

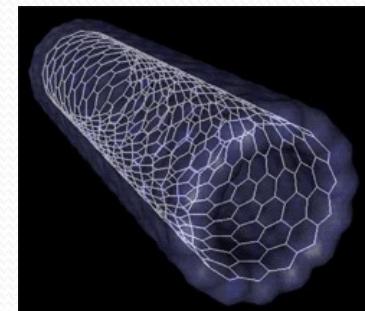
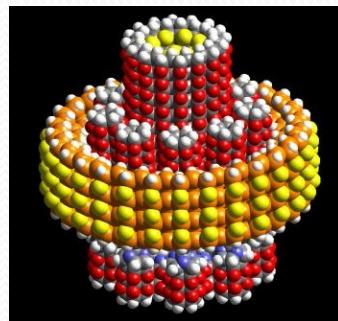


# Universidad Nacional de Colombia sede Manizales

## PCM COMPUTATIONAL APPLICATIONS

# Contenido

- Presentación del GTA PCM Computational Applications.
- Líneas de Investigación
- Trabajos
- Conexiones
- Productos



# **PROFESORES PCM COMPUTATIONAL APPLICATIONS**

**Elisabeth Restrepo Parra,**

**Ing. Electricista, MSc. Física, Dr. Ingeniería**

**Profesora Titular – Dedicación Exclusiva**

**Departamento de Física y Química**

**Investigadora Senior, Colciencias**

**Juan Carlos Riaño Rojas**

**Matemático, MSc. Matemáticas, Dr. Ingeniería**

**Profesor Asociado – Dedicación Exclusiva**

**Departamento de Matemáticas y estadística,**

**Investigador Asociado, Colciencias**

# Grupo PCM Computational Applications

## 2006- Actual, categoría B

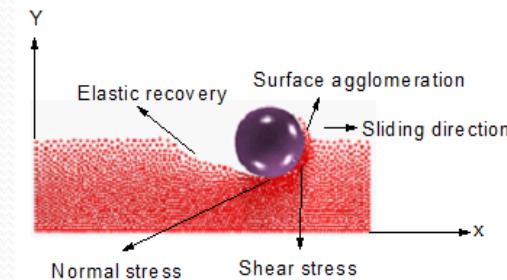
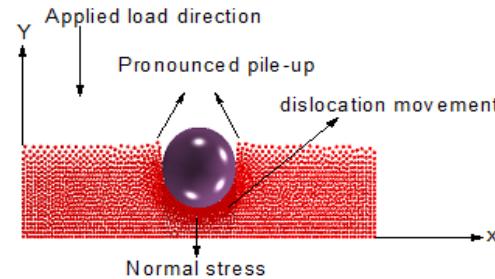
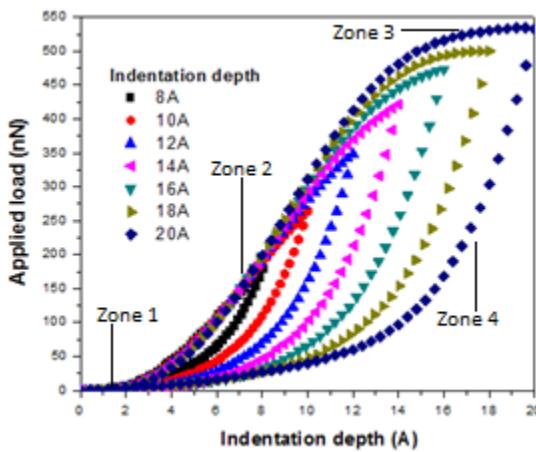
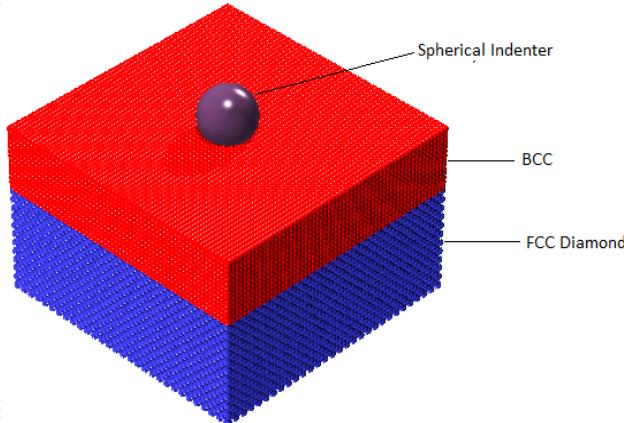
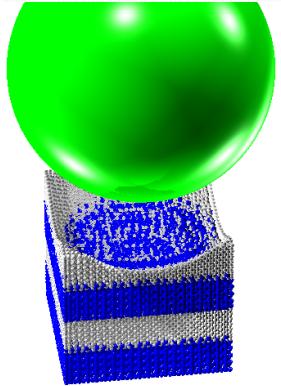
INTEGRANTES	NÚMERO
PROFESORES	2
ESTUDIANTES DE DOCTORADO	5
ESTUDIANTES DE MAESTRÍA	10
ESTUDIANTES DE PREGRADO	10



# Líneas de Investigación

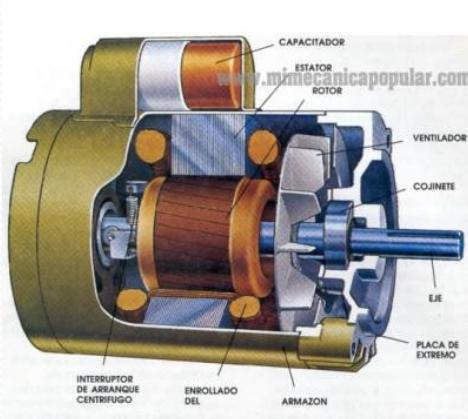
- Modelamiento de propiedades mecánicas de recubrimientos empleando el método de Dinámica Molecular (DM)
- Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo.
- Procesamiento digital de imágenes y de señales
- Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos.

