

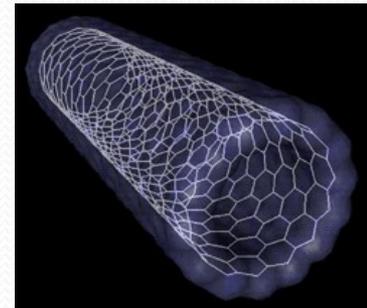
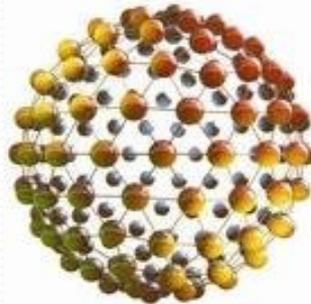
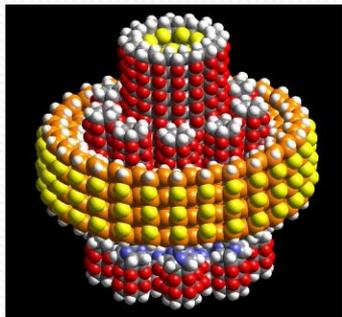
PCM
Computational Applications

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

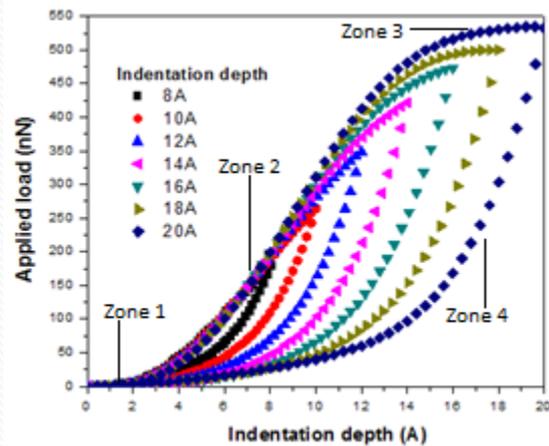
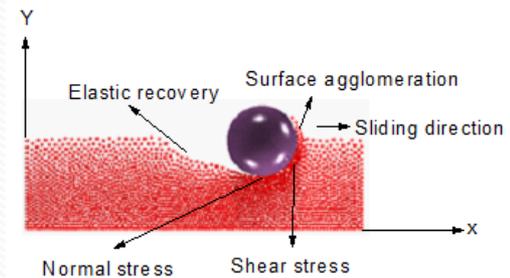
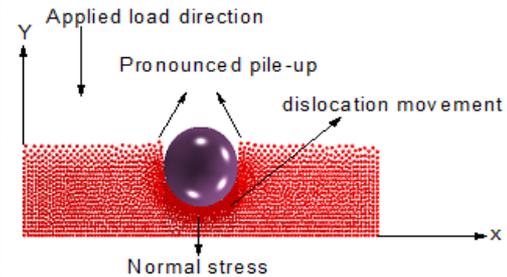
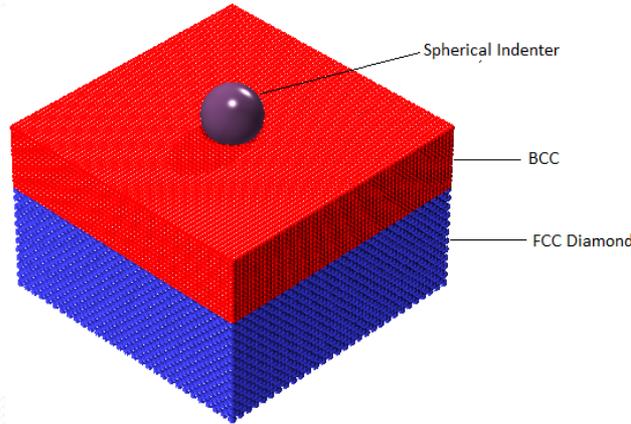
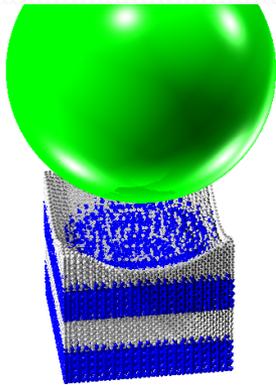
INTEGRANTES	NÚMERO
PROFESORES	2
ESTUDIANTES DE DOCTORADO	5
ESTUDIANTES DE MAESTRÍA	10
ESTUDIANTES DE PREGRADO	10



Líneas de Investigación

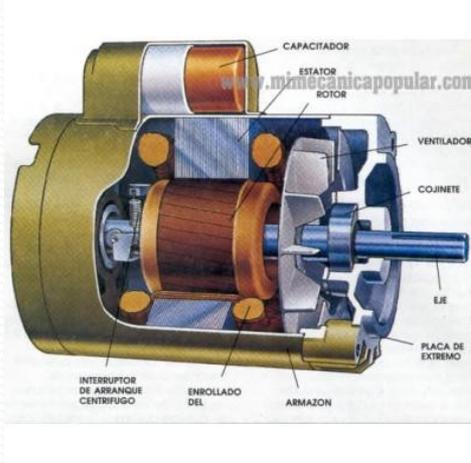
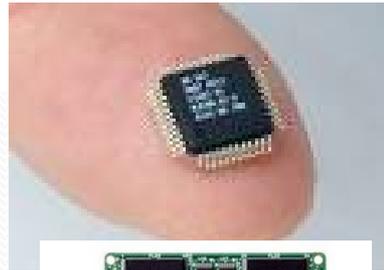
- Modelamiento de propiedades mecánicas de recubrimientos empleando el método de Dinámica Molecular (DM)
- Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo.
- Procesamiento digital de imágenes y de señales
- Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina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

