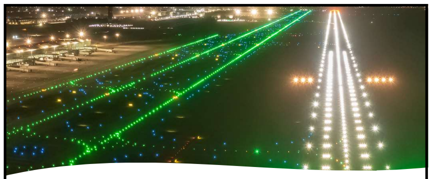
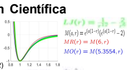
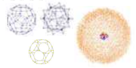


Computación Científica

Roland Glowinski (1937-2022)



DASSAULT AVIATION FALCON 50



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

Lunes de Faenas Matemáticas en la UAMI
6 de Mayo de 2024
Auditorio Sandoval Vallarta, edificio E de 14:00 a 15:00

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 (1928-2001) y es el tema de la tesis de Maestría en Ciencias de la Computación del Ing. Salvador Castillo Álvarez.
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: 13≤n≤147".

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

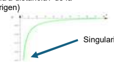
3

Enfoque clásico

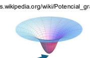
https://es.wikipedia.org/wiki/Potencial_gravitatorio

Gravitación clásica
Potencial de una partícula a distancia r de la M (masa puntual en el origen)

$V(r) = -GM\frac{1}{r}$



Singularidad



Predice colapso de la materia y orbitas de planetas

¿Por qué existe la materia?

Colapso del electrón

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

¿Por qué existe el espacio-tiempo?

4

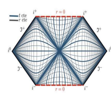
Relatividad General

¿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, Λ is the cosmological constant (sometimes taken to be zero for simplicity), $g_{\mu\nu}$ is the metric tensor, κ is a constant, and $T_{\mu\nu}$ is the stress–energy tensor.



https://www.researchgate.net/publication/375989631_Estudio_de_la_estructura_del_espacio-tiempo_a_traves_de_diagramas_de_Penrose/figures?lo=1
This figure was uploaded by Andrés Infante

Solución de Schwarzschild

In Schwarzschild coordinates (t, r, θ, ϕ) the Schwarzschild metric (or equivalently, the line element for proper time) has the form

$$ds^2 = c^2\,d\tau^2 = \left(1 - \frac{r_s}{r}\right)c^2\,dt^2 - \left(1 - \frac{r_s}{r}\right)^{-1}dr^2 - r^2 d\Omega^2,$$

where $d\Omega^2$ is the metric on the two sphere, i.e. $d\Omega^2 = \left(d\theta^2 + \sin^2\theta\,d\phi^2\right)$.

Referencia: 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 quántica.
- Mejorar el entendimiento de formación de materiales
- LJ y Morse son modelos simples con gran poder predictivo
- Clasificación e identificación geométrica

Nano máquinas

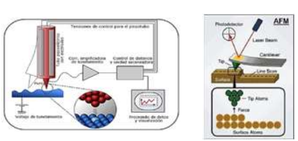
- Potencial de energía de la superficie (PES)
- Virus: muchas interacciones dependen de su forma y estructura
- Diseño de Nanoestructuras
- Conductividad y trampas de partículas

Computación Quántica

20200906: Google: Articles about clusters of Lennard Jones. About 240,000 results (0.47 seconds)
20210906: Google: Articles about clusters of Lennard Jones. Cerca de 505,000 resultados (0.48 segundos)
20220501: Google: Articles about clusters of Lennard Jones. Cerca de 393,000 resultados (0.27 segundos)
20240505: Google: Articles about clusters of Lennard Jones. Aproximadamente 195,000 resultados (**0.10** 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 cubran y sanen las heridas, señala Gabriel Luna

FERNANDO CAMACHO SERVÍN

Periódico La Jornada
Jueves 18 de enero de 2024, p. 6

Luego de destacar el papel en estas investigaciones de la bióloga celular María Cristina Velasquillo Martínez, del Instituto Nacional de

8

Fuerzas intermoleculares atractivas o repulsivas

¿Por qué existe la materia?

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

Buckingham Potential (BU)

where α_{ij}, β_{ij}, and γ_{ij} are parameters for the type of particles.

Kihara Potential (KI)

where ϵ_0, σ, and γ are parameters for the type of particles.

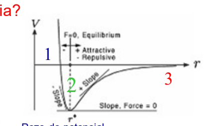
Lennard-Jones potential (LJ)

$$LJ(r_{ij}) = V_{ij} = 4\epsilon_0\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right]$$

where ϵ_0 and σ_{ij} are parameters for the type of particles.

Morse Potential (MO)

where α is a parameter.



Pozo de potencial

1. No se fusionan las partículas, r->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 asintótica de baja atracción

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: P. M. Pardalos, D. Shalloway, 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)

$U(r) = 4\varepsilon\left(\frac{\sigma}{r^{12}} - \frac{\sigma}{r^{6}}\right)$, con $\varepsilon = \sigma = 1$

Mínimo

$\frac{d}{dr}4\left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^{6}}\right) = \frac{24}{r^{13}}\left(r^6 - 2\right)$, $\frac{24}{r^{13}}\left(r^6 - 2\right) = 0$.

