

CdMx a 13 de mayo de 2024.

Asunto: Solicitud de Alta de Proyecto.

DR. ROMÁN LINARES ROMERO
PRESIDENTE DEL CONSEJO DIVISIONAL
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA
PRESENTE



Estimado Dr. Linares,

Por este medio le solicito, atentamente, incluir como un punto del orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisivo que usted preside, la solicitud de alta de un proyecto de investigación del área de Mecánica del Departamento de Física, cuyo título es **Nuevos insights en teoría de sistemas (super) integrables usando herramientas de Machine Learning**, el responsable del mismo es el Dr. Adrián Mauricio Escobar Ruiz del Área de Mecánica.

Sírvase encontrar en anexo la documentación que complementa esta solicitud:

- El Documento que contiene la información del nuevo proyecto de investigación.
- Probatorios sobre la aprobación de financiamiento por dos años por parte de la *Convocatoria para Postulación de Proyectos de Investigación por Personal Académico de Ingreso Reciente* de la Dirección de Apoyo a la Investigación (DAI) de la UAM.

La agradezco su atención y quedo a sus órdenes para cualquier duda o aclaración.

ATENTAMENTE
"CASA ABIERTA AL TIEMPO"



1. NOMBRE

Nuevos insights en teoría de sistemas (super)integrables usando herramientas de Machine Learning

2. NOMBRE DEL RESPONSABLE Y TIEMPO DE DEDICACIÓN AL PROYECTO

Dr. Adrián Mauricio Escobar Ruiz

Profesor Asociado D de Tiempo Completo

Área Académica de Mecánica

Tiempo de dedicación: **10 horas a la semana**

3. NOMBRE DE LOS PARTICIPANTES Y TIEMPO DE DEDICACIÓN

PARTICIPANTES

TIEMPO DE DEDICACIÓN

Dr. Adrián Mauricio Escobar Ruiz

10 horas a la semana

4. ÁREA, DEPARTAMENTO Y DIVISIÓN

Jefatura del Departamento de Física, CBI

5. OBJETIVOS GENERALES Y PARTICULARES

OBJETIVO GENERAL

Generar nuevo conocimiento mediante la incorporación de herramientas de Aprendizaje Automático (Machine Learning) y teoría de la información en el estudio teórico y numérico de Hamiltonianos clásicos y cuánticos de N –cuerpos. Consolidar una línea de investigación sobre sistemas superintegrables clásicos y cuánticos.

OBJETIVOS PARTICULARES

- Explorar el uso sistemático de algoritmos de Machine Learning (redes neuronales) para la reconstrucción de ecuaciones dinámicas a partir de series temporales.
- Integrar principios y leyes físicas en el proceso de aprendizaje automatizado (redes neuronales físicamente informadas, por sus siglas en inglés Physics-Informed Neural Networks (PINNs), para abordar el análisis de problemas directos e inversos que implican ecuaciones en derivadas parciales.
- Investigar aplicaciones novedosas de las redes neuronales para la búsqueda y clasificación de simetrías (cantidades conservadas) en sistemas Hamiltonianos clásicos.
- Análisis exhaustivo y sistemático de la cadena cerrada de 3 osciladores en 2 y 3 dimensiones. Caracterización del sistema clásico (caótico) mediante el método del promedio, series de tiempo, exponentes de Lyapunov, líneas de simetría, secciones de Poincaré. Determinar en el correspondiente sistema cuántico las funciones propias y valores propios del operador Hamiltoniano.
- Estudiar nuevas estructuras algebraicas (álgebra polinomial generada por cantidades conservadas) en sistemas superintegrables de dimensión finita.
- Utilizar los algoritmos de Machine Learning para la interpolación de datos variacionales en sistemas cuánticos atómicos y moleculares en presencia de un campo magnético con confinamiento espacial.