# Modelamiento de propiedades mecánicas de recubrimientos empleando Dinámica Molecular



- Basado en las leyes de Newton
- Sistemas de bajas dimensiones (atómicas)
- Obtención de dureza, elasticidad, etc

# Materiales magnéticos



# Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo.

## Nanopartículas



(a)



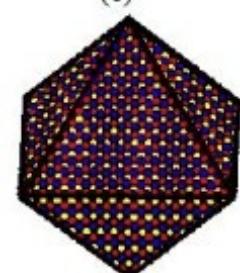
(b)



(c)



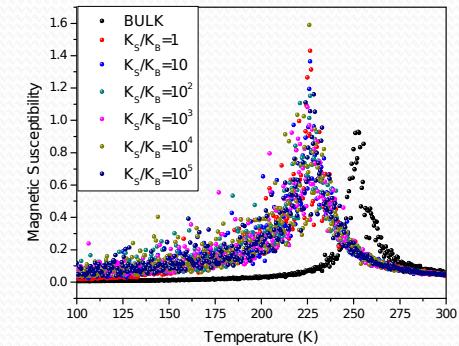
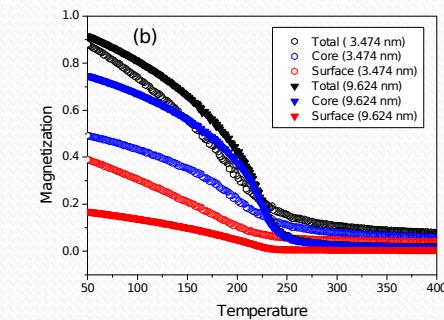
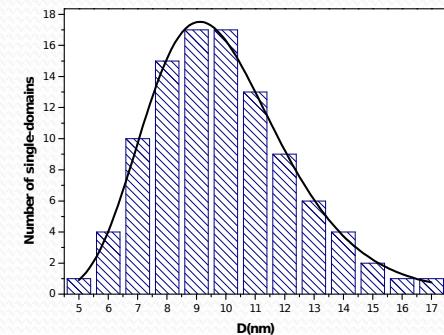
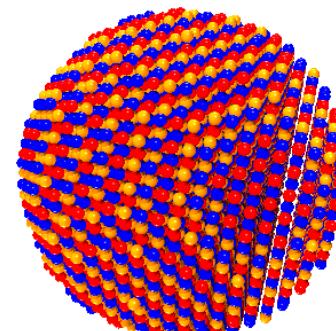
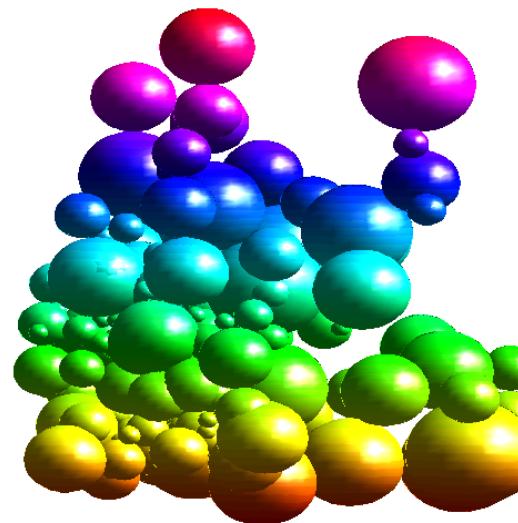
(d)



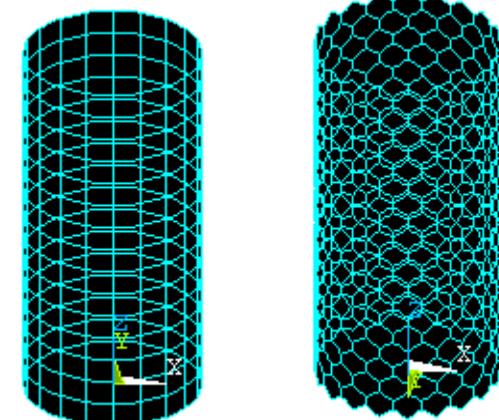
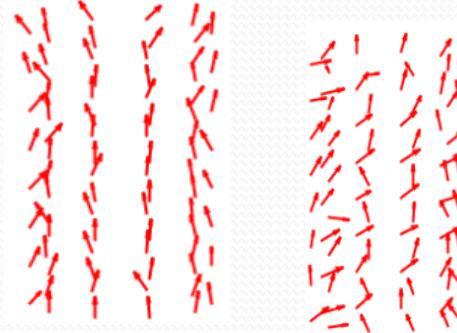
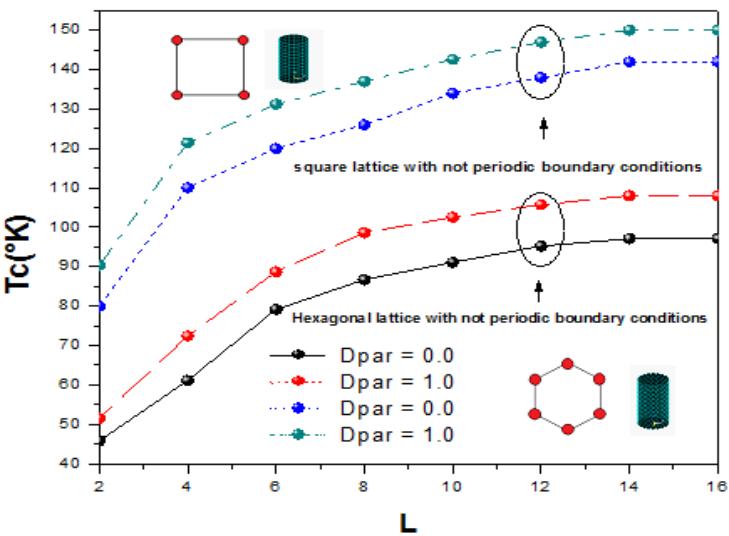
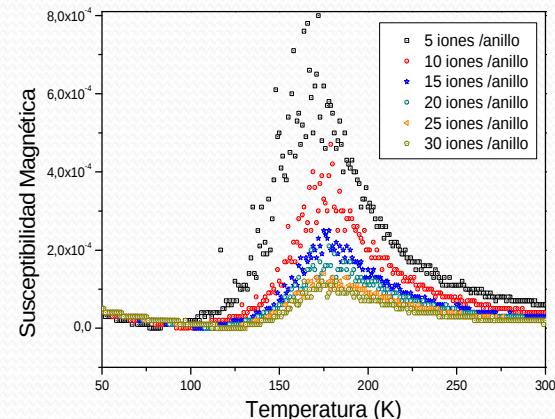
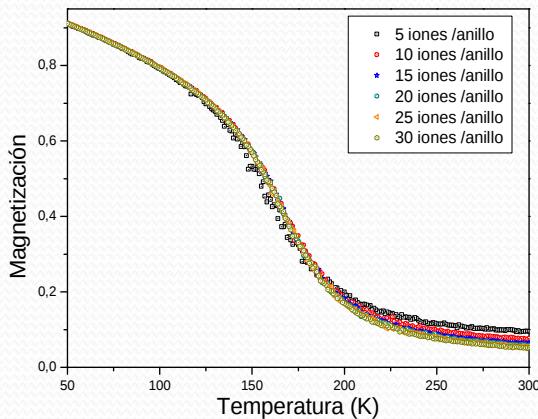
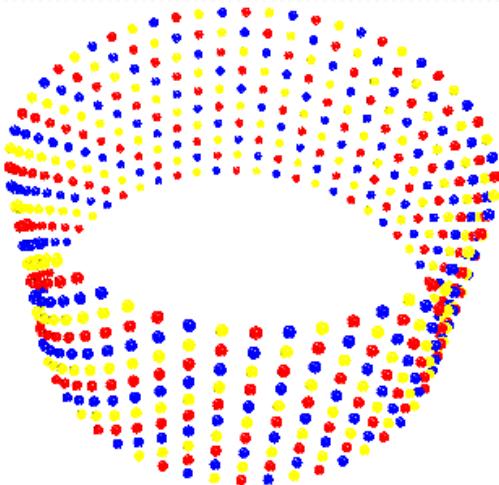
(e)