Soluciones: $\sqrt[6]{2}$, $\sqrt[6]{2}\left(\frac{1}{2}i\sqrt{3} + \frac{1}{2}\right)$, $\sqrt[6]{2}\left(\frac{1}{2}i\sqrt{3} - \frac{1}{2}\right)$, $-\sqrt[6]{2}$, $-\sqrt[6]{2}\left(\frac{1}{2}i\sqrt{3} + \frac{1}{2}\right)$, $-\sqrt[6]{2}\left(\frac{1}{2}i\sqrt{3} - \frac{1}{2}\right)$

LJ Normalizado

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

Mínimo

$\frac{d}{dr}\left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^{6}}\right) = \frac{12}{r^{13}}\left(r^6 - 1\right)$, $\frac{12}{r^{13}}\left(r^6 - 1\right) = 0$

Soluciones: $1, \frac{1}{2}i\sqrt{3} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}i\sqrt{3} - \frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}i\sqrt{3} - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}i\sqrt{3}$

Verificaciones por casos

$U(r) = 4\left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^{6}}\right)$, $LJ(r) = \left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^{6}}\right)$

$U(\sqrt[6]{2}) = -1$, $LJ(1) = -1$

$LJ(2) = -\frac{127}{4096}$, $U(2\sqrt[6]{2}) = -\frac{127}{4096}$

$U(4) = -\frac{4095}{4194304}$, $LJ(4/\sqrt[6]{2}) = -\frac{4095}{4194304}$.

Por álgebra se cumple:

$U(r\sqrt[6]{2}) = LJ(r)$ y $LJ(r/\sqrt[6]{2}) = U(r)$

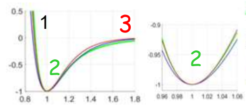
Reducción de parámetros

Simplificación por cambio de métrica (¿ G. L. Xue ?) de $r^* = \sqrt[6]{2}$ a $r^* = 1$

10 / 80

10

Potenciales de pozo de LJ y MO, MR



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

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

$$MR(r) = M(6,r)$$

$$MO(r) = M(5.3554, r)$$

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

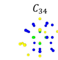
Pozo de potencial: P. M. Pardalos, D. Shalloway, and G. L. Xue. Optimization methods for computing global minima of nonconvex potential-energy functions. *Journal of Global Optimization*, 4(2):117–133, 1994.

11 / 80

11

Problema de optimización local de clústeres

C_{34}



$$PT(C_n) = \min \sum_{1\le i<j\le n} v_{ij}$$

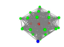
donde

$$v_{ij} = MR(r_{ij}), LJ(r_{ij}), MO(r_{ij})$$

$$r_{ij} = \sqrt{\left(x_i - x_j\right)^2 + \left(y_i - y_j\right)^2 + \left(z_i - z_j\right)^2},$$

$$(x_k, y_k, z_k), k = 1, \ldots, n.$$

lLJ34_N5BT, K_{34}



LJ(lLJ34)=-150.0445

$C_n = \{p_1, \ldots, p_n\}, p_i \in \mathbf{R}^3$, coordenadas arbitrarias dadas, n es el número fijo de partículas. Las coordenadas del óptimo local se obtienen de

$$lPT_n = \arg\min \sum_{1\le i<j\le n} v_{ij}$$

lPT_n es un clúster optimo local del potencial PT, $lPT_n = \{q_1, \ldots, q_n\}, q_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbf{R}^3$ son las coordenadas de la configuración local minima 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.

12 / 80

12

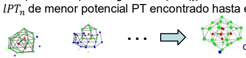
Problema global de n partículas de mínimo potencial

$$PT(C_n) = \min_{\text{Todos los clústeres de tamaño } n} \min \sum_{1\le i<j\le n} v_{ij}$$

donde $v_{i,j} = PT(p_i, p_j)$, $p_i \in \mathbf{R}^3$, 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_n) de PT corresponden con los lPT_n de menor potencial PT encontrado hasta el momento.



LJ(lLJ34_1)=-148.4022 LJ(lLJ34_2)=-142.3567 LJ(oLJ34)=-150.0445

13 / 80

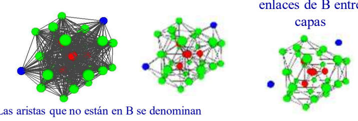
13

Visualización de clústeres

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

oLJ34, K_{34} $\supset$ (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.

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

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

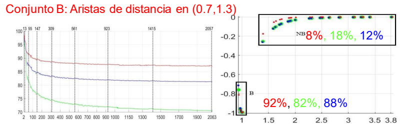
CBR©

14 / 80

14

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

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



oMR55, oLJ55, oMO55

$\lim_{n\to\infty} \frac{|B(\mathrm{oPT}n)|}{|A(\mathrm{oPT}n)|} \le \lim_{n\to\infty} \frac{12n}{\binom{n}{2}} = 0.$

$|A|$ es el total de aristas

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

- 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.

CBR©

15 / 80

15

Buen clúster mínimo local

Propiedades de clústeres de n partículas (n≥4):

1. G(lPTn,B(lPTn)) es un subgrafo conexo de K_n,además, los vértices de B(lPTn) son todos los vértices de lPTn
2. G(lPTn,B(lPTn)), 3 ≤ grado(vértices) ≤12
3. Punto estacionario bajo la función argumento de la minimización: lPTn=argMinPT(lPTn)

Malos clústeres

No tienen estructura definida

Los vértices de B(lPTn) no son todos los vértices de lPTn

Los grumos son grupos de partículas en el valle de equilibrio que están distantes de otros vecinos, o sea no interaccionan y no desaparecen por estar ligados fuertemente entre ellos

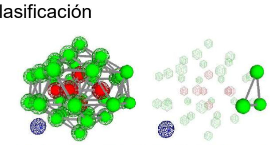
Potencial “grande”, con nula posibilidad de ser mínimo global

16 / 80

16

Ventajas de la geometría sobre B

- Identificación
- Comparación
- Clasificación



a) Overlying oMR39 (solid) and oMR37(wire frame). b) Particle difference between oMR37 and oMR39.

