A. PROPUESTA PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

1. TIPO DE PROYECTO:

Interno		**Grupal**	X
Semilla		**Multidisciplinario**	

2. TIPO DE INVESTIGACIÓN

Básica	X	**Aplicada**	

3. UNIDAD EJECUTORA *(Departamento, Instituto o Estructura de Investigación)*

1. **Centro de Modelización Matemática – MODEMAT.**

4. LINEA(S) DE INVESTIGACIÓN:

1. Análisis matemático y ecuaciones diferenciales. DM
2. Modelización matemática de sistemas complejos. DM.

5. TÍTULO DEL PROYECTO *(mínimo 10 palabras)*:

MÉTODOS MULTIMALLA PARA LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN NO SUAVE Y APLICACIONES A LA INGENIERÍA.

6. RESUMEN *(máximo 200 palabras)*

En este proyecto exploraremos la aplicación de los métodos multimalla (*multigrid methods*) a problemas de optimización de funcionales no diferenciables. Este tipo de problemas aparecen en varias aplicaciones que van desde la simulación de fluidos complejos hasta el tratamiento de imágenes. El reto principal es analizar problemas que no tienen derivada en el sentido clásico, y que, una vez discretizados, alcanzan escalas difíciles de manejar computacionalmente. La motivación central descansa en el hecho de que, a nuestro mejor entender, la aplicación de algoritmos para la resolución de problemas de optimización a gran escala, basados en métodos multimalla, no ha sido explotada en todo su potencial. Esto contrasta con la gran eficiencia mostrada por los mismos en la resolución de problemas de control óptimo en aplicaciones tan complejas como modelos cardíacos o de combustión. Las dificultades observadas en el uso de estos métodos están relacionadas con la falta de regularidad de los funcionales y con el cambio de paradigma, dentro de la estructura de los métodos, que implica el uso directo de algoritmos de optimización en lugar de algoritmos de resolución de las ecuaciones diferenciales que caracterizan la solución del problema. Las ventajas numéricas permitirán un entendimiento integral de los problemas de optimización no suave.

7. PALABRAS CLAVE *(4-6)*

Optimización no suave. Métodos multimalla. Diferenciales generalizados. Métodos variacionales y de optimización.

8. OBJETIVOS

8.1. OBJETIVO GENERAL

Desarrollar algoritmos de optimización multimalla suficientemente robustos para resolver problemas de optimización no suave a gran escala tales como flujo de materiales viscoplásticos y elastoviscoplásticos, filtrado de ruido en imágenes y control óptimo disperso.

8.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

a. Estudiar los diferentes métodos de optimización que pueden ser utilizados como algoritmos internos en un ambiente multimalla. Haremos particular énfasis en métodos precondicionados de descenso más profundo, métodos quasi-Newton y BFGS de memoria limitada, y algoritmos de primer orden, de tipo proximal.
b. Implementar los algoritmos de optimización en MatLab, Python y FEniCs. Realizar experimentación numérica.
c. Plantear el algoritmo multimalla y estudiar su convergencia en presencia de varios algoritmos de optimización internos desarrollados ad hoc para los problemas en estudio.
d. Implementar el algoritmo multimalla, en los ambientes computacionales mencionados, y realizar una profunda experimentación numérica en tres campos: 1) Simulación numérica de fluidos viscoplásticos y elasto-viscoplásticos y 2) problema de filtrado de ruido en imágenes usando espacios de exponente variable y 3) control óptimo de problemas dispersos (*sparse*).

9. HIPÓTESIS

a. Los métodos de optimización multimalla, en combinación con algoritmos de optimización desarrollados ad hoc para los problemas en estudio permiten resolver problemas cuya discretización detallada genera cantidades ingentes de datos.
b. Los métodos multimalla son lo suficientemente versátiles para acomodar algoritmos no suaves de optimización en su estructura, lo que permite resolver una amplia gama de problemas con pocas modificaciones sustanciales en la implementación.
c. Los problemas de flujo estacionario de materiales viscoplásticos, de filtrado de ruido en imágenes y de control óptimo disperso se pueden formular como problemas de optimización no suave en espacios funcionales adecuados.

10. DETALLE DE LOS RESULTADOS ESPERADOS *(con relación a los objetivos)*

a. Estudiaremos en detalle el comportamiento y las propiedades de convergencia de los algoritmos y métodos mencionados. Crearemos una librería de algoritmos para la resolución de problemas de optimización no suave que exhiben baja regularidad, tipo modelos de fluidos viscoplásticos (Bingham, Herschel-Bulkley), filtrado de ruido de imágenes, etc. Esta librería estará disponible en ambientes tipo GitHub.
b. Analizando el nivel de sofisticación usado en el análisis de los métodos y su implementación, exploraremos la posibilidad de generar una publicación científica con este material.
c. Analizaremos en detalle el comportamiento y funcionamiento del algoritmo multimalla en estudio. Extenderemos la teoría actual de convergencia al caso de un problema general con baja regularidad y usaremos estos resultados, junto con los

resultados computacionales obtenidos, para generar al menos una publicación científica que será enviada a una revista internacional.

d. Estudiaremos la aplicación del método multimalla a los tres casos mencionados en el objetivo específico d. Este estudio deberá generar, junto con los resultados computacionales obtenidos, suficiente material para escribir al menos una publicación científica que será enviada a una revista internacional.