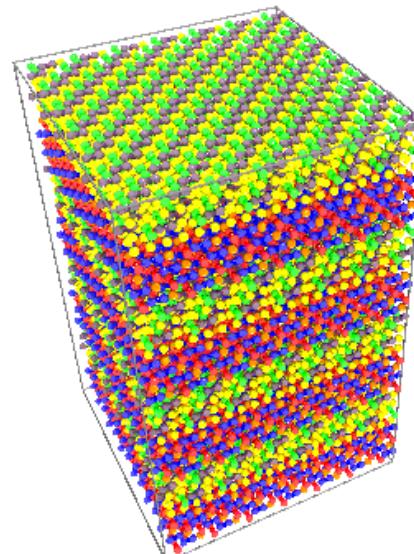
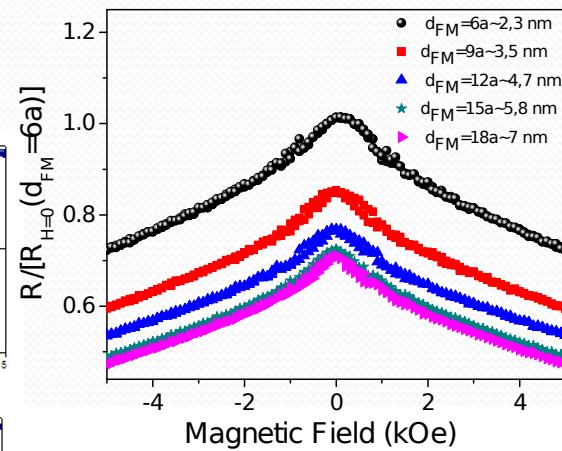
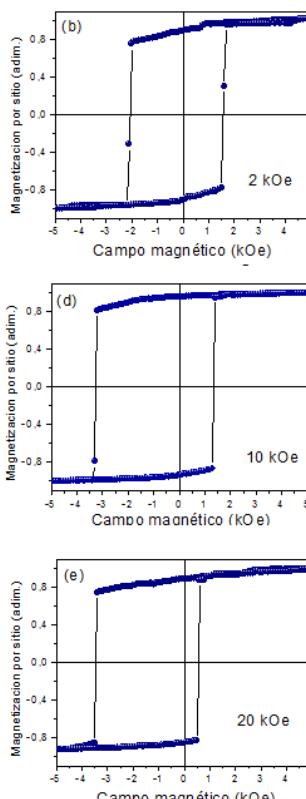
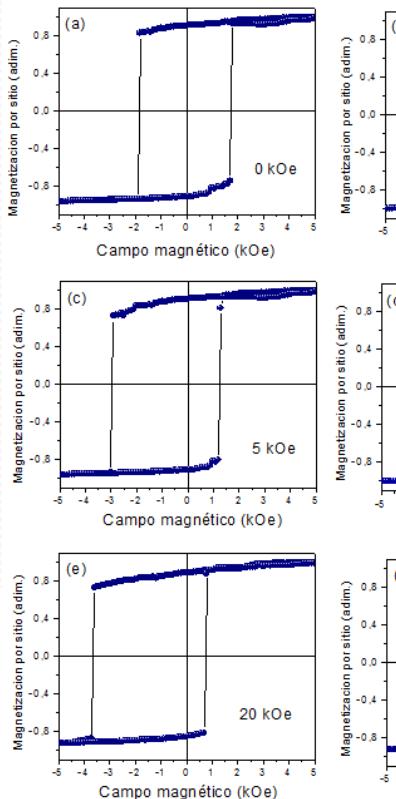
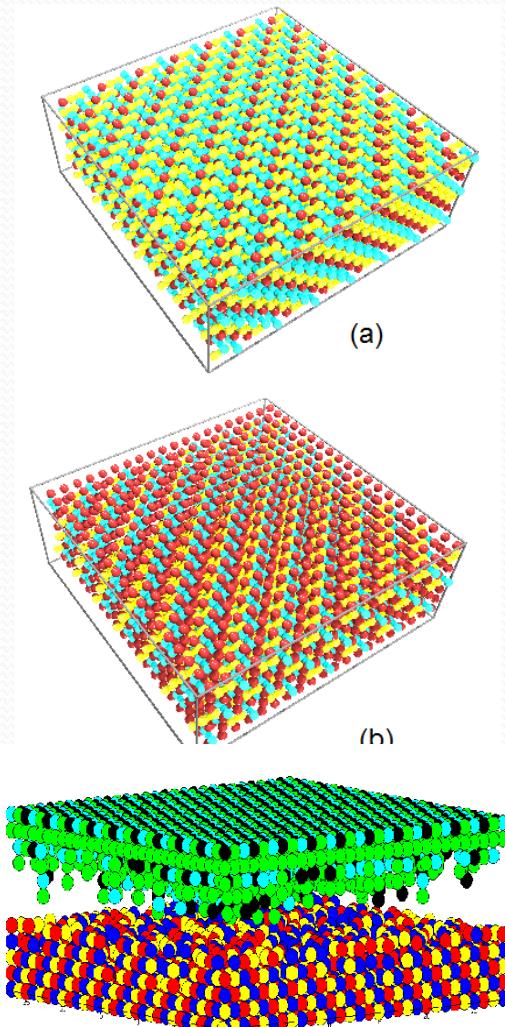
(f)