17 / 80

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

$$LJ(x+h) = LJ(x) + \nabla LJ(x)\,h^T + 1/2h^T\nabla^2 LJ(x)\,h + o\left(h^3\right)$$

Las soluciones cumplen:

$\nabla LJ(x^*) \approx 0$ y $LJ(x^*) \le LJ(x^* + d)$

donde $\|d\| << 1$.

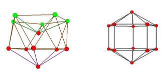
J. L. Morales and J. Nocedal por algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound constrained optimization, 2011.

18 / 80

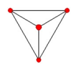
18

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.

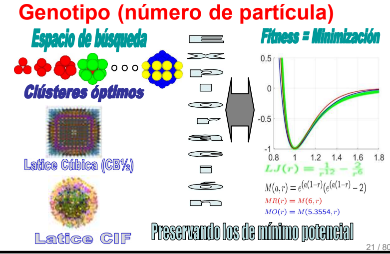
Problemas:
Posible preferencia por repetir clústeres con estructuras conocidas de la base de datos de los posibles clústeres óptimos.
Las coordenadas de dos partículas muy cercanas pueden generar overflow.

20 / 80

20

Algoritmo Evolutivo

Genotipo (número de partícula)



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 CB½ 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

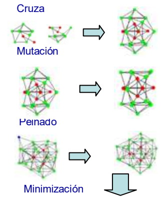
Algoritmo evolutivo

Fenotipo

Cruza

Mutación

Peinado



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

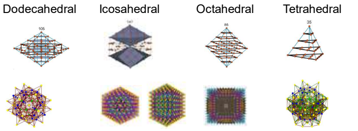
- Completo: Que contenga todos los cúmulos de mínimo potencial
- Eficiente: Que sea "fácil" de construir y de usar
- Sería deseable que ayude en el proceso de minimización

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 CB½ CIF=IF+Rot IFY/2

33. J.A. Northby, Structure and binding of Lennard-Jones clusters: 13 ≤ n ≤ 147), *Journal of Chemical Physics*, 87(10):6166-6177, 1987.

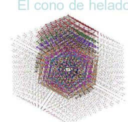
25 / 80

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



MINIMUM SEARCH SPACE AND EFFICIENT METHODS FOR STRUCTURAL CLUSTER OPTIMIZATION

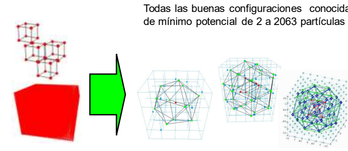
MIF1739 ⊂ IF9483
Posibles clústeres óptimos globales de LJ están en MIF1739

26 / 80

26

Latice CB

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

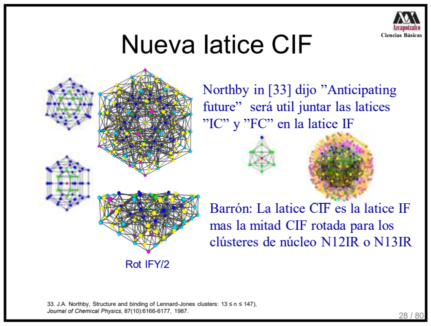


Conjetura: ¿Contiene la latice CB½ todos los clúster iniciales que convergen por minimización a todos los buenos clústeres de mínimo potencial?