Modelamiento de propiedades mecánicas de recubrimientos empleando Dinámica Molecular



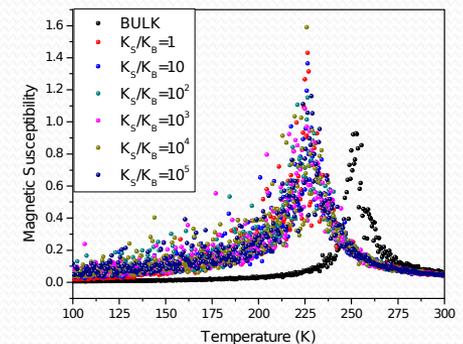
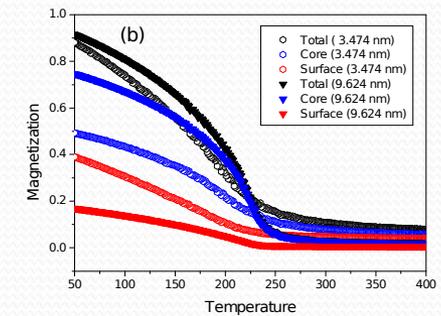
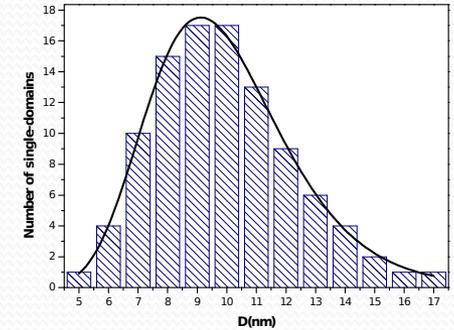
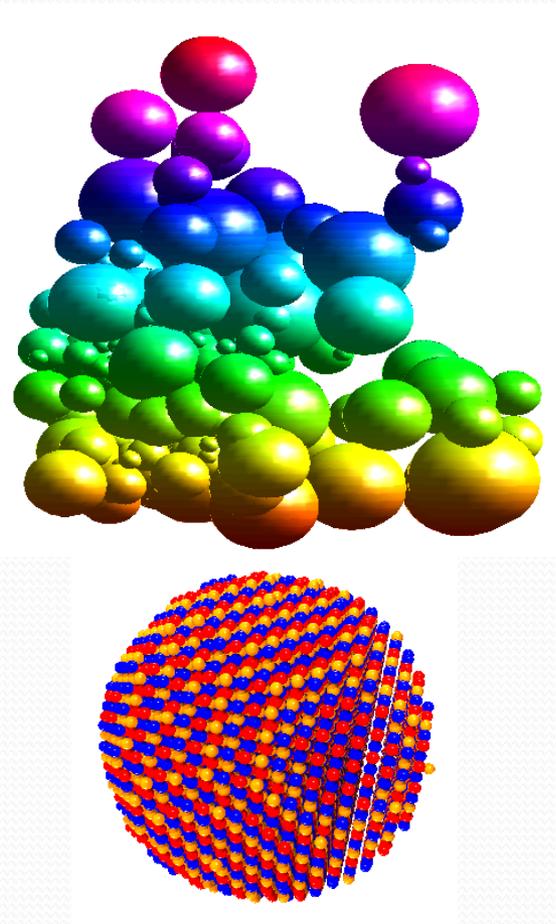
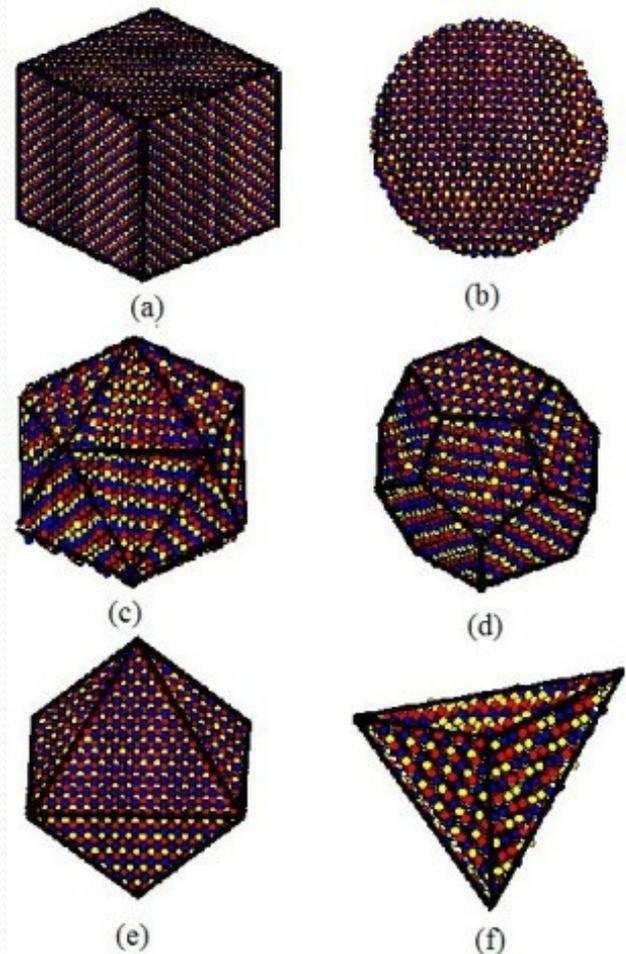
- Basado en las leyes de Newton
- Sistemas de bajas dimensiones (atómicas)
- Obtención de dureza, elasticidad, etc