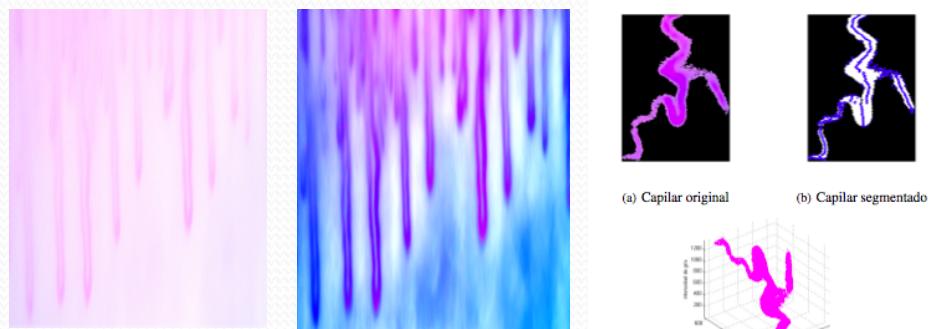
# Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo. - NANOTUBOS



# Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo. - PELICULAS DELGADAS



# Procesamiento digital de imágenes como apoyo al diagnóstico de enfermedades vasculares del tejido conectivo (Lupus, esclerodermia, )



**Lema 1** La función objetivo

$$J_4(W, D) = d^T \left( B \cdot \sum_{i=1}^K w_i w_i^T + \delta I_d \right)^{-1} A \cdot \sum_{i=1}^k w_i w_i^T d$$

converge.

**Teorema 1** Si  $C^{(r)} \rightarrow \hat{C}$  y  $Z^{(r)} \rightarrow \hat{Z}$ , entonces  $D^{(r)} \rightarrow \hat{D}$ .

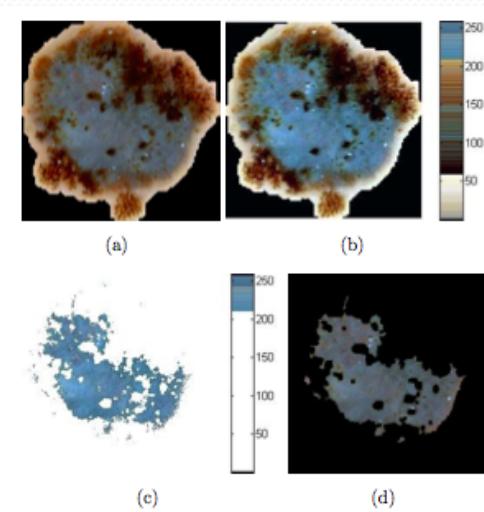
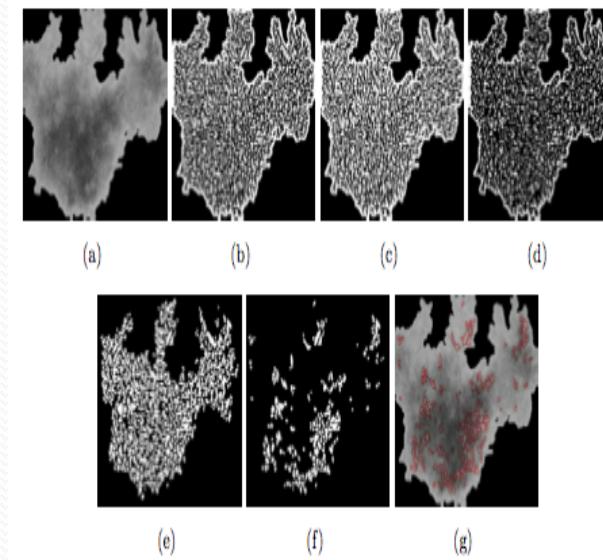
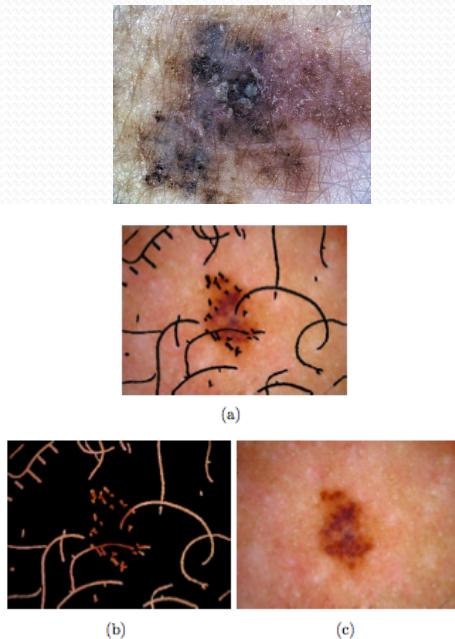
**Teorema 2** Si  $f(x)$  satisface las dos hipótesis anteriores y  $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$ ; si además, cada uno de los siete métodos en línea generan una sucesión infinita  $x_k$ , entonces:  $\lim_{k \rightarrow \infty} (-\nabla f(x_k)^T d_k / \|d_k\|)^2 = 0$ .