11. IMPACTO DE LA INVESTIGACIÓN (*científico, social, económico u otros*)

a. Impacto Científico: La presente propuesta se enmarca en el ámbito de la modelización matemática y la simulación numérica. En el caso presente, esto implica que desarrollaremos herramientas algorítmicas eficientes para simular y resolver problemas que aparecen en varios campos de investigación aplicada. A saber, 1) problemas relacionados con el flujo de materiales complejos en dominios computacionales que representan topografías reales, 2) problemas de tratamiento de imágenes, con particular énfasis en el filtrado de ruido y 3) problemas de control óptimo disperso. Este tipo de problemas, en general, involucran el estudio de problemas de modelos no diferenciables y sistemas inestables de ecuaciones diferenciales en espacios de Banach. Este estudio teórico es, en sí mismo, un campo de investigación interesante. Sin embargo, el enfoque computacional de nuestra propuesta busca trascender el estudio meramente teórico para desarrollar una herramienta algorítmica versátil que permita abordar la mayor cantidad de problemas con pocas modificaciones esenciales en el método. Gracias a todo este trabajo, en el corto plazo, pretendemos obtener resultados de investigación de base en esta temática y generar artículos de investigación relevantes. Así mismo, buscamos establecer contactos de investigación que nos permitan consolidar un grupo de investigación enfocado en la solución numérica de problemas a gran escala asociado al Grupo de Investigación en Optimización no Suave y Aplicaciones – ONSA.

b. Impacto Económico y social: Los problemas de optimización no suave bajo estudio en esta propuesta aparecen naturalmente en campos tan diversos como la medicina, la geofísica, la biomecánica, el aprendizaje de máquina, entre otros. Si bien hay estrategias eficientes de solución, el contar con una herramienta computacional que pueda manejar estos problemas a gran escala y adaptada a implementación en paralelo permitiría ampliar el alcance de nuestra investigación hacia aplicaciones reales como mejoramiento de imágenes médicas obtenidas en hospitales, desarrollo de algoritmos de aprendizaje profunda ad hoc para aplicaciones de reconocimiento de rostros o minería de datos, simulación de fluidos complejos asociados a fenómenos geofísicos como flujos de lava o piroclásticos, etc. De hecho, esta propuesta viene a complementar los proyectos de investigación que se han desarrollado o se están desarrollando en el ModeMat por parte del grupo de investigación ONSA. Así, surge una posibilidad real de brindar soluciones computacionales a los posibles usuarios de estas herramientas, con lo cual podríamos coadyuvar al desarrollo de técnicas nacionales para diagnóstico no invasivo preciso, creación de mapas de riesgo asociado a fenómenos volcánicos, etc.

12. ESTADO DEL ARTE, E INVESTIGACIONES PREVIAS DEL EQUIPO (*máximo tres carillas*)

Los problemas de optimización no suave han ganado gran relevancia en los últimos años, debido a la gran cantidad de campos en los cuales se pueden encontrar problemas relacionados. La modelización detallada de materiales que exhiben propiedades de plasticidad y elasticidad o fenómenos que involucran dispersión son prototipos clásicos de este tipo de problemas. El estudio, por ejemplo, de fluidos no-Newtonianos de tipo viscoplástico y elastoviscoplástico ha sido un campo de investigación fructífero en este tipo de problemas no regulares. La dificultad teórica radica en el hecho de que la modelización del comportamiento plástico de los fluidos genera un término que involucra una norma L^1 en el funcional de energía asociado (Ver [5-7]). Además, la forma clásica de abordar estos problemas es analizarlos como un problema de frontera libre, lo que nos lleva a una inecuación variacional de segundo tipo, problema asociado a un problema de optimización no suave [7]. Este trabajo ha generado una cantidad considerable de proyectos y artículos de investigación. En nuestro grupo, en particular, hemos desarrollado varios trabajos centrados en: la aplicación de métodos generalizados de Newton para su simulación en diferentes geometrías [11-13], el control óptimo de estos materiales [9], la resolución numérica de problemas acoplados [10], y análisis de las propiedades numéricas de los métodos que se aplican en su solución numérica [14,16]. No obstante todo este trabajo, este campo sigue generando problemas interesantes y complejos tanto desde la perspectiva matemática, como desde la perspectiva numérica. Por ejemplo, un problema central es la simulación de estos materiales en tres dimensiones y la resolución de problemas acoplados para la simulación de modelos de flujo no isotérmico dependientes de campos de temperatura controlados y no controlados (con aplicaciones a la geofísica, por ejemplo) y/o problemas acoplados con ecuaciones de transporte para simular fenómenos de reacción-difusión (modelo de Houska) (Ver [5,6]).

Por otro lado, las múltiples aplicaciones en la medicina, la biomecánica y el deep learning han hecho del tratamiento de imágenes un campo de investigación fructífero y de amplio interés en la comunidad científica. Uno de los principales problemas constituye el remover rudio de imágenes "medidas", i.e., imágenes obtenidas por medio de mediciones en aparatos como tomógrafos o radiógrafos. El objetivo es reconstruir la imagen, a través de las mediciones obtenidas, de forma que el resultado sea lo más fiel posible a un original sin ruido. Este problema es difícil de resolver en la mayoría de aplicaciones (Ver [1,15,19,20]). En el caso de imágenes médicas, por ejemplo, la comparación con el original es inviable, lo que nos lleva a un problema inverso complejo. Varios modelos de reconstrucción se han analizado a lo largo del tiempo. Los más conocidos son los modelos ROF (Rudin-Osher-Fatemi) que involucran la norma de variación total, la cual es la norma L^1 del gradiente de la función, por tanto, un término no diferenciable [15]. En los últimos años se han desarrollado modelos que involucran una norma de un espacio de exponente variable $L^{p(x)}$ [1]. El análisis y resolución numérica de este tipo de problemas planteados en espacios de exponente variable están actualmente en estudio preliminar en el ModeMat, donde estamos desarrollando un proyecto de titulación con proyección a una tesis de maestría y/o doctorado. En todos estos casos, la búsqueda de precisión y fidelidad en la reconstrucción demanda de una gran cantidad de datos. En efecto, la imágenes se entienden como matrices cuyas entradas son niveles de intensidad de color de cada pixel. Claramente, si aumenta la resolución en la cual queremos representar la imagen, el tamaño de los arreglos aumenta, dando como resultado problemas de gran escala.

