

**Computación Científica**

Dr. Carlos Barrón Romero  
 Área de Álgebra, Geometría y Computación Científica  
 Departamento de Ciencias Básicas  
 UAM - Azcapotzalco

Roland Glowinski (1937-2022)  
 DASSAULT AVIATION FALCON 30

Lunes de Matemáticas en la UAM  
 6 de Mayo de 2024  
 Auditorio General de la UAM, CDMX. 20:00 a 22:00

1

**Resumen**

Cómputo Científico significa usar Matemáticas y Computación para estudiar problemas y preguntas de Ciencia y Tecnología.  
 ¿De qué está hecho el mundo y el universo?  
 Espacio, ondas, partículas y cúmulos de partículas.  
 Las ondas y señales nos rodean y son parte cotidiana de nuestra vida e interacciones de comunicación, visión, sensaciones y percepción de todo que nos rodea y vivimos, por ejemplo, para ser "buena onda". La teoría y filosofía del atomismo de la antigua Grecia, aún en nuestros días facilita el estudio y las investigaciones de la materia y las nano estructuras a través de átomos o "partículas".  
 En particular, se presenta resultados de dos proyectos:  
 1) Control Aproximado la ecuación de onda Clásica y semilineal cúbica. Proviene de la escuela de Roland Glowinski (1937-2022) y de un problema planteado por Jacques-Louis Lions (1928-2011) y es el tema de la tesis de Maestría en Ciencias de la Computación del Ing. Salvador Castillo Alvaraz.  
 2) Nano estructuras de partículas sobre potenciales tipo de Van Der Waals. Investigación de Estructuras de mínimo potencial que tiene su renacimiento en el seminal artículo de J. A. Northby (1987) "Structure and binding of Lennard-Jones. 153ns147".  
 La plática es a nivel difusión de la Computación Científica destaca la metodología Matemática y Computacional en el estudio y comprensión de fenómenos y posibles aplicaciones en Física, Química, Nano Materiales y Computación Cuántica.

2

**Metodología**

La Computación Científica realiza modelación computacional y es una gran herramienta que contribuye a la investigación en Física y Química, aporta e interacciona con la experimentación y es substancial por sus aportes científico, tecnológicos y económicos para el desarrollo de las áreas experimentales y teóricas de la Física y Química.

Notas: El software de Cómputo Científico es de importancia estratégica para estar a la vanguardia en investigación y juega un papel crucial para la independencia tecnológica de los países. En mi opinión: **Es mejor desarrollarlo que adquirirlo bajo licencias restrictivas.**

Matemáticas Discretas  
 Cálculo Variacional  
 Control Óptimo sobre EDP  
 Métodos Numéricos  
 Optimización

Modelos  
 Funciones  
 Ecuaciones Diferenciales

3

**Enfoque clásico**

Gravitación clásica  
 Potencial de una partícula a distancia  $r$  de la  $M$  (masa puntual en el origen)  
 $V(r) = -GM\frac{m}{r}$

Predice colapso de la materia y órbitas de planetas

¿Por qué existe la materia?

Colapso del electrón  
 ¿Por qué existe el espacio-tiempo?

Mecánica Cuántica  
 No hay colapso del electrón  
 Órbitas de energía discreta (REMPE)  
 Dualidad partícula-onda  
 Ecuación de onda  
 Principio de incertidumbre

4

**Relatividad General**

¿Por qué existe el espacio-tiempo?

The Einstein field equations are  
 $G_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} = \kappa T_{\mu\nu}$   
 where  $G_{\mu\nu}$  is the Einstein tensor,  $\Lambda$  is the cosmological constant (sometimes taken to be zero for simplicity),  $g_{\mu\nu}$  is the metric tensor,  $\kappa$  is a constant, and  $T_{\mu\nu}$  is the stress-energy tensor.

Solución de Schwarzschild  
 In Schwarzschild coordinates  $(t, r, \theta, \phi)$  the Schwarzschild metric (or equivalently, the line element for proper time) has the form  
 $ds^2 = c^2 dt^2 - \left(1 - \frac{r_s}{r}\right) dr^2 - r^2 d\Omega^2$   
 where  $d\Omega^2$  is the metric on the two sphere, i.e.  $d\Omega^2 = (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2)$ .

Referencia: [https://en.wikipedia.org/wiki/Solutions\\_of\\_the\\_Einstein\\_field\\_equations](https://en.wikipedia.org/wiki/Solutions_of_the_Einstein_field_equations)

5

**Motivación para el estudio de nanoestructuras**

Creación de nuevos materiales

- Cuasi cristales
- Gases nobles
- Clústeres metálicos, cobre, oro y aluminio
- Computación cuántica.
- Mejorar el entendimiento de formación de materiales
- LJ y Morse son modelos simples con gran poder predictivo
- Clasificación e identificación geométrica

Nano máquinas

- Potencial de energía de la superficie (PES)
- Virus, muchas interacciones dependen de su forma y estructura
- Diseño de Nanoestructuras
- Conductividad y trampas de partículas

Computación Cuántica

- 2020066: Google: Articles about clusters of Lennard-Jones. About 240,000 results (0.47 seconds)
- 2021006: Google: Articles about clusters of Lennard-Jones. Cerca de 525,000 resultados (0.48 segundos)
- 2022001: Google: Articles about clusters of Lennard-Jones. Cerca de 393,000 resultados (0.27 segundos)
- 2020002: Google: Articles about clusters of Lennard-Jones. Aproximadamente 190,000 resultados (0.19 s)

6

**Creación Nanoestructuras**

Aplicación de Técnicas de Microscopía de Fuerza Atómica y Ultrasónica en Hidrogeles Poliméricos, July 2014, Angelo Lusuardi

Lo nuevo para el diseño es usar la fuerza de interacción para empujar las partículas a lugares deseados

7

**Nanoestructuras y medicina**

Desarrollan método con polímeros naturales para el tratamiento de quemaduras

El procedimiento consiste en combinar metales y sales con nanopartículas para crear películas delgadas que cubren y sellan las heridas, señala Crábelo Luna

FERNANDO CAMACHO SERVIN  
 Líder de desarrollo de papel en estas investigaciones de la Red de Estudios María Crábelo Luna, Laboratorio de Nanotecnología del Instituto Nacional de Salud del Estado

8

**Fuerzas intermoleculares atractivas o repulsivas**

¿Por qué existe la materia?

Interacción de Van Der Waals  
 Potencial de un par de partículas a distancia  $r$ .

Buckingham Potential (BU)  
 $V(r) = A e^{-B/r} - C/r^6$   
 where  $A$ ,  $B$ , and  $C$  are parameters for this type of potential.

Kihara Potential (KI)  
 $V(r) = A \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^{10} \right] - \frac{C}{r^6}$   
 where  $A$ ,  $r_0$ , and  $C$  are parameters for this type of potential.