# Procesamiento digital de imágenes dermatoscópicas para la identificación de melanomas



## Herramienta Soporte al Diagnóstico del Melanoma usando Imágenes Dermatoscópicas

Cristian Felipe Ocampo Blandón



# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

## Surface roughness estimation by 3D stereo SEM reconstruction

Juan Camilo Henao Londoño

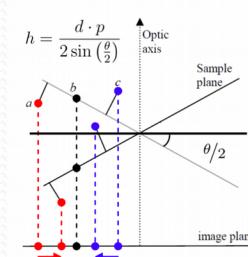
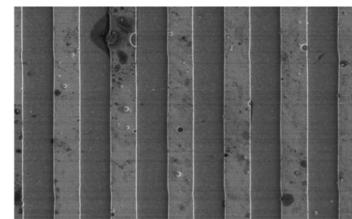
**Advisor:** Ph.D. Juan Carlos Riaño Rojas  
**Co-advisor:** Ph.D. Juan Bernardo Gómez Mendoza

Scanning Electron Microscope (SEM)



Figure : SEM<sup>2</sup>.

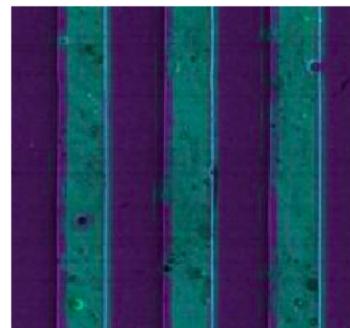
Grid (1000x)



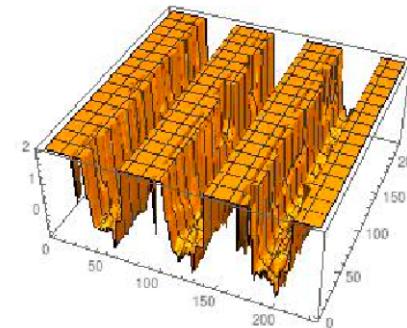
Where

- $h$  is the height
- $d$  is the disparity
- $p$  is the size of the pixel (i.e. microns)
- $\theta$  is the tilt angle

Disparity Map



3D Reconstruction



# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

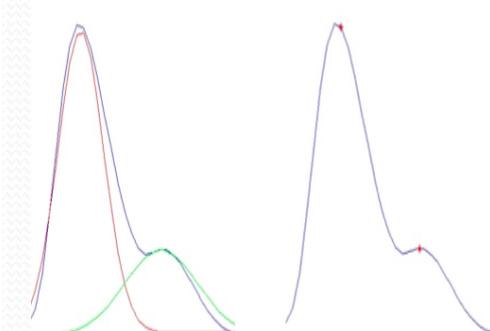
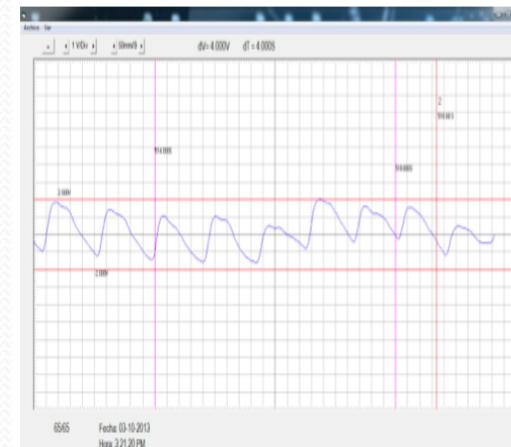
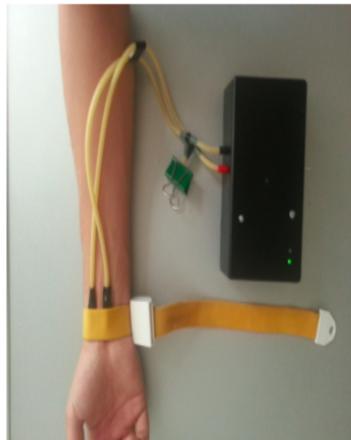
## ANÁLISIS DE PRESIÓN Y RIGIDEZ ARTERIAL DE FORMA NO INVASIVA