Materiales magnéticos

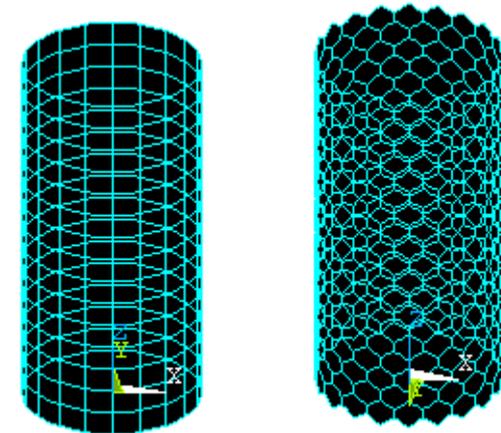
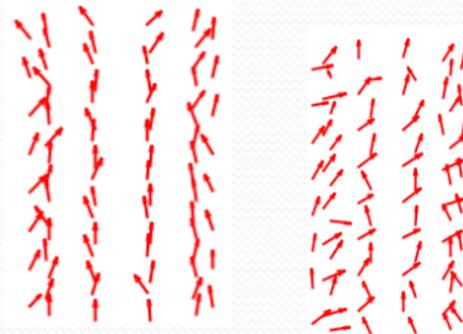
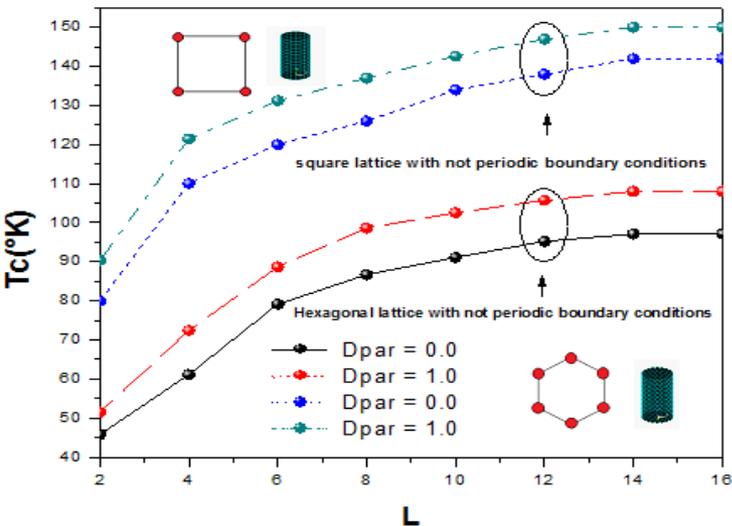
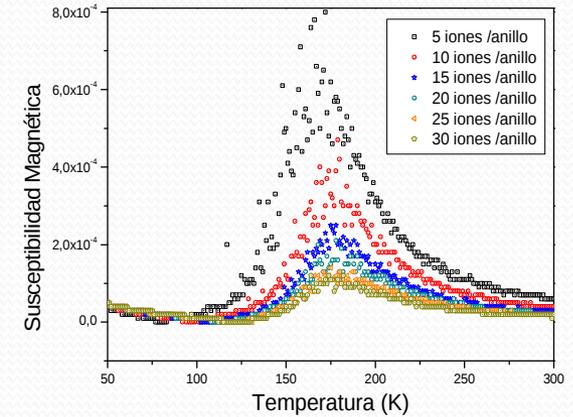
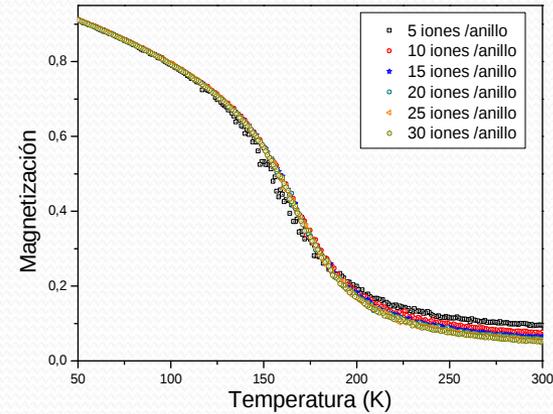
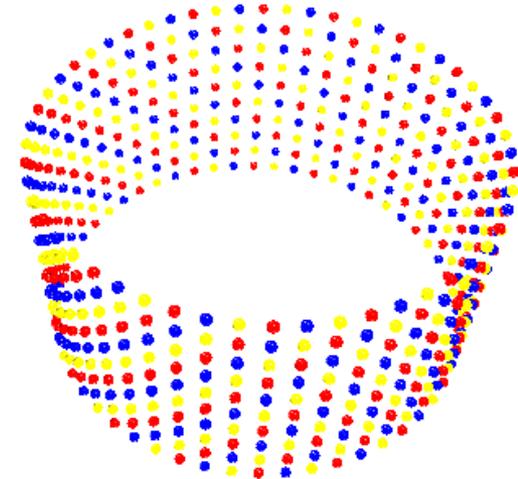


Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo.

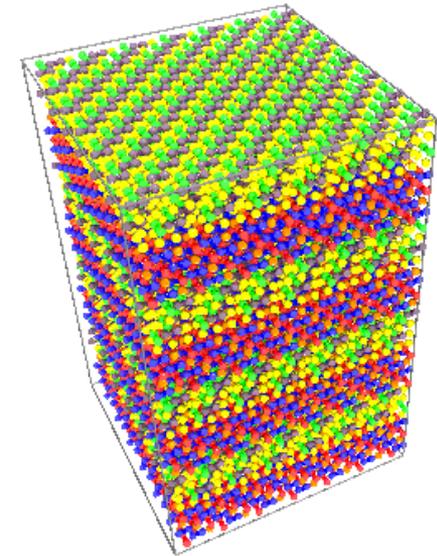
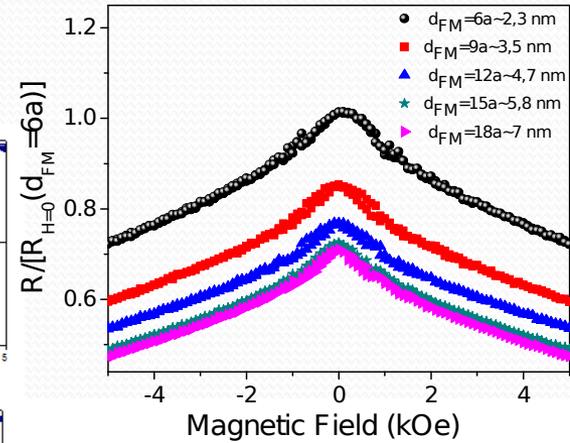
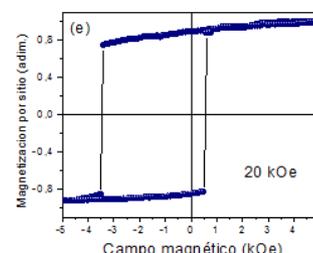
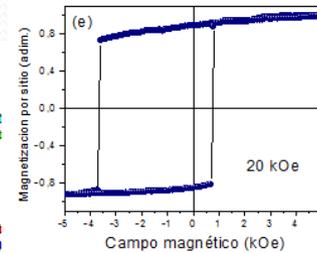
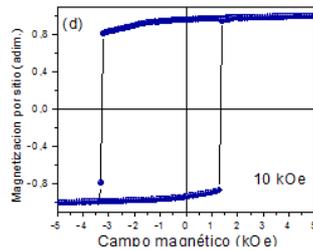
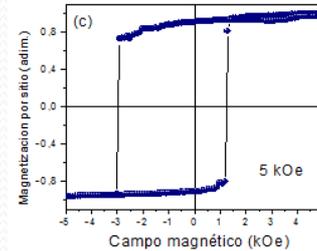
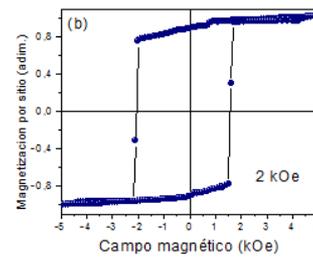
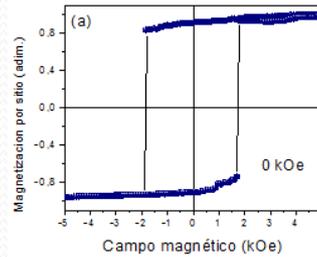
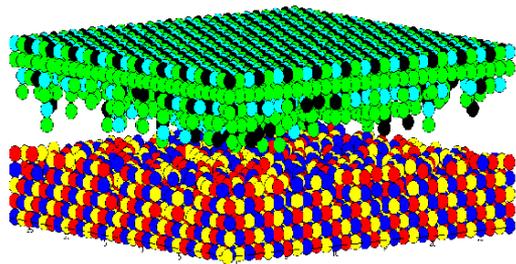
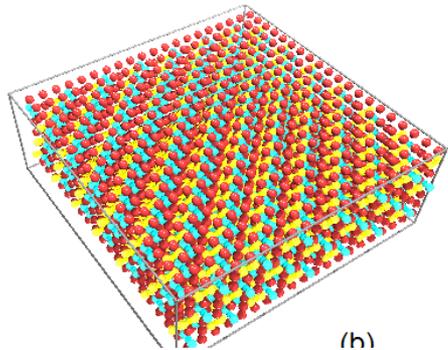
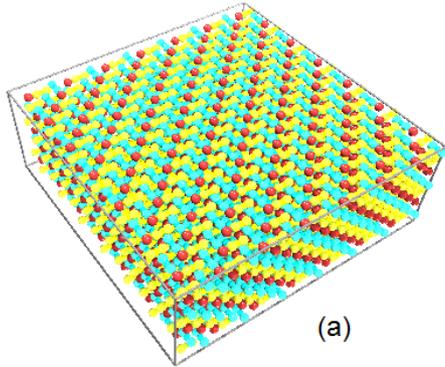
Nanopartículas



