

Encontro Especial de Matemática Aplicada e Computacional

Curitiba - PR, 7 e 8 de outubro de 2019

UFPR - Centro Politécnico - Auditório da Física – Bloco PA – 1. Andar

Inscrições: <https://bit.ly/2mA7qPo>

PROGRAMAÇÃO

Horário	Chair	Segunda-feira - 7/10/2019	Chair	Terça-feira - 8/10/2019
9h00	Yuan Jinyun	Carlile Lavor - UNICAMP Geometria de Proteínas em 5D.	Cassio Oishi	Luis Gustavo Nonato – ICMC-USP/SC Ciência de Dados e o Vislumbre de Políticas Públicas baseadas em Evidência
9h50		Roberto Ribeiro – UFPR Flow structure beneath rotational water waves propagating over flat and variable bottom.		Saulo Pomponet Oliveira - UFPR Um problema de quadrados mínimos com dados normalizados.
10h20		Coffee-break – Responsáveis Lucas e Felipe - PPGM		Coffee-break – Responsáveis Willian L. e Emerson - PPGM
10h50	Ailin Ruiz de Zarate	Willian Carlos Lesinhovski – PPGM - UFPR Approximate travelling internal water waves.	Saulo P. Oliveira	Elias Gudino – UFPR A mathematical model for degradation and drug release from an intravitreal drug delivery system.
11h20		Rodrigo de Souza Portugal - Halliburton Some mathematical challenges in the Brazilian deep-water pre-salt oil exploration & production		Cassio Oishi – UNESP-PP Aspectos computacionais em escoamentos de gotas de fluidos.
12h10		Almoço		Almoço
14h00	Mael Sachine	Sandra Augusta Santos - UNICAMP PACNO: a novel penalty algorithm for constrained nonsmooth optimization	Luiz Carlos Matioli	Frederic Valentin - LNCC The MHM Method on Non-Conforming Polygonal Meshes
14h50		Abel Siqueira - UFPR Implementação de um Método de Filtro Utilizando o Framework JuliaSmoothOptimizers.		Dirceu Scaldelai - UNESPAR MulticlusterKDE: Um novo algoritmo para clusterização baseado na múltipla otimização da Estimativa de Densidade Kernel.
15h20		Coffee-break– Responsáveis - Everton e Flávia - PPGM		Coffee-break– Responsáveis Juliana e Evelin - PPGM
15h50	Elizabeth Wegner Karas	Esdras Penêdo de Carvalho - UEM Otimização de Processos em Engenharia Química.	Elias Gudino	Oliver Kolossoski – UFPR Distância de Cavalos Modular em Grafos e Aplicações no Problema das n-Damas
16h20		Emerson Butyn – PPGM - UFPR Derivative-free optimization with copula-based models for probability maximization problems.		Yuan Jinyun - UFPR Numerical Linear algebra in Data Science.
16h50		Clóvis Caesar Gonzaga - LACTEC Optimal non-anticipative scenarios for non-linear hydro-thermal power systems.		



Encontro Especial de Matemática Aplicada e Computacional

Curitiba - PR, 7 e 8 de outubro de 2019

UFPR - Centro Politécnico - Auditório da Física – Bloco PA – 1. Andar

Inscrições: <https://bit.ly/2mA7qPo>

ABSTRACTS

Apresentações de Segunda-feira – 07/10/2019

9h00 - Geometria de Proteínas em 5D

Carlile Lavor - UNICAMP

Consideraremos o problema de calcular a estrutura de uma molécula de proteína, utilizando distâncias entre átomos próximos provenientes de experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Trata-se de um problema fundamental do complexo e custoso processo de desenvolvimento de novos medicamentos pela indústria farmacêutica. É um problema NP-difícil, conhecido na literatura por Molecular Distance Geometry Problem (MDGP). Baseado em um modelo combinatório para o MDGP, discutiremos alguns resultados recentes que representam a estrutura proteica em 5 dimensões, a fim de considerar as incertezas dos dados de RMN.