El control óptimo disperso de ecuaciones diferenciales parciales es otro campo en el cual se han desarrollado sendos proyectos de investigación en el ModeMat. El reto fundamental de estos problemas es que el control tiene un efecto localizado, lo que implica que ubicar la acción de los efectos del control demanda gran cantidad de datos [21-22]. Usualmente, estos problemas involucran funcionales objetivos con normas L^1, lo cual los convierte en problemas no diferenciables cuyos sistemas de optimalidad exhiben características complejas. Aunque se han desarrollado varios artículos analizando el comportamiento de estos problemas y se han propuesto algoritmos de comportamiento óptimo para su solución numérica [18], la implementación a gran escala de los problemas presenta retos significativos. En particular, la adaptación de los algoritmos desarrollados en una lógica multimalla y el estudio de la influencia que el comportamiento de estos algoritmos tendría en la convergencia del algoritmo multimalla aparecen como retos matemáticos y computacionales dignos de investigación.

Por lo mencionado anteriormente, queda claro que en todos estos problemas, la dificultad común es el manejo de problemas a gran escala, generalmente debido a la gran cantidad de datos que genera la discretización de los modelos involucrados. Es en el manejo de esta información donde los métodos multimalla juegan un rol clave. En efecto, la idea central de los métodos en mención es resolver los problemas a través de mallas cada vez más gruesas (con menos nodos de discretización) y transportar de forma adecuada la información relevante del problema a estas mallas gruesas donde los métodos de solución requieren poco esfuerzo computacional para brindar soluciones confiables [23]. Estos métodos han probado ser eficientes en problemas de optimización como se evidencia en su aplicación sistemática a problemas de contro óptimo [2-4]. Sin embargo, la forma clásica de trabajo con los métodos multimalla se basa en el uso de métodos de solución numérica de los sistemas de ecuaciones diferenciales que caracterizan la solución de los problemas de optimización [2-4,23]. En nuestra propuesta, pretendemos aplicar métodos de optimización directamente al funcional objetivo, logrando similar rendimiento numérico en la estructura multimalla, con menor gasto computacional. En nuestra experiencia, esta aproximación ha funcionado de forma eficiente en la resolución numérica de inecuaciones variacionales de segundo tipo que involucran el operador p-Laplaciano, cuya aplicación más importante es la simulación del flujo simplificado en una tubería de materiales viscoplásticos. Esta experiencia dio lugar al artículo [17], el cual ha sido de particular importancia en la motivación de esta propuesta, debido a los buenos comentarios de los revisores y a nuestra particular consideración de que extender estas ideas al modelo completo de tipo Navier-Stokes con plasticidad (en su formulación por integrales de energía) es un campo abierto y lleno de retos, resultados y aplicaciones interesantes. Por supuesto, esta estructura puede ser utilizada con pocas modificaciones, a nuestro entender, para resolver de forma eficiente los problemas de filtrado de ruido de imágenes y los problemas de optimización binivel desarrollados actualmente en el MODEMAT.

Publicaciones previas relacionadas con el proyecto: Las principales publicaciones asociadas a este proyecto son: [2-4], [16-17]

13. DESCRIPCIÓN DETALLADA DEL PROYECTO, INCLUIDO METODOLOGÍA *(máximo tres carillas)*

En este proyecto estamos interesados en el estudio teórico y computacional del siguiente tipo de problemas.

$$\min_{u\in V} J(u) := \int_\Omega \Phi(x, Bu)\, dx + \mathcal{F}(u),$$

donde V es un espacio de Banach y Φ y $\mathcal{F}$ son funciones adecuadas cuya definición depende del problema en estudio. En particular, en este proyecto estamos interesados en los siguientes problemas:

1. Modelos de fluidos complejos de tipo viscoplásticos [16-17]: dado $1< p <\infty$

$$V = \{v \in (W^{1,p}(\Omega))^d : \nabla \cdot v = 0\},\ Bu = \mathcal{E}u, \Phi(x, Bu) := \frac{1}{p}|\mathcal{E}\boldsymbol{u}|^p + |\mathcal{E}\boldsymbol{u}| \ y\ \mathcal{F}\boldsymbol{u} := \int_\Omega \boldsymbol{f}\cdot \boldsymbol{u}\, dx.$$

2. Modelos de filtrado de ruido de imágenes [15,19-20]:

$$V = BV(\Omega), Bu := \nabla u, \Phi(x, Bu) := |\nabla u| \ y\ \mathcal{F}u := \int_\Omega |f-u|^2\ dx\,.$$

Además, estamos interesados en los modelos con difusión isotrópica [1]:

$$V = W^{1,p(x)}(\Omega), Bu := \nabla u, \Phi(x, Bu) := |\nabla u|^{p(|\nabla u|)} \ y\ \mathcal{F}u := \int_\Omega |f-u|^2\ dx.$$

Aquí, *p(x)* es una función medible que se debe escoger de forma adecuada. Por ejemplo, para modelos de reconstrucción que evitan el efecto de *staricasing* se usan modelos polinomiales [1].

3. Problemas de control óptimo disperso [21-22]:

$$V = H_0^1(\Omega), \Phi(x,u) := |S(u) - y_d|^2 + \frac{\alpha}{2}|u|^2 \; y \; \mathcal{F}u := \int_\Omega |u|^{1/p} dx$$

Donde S(u) representa la solución de una ecuación diferencial elíptica.

Como se ve en los modelos presentados, la característica fundamental de los mismos es que la función Φ o la función $\mathcal{F}$ involucran términos no diferenciables. A lo largo de los últimos años se han desarrollado varias técnicas que permiten un análisis profundo del comportamiento de las soluciones de estos modelos y de sus aplicaciones. Sin embargo, consideramos que el desarrollo de herramientas computacionales para resolución a gran escala es un campo en el cual se puede contribuir investigación de primer nivel.

