve

Sea $I(u)$ el funcional de Modica - Mortola usual

$$I(u) = \int_{\Omega} \varepsilon |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u), \quad (5.1)$$

con el potencial de doble pozo $W(u) = u^2(u - 1)^2$.

Para resolver el problema de minimizar (5.1), NGSolve lo modela de la siguiente forma:

$$\text{Buscamos } u \in H_0^1 \text{ tal que } I(u) \leq I(v) \quad \forall v \in H_0^1.$$

Utilizando el integrador **Variation**, NGSolve formula el problema mediante la descripción simbólica del funcional $I(u)$:

1. Evalúa el funcional

$$I(u) \quad \text{con} \quad I : H_0^1 \rightarrow \mathbb{R}$$

2. Calcula la derivada de Gateau para un u dado (**Apply**):

$$A(u)(v) = I'(u)(v) \quad \text{con} \quad A(u) : H_0^1 \rightarrow \mathbb{R}$$

3. Calcula la segunda derivada (**AssembleLinearization**):

$$(\delta A)(w)(u, v) \quad \text{con} \quad \delta A(w) : H_0^1 \times H_0^1 \rightarrow \mathbb{R}$$

Luego utiliza el **Método de Newton** y se realiza el siguiente bucle:

- Dado una condición inicial u^0

- Bucle sobre $i = 0, \dots$ hasta que se obtenga la convergencia
 - Calcular la linealización: $A(u^i) + \delta A(u^i)\Delta u^i = 0$:
 - $f^i = A(u^i)$
 - $B^i = \delta A(u^i)$
 - Resolver $B^i\Delta u^i = -f^i$
 - Actualizar $u^{i+1} = u^i + \Delta u^i$
 - Evaluar los criterios de detención
- Evaluar $I(u^{i+1})$

Como criterio de detención se toma

$$\langle Au^i, \Delta u^i \rangle = \langle Au^i, Au^i \rangle_{(B^i)^{-1}} < \varepsilon.$$

5.2. Resolución Espacial

Antes de realizar la implementación, necesitamos un valor de ε para obtener una resolución espacial apropiada y de esta manera tener una minimización numérica correcta. Para aquello, vamos a estudiar la demostración de la Γ -convergencia del funcional de Modica-Mortola al funcional de perímetro.

$$\frac{1}{2c_w} \int_{\Omega} \left(\varepsilon |\nabla u(x)|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u(x)) \, dx \right) \xrightarrow[\varepsilon \rightarrow 0]{\Gamma\text{-converge}} \begin{cases} \mathcal{P}er(E) & \text{si } |E| = m, \\ \infty & \text{si } |E| \neq m \end{cases}$$

con $W(u) = u^2(u-1)^2$ y $c_w = \int_0^1 \sqrt{W(s)} ds$, sujeto a la restricción $\int_{\Omega} u = m$.

Demostración:

I) Cota inferior (Γ -lim inf inequality):

Vamos a escribir

$$\varepsilon |\nabla u(x)|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u(x))$$

como

$$\frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2},$$

donde $a = \sqrt{2\varepsilon} |\nabla u|$, $b = \sqrt{\frac{2W}{\varepsilon}}$. Ocupando la desigualdad de Cauchy

$$\frac{a^2 + b^2}{2} \geq ab$$

Obtenemos que

$$\frac{1}{2c_w} \int_{\Omega} \left(\varepsilon |\nabla u(x)|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u(x)) \, dx \right) \geq \frac{1}{2c_w} \int_{\{x \in \Omega: 0 < u(x) < 1\}} 2 |\nabla u(x)| \sqrt{W(u(x))} \, dx.$$

Ahora vamos a descomponer el dominio Ω en conjuntos de nivel de la función $u(x)$, y consideramos un elemento de área que une un conjunto de nivel con el siguiente. Como en el conjunto de nivel $u(x)$ es constante, el vector normal es paralelo a ∇u . El volumen del elemento de área es su área multiplicado por una altura ds (un cambio en distancia en la dirección normal). Por otro lado $|\nabla u(x)| = \frac{du}{ds}$ en la dirección de $\nabla u(x)$, que es la misma dirección normal a la superficie de nivel $u(x) = \text{constante}$.

Luego

$$\frac{1}{2c_w} \int_{\{x \in \Omega: 0 < u(x) < 1\}} 2|\nabla u(x)|\sqrt{W(u(x))} dx = \frac{1}{2c_w} \int_{\{x \in \Omega: 0 < u(x) < 1\}} 2\sqrt{W(u(x))} \frac{du}{ds} dA ds$$

Entonces por la Fórmula de la Coárea

$$\frac{1}{2c_w} \int_{\{x \in \Omega: 0 < u(x) < 1\}} 2|\nabla u(x)|\sqrt{W(u(x))} dx = \frac{1}{c_w} \int_0^1 \left(\int_{\{x \in \Omega: u(x)=t\}} \sqrt{W(t)} dA \right) dt$$

y esto es equivalente a

$$= \frac{1}{c_w} \int_0^1 \sqrt{W(t)} \cdot \text{Área}(\{x \in \Omega : u(x) = t\}) dt.$$

Cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, esperamos que todos los conjuntos de nivel $\{x \in \Omega : u(x) = t\}$ con $0 < t < 1$ se parezcan mucho a la frontera reducida del conjunto límite E ($\partial^*(E)$), donde E es el minimizador buscado para el problema del menor perímetro. Entonces esperamos tener que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2c_w} \int_{\Omega} \varepsilon |\nabla u(x)|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u(x)) dx &\geq \frac{1}{c_w} \left(\int_0^1 \sqrt{W(t)} dt \right) \mathcal{P}er(E) \\ &= \frac{1}{c_w} \cdot c_w \cdot \mathcal{P}er(E) \\ &= \mathcal{P}er(E). \end{aligned}$$

II) Cota superior (recovery sequence):

Buscamos un “perfil de transición u_ε ” tal que

$$\frac{1}{2c_w} \int_{\Omega} \varepsilon |\nabla u(x)|^2 + \frac{W(u(x))}{\varepsilon} dx \approx \mathcal{P}er(E)$$

Lo ideal sería alcanzar la igualdad en la desigualdad de Cauchy $\frac{a^2 + b^2}{2} \geq ab$ con $a = \sqrt{2\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|$, $b = \sqrt{\frac{2W}{\varepsilon}}$. Esto ocurre cuando $a = b$, esto es, cuando

$$\sqrt{2\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon| = \sqrt{\frac{2W}{\varepsilon}}$$

es decir,

$$\varepsilon |\nabla u_\varepsilon(x)| = \sqrt{W(u_\varepsilon(x))}. \quad (5.2)$$

Para E regular y $\Gamma = \partial^* E$ su frontera, pensamos en un $u_\varepsilon(x)$ de la forma

$$u_\varepsilon(x) = u_0 \left(\frac{\text{dist}(x, \Gamma)}{\varepsilon} \right).$$

Si $\frac{\text{dist}(x, \Gamma)}{\varepsilon} = z \in \mathbb{R}$, la ecuación (5.2) se convierte en

$$\varepsilon \left| (u_0)'(z) \nabla \left(\frac{\text{dist}(x, \Gamma)}{\varepsilon} \right) \right| = \sqrt{W(u_0(z))}$$

como $\left| \nabla \left(\frac{\text{dist}(x, \Gamma)}{\varepsilon} \right) \right| = 1$, obtenemos que

$$|(u_0)'(z)| = \sqrt{W(u_0(z))}$$

Esto último es una EDO que no depende de ε , y es un perfil para la curva de transición de 0 a 1.

Para resolver la EDO, consideramos

$$\begin{aligned} u_0(z) &= t, \\ \sqrt{W(t)} &= \frac{dt}{dz}, \\ dz &= \frac{dt}{\sqrt{W(t)}}, \\ \int dz &= \int \frac{dt}{\sqrt{W(t)}}. \end{aligned}$$

entonces, en este caso

$$\begin{aligned} z &= \int \frac{dt}{t(1-t)} + C \\ &= \int \frac{dt}{t} + \frac{dt}{1-t} + C \\ &= \log t - \log(1-t) + C \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} C - z &= \log \frac{1-t}{t} \\ C - z &= \log \left(\frac{1}{t} - 1 \right) \end{aligned}$$

luego

$$\begin{aligned}\frac{1}{t} - 1 &= Ae^{-z} \\ \frac{1}{t} &= 1 + Ae^{-z} \\ t &= \frac{1}{1 + Ae^{-z}},\end{aligned}$$

y se obtiene que $u_0(z) = \frac{1}{1 + Ae^{-z}}$.

Cuando $z = 0$ entonces $\text{dist}(x, \Gamma) = 0$, por lo tanto

$$u_0(z) = u_\varepsilon(x) = \frac{1}{2} \Rightarrow A = 1$$

Esto implica que

$$\begin{aligned}u_0(z) &= \frac{1}{1 + e^{-z}} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{1 + e^{-z}} - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{2 - 1 - e^{-z}}{2(1 + e^{-z})} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1 - e^{-z}}{2(1 + e^{-z})} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{e^{z/2} - e^{-z/2}}{e^{z/2} + e^{-z/2}} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{z}{2}\right).\end{aligned}$$

Por lo tanto el u_ε óptimo es de la forma

$$u_\varepsilon(x) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\text{dist}(x, \Gamma)}{2\varepsilon}\right).$$

Resumiendo tenemos que el minimizador de

$$\frac{1}{2c_w} \int_{\Omega} \left(\varepsilon |\nabla u(x)|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u(x)) \right) dx$$

se alcanza, aproximadamente, cuando se produce la igualdad en la desigualdad de Cauchy $\frac{a^2 + b^2}{2} \geq ab$ con $a = \sqrt{2\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon(x)|$, $b = \sqrt{\frac{2W(u_\varepsilon(x))}{\varepsilon}}$, esto es, cuando

$$\sqrt{2\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon(x)| = \sqrt{\frac{2W(u_\varepsilon(x))}{\varepsilon}}.$$

Esto se produce cuando $u_\varepsilon(x)$ es, aproximadamente, $u_0(z)$, con $u_0(z)$ la solución de la ecuación diferencial

$$u'_o(z) = \sqrt{W(u_0(z))}.$$

Cuando $W(u) = u^2(u - 1)^2$, la solución es

$$u_0(z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{z}{2}\right).$$

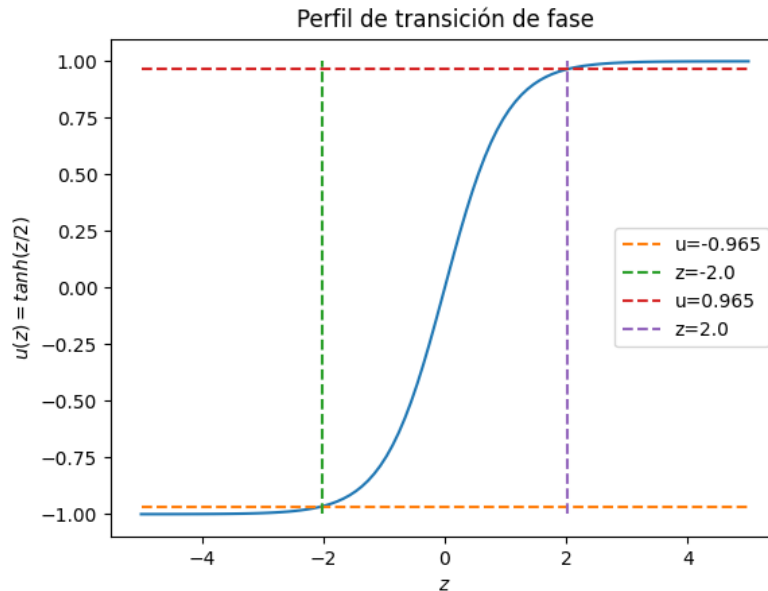


Figura 5.1: $u(z) = \tanh(\frac{z}{2})$

En la Figura (5.1) observamos que el 96,5 % de la transición se produce entre $z = -2$ y $z = 2$ y podemos estimar el ancho de la transición en 4ε . Entonces para resolver numéricamente la transición en $\partial^* E$ vamos a considerar una malla con elementos de ancho $\frac{4\varepsilon}{5}$. Al dividir por 5 estamos pidiendo que hayan 5 elementos en la transición, lo que es razonable.

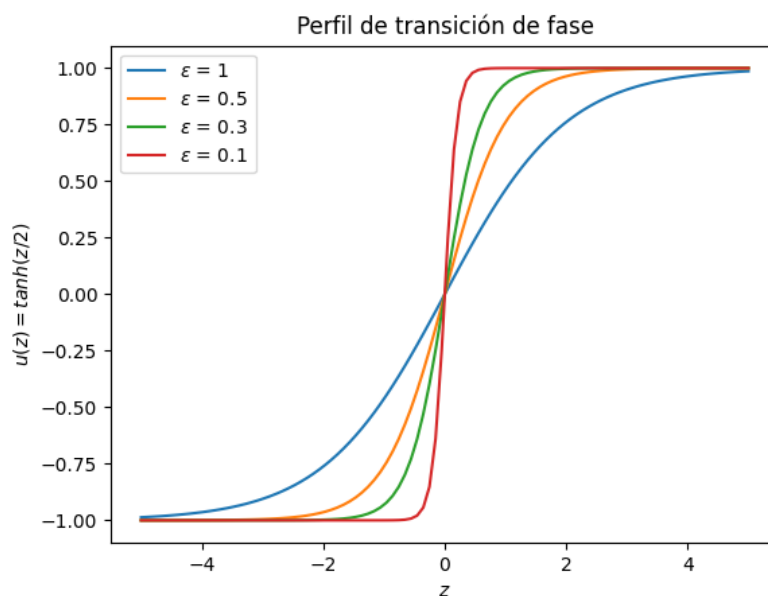


Figura 5.2: Transición para distintos valores de ε

En la Figura (5.2) vemos que cuando ε es más cercano a 0, la transición es mucho más rápida.