6. ANTECEDENTES

Los sistemas superintegrables son sistemas con una alta simetría y poseen diversas aplicaciones en Física y Matemáticas [1]-[4]. Por ejemplo, pueden esclarecer ideas claves sobre el comportamiento cuántico de sistemas para el desarrollo de dispositivos tecnológicos. Además, son candidatos relevantes para el estudio de la teoría de la información cuántica, especialmente para comprender las propiedades cuánticas de los sistemas y su contenido de información mediante correlaciones.

También, las matemáticas desarrolladas para sistemas superintegrables dan lugar a nuevas técnicas avanzadas en ecuaciones diferenciales, álgebra y geometría [5]-[10]. Los investigadores continúan estudiando si los sistemas superintegrables pueden ofrecer nuevas perspectivas y principios guía sobre fenómenos físicos novedosos y servir como modelos de prueba para sistemas más complejos.

Existen Hamiltonianos clásicos y cuánticos de N partículas interactuantes que admiten soluciones analíticas exactas. Por ejemplo, en una dimensión ($d=1$) se tienen los célebres modelos de Calogero-Moser-Sutherland [11]. Estos modelos son superintegrables (sistemas que poseen más integrales de movimiento que grados de libertad).



El descubrimiento de modelos multidimensionales ($d > 1$) de muchos cuerpos con alta simetría promete revelar nuevas conexiones entre distintas ramas de las Matemáticas y Física, brindando novedosas aplicaciones en el estudio de una amplia gama de sistemas físicos.

En nuestros trabajos [12]-[21] se presenta un nuevo formalismo que permite construir Hamiltonianos cuánticos y clásicos de N partículas exactamente solubles más allá del caso unidimensional. Uno de los resultados interesantes es la conexión entre las simetrías (integrabilidad) de los sistemas y la teoría de politopos en Geometría. Mas aún, el formalismo exhibe un fenómeno original de separabilidad más allá de la separación de variables estándar.

Uno de los sistemas, que bajo ciertos valores de los parámetros del modelo es integrable, es el oscilador armónico de 3 y 4 cuerpos. Este sistema armónico representa la extensión natural a más cuerpos del célebre y fundamental oscilador armónico simple (dos masas unidas por un resorte). En general, es un sistema no-integrable [22]-[23].

En particular, sistemas con términos armónicos (debido a sus propiedades de confinamiento y solubilidad) han atraído y continúan siendo un área de investigación muy activa. En la mayoría de los casos, se consideran modelos simples donde $d = 1$ (partículas sobre una línea) o casos muy restrictivos donde las masas y constantes de los resortes son iguales o las distancias de equilibrio son cero. Un estudio sistemático en completa generalidad no ha sido llevado a cabo hasta la fecha. Modestas contribuciones en esa dirección han sido publicadas en recientes trabajos [12]-[21], donde casos muy especiales (masas iguales, $d = 2$, momento angular cero, etc.) han sido investigados con cierto detalle clásica y cuánticamente.

Tanto en el **caso clásico** como en el **cuántico**, el **potencial generalizado** de la cadena de 3 osciladores armónicos tiene la forma:

$$V(r_{12}, r_{13}, r_{23}) = 2 \omega^2 [\nu_{12} (r_{12} - R_{12})^2 + \nu_{13} (r_{13} - R_{13})^2 + \nu_{23} (r_{23} - R_{23})^2] ,$$

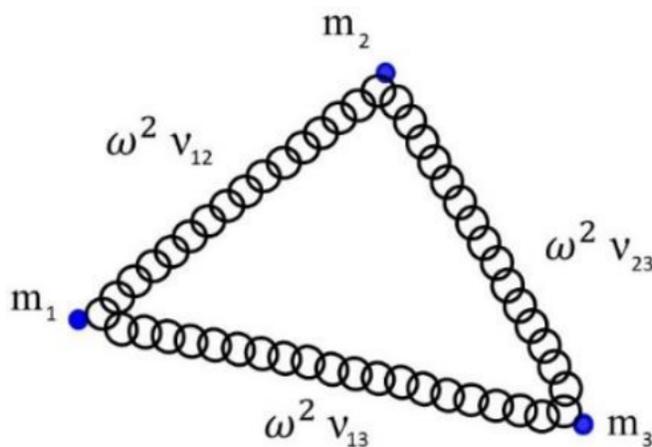
donde $r_{ij} = | \vec{r}_i - \vec{r}_j |$ es la **distancia relativa** entre las partículas i y j , $i < j = 1, 2, 3$.