Siguiendo la teoría fundamental de los métodos de optimización multimalla [17,23], es necesario contar con algoritmos de optimización interno cuyo comportamiento sea robusto y adaptado eficientemente a cada problema en estudio. Así, en primer lugar estudiaremos y desarrollaremos algoritmos de optimización adecuados. En nuestra experiencia consideramos que los algoritmos de descenso más profundo precondicionados variacionalmente funcionan de forma óptima para los problemas de flujo de materiales viscoplásticos que involucran al operador p-Laplaciano [16]. En el caso que nos ocupa debemos, no obstante, desarrollar estos métodos en el caso de problemas de optimización en espacios vectoriales de divergencia libre. Además, exploraremos el uso de métodos de penalización exacta. En el caso de los modelos de imágenes, los métodos de tipo BFGS con memoria limitada y los métodos de tipo trust-region han mostrado ser eficientes [15]. Sin embargo, en nuestro enfoque, considerando los modelos de difusión isotrópica, plantearemos primero una extensión de los métodos de descenso precondicionados con operador p-Laplaciano [16] y luego exploraremos el uso de métodos BFGS con memoria limitada. Finalmente, considerando que los métodos descritos anteriormente requieren procesos de regularización, plateamos el uso de algoritmos que no requieren un tal proceso de suavizado. Particularmente, estudiaremos los métodos de Chambole-Pock y ADM precondicionado [8,24].

Toda vez que contemos con algoritmos de optimización probados y adaptados, plantearemos el algoritmo de optimización multimalla. Si los algoritmos internos de optimización tienen un funcionamiento eficiente, el proceso central en la construcción del algoritmo multimalla es el desarrollo de operadores óptimos de interpolación y proyección para transportar la información del problema entre los diferentes niveles de mallado [17,23]. Usualmente se trabaja con operadores de libro de texto, es decir, operadores estándar que representan, por ejemplo, interpolación bilineal o proyección con pesos [2-4]. Sin embargo, en nuestros modelos esta opción no es inmediata. Por ejemplo, en el caso de los flujos 2D o 3D de materiales viscoplásticos, se requiere trabajar con 3 mallas distintas para la velocidad del flujo, la presión y las componentes del tensor de deformación, y todas estas mallas deben tener sus operadores de transferencia e interpolación. Por esto, se deben analizar diferentes estrategias. Una vez montado el algoritmo debemos analizar sus propiedades de convergencia. En el caso de problemas no suaves, este análisis se debe hacer utilizando técnicas de análisis nonsmooth [17]. En particular, el uso adecuado e intensivo de los teoremas de valor medio para funciones Bouligand diferenciables y las propiedades analíticas de las derivadas de Newton de los funcionales en estudio [8-13,18].

Finalmente, implementaremos el algoritmo multimalla utilizando al menos dos tipos de algoritmos de optimización internos para propósitos de comparación y validación. Esta implementación se hará en ambientes computacionales versátiles como MatLab, Python y FEniCS. Realizaremos una experimentación numérica detallada y desarrollaremos una evaluación comparativa con otras contribuciones, con el afán de mostrar la versatilidad y eficiencia de nuestra propuesta. Además, buscaremos construir experimentos de referencia (benchmarks) para problemas en los cuales no existen o son muy escasos, como en el caso de flujos de Bingham y

Herschel-Bulkley en 3D [6-7]. Para concluir el proyecto, estudiaremos la implementación en paralelo del algoritmo multimalla en el HPC del ModeMat y construiremos una base de datos con los algoritmos implementados para acceso de posibles usuarios interesados.

METODOLOGÍA.

a. **Método precondicionado del descenso más profundo y otros métodos de optimización**.- Los métodos de optimización, entre los cuales destacan los métodos del descenso más profundo, son métodos clásicos para la resolución de problemas de optimización. La idea es generar una sucesión $\{x_k\}$ tal que $x_k \to x^*$, donde x^* es la solución del problema, siguiendo la idea siguiente:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

donde d_k es una dirección de descenso. Esto es, una dirección que satisface

$$J'(u_k)d_k < 0,$$

y $\alpha_k$es un parámetro escogido mediante un proceso de búsqueda lineal como el método de Armijo o la estrategia de Wolfe. La característica de cada método depende de la forma en la cual se calcula la dirección de descenso d_k. Por lo realizado en los últimos años, vamos a extender al caso vectorial el método presentado en [16] para problemas escalares. En este caso, la dirección de descenso la solución de la ecuación variacional siguiente

$$P(d_k, v) = -J'(u_k)v$$

donde P es una aproximación variacional (precondicionador) del p-Laplaciano. En el caso de los métodos BFGS, la dirección se obtiene mediante una aproximación de la Hessiana $J''(u_k)(d_k, \mathrm{v})$. En este proyecto debemos analizar en detalle los métodos que mejor se adaptan a cada problema y que pueden funcionar de forma óptima en un contexto multimalla.