5.3. Minimización del Perímetro

Vamos a minimizar $I(u)$ bajo diferentes dominios y condiciones iniciales.

Caso 1

Minimización de Modica - Mortola (5.1) de un círculo centrado en el origen de radio $r_0 = 0.23L$. Consideramos la minimización en un dominio circular de radio $L = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$, una resolución espacial de $4\varepsilon/5$ con $\varepsilon = 0.03$, y una función lineal de r , $u_0(r) = \frac{L-r}{L-r_0}$ que interpola linealmente $(r_0, 1)$ con $(L, 0)$.

```

1 import numpy as np
2 import math
3 from netgen.geom2d import SplineGeometry
4 from ngsolve import *
5 from ngsolve.webgui import Draw
6
7 factorR0 = 23/100
8 L = sqrt(pi/2)
9 r_in = factorR0*L
10 order = 1
11 epsilon = 0.03
12 maxh = (4*epsilon)/5
13
14 geo = SplineGeometry()
15 geo.AddCircle(c=(0,0),r= L,bc="outer_circle",leftdomain=1,rightdomain
    =0)
16 geo.AddCircle(c=(0,0),r=r_in,bc="inner_circle",leftdomain=2,
    righdomain=1)
17 ngmesh = geo.GenerateMesh(maxh=maxh)
18 mesh = Mesh(ngmesh)
19 Draw (mesh)

```

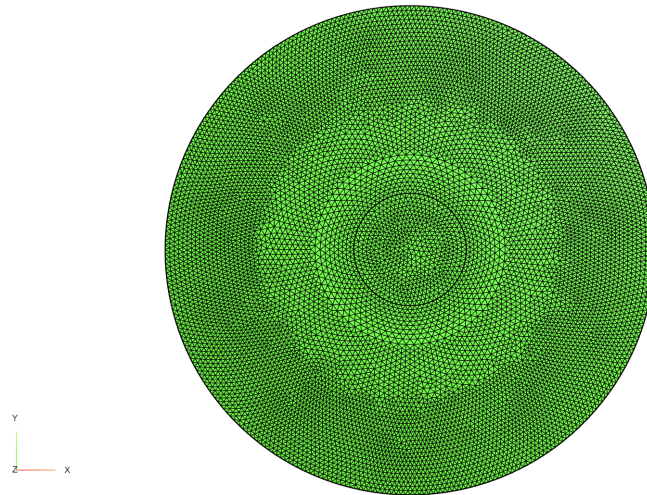


Figura 5.3: Malla para $\varepsilon = 0.03$

Se define el funcional $I(u)$ y la función $u_o(r)$

```

20 def I(u, grad_u):
21     return epsilon*InnerProduct(grad_u,grad_u) + (1/epsilon)*u**2*(u
        -1)**2
22 r = sqrt(x*x+y*y)
23 u0 = (L-r)/(L - r_in)
24 grad_u0 = (-1/(L - r_in))*CoefficientFunction((x/r, y/r))

```

Se define la forma bilineal y comienza la iteración de Newton

```

25 fes = H1(mesh, order=order, dirichlet="outer_circle|inner_circle")
26 v = fes.TrialFunction()
27 grad_v = Grad(v)
28
29 a = BilinearForm(fes, symmetric=False)
30 a += Variation (I(u0+v, grad_u0+grad_v).Compile() * dx)
31
32 gfu = GridFunction(fes)
33 gfu.vec[:] = 0
34 res = gfu.vec.CreateVector()
35 du = gfu.vec.CreateVector()
36 FreeDofs =fes.FreeDofs()
37
38 maxits = 300
39 tol = 3e-2
40 for it in range(maxits):
41     # solve linearized problem:
42     a.Apply (gfu.vec, res)
43     a.AssembleLinearization (gfu.vec)
44     inv = a.mat.Inverse(FreeDofs)

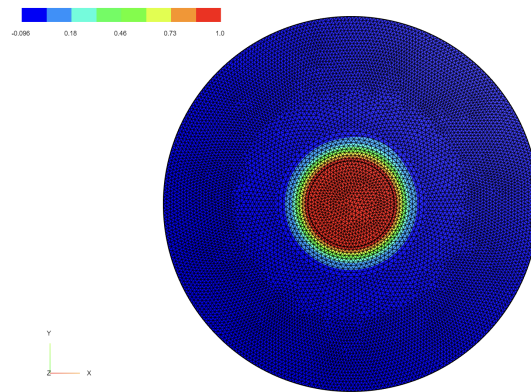
```

```

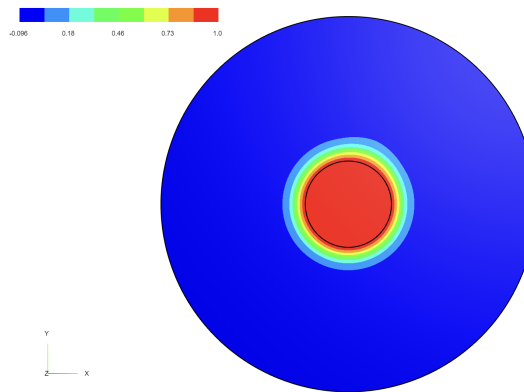
45     # alpha = 5e-2
46     alpha = 5e-2
47     du.data = alpha * inv * res
48
49     #update iteration
50     gfu.vec.data -= du
51
52     #stopping criteria
53     stopcritval = sqrt(abs(InnerProduct(du,res)))
54     if stopcritval < tol:
55         break
56 Draw(gfu+u0,mesh)

```

Se obtiene el minimizador



(a) Con Malla



(b) Sin malla

Figura 5.4: Minimizador de Modica-Mortola para $\varepsilon = 0.03$

Si consideramos una simulación con $\varepsilon = 0.3$ obtenemos la siguiente malla

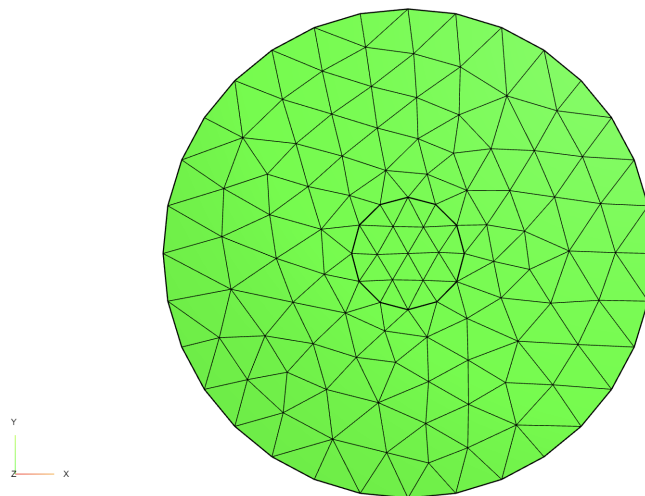
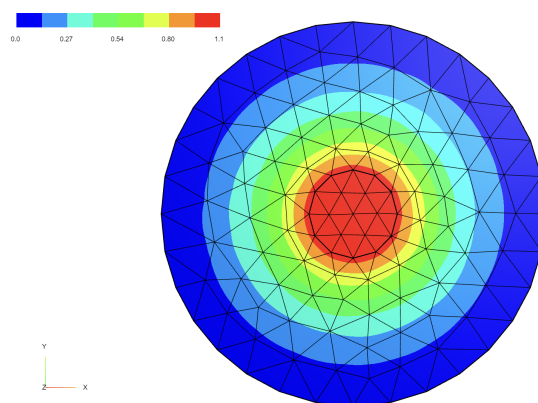
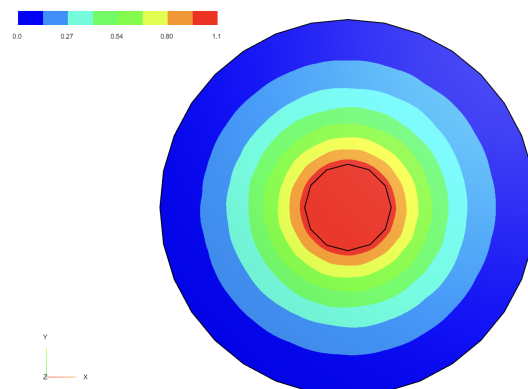


Figura 5.5: Malla para $\varepsilon = 0.3$

y el siguiente minimizador



(a) Con Malla



(b) Sin malla

Figura 5.6: Minimizador de Modica-Mortola para $\varepsilon = 0.3$

Caso 2

Minimización de Modica - Mortola (5.1) de dos “islas” (un círculo y un triángulo) con condición inicial la función característica de un cuadrado grande (cercano al dominio) que encierra a ambas islas, sujeto a las restricciones:

- $u(x) = 1$ para todo x en el borde del círculo,
- $u(x) = 1$ para todo x en el borde del triángulo,
- $u(x) = 0$ para todo x en el borde del cuadrado.

Consideramos la minimización en un dominio cuadrado de lado $L = 15\sqrt{\frac{\pi}{2}}$, el cuadrado de la condición inicial de lado $0.9L$, y las islas son un círculo y un triángulo ubicados en la esquina inferior izquierda y superior derecha, respectivamente.

```

1 # define geometry and generate mesh
2 import numpy as np
3 import math
4 # from netgen.geom2d import SplineGeometry
5 from netgen.occ import * # Opencascade for geometry modeling
6 from ngsolve import *
7 from ngsolve.webgui import Draw
8
9 factorR0 = 15/100
10 L = 15*sqrt(pi/2)
11 r_in = factorR0*L
12 order = 1
13 epsilon = 0.2
14 maxh = 0.6
15
16 outer = Rectangle(L, L).Face()
17 outer.edges.name="outer_bdry"
18
19 container = MoveTo(0.05*L, 0.05*L).Rectangle(0.9*L, 0.9*L).Face()
20 outer= outer - container
21 outer.faces.name="outer"
22
23 island1 = Circle((0.3*L, 0.3*L), r=r_in).Face()
24 island1.faces.name="island1"
25 island1.edges.name="island1_bdry"
26
27 island2 = MoveTo(0.5*L, 0.5*L).Line(0.3*L, 0.15*L).Line(-0.05*L,
    0.25*L).Line(-0.25*L,-0.4*L).Close().Face()
28 island2.faces.name="island2"
29 island2.edges.name="island2_bdry"
30
31 intermediate = container - island1 - island2
32 intermediate.faces.name = "intermediate"
33 intermediate.edges.col = (0,0,1)

```

```

34 geo = Glue([island1, island2, intermediate, outer])
35 mesh = Mesh(OCCGeometry(geo, dim=2).GenerateMesh(maxh=maxh))
36 Draw(mesh)

```

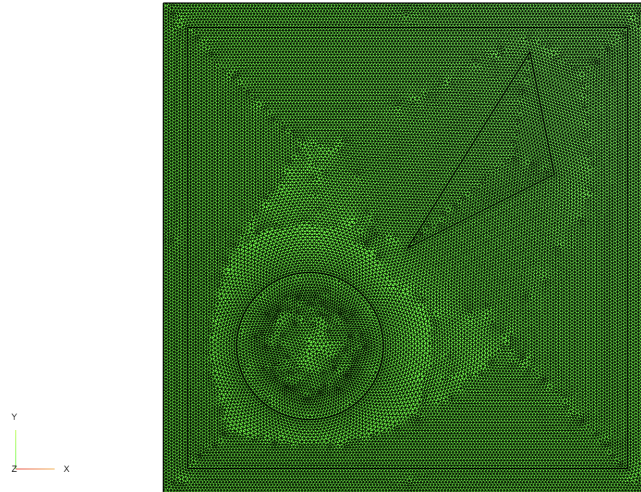


Figura 5.7: Malla para $\varepsilon = 0.2$

Ingresamos la condición inicial

```

37 fes = H1(mesh, order=order, dirichlet="outer_bdry|island1_bdry|
      island2_bdry")
38 v = fes.TrialFunction()
39 grad_v = Grad(v)
40
41 u0 = GridFunction(fes)
42 domain_values = {'island1': 1, 'island2': 1, 'intermediate': 1, '
      outer': 0}
43 cf = mesh.MaterialCF(domain_values)
44 u0.Set(cf)
45 grad_u0=Grad(u0)
46 Draw(u0)