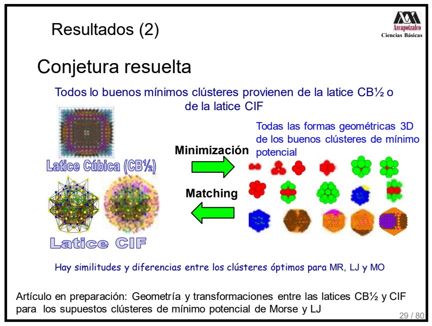
CBR©

27 / 80

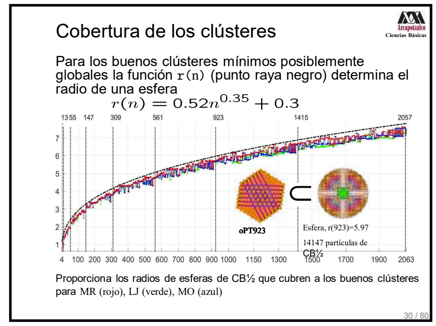
27



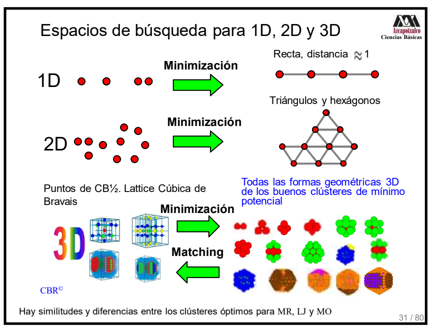
28



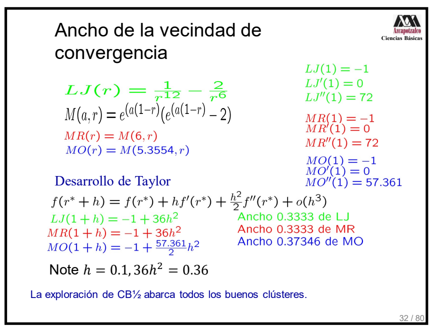
29



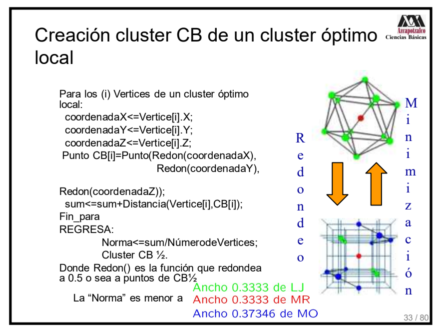
30



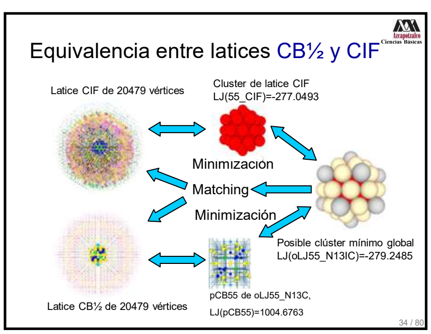
31



32

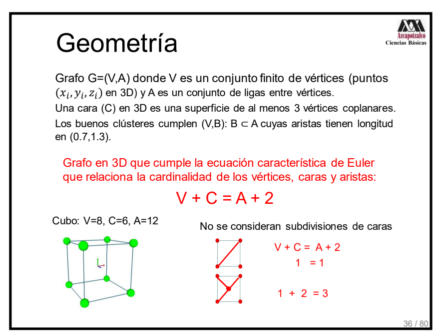


33

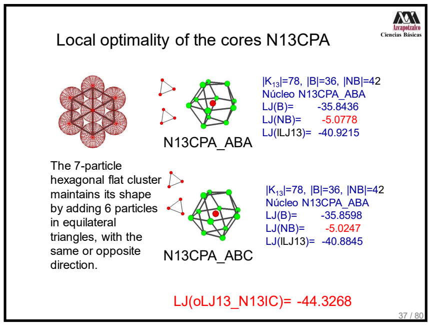


34

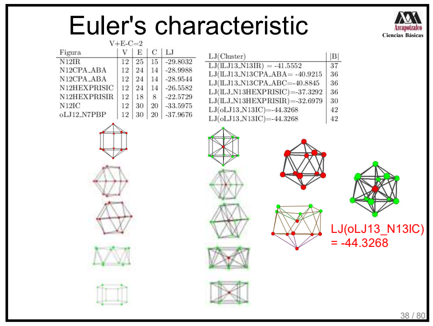
35



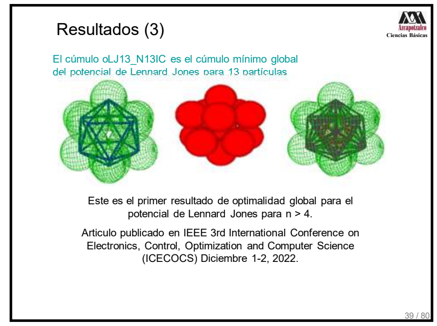
36



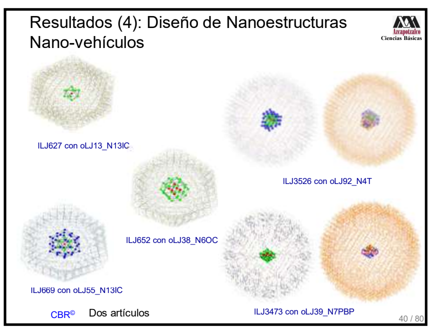
37



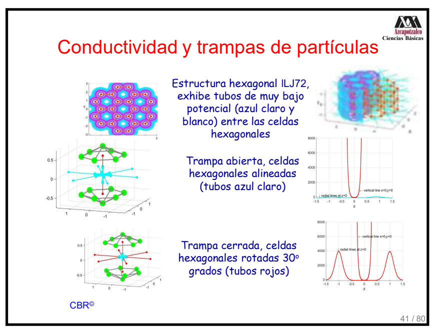
38



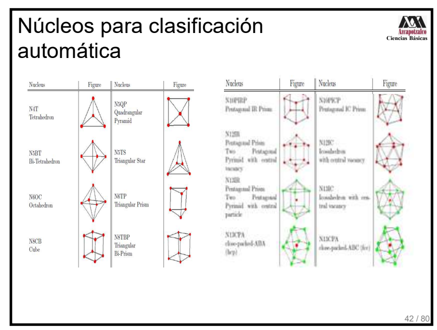
39



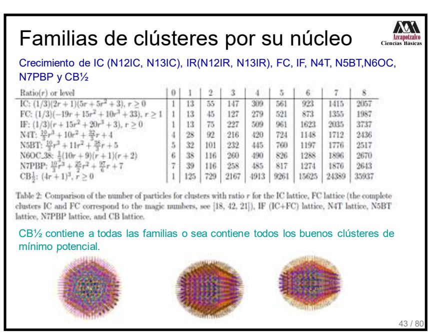
40



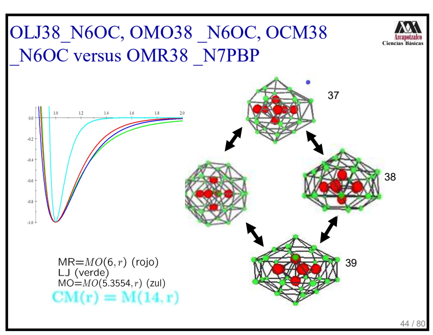
41



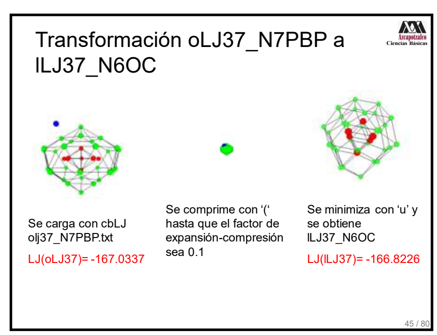
42



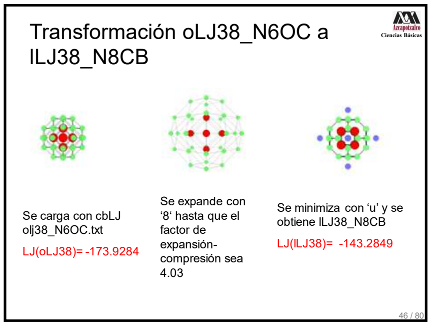
43



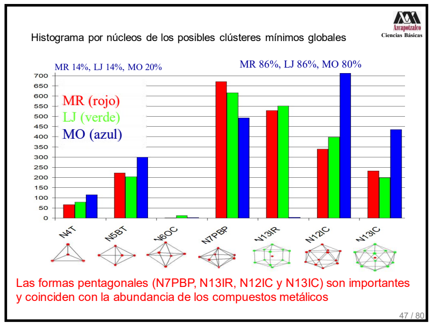
44



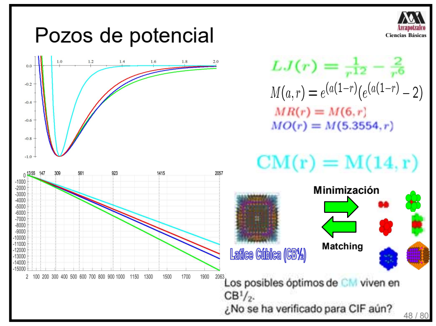
45



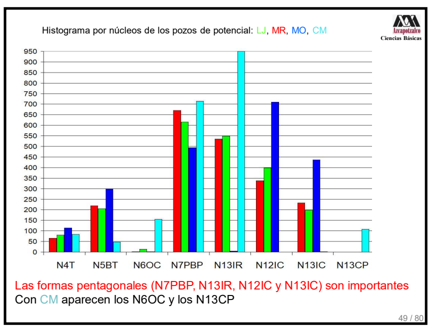
46



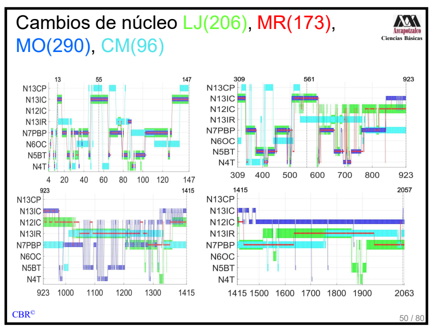
47



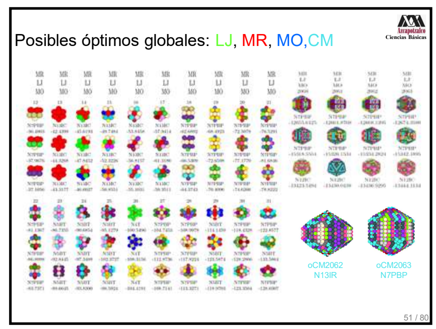
48



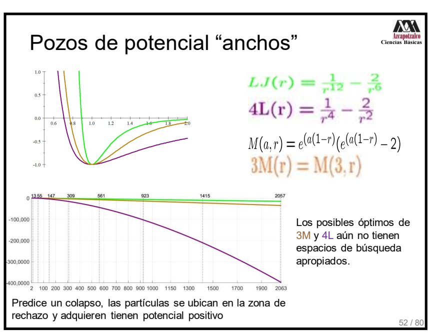
49



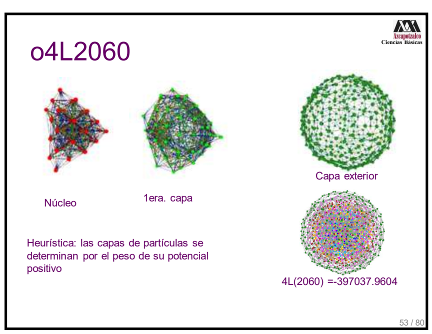
50



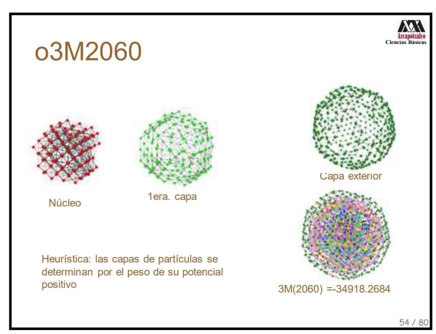
51



52

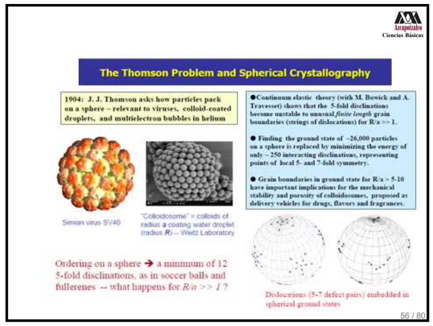


53

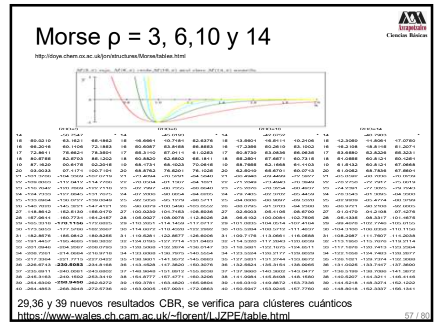


54

55

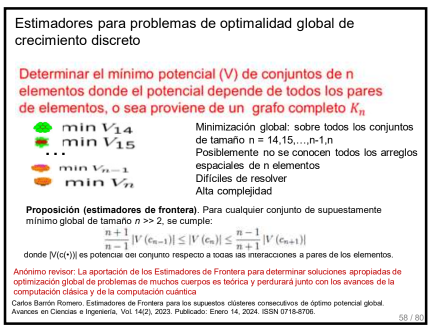


56



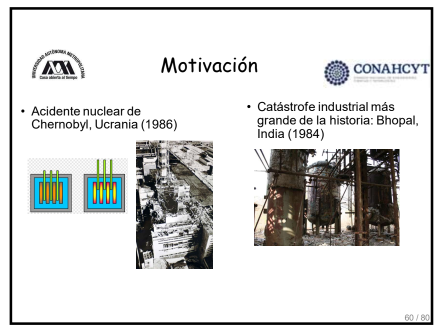
		RHO=3				RHO=6				RHO=10				RHO=14	
14		-56.7547	*	14		-45.6193	*	14		-42.6752	*	14		-40.7983	*
15	-59.9219	-63.1621	-65.4862	15	-46.6664	-49.7484	-52.6376	15	-43.5604	-46.5414	-49.2406	15	-42.3059	-44.8064	-47.0750