Lennard-Jones potential (LJ)  
 $V(r) = \epsilon \left[ \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{12} - \left( \frac{r}{\sigma} \right)^6 \right]$   
 where  $\epsilon$  and  $\sigma$  are parameters for this type of potential.

Morse Potential (MO)  
 $V(r) = D \left[ 1 - e^{-a(r-r_e)} \right]^2 - D$   
 where  $D$  is a parameter.

Pozo de potencial

1. No se fusionan las partículas,  $e=0$  se repelen
2. Valle de equilibrio alrededor de  $r^*$ . Conjunto B (bonded set) aristas de distancia cercana a  $r^*$ . Conjunto NB de aristas-diagonales de distancia mucho mayor a  $r^*$ .
3. Zona asimétrica de baja atracción

Basado en [9], C. D. Murray and C. A. Flinn, Global minimum Potential Energy Curve method of Small Molecules, *Journal of Global Optimization*, 4:217-235, 1994.

Peso de potencial: P. M. Pardalos, D. Shalaginov, and G. L. Xue, Optimization methods for computing global minima of nonconvex potential-energy functions, *Journal of Global Optimization*, 4(2):117-133, 1994.

9

### Normalización del Potencial de Lennard Jones

Lennard Jones (LJ)  
 $U(r) = 4\epsilon \left( \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{12} - \left(\frac{r}{\sigma}\right)^6 \right)$ , con  $\epsilon = \sigma = 1$   
 Mínimo:  $\frac{d}{dr} \left( \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{12} - \left(\frac{r}{\sigma}\right)^6 \right) = \frac{24}{r^7} \left( \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{12} - 2 \left(\frac{r}{\sigma}\right)^6 \right) = 0$   
 Soluciones:  $\sqrt[6]{2}$ ,  $\sqrt[6]{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \right)$ ,  $\sqrt[6]{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \right)$ ,  $-\sqrt[6]{2}$ ,  $-\sqrt[6]{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \right)$ ,  $-\sqrt[6]{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \right)$

LJ Normalizado  
 $LJ(r) = \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{12} - \left( \frac{r}{\sigma} \right)^6$   
 Mínimo:  $\frac{d}{dr} \left( \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{12} - \left(\frac{r}{\sigma}\right)^6 \right) = \frac{24}{r^7} \left( \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{12} - 2 \left(\frac{r}{\sigma}\right)^6 \right) = 0$   
 Soluciones:  $1$ ,  $\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}$ ,  $-1$ ,  $-\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2}$ ,  $-\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}$

Verificaciones por casos  
 $U(r) = 4 \left( \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{12} - \left(\frac{r}{\sigma}\right)^6 \right)$ ,  $LJ(r) = \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{12} - \left( \frac{r}{\sigma} \right)^6$   
 $U'(2) = -1$ ,  $LJ'(1) = -1$   
 $LJ(2) = -\frac{13}{16}$ ,  $U(2/2) = -\frac{13}{16}$   
 $U(4) = -\frac{13}{16}$ ,  $LJ(4/2) = -\frac{13}{16}$

Por Algebra se cumple:  
 $U(\sqrt{2}) = LJ(r)$ ,  $LJ(r/\sqrt{2}) = U(r)$

Reducción de parámetros  
 Simplificación por cambio de métrica (G. L. Xue ?) de  $r^* = \sqrt{2}$  a  $r^* = 1$

10

### Potenciales de pozo de LJ y MO, MR

$LJ(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$   
 $M(r) = e^{a(1-r)} (e^{a(1-r)} - 2)$   
 $MR(r) = M(6, r)$   
 $MO(r) = M(5.3554, r)$

- No se fusionan las partículas,  $r > 0$  se repelen
- Valle de equilibrio alrededor de  $r^*$ . Conjunto B (bond) aristas en (0.7, 1.3). Conjunto NB de aristas-diagonales de distancia  $\geq 1.3$
- Zona asintótica de baja atracción,  $r \geq 1.3$

Bonded set (B): C. D. Maranas and C. A. Floudas. Global minimum Potential Energy Conformations of Small Molecules. Journal of Global Optimization, 4(2):135-170, 1994.

Pozo de potencial: F. M. Randos, D. Shalloy, and G. L. Xue. Optimization methods for computing global minima of nonconvex potential-energy functions. Journal of Global Optimization, 4(2):117-133, 1994.

11

### Problema de optimización local de clústeres

$PT(C_n) = \min \sum_{1 \leq i < j \leq n} v_{ij}$   
 donde  
 $v_{ij} = MR(r_{ij}), LJ(r_{ij}), MO(r_{ij})$   
 $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$   
 $(x_k, y_k, z_k), k = 1, \dots, n$

$C_n = \{p_1, \dots, p_n\}, p_i \in \mathbb{R}^3$ , coordenadas arbitrarias dadas,  $n$  es el número fijo de partículas. Las coordenadas del óptimo local se obtienen de  
 $OPT_n = \arg \min \sum_{1 \leq i < j \leq n} v_{ij}$

$OPT_n$  es un clúster óptimo local del potencial PT,  $OPT_n = \{a_1, \dots, a_n\}, a_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3$  son las coordenadas de la configuración local mínima de PT y se comporta como un punto estacionario, o sea, no cambian al repetir la minimización.

Un grafo completo  $K_n$  representa al clúster de  $n$  partículas, ya que sus aristas corresponden con todas las interacciones de pares de elementos que aportan al potencial.

ILJ34\_N5BT,  $K_{34}$   
 $LJ(ILJ34) = -150.0445$

12

### Problema global de n partículas de mínimo potencial

$PT(C_n) = \min_{\text{Todos los clústeres de tamaño } n} \min \sum_{1 \leq i < j \leq n} v_{ij}$   
 donde  $v_{i,j} = PT(p_i, p_j), p_i \in \mathbb{R}^3, n$  número de partículas y PT puede ser MR, LJ, MO u otro potencial

Una estrategia es resolver los problemas creciendo o decreciendo el número de elementos 2,3,4,...,n...

Los posibles óptimos globales (OPT<sub>n</sub>) de PT corresponden con los IPT<sub>n</sub> de menor potencial PT encontrado hasta el momento.

LJ(ILJ34\_1)=-148.4022    LJ(ILJ34\_2)=-142.3567    oLJ34\_N5BT    LJ(oLJ34)=-150.0445

13

### Visualización de clústeres

Conjunto B: Aristas de distancia en (0.7, 1.3)

oLJ34,  $K_{34} \supseteq (oLJ34, B(oLJ34))$     Representación convencional sin los enlaces de B entre capas

Las aristas que no están en B se denominan diagonales y forman el conjunto NB.

$PT(IPT) = PT(B(IPT)) + PT(NB(IPT))$

El potencial se descompone en las aportaciones de las ligas (aristas-bonds) de B y de las diagonales de NB (aristas de distancia  $\geq 1.3$ ).