```

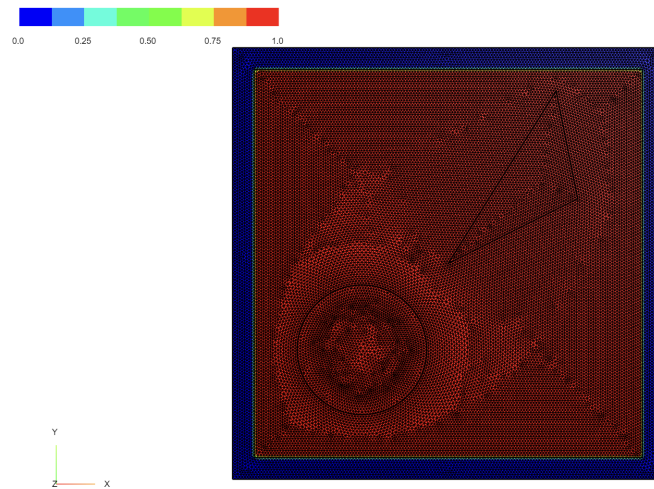


Figura 5.8: Condición inicial

Se ingresa $I(u)$.

```

47 def I(u, grad_u):
48     return epsilon*InnerProduct(grad_u,grad_u) + (1/epsilon)*u**2*(u
        -1)**2

```

Se define la forma bilineal y comienza la iteración de Newton

```

49 a = BilinearForm(fes, symmetric=False)
50 a += Variation (I(u0+v, grad_u0+grad_v).Compile() * dx)
51
52 gfv = GridFunction(fes)
53 gfv.vec[:] = 0
54 res = gfv.vec.CreateVector()
55 dv = gfv.vec.CreateVector()
56 FreeDofs=fes.FreeDofs()
57
58 maxits = 300
59 tol = 3e-2
60
61 for it in range(maxits):
62     # solve linearized problem:
63     a.Apply (gfv.vec, res)
64     a.AssembleLinearization (gfv.vec)
65     inv = a.mat.Inverse(FreeDofs)
66     # alpha = 5e-2
67     alpha = 5e-2
68     dv.data = alpha * inv * res
69
70     #update iteration
71     gfv.vec.data -= dv
72

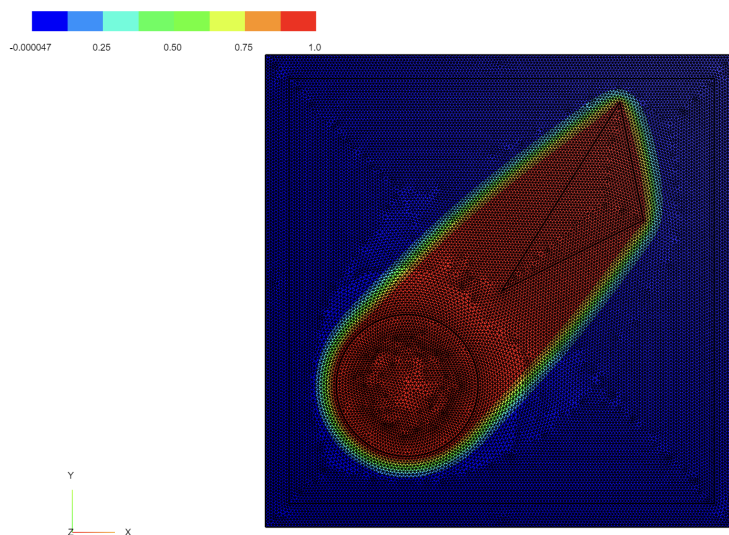
```

```

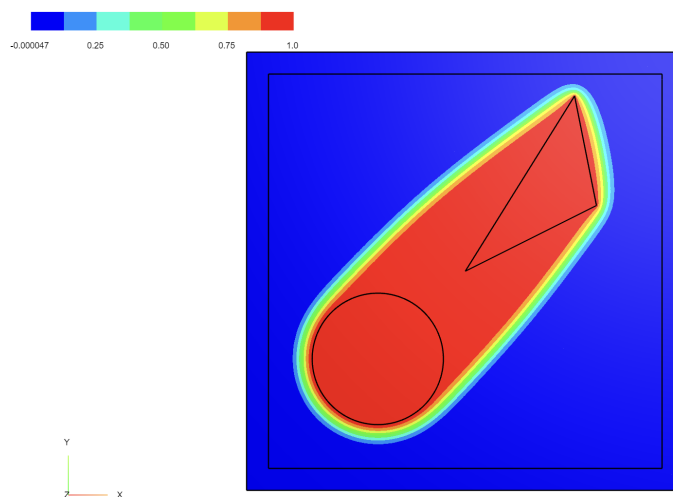
73     #stopping criteria
74     stopcritval = sqrt(abs(InnerProduct(dv,res)))
75     if stopcritval < tol:
76         break
77 Draw(gfv+u0,mesh)

```

Obtenemos el minimizador



(a) Con Malla



(b) Sin malla

Figura 5.9: Minimizador de Modica-Mortola de dos islas con $\varepsilon = 0.2$

Si realizamos una nueva simulación para $\varepsilon = 0.4$ la malla es de la forma

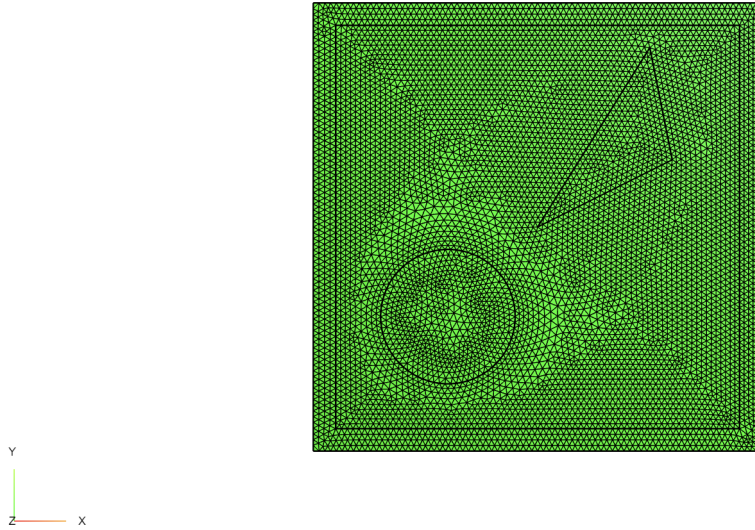


Figura 5.10: Malla para $\varepsilon = 0.4$

por lo tanto la condición inicial es

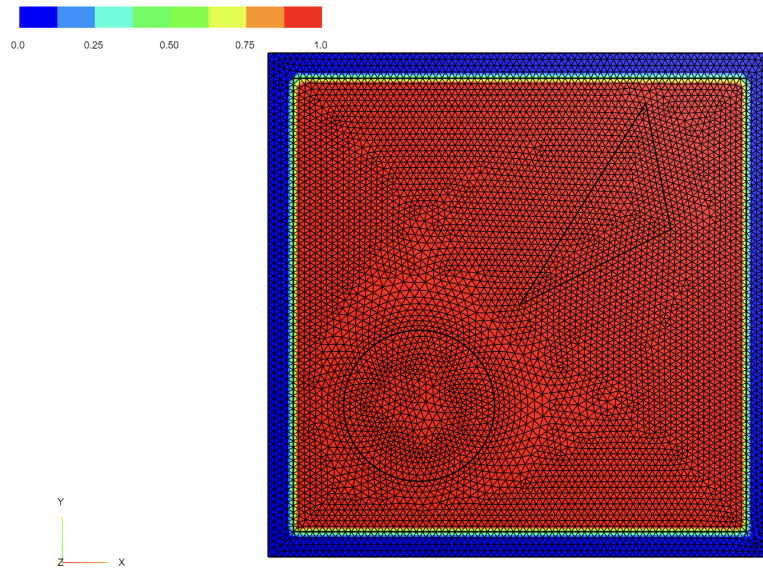
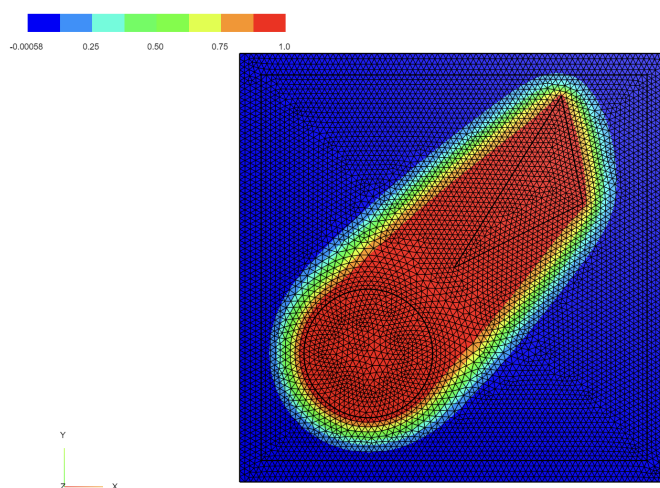
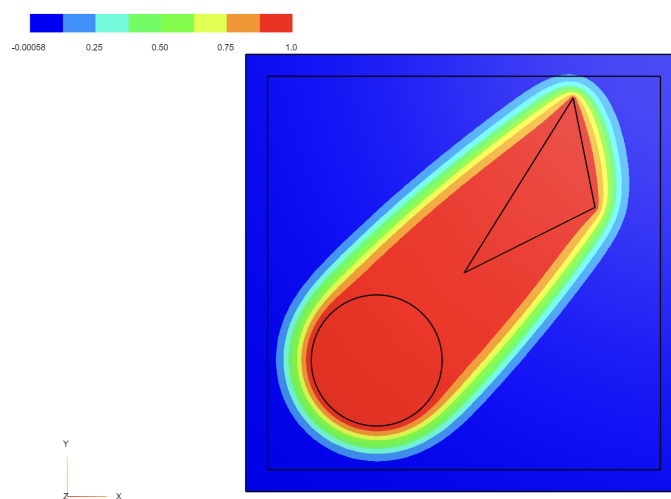


Figura 5.11: Condición inicial para $\varepsilon = 0.4$

y el minimizador que se obtiene es



(a) Con Malla



(b) Sin malla

Figura 5.12: Minimizador de Modica-Mortola de dos islas con $\varepsilon = 0.4$

Caso 3

Minimización de Modica - Mortola (5.1) de dos “islas” (un círculo y un triángulo) con condición inicial la función característica de rectángulos que encierran al círculo y al triángulo por separado, sujeto a las restricciones:

- $u(x) = 1$ para todo x en el borde del círculo,
- $u(x) = 1$ para todo x en el borde del triángulo,
- $u(x) = 0$ para todo x en el borde del cuadrado.

Para la minimización consideramos el mismo dominio del Caso 2, y los rectángulos de la condición inicial que encierran el círculo y el triángulo son definidos de la siguiente forma

```

1 outer = Rectangle(L, L).Face()
2 outer.edges.name="outer_bdry"
3
4 container1 = MoveTo(0.3*L - r_in - 4*maxh, 0.3*L - r_in - 4*maxh).
   Rectangle(2*r_in + 8*maxh, 2*r_in + 8*maxh).Face()
5
6 island1 = Circle((0.3*L, 0.3*L), r=r_in).Face()
7 island1.faces.name="island1"
8 island1.edges.name="island1_bdry"
9
10 intermediate1 = container1 - island1
11 intermediate1.faces.name = "intermediate1"
12
13 container2 = MoveTo(0.5*L - 2*maxh, 0.5*L - 2*maxh).Rectangle(0.3*L +
   8*maxh, 0.4*L + 8*maxh).Face()
14
15 island2 = MoveTo(0.5*L, 0.5*L).Line(0.3*L, 0.15*L).Line(-0.05*L,
   0.25*L).Line(-0.25*L,-0.4*L).Close().Face()
16 island2.faces.name="island2"
17 island2.edges.name="island2_bdry"
18
19 intermediate2 = container2 - island2
20 intermediate2.faces.name = "intermediate2"
21
22 outer= outer - container1 - container2
23 outer.faces.name="outer"
24
25 geo = Glue([island1, island2, intermediate1, intermediate2, outer])
26 mesh = Mesh(OCCGeometry(geo, dim=2).GenerateMesh(maxh=maxh))
27 Draw(mesh)

```

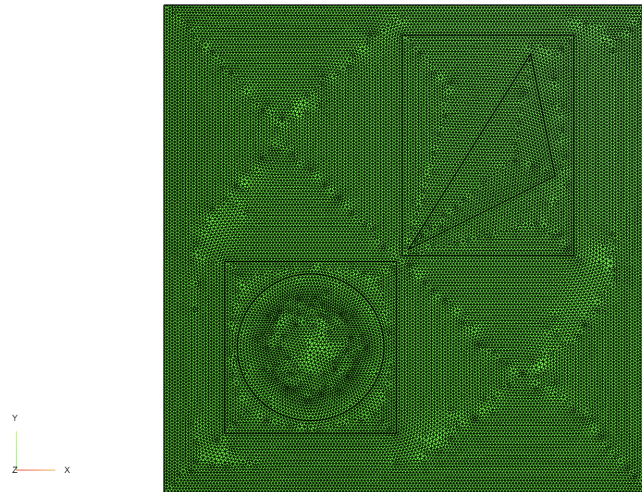



Figura 5.13: Malla para $\varepsilon = 0.2$ con nueva condición inicial

```

28 u0 = GridFunction(fes)
29 domain_values = {'island1': 1, 'island2': 1, 'intermediate1': 1, '
    intermediate2':1, 'outer': 0}
30 cf = mesh.MaterialCF(domain_values)
31 # bdry_values = {'inner_circle': 1, 'outer_circle': 0}
32 # cf = mesh.BoundaryCF(bdry_values)
33 # u0.Set(cf, BND)
34 u0.Set(cf)
35 grad_u0=Grad(u0)
36 Draw(u0)