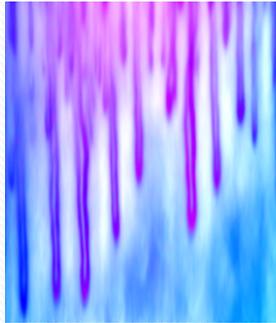
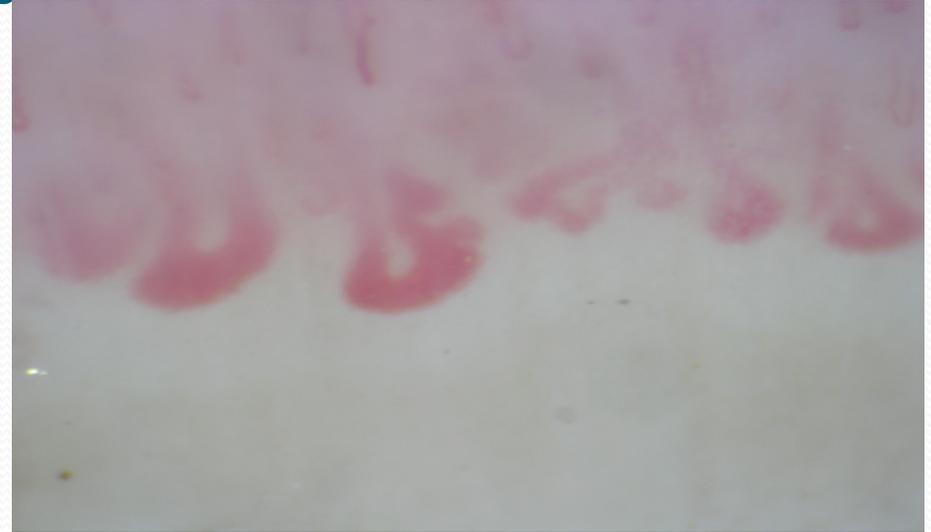
Modelamiento y simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras empleando el método de Monte Carlo. - NANOTUBOS



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

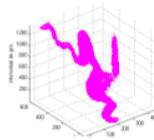


Procesamiento digital de imágenes como apoyo al diagnóstico de enfermedades vasculares del tejido conectivo (Lupus, esclerodermia.)



(a) Capilar original

(b) Capilar segmentado



Lema 1 La función objetivo

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

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

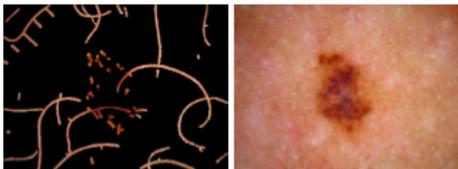


Herramienta Soporte al Diagnóstico del Melanoma usando Imágenes Dermatoscópicas

Cristian Felipe Ocampo Blandón

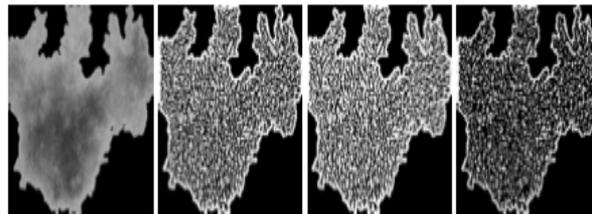


(a)



(b)

(c)

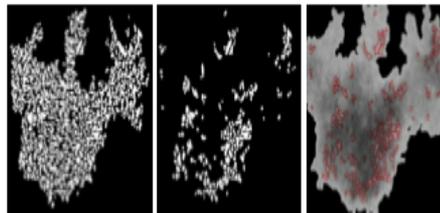


(a)

(b)

(c)

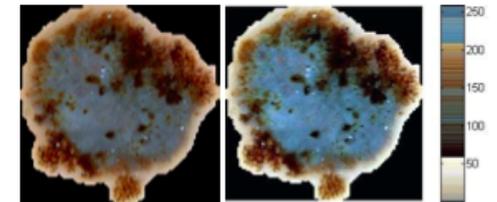
(d)



(e)

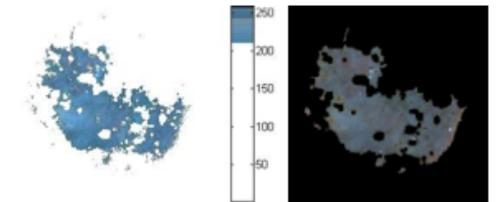
(f)

(g)



(a)

(b)