9h50 - Flow structure beneath rotational water waves propagating over flat and variable bottom.

Roberto Ribeiro – UFPR, André Nachbin and Marcelo Flamarion

The purpose of this talk is to show how to use mathematical techniques such as conformal maps to explore underwater. We are going to discuss some results concerning the flow structure beneath rotational water waves propagating over flat and variable bottom. Our numerical formulation allows us to compute the particle trajectories and the location of stagnation points. Moreover, we present regimes in which the pressure has very different features from the usual irrotational wave case.

10h50 - Approximate travelling internal water waves.

Willian Carlos Lesinowski – PPGM – UFPR e Ailín Ruiz de Zárate Fabregas -UFPR

Modelling internal water waves is very important to understand the ocean dynamics. These are high amplitude waves that can travel for very long distances and can affect maritime transport, oil recovery offshore operations among other economic activities. Internal waves are also responsible for the mixture and transportation of many nutrients in the ocean. In this work we focus on the numerical solution of a reduced bidirectional nonlinear model of Boussinesq type involving a nonlocal operator. Based on a von Neumann stability analysis for the linearized problem, an efficient and stable scheme for the nonlinear system is used to capture the evolution of approximate travelling wave solutions.

11h20 - Some mathematical challenges in the Brazilian deep-water pre-salt oil exploration & production”

Rodrigo Portuga - Halliburton

Recently the main source of Brazilian oil production has been changed from the sandstone reservoirs of the offshore fields of Campos basin to the carbonate reservoirs of the offshore fields of Santos basin. These carbonate reservoirs present unprecedented challenges for oil operators and service companies in all phases: in exploration, in which the oil accumulations need to be discovered, in development, in which the reservoir details need to be known for maintenance and forecasting, in production, in which the facilities system need to be optimized for hydrocarbon extraction. In this lecture, I am going to present some of the mathematical challenges that emerge from each one of these phases.

14h00 - PACNO: a novel penalty algorithm for constrained nonsmooth optimization

Sandra Augusta Santos - UNICAMP

Intrinsic features behind the gradient sampling method for unconstrained minimization, together with previous investigations involving this approach are our grounds for presenting a novel penalty function for addressing Lipschitz continuous nonsmooth constrained minimization problems. As a by-product, a new sequential optimality condition for constrained nonsmooth optimization has been devised, associated with the sequence generated by the proposed algorithm. Besides providing strong control upon the infeasibility of the iterates, so that the greediness phenomenon may be circumvented, the absence of the calmness property does not impact our penalty function, as opposed to the exact penalty. Theoretical analysis, and preliminary numerical experiments uphold our contribution. This is a joint work with Lucas Simões and Elias Helou.

14h50 - Implementação de um Método de Filtro Utilizando o Framework JuliaSmoothOptimizers.

Abel Siqueira (UFPR)

Apresentaremos a implementação de um método de filtro-SQP com o objetivo de demonstrar o funcionamento do framework JuliaSmoothOptimizers. Mostraremos as etapas de um desenvolvimento ágil para otimização, desde o protótipo de um método de otimização, passando pelo teste no repositório CUTEst, e finalizando com a comparação contra o método IPOPT.

15h50 - Otimização de Processos em Engenharia Química

Esdras Penêdo de Carvalho - UEM

Apresentamos uma visão geral de modelos e algoritmos para otimização discreta e contínua de uma variedade de aplicações importantes na Engenharia Química. Fornecemos uma visão geral de modelos determinísticos baseados em programação linear inteira mista (MILP), programação não-linear inteira mista (MINLP) e uma revisão de otimização global aplicada em projeto de trocadores de calor, síntese de redes distribuídas de água, síntese de redes de trocadores de calor e de reatores que envolvem modelos MINLP não-convexos de grande porte. Considerando técnicas de otimização global, descrevemos uma estratégia de bound contraction para acelerar o algoritmo Spatial Branch and Bound aplicado em problemas MINLP bilineares. A estratégia consiste contrair os limites de cada uma das variáveis permitindo reduzir o gap entre um lower bound linear e um upper bound obtido resolvendo-se o problema original. O procedimento é ilustrado através de resultados numéricos em problemas de síntese de redes de trocadores de calor.