```

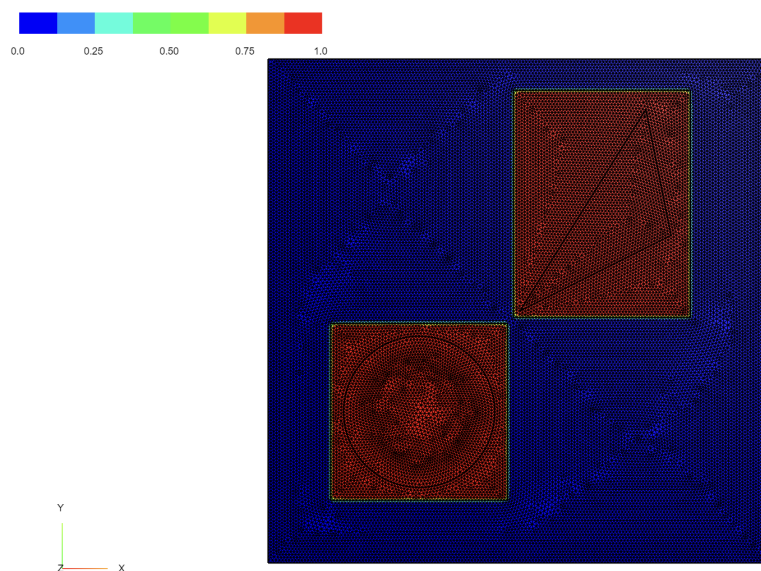
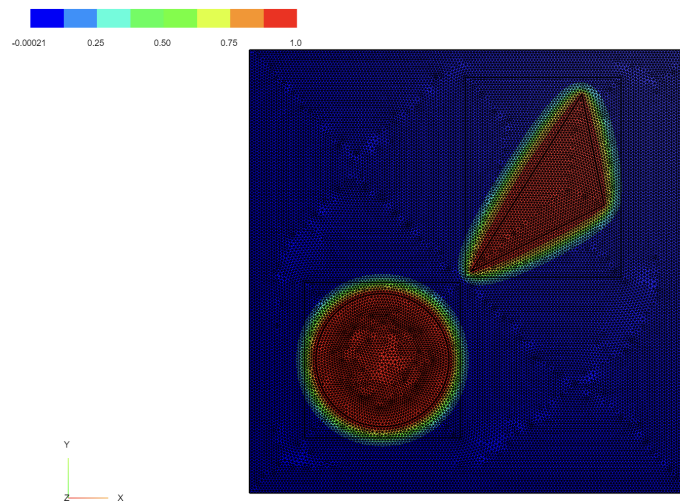
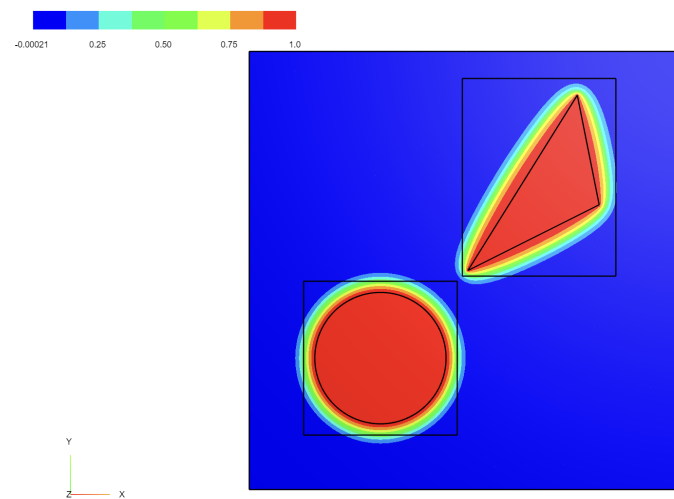


Figura 5.14: Nueva condición inicial $\varepsilon = 0.2$

Al ejecutar NGSolve obtenemos el siguiente minimizador



(a) Con Malla



(b) Sin malla

Figura 5.15: Minimizador de Modica-Mortola para $\varepsilon = 0.2$ con condición inicial nueva

Perímetro con Restricción de Masa

Para la minimización de Modica-Mortola con restricción de masa, consideramos la forma débil de las ecuaciones de Euler-Lagrange, con multiplicador de Lagrange de la siguiente forma:

Queremos minimizar

$$I[u] = \int_{\Omega} \varepsilon |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u)$$

con la restricción

$$\int_{\Omega} u = m.$$

Consideramos las funciones test $u + \alpha v$, con $v \in H_0^1(\Omega)$ sujeto a $\int_{\Omega} v = 0$. La primera variación de $I[u]$ es dada por

$$0 = \langle I'[u], \tilde{v} \rangle = \int_{\Omega} 2\varepsilon \nabla u \cdot \nabla \tilde{v} + \frac{W'(u)\tilde{v}}{\varepsilon}.$$

Tomemos cualquier $v \in H_0^1(\Omega)$. Sea

$$\tilde{v}(x) := v(x) - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} v$$

$\int_{\Omega} \tilde{v}(x) \, dx = 0$, de modo que \tilde{v} sirve como función test.

$$0 = \langle I'[u], \tilde{v} \rangle = 2\varepsilon \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \tilde{v} + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} W'(u)\tilde{v}$$

Por lo tanto,

$$0 = 2\varepsilon \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} W'(u)v - \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} W'(u) \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} v$$

Que sea cero para todo $v \in H_0^1(\Omega)$ es equivalente a

$$2\varepsilon \Delta u + \frac{1}{\varepsilon} W'(u) - \lambda = 0,$$

donde $\lambda = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} W'(u) \right)$.

Lamentablemente no lo pudimos implementar en NGSolve con las herramientas que teníamos.

Capítulo 6

Conclusiones y Futuras Direcciones de Investigación

Nuestras simulaciones de Julia sólo fueron realizadas con $N = 90$, $\varepsilon = 0.3$ y $\lambda \geq 0.3$, ya que cada vez que utilizamos un N mayor y tanto λ como ε menor a 0.3, IPOPT no fue capaz de alcanzar la convergencia o simplemente el computador se quedó sin memoria. Esto tiene que ver con la matriz de restricciones que no es dispersa. Hay del orden de N^2 variables y del orden de N^2 restricciones, por lo tanto las matrices de restricciones lineales tienen del orden de N^4 elementos no nulos. En nuestras simulaciones con $N = 90$, por ejemplo, son aproximadamente 65 millones de elementos no nulos. En Généraux y Oudet con $N = 2048$, la cantidad de elementos no nulos es 270.000 veces mayor que 65 millones. Aún así, con un número de puntos discretización tan bajo como $N = 90$, algunas simulaciones demoraron hasta incluso más de un día.

Si analizamos la resolución espacial de Julia $\frac{T}{N}$ y definimos $h = \frac{T}{N}$, nos gustaría que

$$h < \frac{4\varepsilon}{5},$$

con $\frac{4\varepsilon}{5}$ la resolución espacial que obtuvimos en el análisis de la tangente hiperbólica. Notemos que para $T = 20\pi$ se tiene

$$\varepsilon > \frac{5}{4}h = \frac{5T}{4N} = \frac{25\pi}{N}.$$

Dado que nuestras simulaciones son con $N = 90$, tenemos la severa restricción de

$$\varepsilon > \frac{25\pi}{90} \approx 0.9$$

Fuimos osados y violamos esa restricción recomendada e hicimos simulaciones en Julia con $\varepsilon = 0.3$. Sin embargo, esto es equivalente a tener una resolución espacial de $h \approx 2.3\varepsilon$ la cual es muy gruesa (comparada a la resolución espacial recomendada $\frac{4\varepsilon}{5} = 0.8\varepsilon$) por lo tanto no es claro que la transición desde $u = 0$ hasta $u = 1$ se esté resolviendo adecuadamente, dado que no conseguimos un ε tan cercano a 0.

Esto nos dice que nuestras simulaciones para masas pequeñas no aproximan el perímetro de forma correcta, ni tampoco podremos observar la “fisión nuclear” que en los resultados numéricos de Généraux - Oudet se tiene para una masa pequeña entre 1.5 y 1.6. (Ver Figuras 2.1a y 2.1b).

Sin embargo, para masas grandes nuestros resultados sí son significativos, ya que se puede observar el efecto centrífugo del Potencial de Riesz. Esto es más evidente cuando λ es mayor, por lo tanto este efecto es más claro para $\lambda = 1$ que para $\lambda = 0.3$, como lo podemos ver en las siguientes simulaciones para $L = 13\pi$ y $L = 19\pi$:

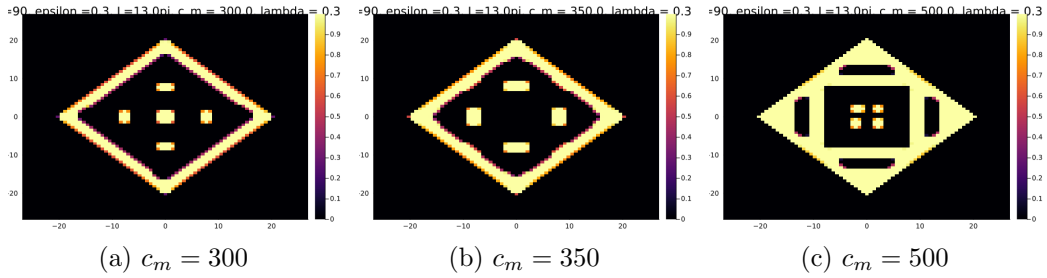


Figura 6.1: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 0.3$

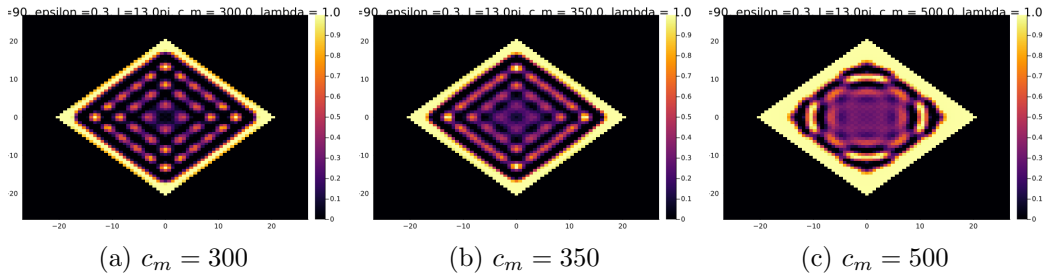


Figura 6.2: $N = 90, L = 13\pi, \lambda = 1$

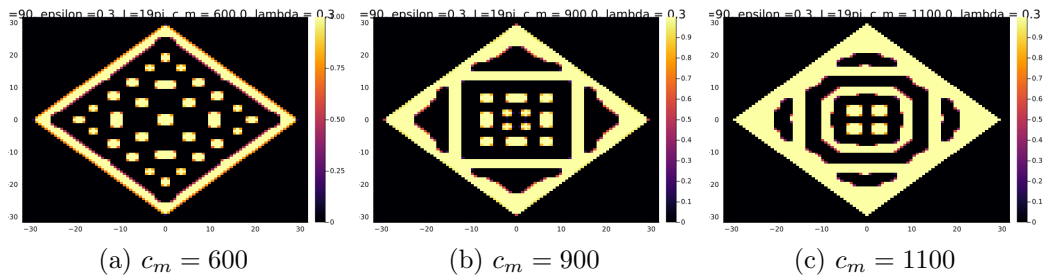


Figura 6.3: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 0.3$

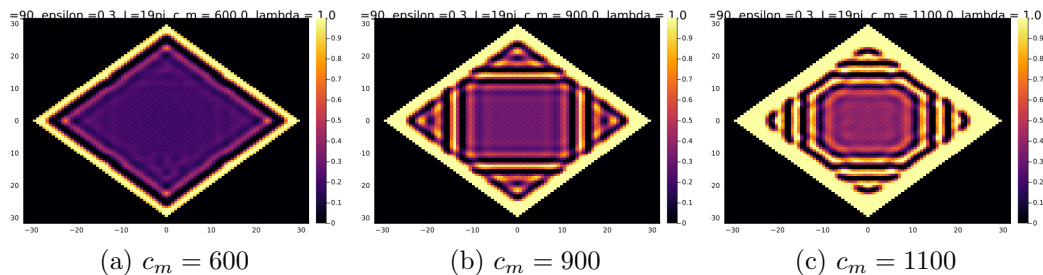


Figura 6.4: $N = 90, L = 19\pi, \lambda = 1$

También es visible este efecto cuando aumentamos λ para una masa fija:

