

VARIDIS

El treball realitzat sobre grafs ens permet disposar d'un càlcul vectorial discret amb el qual caracteritzar les propietats estructurals i resoldre els problemes de contorn per a l'operador de Schrödinger amb eines de Teoria del Potencial. Completarem el treball amb el càlcul explícit de les funcions de Green utilitzant famílies de polinomis ortogonals, construirem el càlcul vectorial per dígrafs, abordarem la solució de problemes de contorn no lineals i el problema d'Identificació de Paràmetres. Per altra banda, utilitzant els algorismes que el nostre grup de treball ha desenvolupat en relació amb el problema dels punts de Fekete, analitzarem detalladament els casos corresponents a l'energia potencial electrostàtica i a altres funcionals d'energia potencial propis de la Química, Biologia, Nanotecnologia, CAD i Sistemes Dinàmics. Hem obert una línia de treball en la qual busquem tant el rang d'aplicació del nostre procediment com les línies mestres d'una demostració de convergència.