Aquí ω y ν_{ij} son **parámetros** reales positivos que definen las **constantes de los resortes**, y R_{ij} son las **distancias de equilibrio** del sistema

depende de las distancias relativas entre ellos, es decir, donde

$$V(r_{12}, r_{13}, r_{23}) = V_{12}(r_{12}) + V_{13}(r_{13}) + V_{23}(r_{23}),$$

alrededor de su posición de equilibrio por el oscilador de 3 cuerpos.



Izquierda: configuración geométrica de la cadena de 3 osciladores armónicos en 2D y (derecha) su realización experimental (sistema clásico con momento angular cero) mediante circuitos electrónicos [14].

En el caso de tres cargas (un sistema caótico) [24], un fenómeno interesante que hemos estudiado fue la existencia y clasificación de trayectorias periódicas especiales. Estas trayectorias especiales están caracterizadas a través de integrales de movimiento particulares. Esto implica la aparición de regiones con cierto orden (donde la dinámica es regular) que están inmersas en el espacio fase de un sistema caótico.

En el caso de Física atómica y molecular los resultados teóricos pueden ser contrastados con los valores experimentales. Además, los sistemas de partículas interactuantes confinadas por pozos de potencial (puntos cuánticos) son descritos como sistemas confinados armónicamente con parámetros de control ajustables (Kościk y A. Okopińska, 2013). Estos sistemas se consideran candidatos prometedores para la construcción de computadoras cuánticas. Esto indica la importancia de estudiar como un primer paso la información cuántica [25]-[31] que posee la cadena cerrada de 3-osciladores armónicos.

- [1] Willard Miller Jr., Sarah Post, Pavel Winternitz, Classical and quantum superintegrability with applications, *J. Phys. A: Math. Theor.* 46 423001, (2013)
- [2] Adlam C M, McLenaghan R G and Smirnov R G, An orbit analysis approach to the study of superintegrable systems in the Euclidean plane *Phys. Atomic Nuclei* 70 486–90, (2007)
- [3] Chanu C, Degiovanni L and Rastelli G, Three and four-body systems in one dimension: integrability, superintegrability and discrete symmetries *Regular and Chaotic Dynamics* 16 496–503, (2011)
- [4] Fasso, F., Superintegrable Hamiltonian systems: geometry and perturbations, *Acta Appl. Math.* 87 93, (2005)
- [5] J. E. Marsden and T. S. Ratiu. Introduction to mechanics and symmetry: a basic exposition of classical mechanical systems, Volume 17. Springer Science & Business Media, (2013).
- [6] F. Cantrijn, M. de León, and E. A. Lacomba. Gradient vector fields on cosymplectic manifolds. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 25:175–188, (1992).
- [7] V. Arnold, V. Kozlov, and A. Neishtadt. *Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics*, third edition. Springer, (2006).
- [8] A. Anderson. Canonical transformations in quantum mechanics. *Ann. Physics*, 232:292–331, (1994).
- [9] A. M. Escobar-Ruiz and Alexander V Turbiner. Classical n-body system in volume variables ii: Four-body case. *International Journal of Modern Physics A*, 37(34):2250209, (2022).
- [10] A. M. Escobar-Ruiz and R. Azuaje. On particular integrability in classical mechanics. *ArXiv:2304.12581*, (2023).
- [11] F. Calogero, *Classical many-body problems amenable to exact treatments*, Lecture Notes in Physics Monograph 0940-7677. Springer, Berlin, (2001)
- [12] H Olivares-Pilón, A M Escobar-Ruiz, Fidel Montoya Molina. Three-body harmonic molecule. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 56 (2023) 075002.