b. **Métodos de optimización multimalla**.- Los métodos multimalla son técnicas desarrolladas para la solución eficiente de problemas a gran escala. Primero, debemos discretizar el dominio de estudio, notado Ω utilizando N nodos. Este dominio representa la geometría en la cual se da el fenómeno en estudio: la geometría del flujo, la imagen a filtrar, etc. Una vez definida la discretización, construimos varias mallas más gruesas (con menos nodos de discretización) tomando, de forma adecuada, varios nodos de la discretización inicial. A estas mallas más gruesas las llamamos niveles y las denotamos por Ω_k, con $k=1,\ldots, N$. En contraste con los métodos multimalla clásicos, donde se discretizan los sistemas de optimalidad, en esta aproximación discretizamos el funcional a ser optimizado en cada nivel Ω_k, y llamaremos $J_k(u_k)$ al funcional discretizado en Ω_k. El algoritmo inicia calculando una aproximación base de la solución mediante un método de optimización construido ad hoc para el problema en estudio. Este algoritmo no requiere alcanzar convergencia en esta primera instancia. En general, se requieren 2 iteraciones, incluso si la tasa de convergencia del método es lineal o sublineal. Luego, el método construye una dirección de descenso para el problema mediante una corrección en mallas más gruesas. Básicamente, el método transporta la información más relevante del problema a las mallas más gruesas y, una vez en la malla más gruesa posible, calcula la solución real del problema. Esta solución se calcula de forma exacta o haciendo que el algoritmo de optimización alcance convergencia. En cualquiera de los dos casos, este proceso es barato computacionalmente, de hecho el gasto computacional es casi nulo en comparación con el gasto que se requiere para alcanzar convergencia en los niveles más altos de la discretización. Una vez que se tiene la solución, ésta se transporta al nivel más fino, donde se construye una dirección de descenso para el funcional. El éxito y eficiencia de estos métodos se basa en la combinación inteligente de los dos procesos complementarios: los métodos de optimización y la corrección en las mallas más gruesas. Estas técnicas han probado ser muy eficientes en la solución numérica de varios problemas de control óptimo y optimización (ver [2-4,17]) razón por la cual proponemos utilizarlas en este proyecto.

***Bibliografía** (Normas APA)*

1. E. Bollt, R. Chartrand, S. Esedoglu, P. Schultz and K. R. Vixie. (2009). Graduated adaptive image denoising: local compromise between total variation and isotropic diffusion. Advances in Computational Mathematics, 31 (61) 65 – 85.
2. A. Borzì and S. González Andrade. (2015). Second-order approximation and fast multigrid solution of parabolic bilinear optimization problems. Advances in Computational Mathematics, 41 (2) 457 – 488.
3. A. Borzì and S. González Andrade. (2012). Multigrid second-order accurate solution of parabolic control-constrained problems. Computational Optimization and Applications, 51 (2) 835 – 866.
4. A. Borzì and S. González Andrade. (2012). Multigrid Solution of a Lavrentiev-Regularized State-Constrained Parabolic Control Problem. Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications, 5 (1) 1–18.
5. R. Glowinski and A. Wachs. On the numerical simulation of viscoplastic flow. In: CIARLET, P.G. (Ed.). Numerical Methods for Non-Newtonian Fluids. Handbook of Numerical Analysis, Vol. 16. Great Britain: Elsevier, 2011, pp. 483-717.
6. R. Huilgol. Fluid Mechanics of Viscoplasticity. Berlin: Springer-Verlag, 2015. ISBN 978-3-662-45616-3.
7. E. J. Dean, R. Glowinski and G. Guidoboni. (2007). On the numerical simulation of Bingham visco-plastic flow: Old and new results. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics. 142 (1-3) 36 – 62.
8. C. Clason, S. Mazurenko and T. Valkonen. (2018). Acceleration and global convergence of a first-order primal–dual method for nonconvex problems. SIAM J. Optim., 29 (1) 933 – 963.
9. J. C. De los Reyes (2012). Optimization of mixed variational inequalities arising in flow of viscoplastic materials. Computational Optimization and Applications, 52 (2) 757 – 784.
10. J. C. De los Reyes and S. González-Andrade (2013). Numerical simulation of thermally convective viscoplastic fluids by semismooth second order type methods. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 193, 43 – 48.
11. J. C. De los Reyes and S. González Andrade. (2012). A Combined BDF-Semismooth Newton Approach for Time-Dependent Bingham Flow. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 28 (3) 834 – 860.
12. J. C. De los Reyes and S. González Andrade. (2010). Numerical Simulation of Two-Dimensional Bingham Fluid Flow by Semismooth Newton Methods. Journal of Computational and Applied Mathematics 235 (1) 11 – 32.
13. J. C. De los Reyes and S. González. (2009). Path Following Methods for Steady Laminar Bingham Flow in Cylindrical Pipes. Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 43 (1) 81 – 117.
14. J. -C. De los Reyes and V. Dhamo. (2016). Error estimates for optimal control problems of a class of quasilinear equations arising in variable viscosity fluid flow. Numerische Mathematik, 132 (4) 691 – 720.
15. J. -C. De los Reyes and C.-B. Schönlieb. (2013). Image denoising: Learning the noise model via nonsmooth PDE-constrained optimization. Inverse Problems and Imaging, 7 (4) 1183-1214.

16. S. González-Andrade. (2017). A Preconditioned Descent Algorithm for Variational Inequalities of the Second Kind Involving the p-Laplacian Operator. Computational Optimization and Applications, 66 (1) 123 – 162.
17. S. González-Andrade and S. López-Ordóñez. (2018). A Multigrid Optimization Algorithm for the Numerical Solution of Quasilinear Variational Inequalities Involving the p-Laplacian. Computers and Mathematics with Applications, 75 (4) 1107 – 1127.
18. J.-C. De los Reyes, E. Loayza and P. Merino. (2017). Second-order orthant-based methods with enriched hessian information for sparse l1-optimization, Computational Optimization and Applications, 67 (2) 225 – 258.
19. E. Haber and J. Modersitzky. (2006). A Multilevel Method for Image Registration. SIAM J. Sci. Comput., 27 (5) 1594 – 1607.
20. S. Henn. (2005). A Multigrid Method for a Fourth-Order Diffusion Equation with Application to Image Processing. SIAM SIAM J. Sci. Comput., 27 (3) 831 – 849.
21. P. Merino. (2019). A difference-of-convex functions approach for sparse PDE optimal control problems with nonconvex costs. Computational Optimization and Applications, 74 (1) 225–258.
22. P. Merino and A. Nenjer. (2019). Error estimates for the fem approximation of state–constrained elliptic optimal control problems with sparsity in a finite–dimensional control space, To Appear.
23. U. Trottenberg, C. Oosterlee and A. Schüller. Multigrid. London: Academic Press, 2001. ISBN 0-12-701070-X.
24. T. Valkonen. (2018). Testing and Non-linear Preconditioning of the Proximal Point Method. Applied Mathematics and Optimization, doi.org/10.1007/s00245-018-9541-6