Sebastián Alzate Marín

Director: Físico Pedro José Arango Arango

Codirector: Matemático Juan Carlos Riaño Rojas

Asesor: Cardiólogo Mauricio Pineda

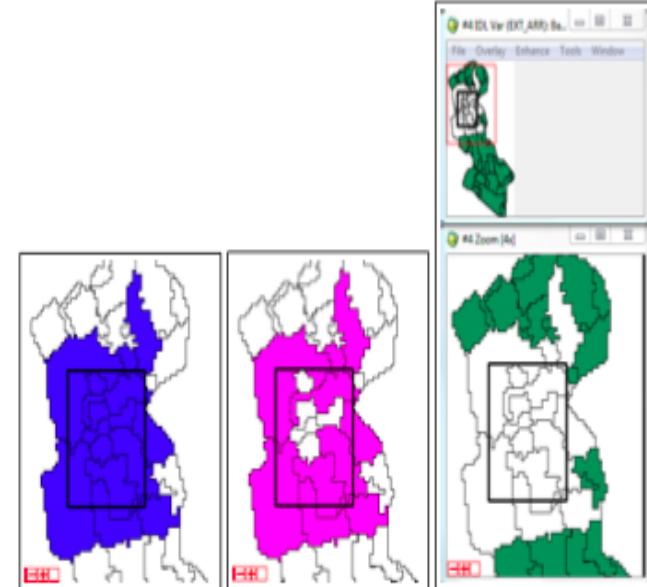
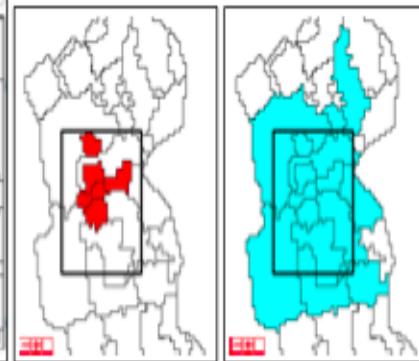
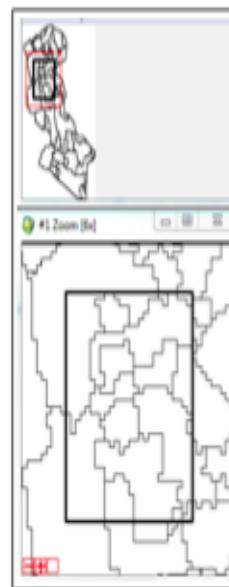
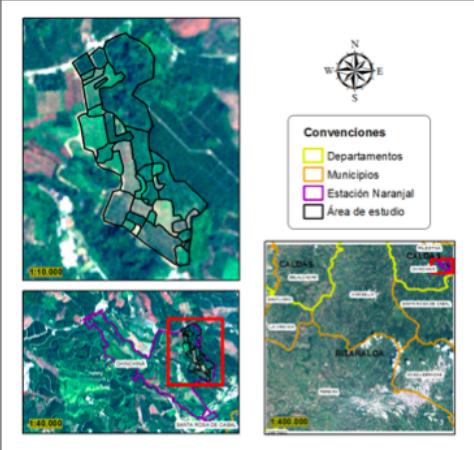


# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos



**Aplicación espectral y topológica en el procesamiento de imágenes satelitales**

Oscar Gonzalo Castillo Romero



# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos



## Caracterización y Clasificación Morfológica de Imágenes de Ultrasonido Como Herramienta al Diagnóstico de Lesiones en los Tendones de Conejo

Daniel Alberto Chávez Verbel

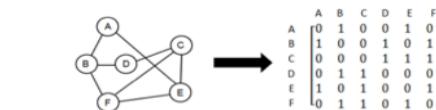
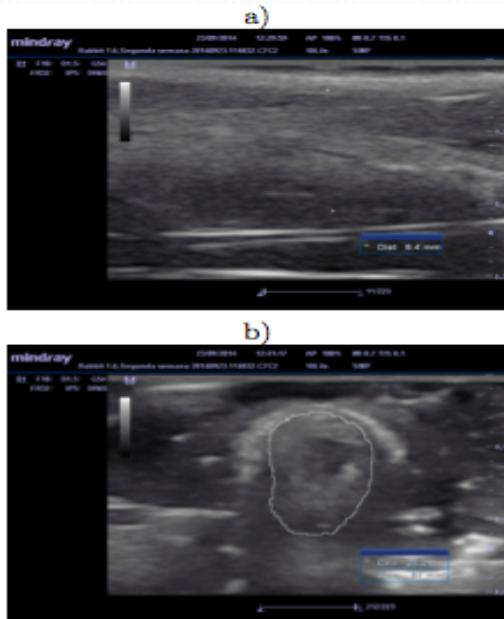


Figura 2.1: Esquema de una red compleja y su matriz de adyacencia

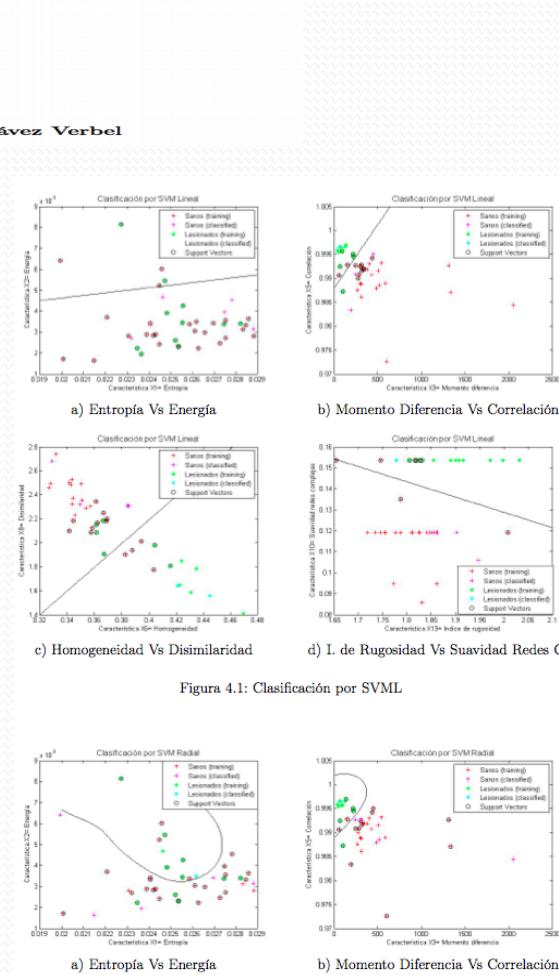
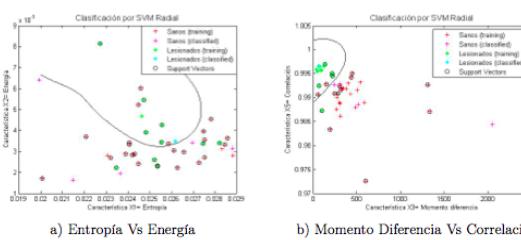