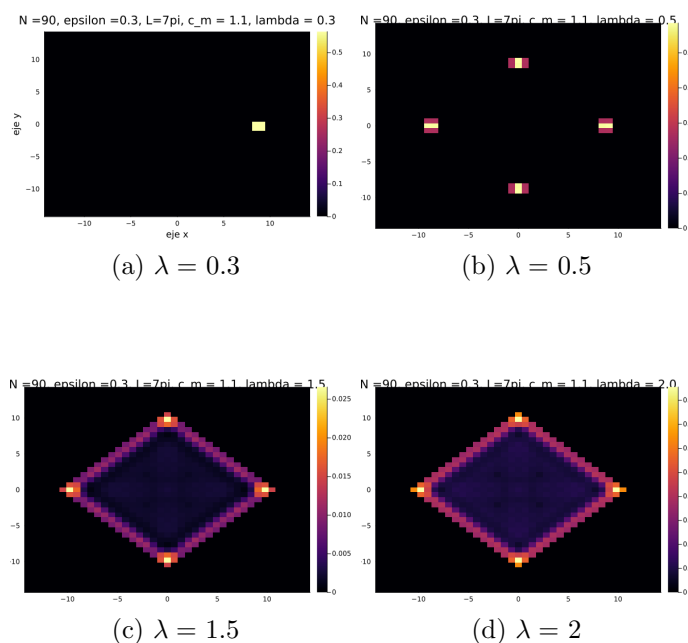
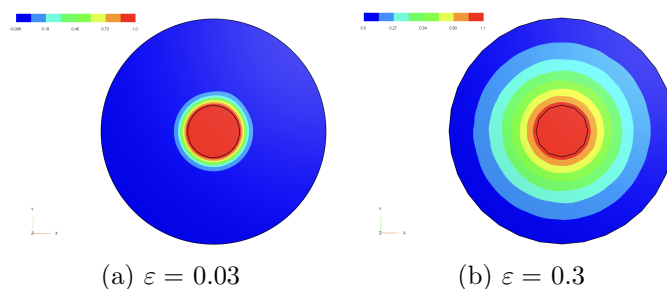


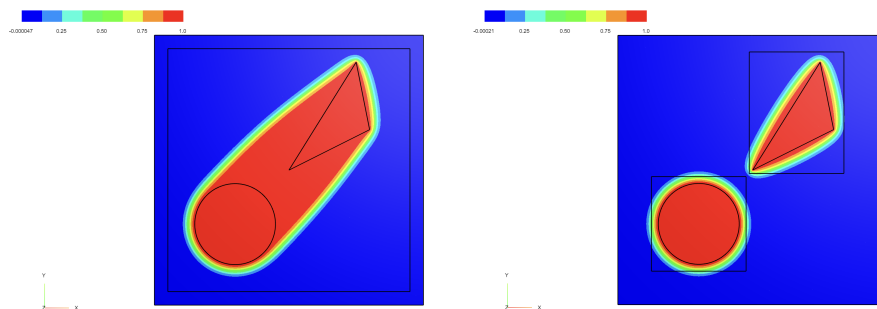
Figura 6.5: $N = 90, L = 7\pi$, Masa fija $c_m = 1.1$

En NGsolve para la simulación del Caso 1 con $\varepsilon = 0.03$ y con una resolución espacial de $\frac{4\varepsilon}{5}$, la solución sí fue una función característica. Cuando aumentamos a $\varepsilon = 0,3$ no llegamos a una función característica y notamos que la transición desde el color azul oscuro al rojo ocupa mucho espacio (una gran parte del dominio).



Lo mismo ocurre en las simulaciones del Caso 2 y el Caso 3, para valores de ε grandes como 0.2 y 0.4. Estos casos son importantes ya que nos muestra que para distintas

condiciones iniciales, obtenemos minimizadores diferentes, lo cuál es una dificultad para establecer minimizadores globales en las simulaciones.



(c) u_0 como una función característica de un cuadrado grande (d) u_0 como una función característica dos cuadrados disconexos

Figura 6.6: Simulaciones para $\varepsilon = 0.2$ con condiciones iniciales distintas

Las simulaciones de NGSolve nos dicen a qué podemos aspirar en las simulaciones de Julia con un ε tan grande como 0.3. Si quisieramos en Julia simulaciones con una resolución espacial como la del Caso 1 de NGSolve, $\frac{4\varepsilon}{5} = 0.024$, necesitaríamos que la resolución espacial de Julia $\frac{T}{N}$ cumpla lo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} = 0.024 &\Rightarrow N = \frac{20\pi}{0.024} \\ &\Rightarrow N = 2618, \end{aligned}$$

y para un número de puntos de discretización $N = 90$ estamos muy lejos de esa resolución espacial. Esto justifica que en Généaux y Oudet utilicen $N = 2048$.

Futuras direcciones de Investigación

Como direcciones para continuar la investigación podemos considerar las siguientes:

- Dadas las limitaciones computacionales que tuvimos en nuestro trabajo, una dirección inmediata es contactar a los matemáticos François Généaux y Edouard Oudet, para tener más información del lenguaje de programación que utilizan y su estrategia en la implementación numérica.
- Implementar el Potencial de Riesz en NGSolve aproximando con diferencias finitas con algún paquete ya instalado del software. De lo contrario programar una matriz de ensamblaje.
- Estudiar numéricamente como Généaux y Oudet el problema variacional con pesos (3). Se podrían ocupar estrategias como el Modelo Mexican Hat o estudiar minimizadores de una sucesión de pesos $\{a_n\}$ tal que $a_n \rightarrow 1$.

Capítulo 7

Apéndice

En este capítulo exponemos los códigos utilizados en la minimización numérica de nuestro problema variacional (1) y el cálculo explícito del potencial de doble pozo $W(u) = u^2(u - 1)^2$ al final del Capítulo 4.

Minimización Numérica en Matlab

Solver Quadprog:

```
N = 2^3;
T = 20*pi; n=2; alpha = 1;
c_m = 1.5; epsilon = 0.3; lambda = 1;

%considerando que c_m = m^((1+alpha)/n)
m = exp((log(c_m))/((1+alpha)/n));

%esta es la funcion C(n,alpha)
C = (2^alpha * pi^(n/2) * gamma(alpha/2))/(gamma((n-alpha)/2));

%Restriccion desigualdad A * c <= b
b = ones (2*N^2,1);
b(N^2+1:2*N^2) = zeros(N^2,1);

A = zeros(2*N^2);
for index_j1=1:N
    j1 = -N/2 + index_j1;
    x = j1*T/N;
    for index_j2=1:N
        j2 = -N/2 + index_j2;
        y = j2*T/N;
        row_in_A = sub2ind([N N], index_j1, index_j2);

        for index_c =1:N^2
            [index_k1, index_k2] = ind2sub([N N], index_c);
            k1 = -N/2 + index_k1; k2 = -N/2 + index_k2;
            A(row_in_A, index_c) = cos(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
        end
    end
end
```



```

        A(row_in_A, index_c+N^2) = sin(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
    end
end
end

A(N^2+1:2*N^2, :) = - A(1:N^2, :);

%Restriccion igualdad Aeq * c = beq
beq = m;
Aeq = zeros(1,2*N^2);

for q=1:N^2
    [k1,k2] = ind2sub ([N N], q);
    k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;
    if ((k1==0) && (k2==0))
        Aeq(1,q) = Aeq(1,q) + T^2;
    end
end

%Restriccion de pertenencia a Omega (u(x,y)=0 si (x,y)\notin\Omega)
for index_j1=1:N
    j1 = -N/2 + index_j1;
    x = j1*T/N;
    for index_j2=1:N
        j2 = -N/2 + index_j2;
        y = j2*T/N;
        if (~ (y+x <= pi/2) || ~(y+x >= -pi/2) || ~(y-x <= pi/2) || ~(y-x >= -pi/2))
            beq = [ beq ; 0];
            AeqExtrarow = zeros(1,2*N^2);
            for index_c =1:N^2
                [index_k1, index_k2] = ind2sub([N N], index_c);
                k1 = -N/2 + index_k1; k2=-N/2 + index_k2;
                AeqExtrarow(1, index_c) = cos(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
                AeqExtrarow(1, index_c+N^2) = sin(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
            end
            Aeq = [Aeq;AeqExtrarow];
        end
    end
end

% Potencial cuadratico (parte lineal)
f_w = zeros(2*N^2,1);

for p=1:N^2
    [k1,k2] = ind2sub ([N N], p);

```

```

k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;
for j1=(-N/2+1):N/2
    for j2=(-N/2+1):N/2
        f_w(p,1) = f_w(p,1) + (T/N)^2*cos(2*pi/T*(k1*j1*T/N+ k2*j2
            *T/N));
        f_w(p+N^2,1) = f_w(p+N^2,1) + (T/N)^2*sin(2*pi/T*(k1*j1*T/
            N+ k2*j2*T/N));
    end
end
end

f_w = (1/epsilon)*f_w;

%Potencial cuadratico (parte cuadratica)
H_w=zeros(2*N^2);
for p=1:N^2
    for q=1:N^2
        [k1tilde, k2tilde] = ind2sub([N N], p);
        [k1, k2] = ind2sub ([N N], q);
        k1tilde = k1tilde -N/2; k2tilde=k2tilde-N/2;
        k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;

        for j1=(-N/2+1):N/2
            for j2=(-N/2+1):N/2
                H_w(p,q)=H_w(p,q) - (T/N)^2*cos(2*pi/T*(k1tilde*j1*T/N
                    ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*cos(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));

                H_w(p,q+N^2)=H_w(p,q+N^2) - (T/N)^2*cos(2*pi/T*(
                    k1tilde*j1*T/N ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*sin(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));

                H_w(p+N^2,q)=H_w(p+N^2,q) - (T/N)^2*sin(2*pi/T*(
                    k1tilde*j1*T/N ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*cos(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));

                H_w(p+N^2,q+N^2)=H_w(p+N^2,q+N^2) - (T/N)^2*sin(2*pi/T
                    *(k1tilde*j1*T/N ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*sin(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));
            end
        end
    end
end
end
end

```

```

H_w = (1/epsilon)*H_w;

%Potencial de Riesz
H_riesz = zeros(2*N^2);

for p=1:N^2
    for q=1:N^2
        [k1,k2] = ind2sub([N N], p);
        k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;

        if (k1 == 0 && k2 == 0) || (p ~ = q)
            H_riesz(p,q)=0;
        elseif p == q
            H_riesz(p,q) = H_riesz(p,q) + ...
                (C/(2*pi)^alpha) * T^(alpha - 2) * ((k1)^2 + (k2)^2)
                    ^(-alpha/2);
        end

        if (k1 == 0 && k2 == 0) || (p+N^2 ~ = q+N^2)
            H_riesz(p+N^2,q+N^2)=0;
        elseif (p+N^2) == (q+N^2)
            H_riesz(p+N^2,q+N^2) = H_riesz(p+N^2,q+N^2) + ...
                (C/(2*pi)^alpha) * T^(alpha - 2) * ((k1)^2 + (k2)^2)
                    ^(-alpha/2);
        end
    end
end

H_riesz = (lambda)*H_riesz;

% Termino de gradiente al cuadrado
H_grad= zeros(2*N^2);

for p=1:N^2
    for q=1:N^2
        [k1tilde,k2tilde] = ind2sub([N N], p);
        [k1,k2] = ind2sub([N N], q);
        k1tilde = k1tilde-N/2; k2tilde = k2tilde-N/2;
        k1 = k1-N/2; k2 = k2-N/2;

        if ((k1tilde == -k1) && (k2tilde == -k2))
            H_grad(p,q) = H_grad(p,q) - 2*pi^2*(k1tilde*k1+k2tilde*k2)
                ;
            H_grad(p+N^2,q+N^2) = H_grad(p+N^2,q+N^2) + 2*pi^2*(
                k1tilde*k1+k2tilde*k2);
        elseif ((k1tilde == k1) && (k2tilde == k2))

```

```
H_grad(p,q) = H_grad(p,q) + 2*pi^2*(k1tilde*k1+k2tilde*k2)
;
H_grad(p+N^2,q+N^2) = H_grad(p+N^2,q+N^2) + 2*pi^2*(
    k1tilde*k1+k2tilde*k2);
else
H_grad(p,q) = 0;
H_grad(p,q+N^2) = 0;
H_grad(p+N^2,q) = 0;
H_grad(p+N^2,q+N^2) = 0;
end
end
end

H_grad = (epsilon)*H_grad;

H=(H_grad + H_w + H_riesz);
H=(H+H')/2;

% De esta forma H es simetrica

% Se llama a la funcion quadprog de la siguiente forma:

x = quadprog(H,f_w,A,b,Aeq,beq);
```

Solver Fmincon

```

N = 2^3;
T = 20*pi; n=2; alpha = 1;
c_m = 1.6; epsilon = 0.3; lambda = 1;

%considerando que c_m = m^((1+alpha)/n)
m = exp((log(c_m))/((1+alpha)/n));

%esta es la funcion C(n,alpha)
C = (2^alpha * pi^(n/2) * gamma(alpha/2))/(gamma((n-alpha)/2));

%Restriccion desigualdad A * c <= b
b = ones (2*N^2,1);
b(N^2+1:2*N^2) = zeros(N^2,1);

A = zeros(2*N^2);
for index_j1=1:N
    j1 = -N/2 + index_j1;
    x = j1*T/N;
    for index_j2=1:N
        j2 = -N/2 + index_j2;
        y = j2*T/N;
        %x
        row_in_A = sub2ind([N N], index_j1, index_j2);

        for index_c =1:N^2
            [index_k1, index_k2] = ind2sub([N N], index_c);
            k1 = -N/2 + index_k1; k2 = -N/2 + index_k2;
            A(row_in_A, index_c) = cos(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
            A(row_in_A, index_c+N^2) = sin(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
        end
    end
end

A(N^2+1:2*N^2, :) = - A(1:N^2, :);

%Restriccion igualdad Aeq * c = beq
beq = m;
Aeq = zeros(1,2*N^2);

for q=1:N^2
    [k1,k2] = ind2sub ([N N], q);
    k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;
    if ((k1==0) && (k2==0))
        Aeq(1,q) = Aeq(1,q) + T^2;
    end
end