14. INFRAESTRUCTURA Y EQUIPOS

- *Indicar la infraestructura y equipos **disponibles** para la ejecución del proyecto, con la ubicación actual de los mismos*

Infraestructura	Equipos	
Laboratorio	**Nombre del Equipo**	**Ubicación del Equipo**
Laboratorio de Cálculo Científico	HPC-MODEMAT	EARME

15. MONTO REQUERIDO

a. **Monto y justificación del equipo requerido**: Para el desarrollo de la presente propuesta se requiere poder computacional adecuado. La EPN cuenta con el Laboratorio de Cálculo Científico, dondel el HPC permite realizar cálculos de alto rendimiento. Sin embargo, es necesario fortalecer esta infraestructura para que pueda seguir prestando los servicios de forma óptima. Requerimos entonces la compra de un nuevo servidor. El monto solicitado, sin IVA, es de 25.000,00 USD.

b. **Monto y justificación del personal requerido**: El desarrollo de esta propuesta requiere la contratación de un estudiante de maestría, por 18 meses. Este estudiante realizará su tesis de grado en el marco del proyecto. Además, requerimos la contratación de un estudiante de pregrado, por un año, para que realice su proyecto de titulación asociado a los temas de este proyecto. La importancia de formar profesionales de alta valía justifica estas contrataciones. Además, con esto enriquecemos el personal académico de la EPN y del ModeMat. Las dos contrataciones serán por 18 meses y por un monto total, sin IVA o IESS, de 19.308,00 USD.

c. **Monto y justificación de los investigadores invitados**: La movilidad científica es fundamental en el desarrollo de cualquier actividad de investigación. Además, invitar a científicos que trabajan fuera de la EPN ayuda a mejorar el posicionamiento internacional de la institución y, más importante, contribuye a la mejor formación de nuestro personal académico y a crear un ambiente diverso en las aproximaciones a la investigación realizada por los profesores de la EPN. Planteamos dos invitaciones por un total de 4.000,00 USD.

d. **Monto y justificación de los viajes y salidas del campo requeridos**: Es fundamental el viajar a foros científicos internacionales en los cuales se exponen los resultados de nuestra investigación. Estos viajes contribuyen a una retroalimentación y a un crecimiento profesional a la vez que nos permiten insertar a nuestros investigadores en el circuito cientifico internacional. Planteamos la participación en dos eventos internacionales por un monto, sin IVA, de pasajes de avión y viáticos por 4.000,00 USD y de 1.000,00 USD por pago de inscripciones.

16. FONDOS ADICIONALES

- *No aplica*

B. DATOS INFORMATIVOS

1. INFORMACIÓN DEL DIRECTOR, CODIRECTOR, COLABORADORES Y COLABORADORES TÉCNICOS

Apellidos y nombres	No. de Cédula	HSS*	Departamento	Rol	Título de mayor nivel y mención.
González Andrade Sergio Alejandro	1707824932	12	Modemat/Matemática	Director	PhD.
Merino Rosero Pedro Martín	1711883312	10	Modemat/Matemática	Codirector	PhD.
De los Reyes Bueno Juan Carlos	1706583174	5	Modemat/Matemática	Colaborador	PhD.
López Ordóñez Sofía Alejandra	1722067657	5	Modemat/Matemática	Colaboradora	MSc.

* HSS =Horas Semana Semestre: Es el número de horas que se dedica por semana a la investigación. Este número de horas se mantiene para todo el semestre.

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN Y VINCULACIÓN

DECLARACIÓN FINAL
DECLARACIÓN DEL DIRECTOR DEL PROYECTO

El equipo de investigadores, representado por el Director del Proyecto declara lo siguiente:

- Que el presente proyecto es una creación original de mi autoría y del equipo de investigadores, y por tanto asumimos la completa responsabilidad legal en caso de que un tercero alegue la titularidad de los derechos intelectuales del proyecto, exonerando a la EPN de cualquier acción legal que se derive por esta causa.

- Que el presente proyecto no ha sido presentado en ninguna convocatoria de otra institución pública o privada. El incumplimiento será causal para que el proyecto no sea tomado en consideración.

- Que si el proyecto genera algún producto o procedimiento susceptible de obtener derechos de propiedad intelectual, de los cuales se deriven beneficios, aceptamos que éstos serán compartidos entre los investigadores y la institución o las instituciones participantes en el proyecto, conforme a lo establecido en el COESC.

- Que el equipo de investigadores y/o instituciones participantes se comprometen a mantener la confidencialidad de la información si ésta podría ser susceptible de protección por patentes, y solicitar la valoración de propiedad intelectual respectiva previa a cualquier publicación o difusión.

- Que para el caso de derechos de autor otorgamos una licencia de uso exclusivo con fines académicos para la o las instituciones participantes en el proyecto.

- Que aceptamos conocer y cumplir con la normativa vigente para la gestión de proyectos.

Firma del Director del Proyecto
Nombre: Sergio González Andrade
C.I.: 1707824932

ESCUELA POLITECNICA NACIONAL

VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN Y VINCULACIÓN

PRESUPUESTO PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

AÑO 1

Título del proyecto

MÉTODOS MULTIMALLA PARA LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN NO SUAVE Y APLICACIONES A LA INGENIERÍA.