Figura 4.1: Clasificación por SVML



# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

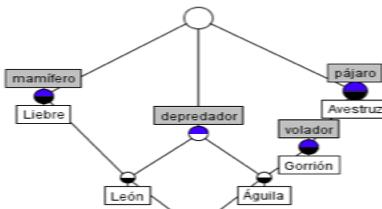


Aspectos topológicos en el Análisis de  
Conceptos Formales  
Topological aspects in Formal Concept Analysis

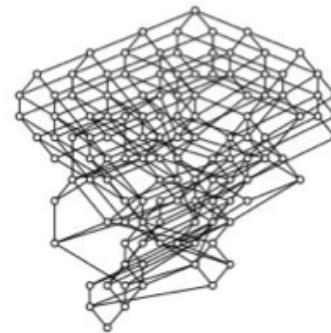
Johana Ramírez Gaviria

	depredador	volador	pájaro	mamífero
León	×			×
Gorrión		×	×	
Aguila	×	×	×	
Liebre				✗
Avestruz		✗		

Conceptos Formales	Objetos
Atributos	
depredador	
volador	
pájaro	
mamífero	
León	mamífero
Gorrión	depredador
Aguila	depredador
Liebre	volador
Gorrión	pájaro
Aguila	
León	depredador
Liebre	volador
Gorrión	pájaro
Aguila	
Aguila	mamífero
Gorrión	volador
Aguila	pájaro
Avestruz	



	birth rate		death rate	
	low (bl)	high (bh)	low (dl)	high (dh)
Brazil (B)	0	0.25	0.25	0.5
Czech Republic (C)	0.75	0	0	0.75
Eritrea (E)	0	1	0	0.75
France (F)	0.5	0	0	0.5
Germany (G)	1	0	0	0.75
Iran (I)	0	0.25	0.5	0.25
Israel (J)	0	0.5	0.25	0.5
Japan (J)	0.75	0	0	0.5
Kenya (K)	0	1	0	1
Malaysia (M)	0	0.75	0.5	0.25
Poland (P)	0.75	0	0	0.75
Russia (R)	0.75	0	0	1
Singapore (S)	0.75	0	0.75	0.25
United States (U)	0	0.25	0	0.5
Venezuela (V)	0	0.5	0.5	0.25



## A. Anexo A: Demostración Teorema básico sobre retículo concepto parte 1. y parte 2.

### A.1. Teorema básico sobre el retículo concepto parte 1.

Teorema.  $\mathfrak{B}(\mathbb{K})$  con  $\mathbb{K} := (G, M, I)$  es un retículo completo cuyos infimos y supremos se pueden describir así:

Sea  $\mathcal{C} = \{(A_t, B_t) \in \mathfrak{B}(\mathbb{K}) \mid t \in T\}$ ,

entonces el infimo de  $\mathcal{C}$  es

$$\wedge \mathcal{C} = \left( \bigcap_{t \in T} A_t, \left( \bigcup_{t \in T} B_t \right)^{II} \right)$$

y el supremo de  $\mathcal{C}$  es

$$\vee \mathcal{C} = \left( \left( \bigcup_{t \in T} A_t \right)^{II}, \bigcap_{t \in T} B_t \right)$$

Demostración.  
Sea  $\mathcal{C} \subseteq \mathfrak{B}(\mathbb{K})$ .

Primero veamos que  $\wedge \mathcal{C}$  y  $\vee \mathcal{C}$  son conceptos formales en  $\mathfrak{B}(\mathbb{K})$ .

$$\begin{aligned} \wedge \mathcal{C} &= \left( \bigcap_{t \in T} A_t, \left( \bigcup_{t \in T} B_t \right)^{II} \right) \\ &= \left( \bigcap_{t \in T} B_t^I, \left( \bigcup_{t \in T} B_t \right)^{II} \right) \\ &= \left( \left( \bigcup_{t \in T} B_t^I \right)^I, \left( \bigcup_{t \in T} B_t \right)^{II} \right) \end{aligned}$$

# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

MATHEMATICAL COMMUNICATIONS  
Math. Commun. 20(2015), 161–173

161

## Convergence of the steepest descent method with line searches and uniformly convex objective in reflexive Banach spaces\*

FERNANDO ANDRÉS GALLEGÓ<sup>1</sup>, JOHN JAIRO QUINTERO<sup>2</sup> AND JUAN CARLOS RIANO<sup>2,†</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Matemáticas, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21945-970 Rio de Janeiro, Brazil

<sup>2</sup> PCM Computational Applications, Universidad Nacional de Colombia, Crm 27 # 64-60 Manizales, Colombia

Received July 12, 2015; accepted August 4, 2015

**Abstract.** In this paper, we present some algorithms for unconstrained convex optimization problems. The development and analysis of these methods is carried out in a Banach space setting. We begin by introducing a general framework for achieving global convergence without Lipschitz conditions on the gradient, as usual in the current literature. This paper is an extension to Banach spaces to the analysis of the steepest descent method for convex optimization, most of them in less general spaces.

**AMS subject classifications:** 90C25, 49M29, 46N10, 46N40

**Key words:** uniformly convex functional, descent methods, step-size estimation, metric of gradient

LINE SEARCH IN REFLEXIVE BANACH SPACES

163

minimization problem: Find  $u \in E$  such that

$$f(u) = \min_{v \in E} f(v). \quad (1)$$

The line search method for solving (1) generates the following iteration:

$$u_{k+1} = u_k + \alpha_k s_k, \quad (2)$$

where  $u_k \in E$  is the current iterative point,  $s_k \in E$  is a search direction, and  $\alpha_k$  is a positive step-size.

# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

## Modelamiento Matemático del Crecimiento del Cocodrilo Especie Fuscus en Zoocriaderos

Cesar Segundo Osorio Henriquez

### Regresión PLS (PLSR)

Consideremos la matriz de entrada  $X$  de tamaño  $n \times N$  y de salida  $Y$  de tamaño  $n \times L$ , consideremos además el problema de multicolinealidad.