```

```

end

%Restriccion de pertenencia a Omega (u(x,y)=0 si (x,y)\notin\Omega)
for index_j1=1:N
    j1 = -N/2 + index_j1;
    x = j1*T/N;
    for index_j2=1:N
        j2 = -N/2 + index_j2;
        y = j2*T/N;
        if (~ (y+x <= pi/2) || ~(y+x >= -pi/2) || ~(y-x <= pi/2) || ~(y-
            x >= -pi/2))
            beq = [ beq ; 0];
            AeqExtrarow = zeros(1,2*N^2);
            for index_c = 1:N^2
                [index_k1, index_k2] = ind2sub([N N], index_c);
                k1 = -N/2 + index_k1; k2=-N/2 + index_k2;
                AeqExtrarow(1, index_c) = cos(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
                AeqExtrarow(1, index_c+N^2) = sin(2*pi/T*(k1*x+k2*y));
            end
            Aeq = [Aeq;AeqExtrarow];

            %counter = counter +1;
            %counter, size(Aeq)
        end
    end
end

end

% Potencial cuadratico (parte lineal)
f_w = zeros(2*N^2,1);

for p=1:N^2
    [k1,k2] = ind2sub ([N N], p);
    k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;
    for j1=(-N/2+1):N/2
        for j2=(-N/2+1):N/2
            f_w(p,1) = f_w(p,1) + (T/N)^2*cos(2*pi/T*(k1*j1*T/N+ k2*j2
                *T/N));
            f_w(p+N^2,1) = f_w(p+N^2,1) + (T/N)^2*sin(2*pi/T*(k1*j1*T/
                N+ k2*j2*T/N));
        end
    end
end

end

f_w = (1/epsilon)*f_w;

%Potencial cuadratico (parte cuadratica)
H_w=zeros(2*N^2);

```

```

for p=1:N^2
    for q=1:N^2
        [k1tilde, k2tilde] = ind2sub([N N], p);
        [k1, k2] = ind2sub([N N], q);
        k1tilde = k1tilde -N/2; k2tilde=k2tilde-N/2;
        k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;

        for j1=(-N/2+1):N/2
            for j2=(-N/2+1):N/2
                H_w(p,q)=H_w(p,q) - (T/N)^2*cos(2*pi/T*(k1tilde*j1*T/N
                    ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*cos(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));

                H_w(p,q+N^2)=H_w(p,q+N^2) - (T/N)^2*cos(2*pi/T*(
                    k1tilde*j1*T/N ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*sin(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));

                H_w(p+N^2,q)=H_w(p+N^2,q) - (T/N)^2*sin(2*pi/T*(
                    k1tilde*j1*T/N ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*cos(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));

                H_w(p+N^2,q+N^2)=H_w(p+N^2,q+N^2) - (T/N)^2*sin(2*pi/T
                    *(k1tilde*j1*T/N ...
                    + k2tilde*j2*T/N))*sin(2*pi/T*(k1*j1*T/N+k2*j2*T/N
                    ));
            end
        end
    end
end

H_w = (1/epsilon)*H_w;

%Potencial de Riesz
H_riesz = zeros(2*N^2);

for p=1:N^2
    for q=1:N^2
        [k1,k2] = ind2sub([N N], p);
        k1 = k1-N/2; k2=k2-N/2;

        if (k1 == 0 && k2 == 0) || (p ~ = q)
            H_riesz(p,q)=0;
        elseif p == q
            H_riesz(p,q) = H_riesz(p,q) + ...
                (1/4)*(C/(2*pi)^alpha) * T^(alpha) * ((k1)^2 + (k2)^2)
        end
    end
end

```

```

        ^(-alpha/2);
    end

    if (k1 == 0 && k2 == 0) || (p+N^2 ~= q+N^2)
        H_riesz(p+N^2,q+N^2)=0;
    elseif (p+N^2) == (q+N^2)
        H_riesz(p+N^2,q+N^2) = H_riesz(p+N^2,q+N^2) + ...
            (1/4)*(C/(2*pi)^alpha) * T^alpha * ((k1)^2 + (k2)^2)
            ^(-alpha/2);
    end
end
end
H_riesz = (lambda)*H_riesz;

%Termino de gradiente al cuadrado
H_grad= zeros(2*N^2);

for p=1:N^2
    for q=1:N^2
        [k1tilde,k2tilde] = ind2sub([N N], p);
        [k1,k2] = ind2sub([N N], q);
        k1tilde = k1tilde-N/2; k2tilde = k2tilde-N/2;
        k1 = k1-N/2; k2 = k2-N/2;

        if ((k1tilde == -k1) && (k2tilde == -k2))
            H_grad(p,q) = H_grad(p,q) - 2*pi^2*(k1tilde*k1+k2tilde*k2)
                ;
            H_grad(p+N^2,q+N^2) = H_grad(p+N^2,q+N^2) + 2*pi^2*(
                k1tilde*k1+k2tilde*k2);

        elseif ((k1tilde == k1) && (k2tilde == k2))
            H_grad(p,q) = H_grad(p,q) + 2*pi^2*(k1tilde*k1+k2tilde*k2)
                ;
            H_grad(p+N^2,q+N^2) = H_grad(p+N^2,q+N^2) + 2*pi^2*(
                k1tilde*k1+k2tilde*k2);

        else
            H_grad(p,q) = 0;
            H_grad(p,q+N^2) = 0;
            H_grad(p+N^2,q) = 0;
            H_grad(p+N^2,q+N^2) = 0;
        end
    end
end
end

H_grad = (epsilon)*H_grad;

H=(H_grad + H_w + H_riesz);
H=(H+H')/2;

```



```

%Esto hace que H sea simetrica

%% Cambiamos indices con el fin de eliminar
%%funciones trigonometricas linealmente dependientes

f_w_reducida = zeros(2*(N/2+1)^2,1);

for ell=1:(N/2+1)^2
    [k1,k2] = ind2sub ([N/2+1 N/2+1], ell);
    k1emb = k1 + (N/2-1);
    k2emb = k2 + (N/2-1);

    p = sub2ind([N N], k1emb,k2emb);

    f_w_reducida(ell) = f_w(p);
    f_w_reducida(ell + (N/2+1)^2) = f_w(p + N^2);

end

H_reducida = zeros(2*(N/2+1)^2);
for ell1=1:(N/2+1)^2
    [k1,k2] = ind2sub ([N/2+1 N/2+1], ell1);
    k1emb = k1 + (N/2-1);
    k2emb = k2 + (N/2-1);
    p1 = sub2ind([N N], k1emb,k2emb);

    for ell2=1:(N/2+1)^2
        [k1,k2] = ind2sub ([N/2+1 N/2+1], ell2);
        k1emb = k1 + (N/2-1);
        k2emb = k2 + (N/2-1);
        p2 = sub2ind([N N], k1emb,k2emb);

        H_reducida(ell1, ell2) = H(p1,p2);
        H_reducida(ell1, ell2 + (N/2+1)^2) = H(p1, p2 + N^2);
        H_reducida(ell1 + (N/2+1)^2, ell2) = H(p1 + N^2,p2);
        H_reducida(ell1 + (N/2+1)^2, ell2 + (N/2+1)^2) = H(p1+N^2,p2
            + N^2);
    end
end

A_reducida = zeros(2*N^2, 2*(N/2+1)^2);
for row_in_A =1:2*N^2
    for ell=1:(N/2+1)^2
        [k1,k2] = ind2sub ([N/2+1 N/2+1], ell);
        k1emb = k1 + (N/2-1);

```

```

    k2emb = k2 + (N/2-1);
    p = sub2ind([N N], k1emb,k2emb);

    A_reducida (row_in_A, ell) = A(row_in_A, p);
    A_reducida (row_in_A, ell + (N/2+1)^2) = A(row_in_A, p + N^2)
        ;
end
end

num_rows = size(Aeq, 1);
Aeq_reducida = zeros(num_rows, 2*(N/2+1)^2);
for row_in_Aeq =1:num_rows
    for ell=1:(N/2+1)^2
        [k1,k2] = ind2sub ([N/2+1 N/2+1], ell);
        k1emb = k1 + (N/2-1);
        k2emb = k2 + (N/2-1);
        p = sub2ind([N N], k1emb,k2emb);

        Aeq_reducida (row_in_Aeq, ell) = Aeq(row_in_Aeq, p);
        Aeq_reducida (row_in_Aeq, ell + (N/2+1)^2) = Aeq(row_in_Aeq,
            p + N^2);
    end
end

fun = @(x) 1/2*x'*H_reducida*x + f_w_reducida'*x ;
c0 = zeros(2*(N/2+1)^2,1);

options = optimoptions("fmincon",...
    "Algorithm","interior-point",...
    "EnableFeasibilityMode",true,...
    "SubproblemAlgorithm","cg");

c = fmincon(fun,c0,A_reducida,b,Aeq_reducida,beq)

```

Solver IPOPT

```

using LinearAlgebra, Printf, IPOPT, JuMP, SpecialFunctions, Plots
Plots.default(show = true)

hora_inicial=time_ns()

n = 2
alpha = 1
T = 20*pi

# data es un arreglo con la siguiente informacion, en ese orden:
# data = [exponente_para_N, epsilon, L, c_m, lambda]

data = ARGS

N = 2^parse(Int64, data[1])
epsilon = parse(Float64, data[2])
L = pi*parse(Float64, data[3])
c_m = parse(Float64, data[4])
lambda = parse(Float64, data[5])

#considerando que c_m = m^((1+alpha)/n)
m = exp(log(c_m)/((1+alpha)/n))

#esta es la funcion C(n,alpha)
C = (2^alpha * pi^(n/2) * gamma(alpha/2))/(gamma((n-alpha)/2))

# Las restriccion con desigualdad es
# 0<= u(jT/N) <= 1 , para muchos j
# y la restriccion de pertenencia
# u(x,y) = 0 para (x,y) no perteneciente al cuadrado de diagonal L

# number of Fourier modes
# size of index set I_k
# matrices tienen 2*num_Fourier columnas, esto es, num_Fourier
#   cosenos y num_Fourier senos

num_Fourier::Int64 = (N + 1)*(N/2) + N/2

A = Matrix{Float64}(undef, 0, 2*num_Fourier)
b = Vector{Float64}(undef, 0)
rows_in_A = 0
Aeq = Matrix{Float64}(undef, 0, 2*num_Fourier)
beq = Vector{Float64}(undef, 0)
rows_in_Aeq = 0
Avisual = Matrix{Float64}(undef, 0, 2*num_Fourier)

```

```

Threads.@threads for j1 = -(N/2)+1:N/2
    x = j1*T/N
    Threads.@threads for j2 = -(N/2)+1:N/2
        y = j2*T/N
        point_inside_square = (y+x <= L/2) && (y+x >= -L/2) && (y-x
            <= L/2) && (y-x >= -L/2)
        Extrarow = zeros(1, 2*num_Fourier)
        index_c = 1
        Threads.@threads for k1 = (-N/2):(N/2)
            Threads.@threads for k2 = 0:(N/2)
                if k2==0 && k1<=0
                    continue
                end
                Extrarow[index_c] = cos(2*pi/N*(k1*j1+k2*j2))
                Extrarow[index_c + num_Fourier] = sin(2*pi/N*(k1*j1+k2
                    *j2))
                index_c += 1
            end
        end
    end
    global Avisual = vcat(Avisual, Extrarow)
    if point_inside_diamond
        #Restriccion desigualdad  $A * c \leq b$  correspondiente a  $u \leq 1$ 
        global A = vcat(A, Extrarow)
        global b = vcat(b, 1-m/T^2)
        global rows_in_A += 1
    else
        #Restriccion igualdad  $A_{eq} * c = b_{eq}$ 
        # Restriccion de pertenencia a  $\Omega$  ( $u(x,y)=0$  si  $(x,y) \setminus$ 
            notin  $\Omega$ )
        global Aeq = vcat(Aeq, Extrarow)
        global beq = vcat(beq, -m/T^2)
        global rows_in_Aeq += 1
    end
end
println("j1= ", j1)
tiempo_transcurrido = (time_ns()- hora_inicial)/1e9
println("Tiempo transcurrido: ", round(tiempo_transcurrido,
    digits=2), " s")
end

#Restriccion desigualdad  $A * c \leq b$  correspondiente a  $-u \leq 0$ 
A = vcat(A, -A)
b = vcat(b, (m/T^2)*ones(rows_in_A))
rows_in_A *= 2

#Potencial cuadratico (parte cuadratica)