16h20 - Derivative-free optimization with copula-based models for probability maximization problems

Emerson Butyn (PPGM-UFPR), Elizabeth Karas (UFPR) and Wellington de Oliveira (Mines ParisTech - CMA)

In this work, we assess the numerical performance of several optimization solvers applied to the Cash Matching problem via a probability maximization formulation. Due to the evidenced difficulty in evaluating the probability function and its gradient numerically, we propose a derivative-free trust-region method with copula-based models for dealing with general probability maximization problems.

16h50 - Optimal non-anticipative scenarios for non-linear hydro-thermal power systems

Clóvis Caesar Gonzaga (LACTEC), Gislaine Peričaro (UNESPAR), Elizabeth W. Karas (UFPR), Débora C. Marcílio (LACTEC), Ana Paula Oening (LACTEC), Luiz Carlos Matioli (UFPR), Daniel H. M. Detzel (LACTEC), Klaus de Geus (COPEL), Marcelo R. Bessa (UFPR)

The long-term operation of hydro-thermal power generation systems is modeled by a large-scale stochastic optimization problem that includes non-linear constraints due to the head computation in hydroelectric plants. We do a detailed development of the problem model and state it by a non-anticipative scenario analysis, leading to a large-scale non-linear programming problem. This is solved by a Filter-SQP algorithm whose iterations minimize quadratic Lagrangian

approximations using exact Hessians in L-infinity trust regions. The method is applied to the long-term planning of the Brazilian system, with over 100 hydroelectric and 50 thermoelectric plants, distributed in 5 interconnected sub-systems. This problem with 50 synthetically generated inflow scenarios and a horizon of 60 months, amounting to about one million variables and 15000 non-linear constraints was solved by the filter algorithm in a standard 2016 notebook computer in 10 hours of CPU.

Apresentações de Terça-feira – 08/10/2019

9h00 - Ciência de Dados e o Vislumbre de Políticas Públicas baseadas em Evidência

Luis Gustavo Nonato – ICMC-USP/SC

Ciência de dados tem transformado drasticamente muitas áreas da ciência, o setor produtivo e a forma de se realizar políticas públicas. Nesta palestra, discutiremos o que é ciência de dados, apresentando exemplos reais do uso deste novo conceito na solução de problemas importantes como mobilidade urbana e segurança pública.

9h50 - Um problema de quadrados mínimos com dados normalizados

Saulo Pomponet Oliveira, Jessica Dercacz Weihermann, Francisco José Ferreira da Silva

Um dos desafios na inversão de dados gama-espectrométricos é que o problema direto depende de uma constante multiplicativa pouco compreendida na literatura, motivando o estudo de um problema de quadrados mínimos correspondente à minimização do funcional $J(x) = \|A(x)-b\|^2$ ($x \in \mathbb{R}^n$), sendo que o dado observado e o dado calculado são normalizados, ou seja, $\|b\|=1$ e $A(x)=A^*x/\|A^*x\|$. Note que a normalização do vetor A^*x em $A(x)$ torna o problema não-linear. Este problema pode ser de interesse em outros contextos. Algumas propriedades e resultados preliminares serão apresentados.

10h50 - A mathematical model for degradation and drug release from an intravitreal drug delivery system

Elias Gudino – UFPR

In this talk, we present a model for bulk degradation and drug delivery for an intravitreal biodegradable implant. We consider that a liquid enters the implant by non-Fickian diffusion causing the degradation of the poly(lactic-co-glycolic acid) based implant. Then, drug in the implant dissolves and diffuses out of the polymeric matrix. The transport of drug in the vitreous chamber and retina is modeled by Fickian diffusion and convection generated by the flow of the vitreous humor. In order to numerically solve the system of partial differential equations that define the model, we propose an Implicit-Explicit finite element method that allows for the decoupling of the solution reducing the computational cost of the simulations.