(c)

(d)

Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

Surface roughness estimation by 3D stereo SEM reconstruction

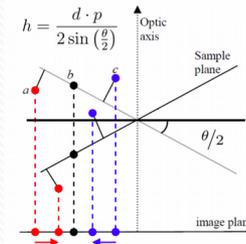
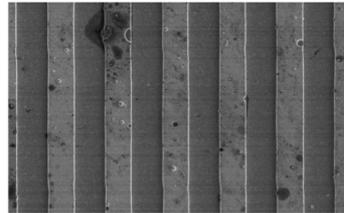
Juan Camilo Henao Londoño
Advisor: Ph.D. Juan Carlos Riaño Rojas
Co-advisor: Ph.D. Juan Bernardo Gómez Mendoza

Scanning Electron Microscope (SEM)



Figure : SEM².

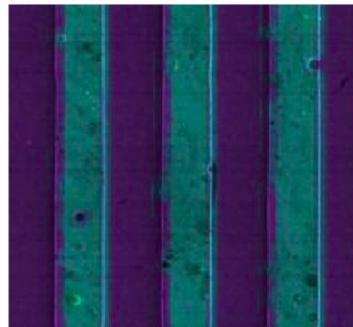
Grid (1000x)



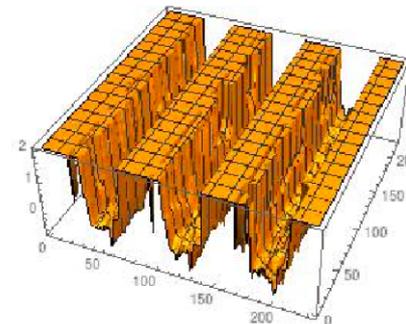
Where

- ▶ h is the height
- ▶ d is the disparity
- ▶ p is the size of the pixel (i.e. microns)
- ▶ θ is the tilt angle

Disparity Map



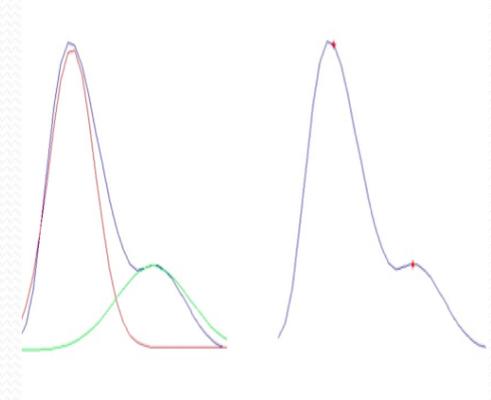
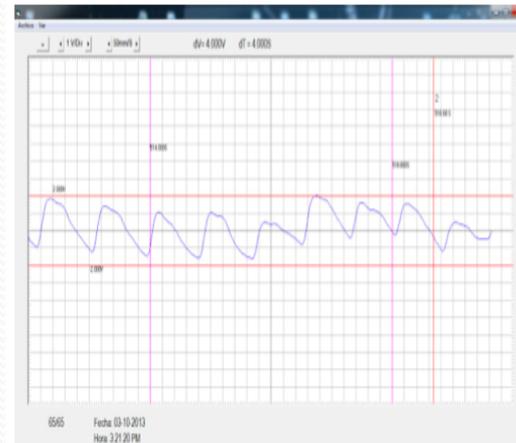
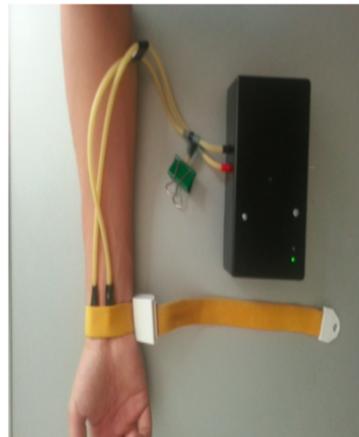
3D Reconstruction



Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

ANÁLISIS DE PRESIÓN Y RIGIDEZ ARTERIAL DE FORMA NO INVASIVA

Sebastián Alzáte Marín
Director: Físico Pedro José Arango Arango
Codirector: Matemático Juan Carlos Riaño Rojas
Asesor: Cardiólogo Mauricio Pineda