14

### Resultados (1): Contribuciones de B y NB al potencial

Conjunto B: Aristas de distancia en (0.7, 1.3)

$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|B(OPT_n)|}{|A(OPT_n)|} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{12n}{(n^2)} = 0$ , oMR55, oLJ55, oMO55

$|A|$  es el total de aristas  
 $PT(IPT) = PT(B(IPT)) + PT(NB(IPT))$

- B aporta el 70% de LJ, 83% de MO y 87% para MR.
- |B| es cada vez más insignificante que el total de aristas.

Bonded set (B): C. D. Maranas and C. A. Floudas. Global minimum Potential Energy Conformations of Small Molecules. Journal of Global Optimization, 4(2):135-170, 1994.

15

### Buen clúster mínimo local

Propiedades de clústeres de n partículas ( $n \geq 4$ ):

- $G(IPT_n, B(IPT_n))$  es un subgrafo conexo de  $K_n$ , además, los vértices de  $B(IPT_n)$  son todos los vértices de  $IPT_n$
- $G(IPT_n, B(IPT_n))$ ,  $3 \leq \text{grado}(\text{vértices}) \leq 12$
- Punto estacionario bajo la función argumento de la minimización:  $IPT_n = \arg \min PT(IPT_n)$

Malos clústeres  
 No tienen estructura definida  
 Los vértices de  $B(IPT_n)$  no son todos los vértices de  $IPT_n$   
 Los grupos son grupos de partículas en el valle de equilibrio que están distantes de otros vecinos, o sea no interactúan y no desaparecen por estar ligados fuertemente entre ellos  
 Potencial "grande", con nula posibilidad de ser mínimo global

16

### Ventajas de la geometría sobre B

- Identificación
- Comparación
- Clasificación

a) Overlaying oMER3 (solid) and oMER7 (new frame).    b) Particula difference between oMER7 and oMER3.

17

### Minimización LBFGS

Modelo de minimización cuadrático de memoria reducida:  
 $m_k(x) = f(x_k) + g_k^T(x - x_k) + 1/2(x - x_k)^T B_k(x - x_k)$   
 donde  $x$  es el mínimo local,  $x_k$  es su aproximación,  $g_k$  gradiente,  $B_k$  es una aproximación limitada de la matriz del Hessiano de la función del problema.

Aproximación de Taylor de 2do Orden  
 $LJ(x+h) = LJ(x) + \nabla LJ(x)h + 1/2h^T \nabla^2 LJ(x)h + o(h^3)$

Las soluciones cumplen:  
 $\nabla LJ(x^*) \approx 0$  y  $LJ(x^*) \leq LJ(x^* + d)$   
 donde  $\|d\| \ll 1$ .

J. L. Morales and J. Nocedal por algorithm 778. L-BFGS-B. Fortran subroutines for large-scale bound constrained optimization, 2011.

18

### Codificación Fenótica

Individuo = Cadena de partes o órganos o individuos

Cluster = conjunto de puntos en coordenadas 3D

0.0	0.5	0.354
-0.5	0.0	-0.354
0.5	0.0	-0.354
0.0	-0.5	0.354

19 / 80

19

### Algoritmo evolutivo por fenotipo

C. Barrón, S. Gómez, D. Romero. A Genetic Algorithm for Lennard-Jones Clusters. Applied Mathematics Letters, 12(7): 85-90, 1999.\*

Las operaciones son con las coordenadas 3D de los clústeres o latices.

Problemas:  
Posible preferencia por repetir clústeres con estructuras conocidas de la base de datos de los posibles clústeres óptimos.  
Las coordenadas de dos partículas muy cercanas pueden generar overflow.

20 / 80

20

### Algoritmo Evolutivo

**Genotipo (número de partícula)**

**Espacio de búsqueda**

**Clústeres óptimos**

**Latice cúbica (CB $\frac{1}{2}$ )**

**Latice CIF**

**Fitness = Minimización**

$L(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6}$

$M(r) = e^{(1-r)^2} (e^{(1-r)^2} - 2)$

$M(r) = M(r)$

$M(r) = M(0.354 \cdot r)$

Preservando los de mínimo potencial

21 / 80

21

### Codificación Genética

Abstracción de los objetos de estudio o individuos por cadenas de un alfabeto

Individuo = Cadena de genes en una base apropiada de un alfabeto

0,5,7,19,25,27,52,55,58,89,92,95,124

Cluster = cadena de índices de una latice

Codificación genética por los índices de CB $\frac{1}{2}$  de 20479 partículas o bien por los índices de CIF de 20479 partículas, donde las partículas de las latices se enumeran del centro a las capas exteriores.

22 / 80

22

### Algoritmo evolutivo

**Fenotipo**

Cruza

Mutación

Penado

Minimización

Selección del de mínimo potencial

Orientado a la geometría

**Genotipo**

Combinación del DNA de clústeres o de latice

0,5,7,19,25,27,52,55,58,89,92,95,124

1, 11, 17,26,28,33,38,43,48,73,76,79, 100, 105,110,116,120,347

0, 5, 7, 19, 25, 27, 31,182, 279, 284,290, 292,295,304,314,323,332,342,348,740

0,5,7,19,25,27,52,55,58,89,92, 100, 105,110,116,120,347, 323,332,342,740

Minimización

Selección del de mínimo potencial

**+ EFICIENCIA**

23 / 80

23

### Problema del espacio de búsqueda

Determinar un espacio de búsqueda de los cúmulos de mínimo potencial

¿? ¿? ¿? ¿?

- Completo: Que contenga todos los cúmulos de mínimo potencial
- Eficiente: Que sea "fácil" de construir y de usar
- Seria deseable que ayude en el proceso de minimización

24 / 80

24

### Espacio de búsqueda

- Construir clústeres con coordenadas aleatorias
- Construir clústeres de todas las latices posibles
- I. A. Solov'yov, A. V. Solov'yov, and W. Greiner. Fusion process of Lennard-Jones clusters: global minima and magic numbers formation. *ArXiv Physics e-prints*, 2003.
- Dodecahedral Icosahedral Octahedral Tetrahedral
- IF=IC+FC IC IR CB $\frac{1}{2}$  CIF=IF+Rot IFY2

33 J.A. Northby. Structure and bonding of Lennard-Jones clusters. 13, 116-141, *Journal of Chemical Physics*, 81(1),6168-6177, 1985.

25 / 80

25

### Espacio de búsqueda y métodos eficientes para la determinación de clústeres óptimos de Lennard Jones

8 de abril de 2005

El cono de helado

MIF1739  $\subset$  IF9483

Posibles clústeres óptimos globales de LJ están en MIF1739

26 / 80

26

### Latice CB

Todas las buenas configuraciones conocidas de mínimo potencial de 2 a 2063 partículas

Conjetura: ¿Contiene la latice CB $\frac{1}{2}$  todos los clústeres que convergen por minimización a todos los buenos clústeres de mínimo potencial?