```

```

H_w = ones(2*num_Fourier)
H_w[num_Fourier] += 1
H_w[2*num_Fourier] -= 1
H_w *= -(1/2)*(T^2)*(1/epsilon)

#Potencial de Riesz
H_riesz = Vector{Float64}(undef, 2*num_Fourier)
index_c = 1
Threads.@threads for k1 = (-N/2):(N/2)
    Threads.@threads for k2 = 0:(N/2)
        if k2==0 && k1<=0
            continue
        end
        aux = lambda*(((C*T^(alpha+2))/(4*(2*pi)^alpha))*((k1^2+ k2
            ^2)^(-alpha/2)))
        H_riesz[index_c] = aux
        H_riesz[index_c + num_Fourier] = aux
        global index_c += 1
    end
end

# Termino de gradiente al cuadrado
H_grad = Vector{Float64}(undef, 2*num_Fourier)
index_c = 1
Threads.@threads for k1 = (-N/2):(N/2)
    Threads.@threads for k2 = 0:(N/2)
        if k2==0 && k1<=0
            continue
        end
        aux = epsilon*(2*(pi^2)*(k1^2 + k2^2))
        H_grad[index_c] = aux
        H_grad[index_c + num_Fourier] = aux
        global index_c += 1
    end
end

# Se suman los potenciales cuadraticos
H = H_grad + H_w + H_riesz

tiempo_transcurrido = (time_ns()- hora_inicial)/1e9
println("Tiempo transcurrido: ", round(tiempo_transcurrido, digits=2)
    , " s")

# Se llama a IPOPT
model = Model(IPOPT.Optimizer)

```

```

nx = 2*num_Fourier
@variable(model, x[1:nx])

@constraint(model, Aeq*x .== beq);
@constraint(model, A*x .<= b);

# Construimos un start_value. para el Newton del Ipot
# Corresponde a los coeficientes de Fourier de
# la funcion caracteristica de un cuadrado de area m centrado en el
  origen

start_x = zeros(2*num_Fourier)
index_c = 1
Threads.@threads for k1 = (-N/2):(N/2)
  Threads.@threads for k2 = 0:(N/2)
    if k2==0 && k1<=0
      continue
    end
    # coeficiente a_k para el coseno
    if k1==0
      start_x[index_c] = sqrt(m)*T/pi/k2*sin(pi/T*k2*sqrt(m))
    elseif k2==0
      start_x[index_c] = sqrt(m)*T/pi/k1*sin(pi/T*k1*sqrt(m))
    else
      start_x[index_c] = (2/(pi^2))*(1/k1)*(1/k2)*sin(pi/T*k1*
        sqrt(m))*sin(pi/T*k2*sqrt(m))
    end
    global index_c += 1
    # Los coeficientes b_k para los senos se quedan en cero
  end
end

set_start_value.(x, start_x)

@NLobjective(model, Min, (m - m^2/T^2)*(1/epsilon) + sum(H[i]*x[i]*x[
  i] for i=1:nx))

optimize!(model)

#Este es el vector solucion de coeficientes de Fourier que nos da
  IPOPT

coef_Fourier = [JuMP.value(x[i]) for i in 1:nx]

#Este es el valor minimo de la funcion objetivo
Fun_Objetivo = [JuMP.value((m - m^2/T^2)*(1/epsilon) + sum(H[i]*x[i]*
  x[i] for i=1:nx)) ]

```

```

# Calcula los valores de la solución u(x,y) en los puntos de la
  grilla
# Guarda dichos valores como una matriz de (N+1) x (N+1)
valores_de_u_aux = Avisual*coef_Fourier
valores_de_u = zeros(N+1, N+1)
p=1
suma_de_Riemann = 0
Threads.@threads for j1 = -(N/2):N/2
  # x = j1*T/N
  Threads.@threads for j2 = -(N/2):N/2
    # y = j2*T/N
    columna::Int64 = j1 + N/2 + 1
    fila::Int64 = j2 + N/2 + 1
    if j1==-N/2 || j2==N/2
      continue
    end
    aux = m/T^2 + valores_de_u_aux[p]
    valores_de_u[fila, columna] += aux
    global suma_de_Riemann += aux*(T/N)^2
    global p +=1
  end
end

# Construye nombre de archivo para el .png y el results.txt
auxL=L/pi
if isinteger(auxL)
  stringL=string(trunc(Int,auxL))*"pi"
else
  stringL=@sprintf("%.1f", auxL)*"pi"
end
stringlambda=@sprintf("%.1f", lambda)
filename_suffix = ("N"*string(N)*"-eps"*string(epsilon)*"-L"*stringL
  *"-c_m"*string(c_m))*"-lambda"*stringlambda

archivo = open("results-"*filename_suffix*".txt", "w")

# Imprime mínimo y máximo
auxString = @sprintf("Energía: %.3f \n", Fun_Objetivo[1])
write(archivo, auxString)
auxString = @sprintf("Mínimo de u: %f\n", minimum(valores_de_u))
write(archivo, auxString)
auxString = @sprintf("Máximo de u: %f\n", maximum(valores_de_u))
write(archivo, auxString)
auxString = @sprintf("Masa: %f\n", suma_de_Riemann)
write(archivo, auxString)

### Grafica la solución mediante un heatmap
max_j::Int64 = round(min((L/T)*(N/2)*1.3, N/2))

```

```
index_medio::Int64 = N/2+1
heatmap((-max_j:max_j)*T/N, (-max_j:max_j)*T/N, valores_de_u[(
  index_medio-max_j):(index_medio+max_j),(index_medio-max_j):(
  index_medio+max_j)], xlabel= "eje x", ylabel="eje y", title="N
  ="*string(N)*", epsilon ="*string(epsilon)*", L="*stringL*", c_m
  = "*string(c_m)*", lambda = "*stringlambda")

# Guarda el grafico
savefig("heatmap-*filename_suffix*".png")

# Imprime el tiempo transcurrido
tiempo_transcurrido = (time_ns()- hora_inicial)/1e9
auxString = @sprintf("Tiempo transcurrido: %d s", round(
  tiempo_transcurrido, digits=2))
write(archivo, auxString)

close(archivo)
```


Potencial de Doble Pozo $W(u) = u^2(u - 1)^2$

Queremos calcular

$$\frac{1}{\varepsilon} \int W(u) = \frac{1}{\varepsilon} \int u^4 - 2u^3 + u^2,$$

por lo tanto antes tenemos que calcular lo siguiente:

(Integral I) $\int u^4$:

Recordemos que

$$u(\mathbf{j}T/N) = u(x, y) = \frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right]$$

y que $(a + b)^4 = a^4 + 4a^3b + 6a^2b^2 + 4ab^3 + b^4$, por lo tanto $\int u^4$

$$\begin{aligned} \int u^4 &= \int \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^4 \\ &= \int \left[\frac{m^4}{T^8} + 4 \frac{m^3}{T^6} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \right. \\ &\quad + 6 \frac{m^2}{T^4} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ &\quad + 4 \frac{m}{T^2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^3 \\ &\quad \left. + \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^4 \right] \\ &= \int \frac{m^4}{T^8} + 4 \frac{m^3}{T^6} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\ &\quad + 6 \frac{m^2}{T^4} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ &\quad + 4 \frac{m}{T^2} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^3 \\ &\quad + \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^4. \end{aligned}$$

Vamos a calcular las cinco integrales por partes

$$(1) \int \frac{m^4}{T^8} :$$

$$\begin{aligned} \int \frac{m^4}{T^8} dx dy &= \frac{m^4}{T^8} T^2 \\ &= \frac{m^4}{T^6}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2) & 4 \frac{m^3}{T^6} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) : \\ &= 4 \frac{m^3}{T^6} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\ &= 4 \frac{m^3}{T^6} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} \int e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} \int e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

ya que $\int e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = 0 = \int e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$, por resultados vistos antes.

$$\begin{aligned} (3) & 6 \frac{m^2}{T^4} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 : \\ &= 6 \frac{m^2}{T^4} \int \left(\sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \left[\left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}}}{2} i \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}}}{2} i \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}}}{2} i \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}}}{2} i \right) e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\ &= 6 \frac{m^2}{T^4} \sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \left[\left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}}}{2} i \right) \int e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}}}{2} i \right) \int e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}}}{2} i \right) \int e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}}}{2} i \right) \int e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &= 6 \frac{m^2}{T^4} \sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \left[\left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}}}{2} i \right) T^2 \delta_{\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}}} + \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}}}{2} i \right) T^2 \delta_{\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}}} \right] \end{aligned}$$

ya que $\int e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} = 0 = \int e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}}$, por lo tanto

$$\begin{aligned} &= 6 \frac{m^2}{T^4} \sum_{k_1, k_2} \left[\left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) T^2 + \left(\frac{a_k + b_k}{2} i \right) \left(\frac{a_k - b_k}{2} i \right) T^2 \right] \\ &= 6 \frac{m^2}{T^4} \frac{T^2}{2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right] \\ &= 3 \frac{m^2}{T^2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3m}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} ((a_{\mathbf{k}_1} - b_{\mathbf{k}_1} i)(a_{\mathbf{k}_2} - b_{\mathbf{k}_2} i)(a_{\mathbf{k}_3} + b_{\mathbf{k}_3} i) \right. \\
&\quad \left. + (a_{\mathbf{k}_1} + b_{\mathbf{k}_1} i)(a_{\mathbf{k}_2} + b_{\mathbf{k}_2} i)(a_{\mathbf{k}_3} - b_{\mathbf{k}_3} i) \right) \\
&= \frac{3m}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} i - a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} i - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} \right. \\
&\quad + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} i + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} i - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} \\
&\quad + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} i + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} - b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} i \\
&\quad \left. - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} i + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} + b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} i) \right) \\
&= \frac{3m}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (2a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - 2a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} + 2a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + 2a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right) \\
&= 3m \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right). \\
(5) \int &\left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^4 : \\
&= \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\
&\cdot \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2) i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2) i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\
&= \int \left(\sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \left[\left(\frac{a_k - b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k - b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{a_k + b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k + b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\
&\cdot \left(\sum_{k_1, k_2} \sum_{\tilde{k}_1, \tilde{k}_2} \left[\left(\frac{a_k - b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k - b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{a_k + b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} - b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_k + b_k i}{2} \right) \left(\frac{a_{\tilde{k}} + b_{\tilde{k}} i}{2} \right) e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}} \right] \right) \\
&= \int \left(\sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \sum_{\mathbf{k}_4} \left(\left(\frac{a_{\mathbf{k}_1} - b_{\mathbf{k}_1} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\mathbf{k}_2} - b_{\mathbf{k}_2} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}_1} - b_{\mathbf{k}_1} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\mathbf{k}_2} + b_{\mathbf{k}_2} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{a_{\mathbf{k}_1} + b_{\mathbf{k}_1} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\mathbf{k}_2} - b_{\mathbf{k}_2} i}{2} \right) e^{\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}} + \left(\frac{a_{\mathbf{k}_1} + b_{\mathbf{k}_1} i}{2} \right) \left(\frac{a_{\mathbf{k}_2} + b_{\mathbf{k}_2} i}{2} \right) e^{-\frac{2\pi i}{T} (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} + 2b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - 2a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - 2a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2}) \\
& = \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} \left(\frac{T^2}{2} \delta_{(k_4=k_1+k_2+k_3)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3}a_{k_4} + a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}b_{k_4} \right. \\
& + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}b_{k_4} - a_{k_1}a_{k_4}b_{k_2}b_{k_3} - a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} - a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2} - b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4}) \\
& + \frac{3T^2}{8} \delta_{(k_1+k_2=k_3+k_4)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3}a_{k_4} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}b_{k_4} + a_{k_1}a_{k_4}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}b_{k_4} \\
& + a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} + b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2}) \\
& = \frac{T^2}{2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} \left(\delta_{(k_4=k_1+k_2+k_3)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3}a_{k_4} + a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}b_{k_4} \right. \\
& + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}b_{k_4} - a_{k_1}a_{k_4}b_{k_2}b_{k_3} - a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} - a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2} - b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4}) \\
& + \frac{3}{4} \delta_{(k_1+k_2=k_3+k_4)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3}a_{k_4} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}b_{k_4} + a_{k_1}a_{k_4}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}b_{k_4} \\
& + a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} + b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2}) \\
& \left. \right)
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
\int u^4 & = \frac{m^4}{T^6} + 3 \frac{m^2}{T^2} \sum_{\mathbf{k}} ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \\
& + 3m \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \left(\delta_{(k_3=k_1+k_2)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3} - a_{k_3}b_{k_1}b_{k_2} + a_{k_1}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}b_{k_1}b_{k_3}) \right) \\
& + \frac{T^2}{2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} \left(\delta_{(k_4=k_1+k_2+k_3)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3}a_{k_4} + a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}b_{k_4} \right. \\
& + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}b_{k_4} - a_{k_1}a_{k_4}b_{k_2}b_{k_3} - a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} - a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2} - b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4}) \\
& + \frac{3}{4} \delta_{(k_1+k_2=k_3+k_4)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3}a_{k_4} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}b_{k_4} + a_{k_1}a_{k_4}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}b_{k_4} \\
& + a_{k_2}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_3} + b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}b_{k_4} - a_{k_3}a_{k_4}b_{k_1}b_{k_2}) \\
& \left. \right).
\end{aligned}$$