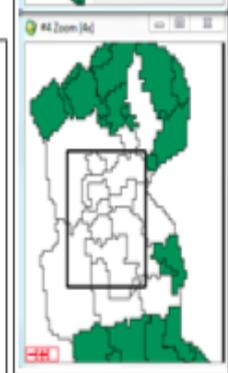
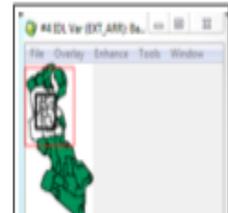
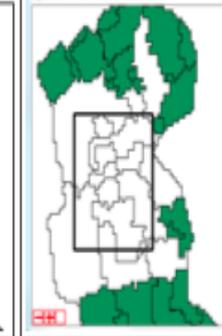
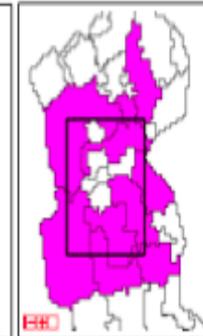
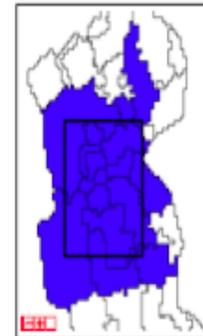
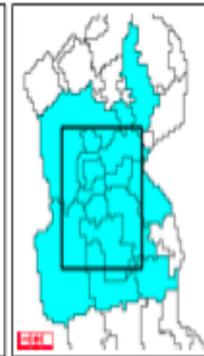
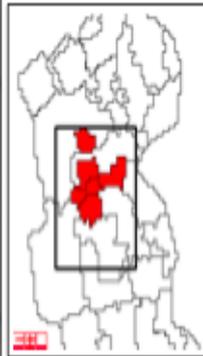
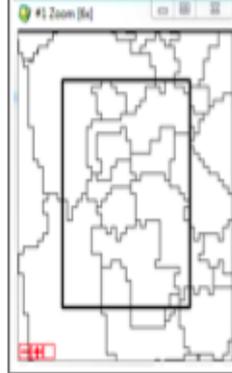
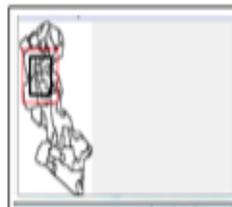
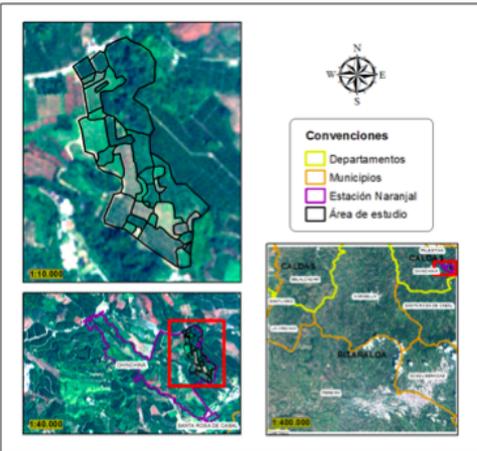
Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Aplicación espectral y topológica en el procesamiento de imágenes satelitales

Oscar Gonzalo Castillo Romero

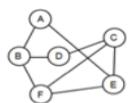
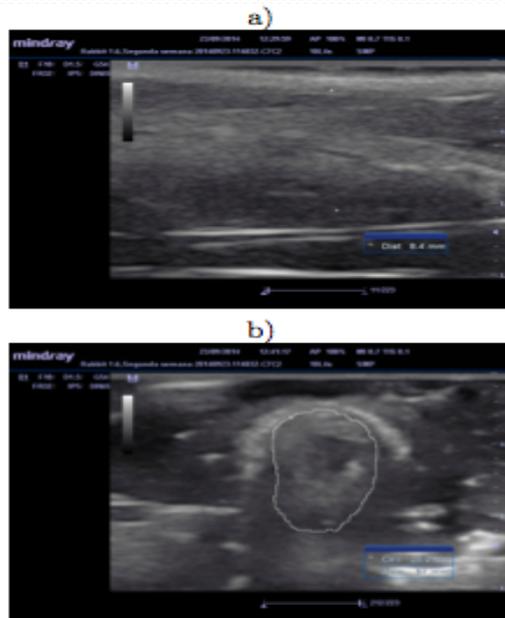


Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos



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

Daniel Alberto Chávez Verbel



	A	B	C	D	E	F
A	0	1	0	0	1	0
B	1	0	0	1	0	1
C	0	0	0	1	1	1
D	0	1	1	0	0	0
E	1	0	1	0	0	1
F	0	1	1	0	1	0

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

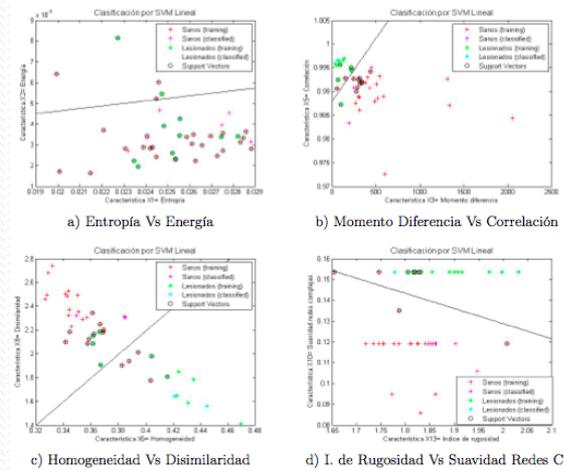
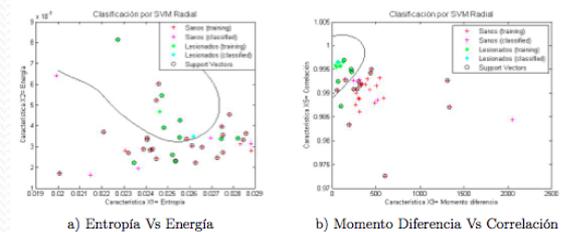