CB $\frac{1}{2}$

27 / 80

27

### Nueva lattice CIF

Northby in [33] dijo "Anticipating future" será útil juntar las latices "IC" y "FC" en la latices IF

Barrón: La latices CIF es la latices IF mas la mitad CIF rotada para los clústeres de núcleo N12IR o N13IR

Rot IFY/2

33. J.A. Northby, Structure and Binding of Lennard-Jones clusters: 13 to n=147, Journal of Chemical Physics, 97(10):6164-677, 1992

28

### Resultados (2)

#### Conjetura resuelta

Todos los buenos mínimos clústeres provienen de la latices CB½ o de la latices CIF

Minimización

Matching

Hay similitudes y diferencias entre los clústeres óptimos para MR, LJ y MO

Artículo en preparación: Geometría y transformaciones entre las latices CB½ y CIF para los supuestos clústeres de mínimo potencial de Morse y LJ

29

### Cobertura de los clústeres

Para los buenos clústeres mínimos posiblemente globales la función  $r(n)$  (punto raya negro) determina el radio de una esfera

$$r(n) = 0.52n^{0.35} + 0.3$$

Proporciona los radios de esferas de CB½ que cubren a los buenos clústeres para MR (rojo), LJ (verde), MO (azul)

30

### Espacios de búsqueda para 1D, 2D y 3D

1D: Recta, distancia  $\approx 1$

2D: Triángulos y hexágonos

3D: Puntos de CB½, Lattice Cúbica de Bravais

Minimización

Matching

Hay similitudes y diferencias entre los clústeres óptimos para MR, LJ y MO

31

### Ancho de la vecindad de convergencia

$$LJ(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$$

$$M(a,r) = e^{a(1-r)}(e^{a(1-r)} - 2)$$

Desarrollo de Taylor

$$f(r^* + h) = f(r^*) + hf'(r^*) + \frac{h^2}{2}f''(r^*) + o(h^3)$$

Note  $h = 0.1, 36h^2 = 0.36$

La exploración de CB½ abarca todos los buenos clústeres.

32

### Creación cluster CB de un cluster óptimo local

Para los (i) Vertices de un cluster óptimo local:

```

coordenadaX==Vertice[i].X;
coordenadaY==Vertice[i].Y;
coordenadaZ==Vertice[i].Z;
Punto CB[i]=Punto(Redon(coordenadaX),
Redon(coordenadaY),
Redon(coordenadaZ));
sum<=sum+Distancia(Vertice[i],CB[i]);
Fin_para
REGRESA:
Norma<=sum/NúmerodeVertices;
Cluster CB ½;
Donde Redon() es la función que redondea a 0.5 o sea a puntos de CB½;
La "Norma" es menor a
Ancho 0.3333 de LJ
Ancho 0.3333 de MR
Ancho 0.37346 de MO

```

33

### Equivalencia entre latices CB½ y CIF

Lattice CIF de 20479 vértices

Cluster de latices CIF LJ(55\_CIF)=277.0493

Minimización

Matching

Minimización

Possible cluster mínimo global LJ(oLJ55\_N13IC)=279.2485

Lattice CB½ de 20479 vértices

oCB55 de oLJ55\_N13IC, LJ(oCB55)=1004.6763

34

### The oLJ13\_N13IC cluster is the global minimum cluster of the Lennard Jones potential for 13 particles

• Dr. Carlos Barrón Romero

• 02 December 2022

• 09h00-11h20

• 2022 International Conference on Electronics, Control, Optimization and Computer Science (ICECOCS)

Carlos Barrón Romero. The oLJ13\_N13IC cluster is the global minimum cluster of Lennard Jones potential for 13 particles. 2022 IEEE 3rd International Conference on Electronics, Control, Optimization and Computer Science (ICECOCS), Fez, Morocco, 2022, pp. 1-6, doi: 10.1109/ICECOCS55148.2022.9982910. <https://ieeexplore.ieee.org/document/9962910>

35

### Geometría

Grafo  $G=(V,A)$  donde  $V$  es un conjunto finito de vértices (puntos  $(x_i, y_i, z_i)$  en 3D) y  $A$  es un conjunto de ligas entre vértices. Una cara (C) en 3D es una superficie de al menos 3 vértices coplanares. Los buenos clústeres cumplen (V,B):  $B \subset A$  cuyas aristas tienen longitud en  $(0.7, 1.3)$ .

Grafo en 3D que cumple la ecuación característica de Euler que relaciona la cardinalidad de los vértices, caras y aristas:

$$V + C = A + 2$$

Cubo:  $V=8, C=6, A=12$

No se consideran subdivisiones de caras

$$V + C = A + 2$$

$$1 + 1 = 1 + 2 = 3$$

36

### Local optimality of the cores N13CPA

**N13CPA\_ABA**  
 $|K_{13}|=78, |B|=36, |NB|=42$   
 Núcleo N13CPA\_ABA  
 $LJ(B)=-35.8436$   
 $LJ(NB)=-5.0779$   
 $LJ(ILJ13)=-40.9215$

**N13CPA\_ABC**  
 $|K_{13}|=78, |B|=36, |NB|=42$   
 Núcleo N13CPA\_ABC  
 $LJ(B)=-35.8559$   
 $LJ(NB)=-5.0247$   
 $LJ(ILJ13)=-40.8845$

The 7-particle hexagonal flat cluster maintains its shape by adding 6 particles in equilateral triangles, with the same or opposite direction.

$LJ(oLJ13\_N13C)=-44.3268$

37

### Euler's characteristic

Figura	V	E	C	LJ	LJ(Cluster)	IR
N12C	12	25	13	29.8032	LJ(ILJ13,N12C)=-41.5552	37
N13CPA_ABA	12	24	14	28.9088	LJ(ILJ13,N13CPA_ABA)=-40.9215	36
N13CPA_ABC	12	24	14	28.9544	LJ(ILJ13,N13CPA_ABC)=-40.8845	36
N12HEXPRISM	12	24	14	28.5562	LJ(ILJ13,N12HEXPRISM)=-37.2092	36
N12HEXPRISM	12	18	8	22.5729	LJ(ILJ13,N12HEXPRISM)=-32.6079	30
N12C	12	20	20	33.3973	LJ(oLJ13,N12C)=-44.3268	42
oLJ13N7PBP	12	20	20	27.9676	LJ(oLJ13,N13C)=-44.3268	42

$LJ(oLJ13\_N13C)=-44.3268$

38

### Resultados (3)

El cúmulo oLJ13\_N13C es el cúmulo mínimo global del potencial de Lennard-Jones para 13 partículas.