(Integral II) $\int u^3 :$

Como $(a + b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3$ se tiene

$$\begin{aligned}
\int u^3 &= \int \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^3 \\
&= \int \frac{m^3}{T^6} + \int \frac{3m^2}{T^4} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\
&\quad + \int \frac{3m}{T^2} \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\
&\quad + \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^3 \\
&= \int \frac{m^3}{T^6} + \frac{3m^2}{T^4} \int \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\
&\quad + \frac{3m}{T^2} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\
&\quad + \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^3.
\end{aligned}$$

Sabemos que

$$1) \int \frac{m^3}{T^6} = \frac{m^3}{T^6} T^2 = \frac{m^3}{T^4}$$

$$2) \frac{3m^2}{T^4} \int \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] = 0 \text{ ya}$$

que

$$\int \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] = 0$$

$$3) \frac{3m}{T^2} \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2$$

$$= \frac{3m}{T^2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right]$$

$$= \frac{3m}{2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right],$$

ya que

$$\int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 = \frac{T^2}{2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right].$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) \int e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{x}} \\
& + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) \int e^{\frac{2\pi i}{T}(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{x}} \\
& + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) \int e^{\frac{-2\pi i}{T}(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{x}}
\end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned}
& = \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) \cdot 0 \right. \\
& + \left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) T^2 \delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} + \left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) T^2 \delta_{(\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_3)} \\
& + \left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) T^2 \delta_{(\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)} + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) T^2 \delta_{(\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)} \\
& + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) T^2 \delta_{(\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_3)} + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) T^2 \delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} \\
& \left. + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) \cdot 0 \right) \\
& = \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(T^2 \delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} \left(\left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) \right) \right. \\
& + T^2 \delta_{(\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_3)} \left(\left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) \right) \\
& \left. + T^2 \delta_{(\mathbf{k}_1=\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)} \left(\left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) \right) \right) \\
& = \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(3T^2 \delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} \left(\left(\frac{a_{k_1}-b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}-b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}+b_{k_3}i}{2}\right) + \left(\frac{a_{k_1}+b_{k_1}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_2}+b_{k_2}i}{2}\right)\left(\frac{a_{k_3}-b_{k_3}i}{2}\right) \right) \right) \\
& = \frac{3T^2}{8} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} \left((a_{k_1}-b_{k_1}i)(a_{k_2}-b_{k_2}i)(a_{k_3}+b_{k_3}i) \right. \right. \\
& \left. \left. + (a_{k_1}+b_{k_1}i)(a_{k_2}+b_{k_2}i)(a_{k_3}-b_{k_3}i) \right) \right) \\
& = \frac{3T^2}{8} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3} - a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}i - a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}i - a_{k_3}b_{k_1}b_{k_2} \right. \\
& + a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3} + a_{k_1}a_{k_3}b_{k_2}i + a_{k_2}a_{k_3}b_{k_1}i - a_{k_3}b_{k_1}b_{k_2} \\
& + a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}i + a_{k_1}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}b_{k_1}b_{k_3} - b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}i \\
& \left. - a_{k_1}a_{k_2}b_{k_3}i + a_{k_1}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}b_{k_1}b_{k_3} + b_{k_1}b_{k_2}b_{k_3}i) \right) \\
& = \frac{3T^2}{8} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (2a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3} - 2a_{k_3}b_{k_1}b_{k_2} + 2a_{k_1}b_{k_2}b_{k_3} + 2a_{k_2}b_{k_1}b_{k_3}) \right) \\
& = \frac{3T^2}{4} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{k_1}a_{k_2}a_{k_3} - a_{k_3}b_{k_1}b_{k_2} + a_{k_1}b_{k_2}b_{k_3} + a_{k_2}b_{k_1}b_{k_3}) \right).
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\int u^3 = \frac{m^3}{T^4} + \frac{3m}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \right] \\ + \frac{3T^2}{4} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right).$$

(Integral III) $\int u^2$:

Ya que $(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$ se tiene

$$\int u^2 = \int \left(\frac{m}{T^2} + \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ = \int \frac{m^2}{T^4} + \int \frac{2m}{T^2} \sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \\ + \int \left(\sum_{\mathbf{k} \in I_k} \left[\frac{a(k_1, k_2) - b(k_1, k_2)i}{2} e^{\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{a(k_1, k_2) + b(k_1, k_2)i}{2} e^{-\frac{2\pi i}{T} \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] \right)^2 \\ = \frac{m^2}{T^4} T^2 + 0 + \frac{T^2}{2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right] \\ = \frac{m^2}{T^2} + \frac{T^2}{2} \sum_{k_1, k_2} \left[((a_k)^2 + (b_k)^2) \right].$$

Ya que tenemos todas las componentes del potencial $W(u) = (u(1-u))^2$, ahora integramos:

$$\frac{1}{\varepsilon} \int W(u) = \frac{1}{\varepsilon} \int u^4 - \frac{2}{\varepsilon} \int u^3 + \frac{1}{\varepsilon} \int u^2 \\ = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{m^4}{T^6} + 3 \frac{m^2}{T^2} \sum_{\mathbf{k}} ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \right. \\ \left. + 3m \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right) \right. \\ \left. + \frac{T^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \sum_{\mathbf{k}_4} \left(\delta_{(\mathbf{k}_4=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_4} \right. \right. \\ \left. \left. + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} - b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4}) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{4} \delta_{(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} \right. \right. \\ \left. \left. + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} + b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2}) \right) \right) \\ - \frac{2}{\varepsilon} \left(\frac{m^3}{T^4} + \frac{3m}{2} \sum_{\mathbf{k}} ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{3T^2}{4} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right) \\
& + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{m^2}{T^2} + \frac{T^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \right)
\end{aligned}$$

Por lo tanto el potencial W es de la forma

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\varepsilon} \int W(u) &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{m^4}{T^6} - \frac{2m^3}{T^4} + \frac{m^2}{T^2} \right) \\
& + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{3m^2}{T^2} - 3m + \frac{T^2}{2} \right) \sum_{\mathbf{k}} ((a_{\mathbf{k}})^2 + (b_{\mathbf{k}})^2) \\
& + \frac{1}{\varepsilon} \left(3m - \frac{3T^2}{2} \right) \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \left(\delta_{(\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} \right. \\
& \left. + a_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3}) \right) \\
& + \frac{1}{\varepsilon} \frac{T^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \sum_{\mathbf{k}_4} \left(\delta_{(\mathbf{k}_4=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} \right. \\
& + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} - a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} \\
& - a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} - b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4}) + \frac{3}{4} \delta_{(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4)} (a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \\
& + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} + a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_3} \\
& \left. + b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} - a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2}) \right).
\end{aligned}$$

Bibliografía

- [1] S. Alama, L. Bronsard, I. Topaloglu y A. Zuniga. “A nonlocal isoperimetric problem with density perimeter.” En: *Calc. Var.* 60:1 (2021). URL: <https://doi.org/10.1007/s00526-020-01865-8>.
- [2] G. Gamow. “Mass defect curve and nuclear constitution.” En: *Proc.R.Soc.Lond. A* 126(803) (1930), págs. 632 -644.
- [3] S. Alama, L. Bronsard, R. Choksi e I. Topaloglu. “Droplet breakup in the liquid drop model with background potential.” En: *Communications in Contemporary Mathematics* 21.3 (2019), pág. 1850022. URL: <https://doi.org/10.1142/S0219199718500220>.
- [4] M. Bonacini y R. Cristoferi. “Local and global minimality results for a nonlocal isoperimetric problem on \mathbb{R}^n .” En: *SIAM J. MATH. ANAL.* 46.4 (2014), págs. 2310 -2349. URL: <https://doi.org/10.1137/130929898>.
- [5] R. CHoksi y M. Peletier. “Small volume fraction limit of the diblock copolymer problem: I. Sharp-interface functional.” En: *SIAM J. MATH. ANAL.* 42.3 (2010), págs. 1334-1370. URL: <https://doi.org/10.1137/090764888>.
- [6] A. Figalli, N. Fusco, F. Maggi, V. Millot y M. Morini. “Isoperimetry and stability properties of balls with respect to nonlocal energies.” En: *Commun. Math. Phys.* 336.1 (2015), págs. 441-507. URL: <https://doi.org/10.1007/s00220-014-2244-1>.
- [7] R.L. Frank, R. Killip y P.T Nam. “Nonexistence of large nuclei in the liquid drop model.” En: *Lett. Math. Phys.* 106.8 (2016), págs. 1033-1036. URL: <https://doi.org/10.1007/s11005-016-0860-8>.
- [8] R.L. Frank y E.H. Lieb and. “A compactness lemma and its application to the existence of minimizers for the liquid drop model.” En: *SIAM J. MATH. ANAL.* 47.6 (2015), págs. 4436-4450. URL: <https://doi.org/10.1137/15M1010658>.
- [9] V. Julin. “Isoperimetric problem with a Coulomb repulsive term.” En: *Indiana Univ. Math. J.* 63.1 (2014), págs. 77-89. URL: <https://doi.org/10.1512/iumj.2014.63.5185>.
- [10] V. Julin. “Remark on a nonlocal isoperimetric problem.” En: *Nonlinear Anal.* 154 (2017), págs. 174-188. URL: <https://doi.org/10.1016/j.na.2016.10.011>.
- [11] H. Knüpfer y C.B. Muratov. “On an isoperimetric problem with a competing nonlocal term II: the general case.” En: *Commun. Pure Appl. Math* 67.12 (2014), págs. 1974-1994. URL: <https://doi.org/10.1002/cpa.21479>.

- [12] H. Knüpfer y C.B. Muratov. “Low density phases in a uniformly charged liquid.” En: *Commun. Math. Phys.* 345.1 (2016), págs. 141-183. URL: <https://doi.org/10.1007/s00220-016-2654-3>.
- [13] J. Lu y F. Otto. “Nonexistence of a minimizer for Thomas-Fermi-Dirac-vonWeizsäcker model.” En: *Commun. Pure Appl. Math.* 67.10 (2014), págs. 1605-1617. URL: <https://doi.org/10.1002/cpa.21477>.
- [14] C.B. Muratov y A. Zaleski. “On an isoperimetric problem with a competing non-local term: quantitative results.” En: *Ann. Global Anal. Geom.* 47 (2014), págs. 63-80. URL: <https://doi.org/10.1007/s10455-014-9435-z>.
- [15] X. Ren y J. Wei. “Double tori solution to an equation of mean curvature and Newtonian potential.” En: *Calc. Var. Partial Differ. Equ.* 49.3-4 (2014), págs. 987-1018. URL: <https://doi.org/10.1007/s00526-013-0608-6>.
- [16] F. Générault y E. Oudet. “Large Volume Minimizers of a Nonlocal Isoperimetric Problem: Theoretical and Numerical Approaches.” En: *SIAM J. MATH. ANAL.* 50.3 (2018), págs. 3427-3450. URL: <https://doi.org/10.1137/17M1139400>.
- [17] A. Braides. “Gamma-Convergence for Beginners.” En: *Clarendon Press, Oxford*. Vol. 22 (2002).
- [18] A. Wächter y L. T. Biegler. “On the implementation of a primal-dual interior point filter line search algorithm for large-scale nonlinear programming”. En: *Math. Program.* 106 (2016), págs. 25-27.
- [19] B. Fuglede. “Stability in the isoperimetric problem for convex or nearly spherical domains in \mathbb{R}^n .”. En: *Trans. Am. Math. Soc.* 314 (1989), págs. 619 -638.
- [20] M. Bonacini y H. Knüpfer. “Ground states of a ternary system including attractive and repulsive Coulomb-type interactions.” En: *Calc. Var. Partial Differ. Equ.* 55(5) (2016), pág. 114.
- [21] Zirui Xu y Qiang Du. “Bifurcation and fission in the liquid drop model: a phase-field approach.” En: *J. Math. Phys.* 64, 071508 (2023).
- [22] R. L. Frank y E. H. Lieb. “A compactness lemma and its application to the existence of minimizers for the liquid drop model.” En: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 47(6) (2015), págs. 4436-4450.
- [23] Killip R. Frank R. L. y P. T. Nam. “Nonexistence of large nuclei in the liquid drop model.” En: *Letters in Mathematical Physics* 106 (2016), págs. 1033 -1036.
- [24] Muratov C. B. Choksi R. e I. Topaloglu. “An old problem resurfaces nonlocally: Gamow’s liquid drops inspire today’s research and applications.” En: *Notices of the AMS* 64(11) (), págs. 1275-1283.
- [25] Robert V. Kohn y Peter Sternberg. “Local minimisers and singular perturbations.” En: *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh Section A: Mathematics* IIIA (1989), págs. 69-84.
- [26] E. M. Stein. “Singular Integrals and Differentiability Properties of Functions.” En: *Princeton University Press* Princeton NJ. (2016).

- [27] Gould N. I. M. Leyffer S. Toint Ph. L. Wachter A. Fletcher R. “Global convergence of a trustregion SQP-filter algorithms for general nonlinear programming.” En: *SIAM Journal on Optimization* 13(3) (2002), págs. 635-659.
- [28] Biegler L. T. Wachter A. “Line search filter methods for nonlinear programming: Motivation and global convergence.” En: *Technical Report RC 23036, IBM T.J. Watson Research Center, Yorktown Heights, USA* (2001; revised 2004).