	Lista de Items	Cantidad	Unidad	Precio Unitario Referencial	Precio Total Referencial	Precio Unitario Referencial con IVA/ Aporte del IESS	Precio Total Referencial con IVA / Aporte del IESS
1	Contratación de servicios personales por contrato						
1.3	Prestación de servicios profesionales 1 (Homologado Escala de remuneración de servidores publicos)	6	mes	$ 986,00	$ 5.916,00	$ 1.104,32	$ 6.625,92
	Subtotal 1			$ 986,00	$ 5.916,00	$ 1.104,32	$ 6.625,92
	Lista de Items	Cantidad	Unidad	Precio Unitario Referencial sin IVA	Precio Total Referencial sin IVA	Precio Unitario Referencial con IVA	Precio Total Referencial con IVA
2	Maquinaria y equipo especializado						
2.1	Item 1 (Detallar nombre de la maquinaria y equipos solicitado)			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 2			$ -	$ -	$ -	$ -
3	Equipo informático						
3.1	Servidor para HPC-Modemat	1	1	$ 25.000,00	$ 25.000,00	$ 28.000,00	$ 28.000,00
	Subtotal 3			$ 25.000,00	$ 25.000,00	$ 28.000,00	$ 28.000,00
4	Insumos y reactivos						
4.1	Item 1 (Detallar nombre de los insumos y reactivos)			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 4			$ -	$ -	$ -	$ -
5	Literatura especializada						
5.1	Cantidad de libros			$ -	$ -	$ -	$ -
5.2	Adquisición de artículos científicos			-	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 5			$ -	$ -	$ -	$ -
6	Salidas de campo y de muestreo						
6.1	Pasajes al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
6.2	Viaticos y subsistencias al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 6			$ -	$ -	$ -	$ -
7	Ponencias nacionales, capacitaciones y/o visitas técnicas						
7.1	Pasajes al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
7.2	Viaticos y subsistencias al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 7			$ -	$ -	$ -	$ -
8	Ponencias en el exterior, capacitaciones, y/o visitas técnicas						
8.1	Pasajes al exterior	2	1	$ 1.000,00	$ 2.000,00	$ 1.120,00	$ 2.240,00
8.2	Viaticos al exterior	2	1	$ 1.000,00	$ 2.000,00	$ 1.000,00	$ 2.000,00
	Subtotal 8			$ 2.000,00	$ 4.000,00	$ 2.120,00	$ 4.240,00
9	Pago de inscripciones						
9.1	Pago de inscripciones al interior			-	$ -	$ -	$ -
9.2	Pago de inscricpiones al exterior			-	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 9			$ -	$ -	$ -	$ -
10	Pago de publicaciones, suscripciones y patentes						
10.1	Pago de publicaciones			$ -	$ -	$ -	$ -
10.2	Pago de publicaciones al exterior			$ -	$ -	$ -	$ -
10.3	Pago de suscripciones			$ -	$ -	$ -	$ -
10.3	Pago de patentes			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 10			$ -	$ -	$ -	$ -
	TOTAL				$ 34.916,00		$ 38.865,92

ESCUELA POLITECNICA NACIONAL

VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN Y VINCULACIÓN

PRESUPUESTO PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

AÑO 2

Título del proyecto

MÉTODOS MULTIMALLA PARA LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN NO SUAVE Y APLICACIONES A LA INGENIERÍA.

	Lista de Items	Cantidad	Unidad	Precio Unitario Referencial	Precio Total Referencial	Precio Unitario Referencial con IVA/ Aporte del IESS	Precio Total Referencial con IVA / Aporte del IESS
1	Contratación de servicios personales por contrato						
1.1	Asistente de investigación (estudiante de pregrado)	12	mes	$ 130,00	$ 1.560,00	$ 130,00	$ 1.560,00
1.3	Prestación de servicios profesionales 1 (Homologado Escala de remuneración de servidores publicos)	12	mes	$ 986,00	$ 11.832,00	$ 1.104,32	$ 13.251,84
	Subtotal 1			$ 1.116,00	$ 13.392,00	$ 1.234,32	$ 14.811,84
	Lista de Items	Cantidad	Unidad	Precio Unitario Referencial sin IVA	Precio Total Referencial sin IVA	Precio Unitario Referencial con IVA	Precio Total Referencial con IVA
2	Maquinaria y equipo especializado						
2.1	Item 1 (Detallar nombre de la maquinaria y equipos solicitado)			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 2			$ -	$ -	$ -	$ -
3	Equipo informático						
3.1	Item 1 (Detallar nombre de la maquinaria y equipos solicitado)			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 3			$ -	$ -	$ -	$ -
4	Insumos y reactivos						
4.1	Item 1 (Detallar nombre de los insumos y reactivos)			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 4			$ -	$ -	$ -	$ -
5	Literatura especializada						
5.1	Cantidad de libros (especificar el area)			$ -	$ -	$ -	$ -
5.2	Adquisición de artículos cientificos			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 5			$ -	$ -	$ -	$ -
6	Salidas de campo y de muestreo						
6.1	Pasajes al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
6.2	Viaticos y subsistencias al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 6			$ -	$ -	$ -	$ -
7	Ponencias nacionales, capacitaciones y/o visitas técnicas						
7.1	Pasajes al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
7.2	Viaticos y subsistencias al interior			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 7			$ -	$ -	$ -	$ -
8	Ponencias en el exterior, capacitaciones, y/o visitas técnicas						
8.1	Pasajes al exterior	2	1	$ 1.000,00	$ 2.000,00	$ 1.120,00	$ 2.240,00
8.2	Viaticos al exterior	2	1	$ 1.000,00	$ 2.000,00	$ 1.000,00	$ 2.000,00
	Subtotal 8			$ 2.000,00	$ 4.000,00	$ 2.120,00	$ 4.240,00
9	Pago de inscripciones						
9.1	Pago de inscripciones al interior			-	$ -	$ -	$ -
9.2	Pago de inscripciones al exterior	2	1	500,00	$ 1.000,00	$ 685,00	$ 1.370,00
	Subtotal 9			$ 500,00	$ 1.000,00	$ 685,00	$ 1.370,00
10	Pago de publicaciones, suscripciones y patentes						
10.1	Pago de publicaciones			$ -	$ -	$ -	$ -
10.2	Pago de publicaciones al exterior			$ -	$ -	$ -	$ -
10.3	Pago de suscripciones			$ -	$ -	$ -	$ -
10.3	Pago de patentes			$ -	$ -	$ -	$ -
	Subtotal 10			$ -	$ -	$ -	$ -
	TOTAL				$ 18.392,00		$ 20.421,84

ESCUELA POLITECNICA NACIONAL
VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN Y VINCULACIÓN
PRESUPUESTO PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Título del proyecto
MÉTODOS MULTIMALLA PARA LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN NO SUAVE Y APLICACIONES A LA INGENIERÍA.