Este es el primer resultado de optimalidad global para el potencial de Lennard-Jones para  $n > 4$ .

Artículo publicado en IEEE 3rd International Conference on Electronics, Control, Optimization and Computer Science (ICECOCS) Diciembre 1-2, 2022.

39

### Resultados (4): Diseño de Nanoestructuras Nano-vehículos

ILJ627 con oLJ13\_N13C  
 ILJ3526 con oLJ92\_N4T  
 ILJ652 con oLJ38\_N6OC  
 ILJ669 con oLJ55\_N13C  
 ILJ3473 con oLJ39\_N7PBP

CBR® Dos artículos

40

### Conductividad y trampas de partículas

Estructura hexagonal ILJ72, exhibe tubos de muy bajo potencial (azul claro y blanco) entre las celdas hexagonales.

Trampa abierta, celdas hexagonales alineadas (tubos azul claro)

Trampa cerrada, celdas hexagonales rotadas 30° grados (tubos rojos)

41

### Núcleos para clasificación automática

Núcleo	Figura	Núcleo	Figura	Núcleo	Figura	Núcleo	Figura
N12C	Fig. 1	N13CPA	Fig. 2	N13CPA	Fig. 3	N13CPA	Fig. 4
N12HEXPRISM	Fig. 5	N12HEXPRISM	Fig. 6	N12HEXPRISM	Fig. 7	N12HEXPRISM	Fig. 8
N13CPA	Fig. 9	N13CPA	Fig. 10	N13CPA	Fig. 11	N13CPA	Fig. 12
N13CPA	Fig. 13	N13CPA	Fig. 14	N13CPA	Fig. 15	N13CPA	Fig. 16
N13CPA	Fig. 17	N13CPA	Fig. 18	N13CPA	Fig. 19	N13CPA	Fig. 20

42

### Familias de clústeres por su núcleo

Crecimiento de IC (N12C, N13C), IR(N12R, N13R), FC, IF, N4T, N5BT, N6OC, N7PBP y CB½

Radio(r) or level	0	1	2	3	4	5	6	7	8
IC: $(1/3)(2r^3 - 1)(3r^2 + 3r + 2)$ , $r \geq 0$	1	13	55	147	309	561	923	1415	2065
FC: $(1/3)(-19r^3 + 15r^2 + 10r^2 + 33r + 3)$ , $r \geq 1$	1	13	45	127	279	521	873	1355	1987
IF: $(1/3)(r^3 + 15r^2 + 20r^2 + 3)$ , $r \geq 0$	1	13	75	227	509	961	1623	2615	3737
N4T: $3r^2 + 10r^2 + 3r + 4$	4	28	60	116	200	320	476	668	906
N5BT: $5r^3 + 11r^2 + 3r + 5$	5	32	101	232	445	760	1197	1776	2517
N6OC: $3r^3 + 10r^2 + 11r + 2$	6	38	116	260	490	826	1288	1896	2670
N7PBP: $7r^3 + 9r^2 + 5r + 7$	7	39	116	256	465	817	1274	1850	2643
CB½: $(4r + 1)^2$ , $r \geq 0$	1	125	729	2167	4913	9961	15925	24389	33067

Table 2: Comparison of the number of particles for clusters with ratio r for the IC lattice, FC lattice (the complete cluster IC and FC correspond to the magic numbers, see [38, 42, 21]), IF (IC+FC) lattice, N4T lattice, N5BT lattice, N7PBP lattice, and CB lattice.

CB½ contiene a todas las familias o sea contiene todos los buenos clústeres de mínimo potencial.

43

### OLJ38\_N6OC, OMO38\_N6OC, OCM38\_N6OC versus OMR38\_N7PBP

MR=M(6, r) (rojo)  
 LJ (verde)  
 MO=M(5.3554, r) (azul)  
 $CM(r) = M(14, r)$

44

### Transformación oLJ37\_N7PBP a ILJ37\_N6OC

Se carga con cBLJ oLJ37\_N7PBP.txt  
 $LJ(oLJ37)=-167.0337$

Se comprime con 't' hasta que el factor de expansión-compresión sea 0.1

Se minimiza con 'u' y se obtiene ILJ37\_N6OC  
 $LJ(ILJ37)=-166.8226$

45



### Transformación oLJ38\_N6OC a ILJ38\_N8CB

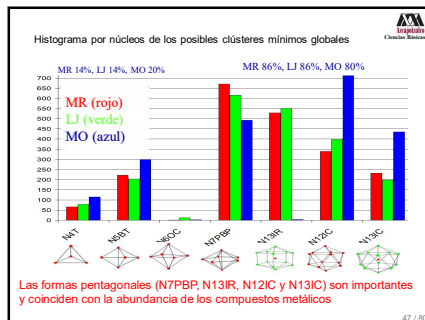
Se carga con `cbLJ oLJ38_N6OC.txt`  
 $LJ(oLJ38) = -173.9284$

Se expande con 'b' hasta que el factor de expansión-compresión sea 4.03

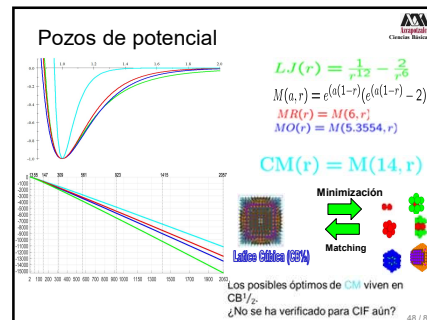
Se minimiza con 'u' y se obtiene `ILJ38_N8CB`  
 $LJ(ILJ38) = -143.2849$