El método PLS sugiere construir componentes ortogonales en  $X$  y  $Y$  de la forma  $\mathbf{t} = X\mathbf{w}$  y  $\mathbf{u} = Y\mathbf{c}$ , respectivamente, donde  $\mathbf{w}$  y  $\mathbf{c}$  son vectores de peso de norma 1. Descomponiendo a  $X$  e  $Y$ , en la forma:

$$\begin{aligned} X &= TP^T + E \\ Y &= UQ^T + F \end{aligned} \quad (1)$$

Donde  $T$  y  $U$  son matrices de componentes ortogonales.  $P$  y  $Q$

**x1**=Tiempo de permanencia en el albergue (días)

**x2**=Ancho promedio de entrada (cm)

**x3**=Peso promedio de entrada (gramos)

**x4**=Densidad ( $\text{animal}/m^2$ )

**x5**=Alimentación (gramos/animal)

**x6**=Talla promedio de entrada (cm)

Y las variables de respuesta son:

**y1**= Talla promedio de salida (cm)

**y2**= Peso promedio de salida (gramos)



Aplicando el método de Regresión PLS1, se obtiene el modelo:

$$\hat{Y} = 6,3501 + \begin{bmatrix} 1,31E-01 \\ -1,48E-01 \\ 3,25E-02 \\ -1,4551E-01 \\ 1,204E-01 \\ 5,477E-01 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix}$$

# Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos



## Parameter Estimation on Molecular Models of Complex Fluids by Stochastic Optimization Techniques

Estimación de parámetros en modelos moleculares de Fluidos Complejos usando técnicas estocásticas de optimización

Carlos Fernando Ospina Trujillo

---

### Algorithm 6 Simplex Simulated Annealing

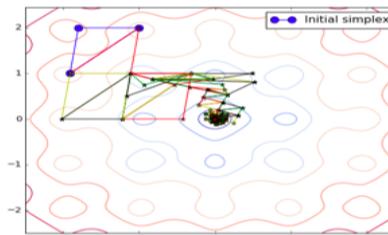
---

```

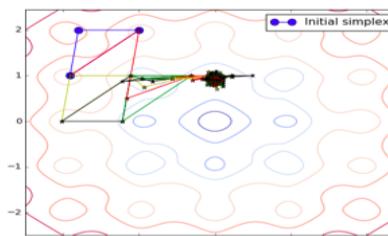
1: Label the vertices such that  $\hat{f}_1 < \hat{f}_2 < \dots < \hat{f}_{n+1}$ .
2: Compute the centroid  $x_0 = \sum_{i=1}^n x_i/n$ .
3: Compute the reflected point  $x_r = x_0 + \alpha(x_0 - x_{n+1})$  and its perturbed value  $\hat{f}_r$ , given by equation 1.8.
4: if  $\hat{f}_r \leq \hat{f}_e < \hat{f}_n$  then
5:    $x_{n+1} \leftarrow x_r$  and go to step 1
6: else if  $\hat{f}_e < \hat{f}_1$  then
7:   compute  $x_c = x_0 + \gamma(x_0 - x_{n+1})$  and  $\hat{f}_c$ 
8:   if  $\hat{f}_c < \hat{f}_r$  then
9:      $x_{n+1} \leftarrow x_c$  and go to step 1.
10: else
11:    $x_{n+1} \leftarrow x_r$  and go to step 1.
12: end if
13: else
14:   Compute  $x_c = x_0 + \rho(x_0 - x_{n+1})$  and  $\hat{f}_c$ 
15:   if  $\hat{f}_c < \hat{f}_{n+1}$  then
16:      $x_{n+1} \leftarrow x_c$  and go to step 1.
17:   else
18:      $x_i = x_1 + \sigma(x_i - x_1) \forall i \in \{2, \dots, n+1\}$  and go to step 1.
19:   end if
20: end if

```

---



(a) An example of global convergence for Simplex Simulated Annealing



(b) An example of local convergence for Simplex Simulated Annealing

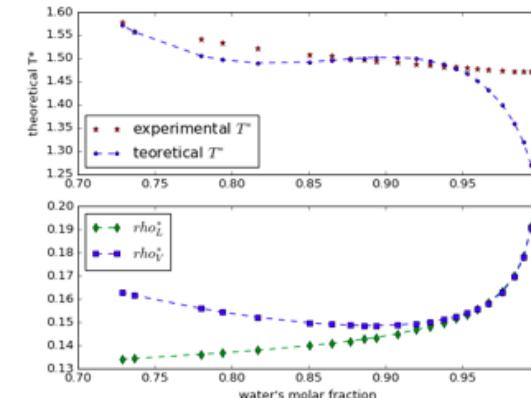
$$\frac{P}{\rho kT} = \sum_{i=1}^n x_i \frac{\mu_i}{kT} - \frac{A}{NkT}. \quad (2.67)$$

To construct an objective function that allow us to estimate the parameter set, this work had into account the equilibrium equations

$$\begin{aligned} \mu_{\text{water}}^L &= \mu_{\text{water}}^V \\ \mu_{\text{LL}}^L &= \mu_{\text{LL}}^V \\ P^L &= P^V \end{aligned} \quad (2.68)$$

The way one can join the equations 2.69 and 2.71 is by certain weights  $w_1$  and  $w_2$ ,

$$f = w_1 \sum_{i=1}^{n_1} \left( \frac{T_i^{\text{exp}} - T_i^{\text{calc}}}{T_i^{\text{exp}}} \right)^2 + w_2 \sum_{k=1}^{n_2} \left( \frac{\rho_k^{\text{exp}} - \rho_k^{\text{calc}}}{\rho_k^{\text{exp}}} \right)^2. \quad (2.72)$$



# Temas que estan en proceso

- Optimización en grupos topológicos para resolver problemas de tipo Job Shop
- Teoría de Haces Fibrados aplicados a Imágenes.
- Utilización de la termografía infrarroja como una herramienta diagnóstica de la mastitis subclínica en vacas holstein en el trópico alto.