Figura 4.1: Clasificación por SVML



Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

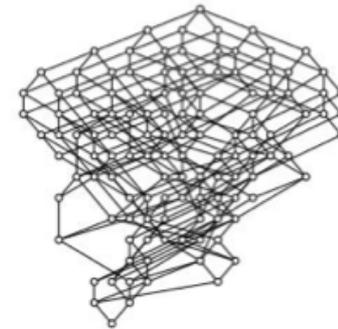


Aspectos topológicos en el Análisis de Conceptos Formales
Topological aspects in Formal Concept Analysis

Johana Ramírez Gaviria

	depredador	volador	pájaro	mamífero
León	x			x
Gorrión		x	x	
Águila	x	x	x	
Liebre				x
Avestruz		x		

	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 (L)	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 ínfimos y supremos se pueden describir así:

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

$$\bigwedge \mathcal{C} = \left(\bigcap_{t \in T} A_t, \left(\bigcup_{t \in T} B_t \right)'' \right)$$

y el supremo de \mathcal{C} es

$$\bigvee \mathcal{C} = \left(\left(\bigcup_{t \in T} A_t \right)'' , \bigcap_{t \in T} B_t \right)$$

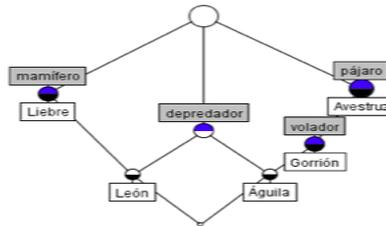
Demostración.

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

Primero vemos que $\bigwedge \mathcal{C}$ y $\bigvee \mathcal{C}$ son conceptos formales en $\mathfrak{B}(\mathbb{K})$.

$$\begin{aligned} \bigwedge \mathcal{C} &= \left(\bigcap_{t \in T} A_t, \left(\bigcup_{t \in T} B_t \right)'' \right) \\ &= \left(\bigcap_{t \in T} B_t', \left(\bigcup_{t \in T} B_t \right)'' \right) \\ &= \left(\left(\bigcup_{t \in T} B_t' \right)', \left(\bigcup_{t \in T} B_t \right)'' \right) \end{aligned}$$

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



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 GALLEGO¹, JOHN JAIRO QUINTERO² AND JUAN CARLOS RIANO^{2,†}

¹ Instituto de Matemáticas, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21 945–970 Rio de Janeiro, Brazil

² PCM Computational Applications, Universidad Nacional de Colombia, Cra 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 α_k is a positive step-size.

Desarrollos en Química-Matemática, Biomedicina y Optimización de procesos

Modelamiento Matemático del Crecimiento del Cocodrilo Especie Fuscus en Zocriaderos

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 (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



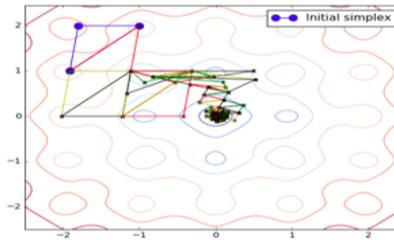
Parameter Estimation on Molecular Models of Complex Fluids by Stochastic Optimization Techniques

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

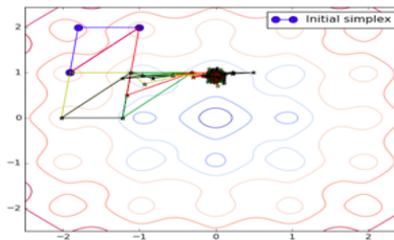
Carlos Fernando Ospina Trujillo

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 $\hat{f}_1 \leq \hat{f}_r < \hat{f}_n$ then
- 5: $x_{n+1} \leftarrow x_r$ and got to step 1
- 6: else if $\hat{f}_r < \hat{f}_1$ then
- 7: compute $x_e = x_0 + \gamma(x_0 - x_{n+1})$ and \hat{f}_e
- 8: if $\hat{f}_e < \hat{f}_r$ then
- 9: $x_{n+1} \leftarrow x_e$ 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: $x_i = x_i + \sigma(x_i - x_1) \forall i \in \{2, \dots, n+1\}$ 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

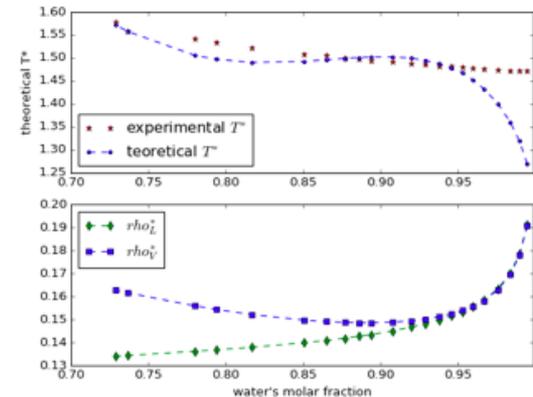
$$\frac{P}{\rho kT} = \sum_{i=1}^n x_i \frac{\mu_i}{kT} - \frac{A}{NkT} \quad (2.67)$$

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

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

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 infraroja como una herramienta diagnóstica de la mastitis subclinica en vacas holstein en el trópico alto.