46 / 80

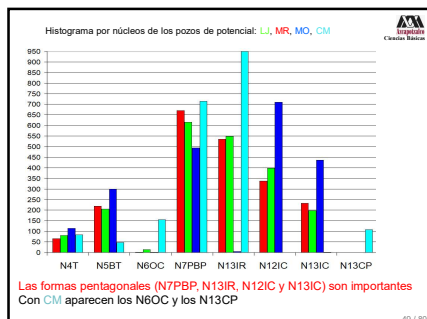
46



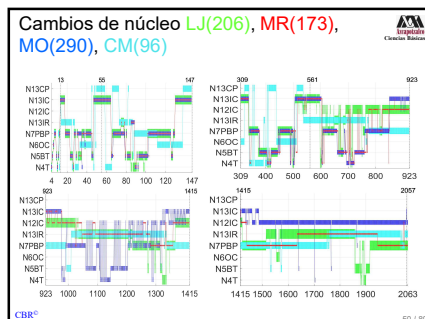
47



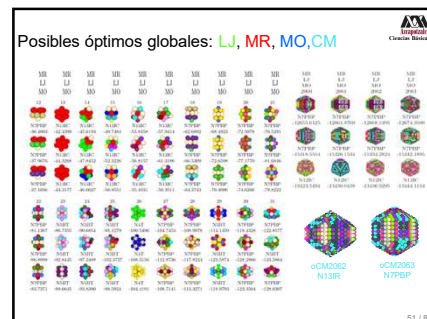
48



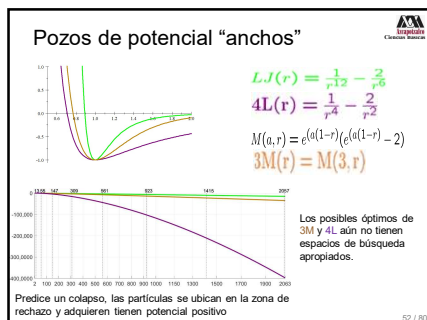
49



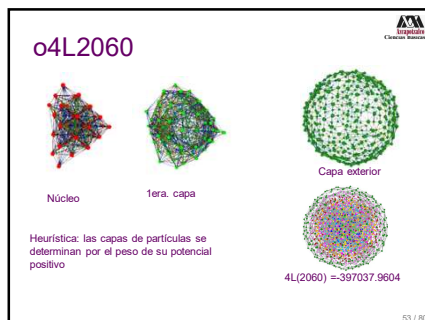
50



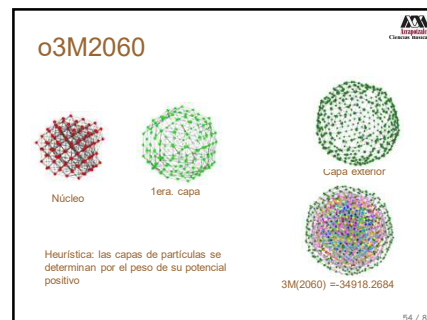
51



52



53



54

**Evolución** Universo evoluciona: **Energía + Tiempo**  
 Universo:  $14 \times 10^9$  años vs vida:  $4.5 \times 10^9$  años

**Alfabeto + Propiedades**  
**Selección (especialización)**  
**Base de carbono  $\Rightarrow$  Humanos**

$\Rightarrow$  **Entidades "aptas"**

**Base de azufre  $\Rightarrow$  Bacterias**  
 Universidad de Brunel, Torre D'Alcala, Laura Flores

**Base de silicio  $\Rightarrow$  Robots, AI**

Figura 1.6. Modelo conceptual del sustrato de hidrogeno en un lago. EOH, hidrogeno, agua, metano, metil hidruro.

Figura 1.7. Modelo conceptual del sustrato de hidrogeno en un lago. EOH, hidrogeno, agua, metano, metil hidruro.

Figura 1.8. Modelo conceptual del sustrato de hidrogeno en un lago. EOH, hidrogeno, agua, metano, metil hidruro.

55

**The Thomson Problem and Spherical Crystallography**

1904: J. J. Thomson asks how particles pack on a sphere - relevant to viruses, colloid-coated droplets, and multilayered bubbles in helium

Continuous elastic theory (with M. Bowick and A. Travert) shows that the 5-fold disclinations become unstable to several five-fold grain boundaries (strings of dislocations) for  $Ra \gg 1$ .

Finding the ground state of  $\sim 2600$  particles on a sphere is replaced by minimizing the energy of only  $\sim 250$  interacting disclinations, representing parts of five- and  $7$ -fold symmetry.

Certain boundaries in the ground state for  $Ra = 5-10$  have important implications for the mechanical stability and porosity of colloids, proposed as delivery vehicles for drugs, flavors and fragrances.

Ordering on a sphere  $\rightarrow$  a minimum of 12 5-fold disclinations, as in soccer balls and fullerenes -- what happens for  $Ra \gg 1$ ?

Disclinations (5-7 defect pairs) embedded in spherical ground states

56

**Morse  $\rho = 3, 6, 10$  y 14**

Figura 1.9. Modelo conceptual del sustrato de hidrogeno en un lago. EOH, hidrogeno, agua, metano, metil hidruro.

29,36 y 39 nuevos resultados CBR, se verifica para clústeres cuánticos

<https://www.wales.ch.cam.ac.uk/~foran/IJPE/abc.html>

57

Estimadores para problemas de optimalidad global de crecimiento discreto

Determinar el mínimo potencial ( $V$ ) de conjuntos de  $n$  elementos donde el potencial depende de todos los pares de elementos, o sea proviene de un grafo completo  $K_n$

$\min V_{14}$   
 $\min V_{15}$   
 $\min V_{n-1}$   
 $\min V_n$

Minimización global: sobre todos los conjuntos de tamaño  $n = 14, 15, \dots, n-1, n$

Posiblemente no se conocen todos los arreglos espaciales de  $n$  elementos

Difíciles de resolver

Alta complejidad

Proposición (estimadores de frontera). Para cualquier conjunto de supuestamente mínimo global de tamaño  $n \gg 2$ , se cumple:

$$\frac{n+1}{n-1} |V(c_{n-1})| \leq |V(c_n)| \leq \frac{n-1}{n+1} |V(c_{n+1})|$$

donde  $|V(c_i)|$  es potencia del conjunto respecto a todas las interacciones a pares de los elementos.

Anónimo revisor: La aportación de los Estimadores de Frontera para determinar soluciones apropiadas de optimización global de problemas de muchos cuerpos es teórica y perdurará junto con los avances de la computación clásica y de la computación cuántica

Carlos Barrón Romero, Estimadores de Frontera para los supuestos clústeres consecutivos de óptimo potencial global. Anales en Ciencias e Ingeniería, Vol. 14(2), 2023. Publicado: Enero 14, 2024. ISSN 0718-8706.

58

**Metodología de Control Óptimo sobre la ecuación de onda clásica y sobre la ecuación de onda semi lineal cúbica y adecuaciones para un manejo eficiente de grandes señales**

Ing. Salvador Castillo Álvarez  
 Dr. Carlos Barrón Romero

Martes 9 de abril de 2024

Seminario de Investigación del Área: Álgebra, Geometría y Computación Científica

59

**Motivación**

Acidente nuclear de Chernobyl, Ucrania (1986)

Catástrofe industrial más grande de la historia: Bhopal, India (1984)

60

**Numerical Methods for Optimization and Control over PDE**

**Roland Glowinski's Workshop**

CIMAT

Enero 11-13, 2006

61



62

**Concluding Remarks**

- Mathematical Modeling, Variational Methods, Discontinuous Galerkin Methods, Theory of Games, Optimality Conditions, Discretization, Conjugate Gradient, dG-Methods, Radial-Functions,...
- Applications for Geosciences, Medicine, Weather, Traffic Flow, Computer Vision, E.G. Tomography, ...
- Computational Science is The 'Third Pillar' of 21st Century Science
- Golden Age with opportunities for YOU
- DASSAULT AVIATION FALCON 50

Roland Glowinski's Workshop

63

La División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Unidad Apatzingato, invita al curso

## Topics in Control and Calculus of Variations

1) Iterative Methods for Variational Problems in Hilbert Spaces.  
2) Control of Continuous-time Manipulators: An Analytical Approach.  
3) Optimal-control Methods for Time-Dependent Problems.  
4) Numerical Solution of Riccati Equations and Systems.  
5) On the solution of an inverse problem from observations for the Ethical equation.

que impartirá el profesor **Roland Glowinski**.