Presupuesto consolidado sin IVA

AÑO	Contratación de servicios personales por contrato	Maquinaria y equipo especializado	Equipo informático	Insumos y reactivos	Literatura especializada	Salidas de campo y de muestreo	Ponencias nacionales, capacitaciones y/o visitas técnicas	Ponencias en el exterior, capacitaciones, y/o visitas técnicas	Pago de inscripciones	Pago de publicaciones y patentes	Total sin IVA
1	$ 5.916,00	$ -	$ 25.000,00	$ -	$ -	$ -	$ -	$ 4.000,00	$ -	$ -	$ 34.916,00
2	$ 13.392,00	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ 4.000,00	$ 1.000,00	$ -	$ 18.392,00
3	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -
TOTAL	**$ 19.308,00**	**$ -**	**$ 25.000,00**	**$ -**	**$ -**	**$ -**	**$ -**	**$ 8.000,00**	**$ 1.000,00**	**$ -**	**$ 53.308,00**

Presupuesto consolidado con IVA

AÑO	Contratación de servicios personales por contrato	Maquinaria y equipo especializado	Equipo informático	Insumos y reactivos	Literatura especializada	Salidas de campo y de muestreo	Ponencias nacionales, capacitaciones y/o visitas técnicas	Ponencias en el exterior, capacitaciones, y/o visitas técnicas	Pago de inscripciones	Pago de publicaciones y patentes	Total con IVA
1	$ 6.625,92	$ -	$ 28.000,00	$ -	$ -	$ -	$ -	$ 4.240,00	$ -	$ -	$ 38.865,92
2	$ 14.811,84	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ 4.240,00	$ 1.370,00	$ -	$ 20.421,84
3	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -	$ -
TOTAL	**$ 21.437,76**	**$ -**	**$ 28.000,00**	**$ -**	**$ -**	**$ -**	**$ -**	**$ 8.480,00**	**$ 1.370,00**	**$ -**	**$ 59.287,76**

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN Y VINCULACIÓN

Proyecto de Investigación Grupal

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES DEL PROYECTO

Título del Proyecto:	MÉTODOS MULTIMALLA PARA LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN NO SUAVE Y APLICACIONES A LA INGENIERÍA.

AÑO 1

Nº	Actividad	Mes 1				Mes 2				Mes 3				Mes 4				Mes 5				Mes 6				Mes 7				Mes 8				Mes 9				Mes 10				Mes 11				Mes 12			
		1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
1	**Objetivo específico 1: a. Estudiar los diferentes métodos de optimización que pueden ser utilizados como algoritmos internos en un ambiente multimalla. Haremos particular énfasis en métodos precondicionados de descenso más profundo, métodos quasi-Newton y BFGS de memoria limitada, y algoritmos de primer orden, de tipo proximal.**																																																
1.1	Actividad 1: Adaptar el método del descenso más profundo precondicionado al caso vectorial en espacios de divergencia cero.																																																
1.2	Actividad 2: Estudio de los modelos de filtrado de imágenes con difusión isotrópica y adaptación del método del descenso más profundo precondicionado a este problema																																																
1.3	Actividad 3: Estudio de los métodos BFGS con memoria limitada y adaptación a los problemas en estudio																																																
	Actividad 4: Estudio de los métodos proximales y su adaptación a los modelos en estudio																																																
2	**Objetivo específico 2: Implementar los algoritmos de optimización en MatLab, Python y FEniCs. Realizar experimentación numérica.**																																																
2.1	Actividad 1: Implementar los algoritmos en MatLab y FEniCS y comparar el rendimiento.																																																
2.2	Actividad 2: Desarrollar una experimentación numérica detallada con los modelos en estudio.																																																
1-2	Producto esperado: Redacción y envío de una primera publicación con los resultados de la experimentación con los algoritmos implementados.																																																

AÑO 2

Nº	Actividad	Mes 1				Mes 2				Mes 3				Mes 4				Mes 5				Mes 6				Mes 7				Mes 8				Mes 9				Mes 10				Mes 11				Mes 12			
		1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
3	**Objetivo específico 3: Plantear el algoritmo multimalla y estudiar su convergencia en presencia de varios algoritmos de optimización internos desarrollados ad hoc para los problemas en estudio.**																																																
3.1	Actividad 1: Plantear el algoritmo multimalla y estudiar la adaptación de los métodos de optimización a cada problema en estudio.																																																
3.2	Actividad 2: Estudio de las propiedades generales de convergencia del algoritmo multimalla en presencia de algoritmos internos de optimización eficientes.																																																
3.3	Actividad 3: Estudio de los cambios a realizarse en el algoritmo genera para su adaptación a los distintos problemas en estudio.																																																
4	**Objetivo específico 4: d. Implementar el algoritmo multimalla, en los ambientes computacionales mencionados, y realizar una profunda experimentación numérica**																																																
4.1	Actividad 3: Implementación del algoritmo multimalla en MatLab y Python.																																																
4.2	Actividad 4: Desarrollo de experimentación numérica detallada y comparativa.																																																
4.3	Actividad 5: Dearrollo de *benchmarks* en los campos analizados.																																																
3-4	Producto esperado: Redacción y envío de una publicación con los resultados de la experimentación con los algoritmos implementados.																																																