16	-66.2046	-69.1406	-72.1853	16	-50.6987	-53.8458	-56.8553	16	-47.2356	-50.2619	-53.1902	16	-46.2198	-48.8145	-51.2074
17	-72.8641	-75.6624	-78.3594	17	-55.3140	-57.9414	-61.0253	17	-50.8739	-53.9836	-56.9635	17	-53.6580	-52.8226	-55.3231
18	-80.5755	-82.5793	-85.1202	18	-60.8820	-62.6892	-65.1841	18	-55.2594	-57.6571	-60.7315	18	-54.0555	-60.8124	-59.4254
19	-87.1629	-90.6475	-92.2945	19	-68.4734	-68.4923	-70.0645	19	-58.7655	-62.1668	-64.4403	19	-61.5432	-60.8124	-67.9668
20	-93.9033	-97.4174	-100.7194	20	-68.8762	-76.5291	-76.1025	20	-62.5049	-65.6791	-69.0743	20	-61.9052	-68.7836	-67.5694
21	-101.3706	-104.3369	-107.6719	21	-73.4094	-76.5291	-84.5848	21	-66.4948	-69.4499	-72.5927	21	-65.8592	-68.7836	-76.0239
22	-109.8063	-112.0412	-114.7706	22	-78.8504	-81.1367	-84.1821	22	-71.2049	-73.4943	-76.3949	22	-70.2750	-72.7917	-75.6619
23	-116.7642	-120.7869	-122.7118	23	-82.7997	-86.7355	-88.8640	23	-75.2076	-78.3254	-80.4937	23	-74.2391	-77.3025	-79.7243
24	-124.7333	-127.8845	-131.7675	24	-87.2006	-90.6854	-94.6205	24	-79.7405	-82.3702	-85.4459	24	-78.3543	-81.3095	-84.3300
25	-133.6964	-136.0727	-139.0049	25	-92.5056	-95.1279	-98.5711	25	-84.0606	-86.9897	-89.5328	25	-82.9939	-85.4774	-88.3799
26	-140.7820	-145.3221	-147.4121	26	-96.6879	-100.5496	-103.0552	26	-88.0795	-91.3703	-94.2388	26	-86.9721	-90.2108	-92.6005
27	-148.8642	-152.5139	-156.9479	27	-100.9239	-104.7453	-108.5936	27	-92.6003	-95.4195	-98.6799	27	-91.0479	-94.2198	-97.4276
28	-157.9644	-160.7734	-164.2457	28	-105.9927	-108.9978	-112.8026	28	-96.6192	-100.0084	-102.7595	28	-95.4335	-98.3317	-101.4675