Lunes, miércoles y viernes de 10:00 a las 13:00 hrs. del 18 al 29 de mayo de 2019  
Auditorio W-03, edificio "W" primer piso.  
Semanas 3 y 4 del Calendario UAM del trimestre 18-P.

**Profesor Roland Glowinski**  
de la Universidad de París, Francia, y de la Universidad de Ginebra, Suiza. Ha trabajado en el campo de la optimización, el control y la mecánica de fluidos. Ha publicado más de 100 artículos en revistas de alto impacto y es autor de varios libros.

Transmisión en vivo por **CYAD TV** [www.cyad.tv/cbi.html](http://www.cyad.tv/cbi.html)

64

**Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems**  
Roland Glowinski (1937-2022)

**Exact and Approximate Controllability for Distributed Parameter Systems**  
Roland Glowinski (1937-2022)

Tata Institute of Fundamental Research 1977  
Roland Glowinski (1937-2022)  
R. GLOWINSKI, "Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems, Springer, 1984, 493 pp. DM 158.00"; J. Fluid Mech., vol. 158, pp. 533-534, sep. 1985. doi: 10.1017/S0022112085222757.

ICIAM 1995  
Roland Glowinski (1937-2022)  
Jacques-Louis Lions (1928-2001)  
Jiwen He  
R. Glowinski, J. L. Lions, and J. He. Exact and Approximate Controllability for Distributed Parameter Systems. Encyclopedia of Mathematics, Cambridge University Press, 2008.

65

## Control Exacto y Aproximado sobre Ecuaciones Diferenciales Parciales

$\Gamma$  frontera de  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d=1,2,3,...$

$A(y, x, t)=0$

Problema de control  $\mathcal{A}(y, x, t) = \mathcal{B}(u)$

$u$  es la variable de control, en puntos, pequeñas regiones (control distribuido) o en la frontera (fijos o adaptables)

**Control aproximado**  
 $J(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_0^T |u|^2 dx dt + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_0^T |y(x, T, u) - y_T(x)|^2 dx$   
donde  $y(x, T, u)$  es la solución de  $\mathcal{A}(y, x, t) = \mathcal{B}(u)$

Es un sistema de EDP para la variable de estado  $y$  (escalar real) que depende de  $(x, t) \in Q = \Omega \times [0, T]$

Para  $\mathcal{A}$  se requieren condiciones de frontera, por ejemplo:  
**Condición de inicio:**  $y_0 = y(x, 0)$ ,  $x \in \Omega$   
**Objetivo o meta:**  $y_T(x)$ ,  $x \in \Omega$

**Control exacto**  
Existe un espacio apropiado de  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$   
 $y(x, T, u) = y_T(x)$

66

## Aspectos considerados al modelar con Teoría de Control Óptimo a fenómenos físicos o químicos dados EDP

- Estudiar el comportamiento de objetos o fenómenos físico-químicos en fluidos.
- A un tiempo T (o sea dado un horizonte) se desea que el Sistema se comporte o alcance una meta dada.
- Para sistemas lineales el control exacto es posiblemente equivalente a la estabilización del Sistema.
- Conocer la reversibilidad, irreversibilidad y la controlabilidad.
- La selección del control tiene relación con la norma seleccionada para tener un espacio funcional apropiado para  $\mathcal{A}(y, x, t) = \mathcal{B}(u)$ .
- Hay muchos ejemplos de concordancia (éxito) entre las simulaciones numéricas (Computo Científico), los correspondientes experimentos en el laboratorio y los diseños de aeronaves y objetos.

67

## Nash Equilibria for the Multiobjective Control of Linear Partial Differential Equations

A. M. RAMOS, R. GLOWINSKI AND J. PERIAUX

We define the control spaces  $\mathcal{U}_1 = L^2(\omega_1 \times (0, T))$ ,  $\mathcal{U}_2 = L^2(\omega_2 \times (0, T))$ , where  $\omega_1, \omega_2 \subset \Omega$  and  $\omega_1 \cup \omega_2 = \Omega$ .

Finally, we consider the functionals  $J_1$  and  $J_2$  given by  $J_1(u_1, u_2) = (\alpha_1/2) \int_{\omega_1} |u_1|^2 dx dt + (k_1/2) \int_{\omega_1} |y - y_d|^2 dx dt + (L/2) \int_{\omega_2} |y(T) - y_d|^2 dx$

for every  $(u_1, u_2) \in \mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2$ , where  $\omega_1, \omega_2 \subset \Omega$ ,  $l = 1, 2$ , and the function  $y$  is defined as the solution of  $y_t - \Delta y = f + v_1 \chi_{\omega_1} + v_2 \chi_{\omega_2}$  in  $Q$ ,  $y(x, 0) = y_0(x)$ , in  $\Omega$ ,  $y = g_i$  on  $\Sigma_i$ ,  $\partial y / \partial n = g_3$  on  $\Sigma_3$ , with  $f, g_1, g_2, g_3, y_0, y_d$  being smooth enough functions,  $\alpha_i \geq 0$ ,  $k_i \geq 0$ ,  $L \geq 0$ , and  $k_i + L > 0$ ,  $i = 1, 2$ .

68

## Metodología de

- Pasar  $A(y, x, t)=0$  a un sistema controlado  $\mathcal{A}(y, x, t) = \mathcal{B}(u)$ .
- Construir la discretización en el tiempo del problema.
- Calcular la variación  $\delta J^{\Delta t}$ .
- Calcular  $\delta J^{\Delta t}$  y construir la discretización completa (espacio-tiempo).
- Adaptar el Método del Gradiente Conjugado al Problema.

69

Taller: Introducción al Control Óptimo en Ecuaciones Diferenciales Parciales (sesiones I y II)

Carlos Barrón Romero

International Seminar on Applied Analysis Evolution Equations and Control  
Notes del curso  
A BRIEF INTRODUCTION TO THE OPTIMAL CONTROL OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS  
Roland Glowinski  
Workshop on Métodos Numéricos de Optimización y de Control Óptimo en PDE,  
Guamajasto, 2006.  
May-2011

<https://academic.azc.uam.mx/cbr/Publications.html>

25. C. Barrón-Romero. Introducción al Control Óptimo en Ecuaciones Diferenciales Parciales. Notas del curso impartido en International Seminar on Applied Analysis Evolution Equations and Control, 2011.