11h20 - Aspectos computacionais em escoamentos de gotas de fluidos

Cassio Oishi – UNESP-PP

Nesta palestra, apresentaremos alguns exemplos práticos sobre o impacto de gotas de fluidos em superfícies rígidas. Em particular, abordaremos uma modelagem matemática que descreve efeitos não-Newtonianos de escoamentos de gotas. Além disso, detalharemos um método numérico que lida com a solução das equações governantes, o movimento de interfaces e o tratamento da curvatura. Finalmente, apresentaremos ideias preliminares da aplicação de técnicas de machine learning em escoamentos de fluidos.

14h00 - The MHM Method on Non-Conforming Polygonal Meshes

Frederic Valentin – LNCC

This talk revisits the general form of the Multiscale Hybrid-Mixed (MHM) method for the second-order Laplace (Darcy) equation under the perspective of non-convex non-conforming polyhedral meshes. In this context, we present new stable multiscale finite elements such that they preserve the well-posedness, super-convergence and local conservation properties of the original MHM method under mild regularity conditions. Precisely, we show that piecewise polynomial of degree $k + 1$ and k , $k > 0$, for the Lagrange multipliers (flux) along with continuous piecewise polynomial interpolations of degree $k + 1$ posed on second-level sub-meshes are stable if the latter is refined enough. Such one- and two-level discretization impact the error in a way that the discrete primal (pressure) and dual (velocity) variables achieve super-convergence in the natural norms under extra local regularity only. Numerical tests assess theoretical results.

14h50 - MulticlusterKDE: Um novo algoritmo para clusterização baseado na múltipla otimização da Estimativa de Densidade Kernel

Dirceu Scaldelai - UNESPAR, Solange Regina dos Santos- UNESPAR, Luiz Carlos Matioli – UFPR, Mariana Kleina – UFPR

Nessa pesquisa apresentamos um algoritmo para clusterização baseado na estimativa de densidade kernel multivariada. O algoritmo denominado MulticlusterKDE é centrado na múltipla otimização da função do Estimador de Densidade Kernel Gaussiano multivariado. O algoritmo proposto tem a vantagem de não exigir a priori o número de cluster, sendo este um parâmetro opcional. Além disso, o MulticlusterKDE é simples, fácil de implementar, bem definido e para em um número finito de etapas, ou seja, sempre converge independentemente do conjunto de dados a ser agrupado. Experimentos numéricos foram realizados no software R com o objetivo de investigar o comportamento gráfico das etapas de execução do algoritmo para problemas de pequeno porte. Além desses, problemas práticos obtidos na literatura e construídos com amostras geradas aleatórias também foram considerados. Os resultados dos testes foram comparados com dois outros algoritmos de clusterização clássicos da literatura, K-means e PDFcluster, indicando que o Multicluster é competitivo quando comparado com estes dois algoritmos e ainda há possibilidades significativas de aprimoramento.

15h50 - Distância de Cavalo Modular em Grafos e Aplicações no Problema das n-Damas

Oliver Kolossoski, Luiz Carlos Matioli, Elvis Torrealba e Juliana Silva – UFPR

Nesse trabalho introduzimos distância de cavalo modular num tabuleiro de xadrez, relacionada ao movimento de um cavalo no xadrez clássico, e estudamos a partir da mesma a geometria de uma classe de soluções do problema (modular) das n-damas. Introduzimos também o do grafo do cavalo do qual tiramos diversas propriedades que nos permitem estudar a classe de soluções desejada com o uso de teoria de grafos. Conseguimos neste trabalho um algoritmo de complexidade exponencial que pode ser usado para gerar todas as soluções da classe estudada. Adicionalmente, a ideia deste algoritmo pode ser aproveitada para computação de classes ligeiramente mais abrangentes. Conjecturamos ainda um resultado que classifica analiticamente todas as soluções da classe estudada algebricamente.

16h20 - Numerical Linear algebra in Data Science

Yuan Jinyun – UFPR

Survey on required numerical linear algebra techniques in data mining, in special matrix (tensor) decomposition in machine learning and deep learning with some applications.