29	-165.3318	**-170.1156**	-172.6825	29	-110.2651	-114.1459	-117.0717	29	-101.0835	-104.0514	-107.4164	29	-99.4678	-102.7746	-105.6155
30	-173.5853	-177.5786	-182.2667	30	-114.6672	-118.4328	-122.2992	30	-105.5284	-108.5712	-111.4837	30	-104.3100	-106.8358	-110.1156
31	-182.8576	-185.9842	-189.8255	31	-119.5281	-122.8577	-126.6006	31	-109.7176	-113.0661	-116.0588	31	-108.2987	-111.7607	-114.2038
32	-191.4457	-195.4685	-198.3832	32	-124.0195	-127.7714	-131.0483	32	-114.5320	-117.2843	-120.6039	32	-113.1950	-115.7676	-119.2114
33	-201.0946	-204.2087	-208.0793	33	-128.5068	-132.2874	-136.0147	33	-118.5681	-122.1675	-124.8511	33	-117.1878	-120.7413	-123.2364
34	-208.7261	-214.0684	-216.9718	34	-133.6068	-136.7975	-140.5554	34	-123.5524	-126.2177	-129.8029	34	-122.1058	-124.7483	-128.2877
35	-217.3364	-221.7715	-227.0422	35	-138.9601	-141.9572	-145.0883	35	-127.5831	-131.2744	-133.8672	35	-126.1021	-129.7374	-132.3088
36	-226.6743	**-230.5083**	-234.8168	36	-143.4528	-147.3820	-150.3076	36	-132.5624	-135.3154	-138.9965	36	-131.0025	-133.7447	-137.3690
37	-235.6911	-240.0081	-243.6802	37	-148.9648	-151.8912	-155.8038	37	-137.9660	-140.3602	-143.0477	37	-136.5199	-138.7086	-141.3872
38	-245.3163	-249.1592	-253.3419	38	-154.8777	-157.4771	-160.3296	38	-141.9984	-145.8498	-148.1580	38	-140.5207	-144.3211	-146.4146
39	-254.6309	**-258.9450**	-262.6272	39	-159.3781	-163.4820	-165.9894	39	-146.0310	-149.8872	-153.7336	39	-144.5218	-148.3274	-152.1222
40	-264.4853	-268.3948	-272.5736	40	-163.9005	-167.9931	-172.0863	40	-150.5947	-153.9245	-157.7760	40	-148.8018	-152.3337	-156.1341