70

## Motivación para combinar la ecuación de onda clásica y la semi lineal cúbica

$y_{tt} - y_{xx} = 0$   
 $y_{tt} - y_{xx} + y^3 = 0$

Waves and control

Weather control

Nuevos sonidos, movimientos, sensaciones (haptics, RVA), criptografía, ocultación-invisibilidad (stealth), ...

Adecuaciones para un manejo eficiente de grandes señales:  
1. Implementar la rutina de Cardano para la solución de polinomios cúbicos en lugar del algoritmo numérico de Newton-Raphson.  
2. Implementar discretización por búferes.

71

## Problema abierto

Problema abierto control exacto (Jacques-Louis Lions: Hasta siempre, E. Zuazua)

"Estoy seguro de que a Lions le hubiera gustado conocer la respuesta y que ésta exigirá de ideas innovadoras con respecto a lo que hasta hoy se conoce."

Consideramos la ecuación de ondas semilínea  $y_t - y_{xx} + y^3 = \chi_{\Omega}(u(x, t))$  en  $(0, 1) \times (0, T)$ ,  $y = 0$  para  $t \in (0, T); x = 0, 1$ ,  $y(0) = y_0$ ,  $y(T) = y_1$  en  $(0, 1)$ ,  $y(T) = y_1(T) = 0$ .

[Zu, Zu, Zu] X. Zuazua y E. Zuazua, Exact controllability of the semilinear wave equation, en "Open problems in mathematical systems theory and control", en vivo de publicación (<http://www.imms.ucl.ac.be/blonde1/op/>).

Respuesta en Control Óptimo Aproximado Numérico:  
No hay controles puntuales para regresar al estado  $Z_0=0, Z_1=0$  de una perturbación.  
C. Barrón-Romero, On the controllability of a Cubic Semi-Linear Wave Equation, International Conference on Control, Decision and Information Technologies, CoDIT'19, Paris, France. <https://ieeexplore.ieee.org/document/8820332>

72



### Generador de señales de Control Óptimo para la ecuación clásica y semilineal cúbica

Tesis de Maestría en Ciencias de la Computación  
Salvador Castillo Álvarez, Matricula: 2213800547

Directores:  
Dr. Carlos Barrón Romero  
M. C. Rogelio Herrera Aguirre

Área de Álgebra, Geometría y Computación Científica, UAM-Azcapotzalco

Minimizar  $J(v) = \frac{1}{2} \int_0^T \|v\|^2 dt + \frac{k_1}{2} \int_0^1 \|y(T) - z_0\|^2 dx + \frac{k_2}{2} \int_0^1 \|v_x\|^2 dx$

Clásica  $y_{tt} - y_{xx} = \sum_{j=1}^M v_j \delta(x - a_j)$     Semilineal cúbica  $y_{tt} - y_{xx} + y^3 = \sum_{j=1}^M v_j \delta(x - a_j)$

Sujeto a  $y(0, t) = y(1, t) = 0$   
 $y(0) = y_0, y(1) = y_1$   
 $-\varphi_{xx} = y_t(T) - z_1$   
 $\varphi(0) = \varphi(1) = 0$

73

### Objetivo del Control Óptimo sobre las ecuaciones de onda clásica y semilineal cúbica

Condiciones iniciales  $y_0$     Transformación de control    Condiciones finales  $z_0$

$y_1$      $z_1$

74

### Evolución de señales

Ecuación de onda clásica: señales periódicas

Ecuación de onda semilineal cúbica: Señales no periódicas

Más una perturbación, bifurcación de señales

Más una perturbación, se absorbe

75

### Metas Tesis Salvador

- Remplazar el método iterativo de Newton-Raphson por el método directo de Cardano en la implementación de la ecuación de onda semilineal cúbica
- Usar 3 búferes (M puntos discretos en L) para los cálculos numéricos, en lugar de una gran matriz (N)(M) para tiempo y longitud (L).
- Mejorará la eficiencia al "mínimo tiempo de ejecución"
- Hacer audibles los resultados y generar nuevas señales

Clásica    Semilineal Cúbica

76

### 1er.Resultado del Control Óptimo sobre la Ecuación de Onda Clásica

R. Landauer, Irreversibility and Heat Generation in the Computing Process, IBM J. Res.Develop, VOL. 44, No. 1/2, January/March 2000, p. 261-269

"Borrar información requiere energía y hay un aumento en entropía"

La evolución natural de una onda clásica no borra información gratis

$T \approx -10C^0$      $T \approx -10C^0$

Conservación de energía:  $\text{Pot}(y) + \frac{1}{2} y_t^2 = \text{Constante}$

Minimizar  $J(v) = \frac{1}{2} \int_0^T \|v\|^2 dt + \frac{k_1}{2} \int_0^1 \|y(x, T) - z_0\|^2 dx + \frac{k_2}{2} \int_0^1 \|v_x\|^2 dx > 0$

El control "absorbe":  $y_t$  es cercana a  $z_t=0$ ,  $y(x, T)$  es cercana a  $z=0$ , o sea no se borra gratuitamente y aumenta la entropía del sistema

77

### Creación y borrado de un bit de información

0 a 1    1 control    1 a 0

5 controles

$y, y_t, u$

78

### Aplicaciones del generador de señales con Control Óptimo para la Ecuación Clásica y Semilineal Cúbica

Clásica    Semilineal Cúbica

Encriptación  
Multimedia  
Señales para realidad virtual  
Animación  
Distorsionador de audio  
Ruidos

79

### ¿Preguntas?

1.- Sea  $J(p_1, \dots, p_n) = \sum_{i=1}^n d(p_i, c_i)$  donde  $p_i \in \mathbb{R}^2$ , la función  $d(\cdot)$  es la distancia Euclidiana entre dos puntos de  $\mathbb{R}^2$ .  
¿Cuál es el dominio y el rango de la función potencial anterior para 25 partículas?

2.- Se tiene:  $y_t^2 - y_x^2 = 0$  sujeto a  $y_t(x, 0) = 0, x \in [0, 1]$ ,  $y(0, t) = y(1, t) = 0, t \in [0, 1]$ .  
Sea  $f(x, t) = \sin(\pi x) \cos(\pi t)$ , ¿por qué es solución del sistema anterior?

### Conclusiones y agradecimientos

Fomentar la felicidad de las personas y el gusto por las ciencias, la cultura, las lenguas e idiomas, la naturaleza, la filosofía, las letras y las artes, y en particular por la Matemáticas es una meta de una sociedad moderna, justa y respetuosa acorde al lema de la UAM, Casa abierta.

El software de Cómputo Científico es de importancia estratégica para la investigación por su interacción con las Ciencias y Tecnologías. Es mejor desarrollarlo que adquirirlo. Crear en la UAM: Posgrado, doctorado en Ciencias de la Computación.

Dr. Carlos Barrón Romero  
cbarron@azc.uam.mx

80