- [13] A. M. Escobar-Ruiz y Fidel Montoya, Generalized three-body oscillator system: ground state, *Acta Polytechnica* 62(1):50–55, (2022).
- [14] A. M. Escobar-Ruiz, M. A. Quiroz-Juárez, J. L. Del Rio-Correa, N. Aquino. Classical harmonic three-body system: an experimental electronic realization. *Sci Rep* 12, 13346 (2022).
- [15] A. M. Escobar-Ruiz y Alexander V. Turbiner, Classical n-body system in volume variables II: Four-body case, *International Journal of Modern Physics A* Vol. 37, No. 34 (2022) 2250209.
- [16] A. M. Escobar-Ruiz, H. O. Pilón, N. Aquino, S. Cruz, Helium-like ions in d-dimensions: analyticity and generalized ground state Majorana solutions, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 54 (2022) 235002.
- [17] A. M. Escobar-Ruiz, R. Linares, Alexander V. Turbiner and Willard Miller Jr., Classical n-body system in geometrical and volume variables I: Three-body case, *International Journal of Modern Physics A* 36 (2021) 2150140.
- [18] A. M. Escobar-Ruiz, A. V. Turbiner, W. Miller Jr. Four-body (an)harmonic oscillator in d-dimensional space: S-states, (quasi)-exact-solvability, hidden algebra $sl(7)$, *Journal of Math Physics* 62 (2021) 072103.
- [19] A. M. Escobar-Ruiz, Miller W Jr and Turbiner A. V., (2019) Four-body problem in d-dimensional space: ground state, (quasi)-exact-solvability. *IV Journal of Math Physics* 60 062101.
- [20] A.V. Turbiner, W. Miller, Jr. y M. A. Escobar-Ruiz, (2020) Three-body closed chain of interactive (an)harmonic oscillators and the algebra $sl(4)$, *J. Phys. A: Math. Theor.* 53 055302.
- [21] W. Miller, Jr., A.V. Turbiner y M. A. Escobar-Ruiz, (2018) The quantum n-body problem in dimension $d \geq n-1$: ground state, *J. Phys. A* 51 205201.
- [22] Saporta Katz, O. & Efrati, E. Self-driven fractional rotational diffusion of the harmonic three-mass system. *Phys. Rev. Lett.* 122, 024102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.024102> (2019).
- [23] Saporta Katz, O. & Efrati, E. Regular regimes of the harmonic three-mass system. *Phys. Rev. E* 101, 032211. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.032211> (2020).
- [24] M. A. Escobar-Ruiz y C. A. Escobar, Three charges on a plane in a magnetic field: Special trajectories, *Journal of Math. Physics* 59 (2018) 102901.
- [25] Bagher, A. M., (2016). *Quantum Dots Applications. Sensors & Transducers*, Vol. 198, Issue 3, March 2016, pp. 37-43.
- [26] N. Aquino, A. Flores-Riveros, J. F. Rivas-Silva, Shannon and Fisher entropies for a hydrogen atom under soft spherical confinement, *Phys. Lett. A*, 377 (2013) 2062.
- [27] C. R. Estañón, N. Aquino, D. Puertas-Centeno, J. S. Dehesa, Two-dimensional confined hydrogen: entropy and complexity approach, *Int. J. Quantum Chem.* (2020), e26192.
- [28] Gray, R. M (2011). *Entropy and Information Theory* (2nd ed.). Springer New York, NY.
- [29] Laguna, H. G., & Sagar, R. P.. (2014). Quantum uncertainties of the confined Harmonic Oscillator in position, momentum and phase-space, *Annalen der Physik* 526, No. 11–12, 555–566 (2014).