57



58

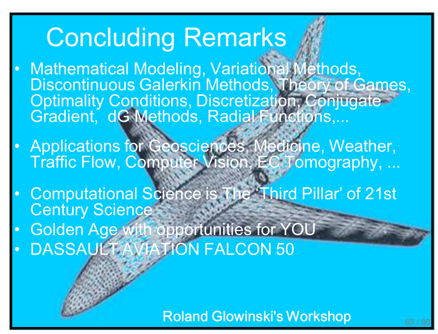
59



60

61

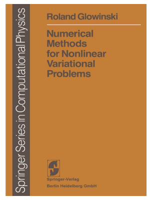
62



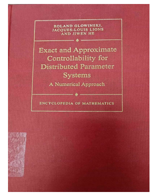
63

64 / 80

64



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.



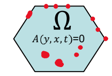
ICIAM 1995
Roland Glowinski (1937-2022)
Jacques-Louis Lions (1928-2001)
Jiwen He
R. Glowinski, J. L. Lions, and J. He. Exact and Approximate Controllability for Distributed Parameter Systems. Encyclopedia of Mathematics. Cambrigde University Press, 2008.

65 / 80

65

Control Exacto y Aproximado sobre Ecuaciones Diferenciales Parciales

Γ frontera de $\Omega \subset R^d$, d=1,2,3,..



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

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

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

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

Control aproximado
$J(u) = \frac{1}{2}\int_{(x,t)\in Q} \|u\|^2 dxdt + \frac{k_1}{2}\int_{x\in\Omega} \|y(x,T,u) - y_T(x)\|^2 dx$
donde $y(x,T,u)$ es la solución de $\boldsymbol{\mathcal{A}}(y,x,t) = \boldsymbol{\mathcal{B}}(u)$

66 / 80

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 $\boldsymbol{\mathcal{A}}(y,x,t) = \boldsymbol{\mathcal{B}}(u)$.
- 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 / 80

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

$$\mathscr{U}_1 = L^2(\omega_1 \times (0,T)), \qquad \mathscr{U}_2 = L^2(\omega_2 \times (0,T)),$$

where

$$\omega_1, \omega_2 \subset \Omega \quad \text{and} \quad \omega_1 \cap \omega_2 = \emptyset.$$

Finally, we consider the functionals J_1 and J_2 given by

$$J_i(v_1, v_2) = (\alpha_i/2)\int_{\omega_i \times (0,T)} |v_i|^2 \, dx \, dt + (k_i/2)\int_{\omega_{di} \times (0,T)} |y - y_{i,d}|^2 \, dx \, dt + (l_i/2)\int_{\omega_{Ti}} |y(T) - y_{i,T}|^2 \, dx,$$

for every $(v_1, v_2) \in \mathscr{U}_1 \times \mathscr{U}_2$, where $\omega_{di}, \omega_{Ti} \subset \Omega$, $i = 1, 2$, and the function y is defined as the solution of

$$\begin{aligned}
&\partial y/\partial t - \Delta y = f + v_1\chi_{\omega 1} + v_2\chi_{\omega 2}, && \text{in } Q,\\
&y(x,0) = y_0(x), && \text{in } \Omega,\\
&y = g_1, && \text{on } \Sigma_1,\\
&\partial y/\partial n = g_2, && \text{on } \Sigma_2,
\end{aligned}$$

with $f, g_i, y_0, y_{i,d}, y_{i,T}$ being smooth enough functions, $\alpha_i > 0$, $k_i \geq 0$, $l_i \geq 0$, and $k_i + l_i > 0$, $i = 1, 2$.

68 / 80

68

Metodología de

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

69 / 80

69

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

Carlos Barrón Romero

International Seminar on Applied Analysis Evolution Equations and Control
Notas del curso
A BRIEF INTRODUCTION ON THE OPTIMAL CONTROL OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS
Roland Glowinski
Workshop en Métodos Numéricos de Optimización y de Control Optimo en PDE,
Guanajuato, 2006.

May-2011

https://academicos.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 / 80

70

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

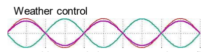
- Waves and control

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

Robotics

Weather control

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



C. Barrón and I.A. Kakadiaris. A Convex Penalty Method for Optical Human Motion Tracking. In ACM International Workshop on Video Surveillance (IWVS), Berkeley, CA, November 7, 2003.

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 / 80

71

Problema abierto

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

"Estoy seguro de que a Lions le hubiese 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 semilineal

$$\begin{cases} y_{tt} - y_{xx} + y^3 = \chi_\omega(x)u(t,x) & \text{en} \quad (0,1)\times(0,T),\\ y = 0 & \text{para} \quad t \in (0,T);\ x = 0,1\\ y(0) = y_0, \quad y_t(0) = y_1 & \text{en} \quad (0,1). \end{cases} \qquad (1)$$

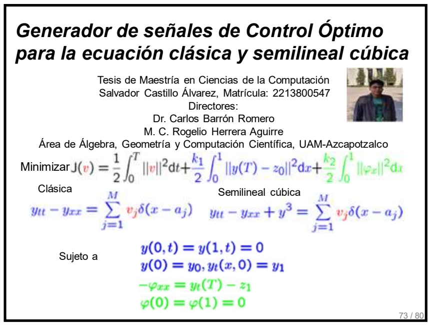
$$y(T) \equiv y_t(T) \equiv 0, \qquad (2)$$

[ZZ] X. Zhang y E. Zuazua, Exact controllability of the semilinear wave equation, en *"Open problems in mathematical systems theory and control"*, en vías de publicación.(`http://www.inma.ucl.ac.be/ blondel/op/`).

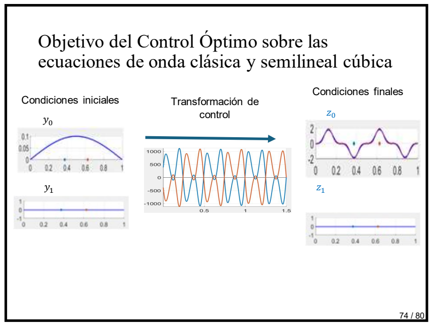
Respuesta en Control Óptimo Aproximado Numérico:
No hay controles puntuales para regresar al estado Z_0=0,Z_1=0 de una perturbación.
C. Barrón-Romero, On the controllability of a Cubic Semi-Linear Wave Equation, International Conference on Control, Decision and Information Technologies, CoDIT'19, Paris,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

72 / 80

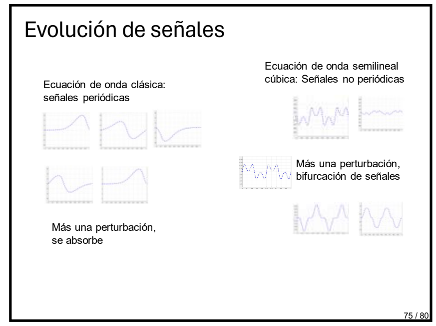
72



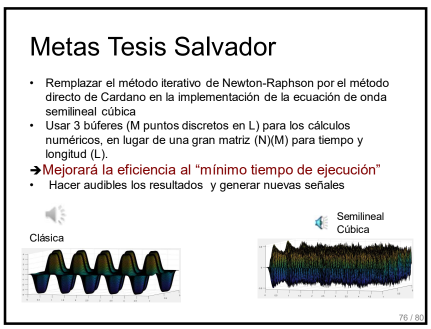
73



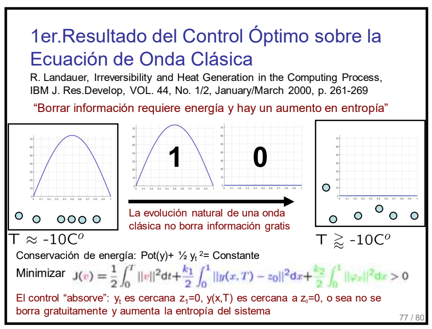
74



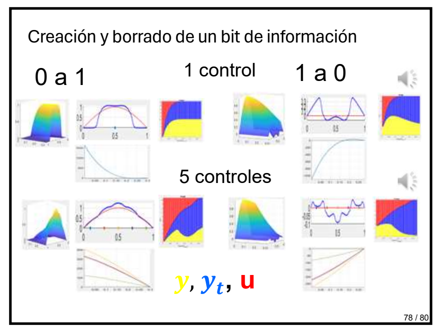
75



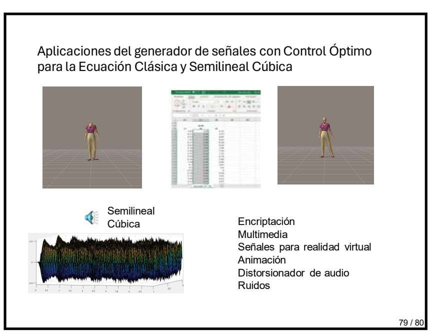
76



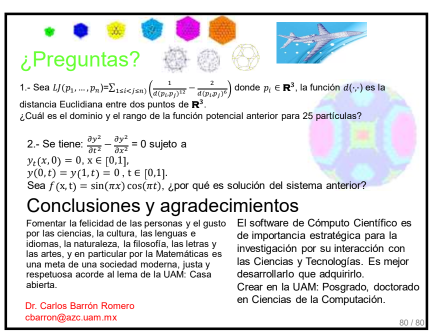
77



78



79



80