[30] P. Kościuk y A. Okopińska, Correlation effects in the Moshinsky model. *Few-Body Syst*, 54:1637–1640, (2013).

[31] Loss, D., & DiVincenzo, D. P. (1998). Quantum computation with quantum dots, *Physical Review A* 57, No. 1, 120-126.

7. DESCRIPCIÓN

Uno de los **conceptos claves** que permean el desarrollo de la Física Teórica, validado con resultados experimentales sin precedentes, es el de **Simetrías**. Incluso en el estudio de sistemas más complejos el surgimiento (emergente) y el reconocimiento de patrones ha permitido adquirir una comprensión más profunda de los fenómenos físicos subyacentes que gobiernan la dinámica del sistema. Actualmente, el estudio de simetrías exactas y/o aproximadas constituye un **terreno multidisciplinario** que congrega diferentes áreas del conocimiento como lo son Matemáticas, Física, Computación y Química. Más aún, las simetrías son un tema que atrae y captura el interés del público general en el estudio de la Física Teórica.

La motivación del proyecto es **profundizar** en el **estudio de sistemas superintegrables**, sistemas que tienen una alta simetría, con un **enfoque original** y sistemático. Específicamente, el propósito es estudiar y caracterizar las propiedades de (super)integrabilidad de sistemas físicamente relevantes (cadena de osciladores armónicos generalizados, puntos cuánticos, sistemas atómicos, etc.) usando un nuevo formalismo teórico que se enriquece con la utilización de **herramientas de teoría de la información y Machine Learning**. Especialmente, en la parte cuántica se pretenden analizar, con base en las soluciones exactas y/o aproximadas del sistema correspondiente, las propiedades de localización/deslocalización usando **la información de Fisher y la entropía de Shannon** (entre otras). En Mecánica Clásica, se utilizarán algoritmos de **Machine Learning y Deep Learning** en la búsqueda de cantidades conservadas, ya que esta **combinación de herramientas** puede ofrecer técnicas novedosas y no-convencionales para la **generación de nuevo conocimiento** en el campo de sistemas integrables.

En este proyecto un elemento fundamental es la participación de estudiantes de doctorado, maestría y licenciatura. Pilares sociales del proyecto son la inclusión y una alta ética profesional.

8. RECURSOS DISPONIBLES PARA EL DESARROLLO DEL PROYECTO

El desarrollo óptimo del proyecto requiere de recursos computacionales para los cálculos numéricos de la investigación. Estos recursos están disponibles en el Área de Mecánica y en el Departamento de Física, y también pueden conseguirse con financiamiento externo. Igualmente, se requiere de apoyo económico para cubrir cuotas de inscripción, transporte, viáticos y hospedaje para la participación en congresos científicos de los estudiantes involucrados en el presente proyecto.

9. INFRAESTRUCTURA ACTUAL EN LA UNIVERSIDAD DISPONIBLE PARA EL PROYECTO

La UAM-I tiene disponible equipo de cómputo para la resolución de los cálculos numéricos relevantes al proyecto y también ofrece oportunidades de financiamiento para la asistencia a congresos científicos.

10. FUENTES DE FINANCIAMIENTO

El solicitante tiene financiamiento aprobado por dos años de la Convocatoria para Postulación de Proyectos de Investigación por Personal Académico de Ingreso Reciente de la Dirección de Apoyo a la Investigación (DAI) de la UAM. Además, el solicitante ya ha aplicado a la Convocatoria de Ciencia de Frontera 2023-2024 de Conahcyt.

11. INDICADORES DE DESEMPEÑO

Componente	Productos de Trabajo	Cantidad
Investigación	Publicación de artículos de investigación en revistas indizadas con prestigio internacional	5
	Publicación de artículos de divulgación en revistas indizadas	2
	Conferencias de investigación impartidas en Congresos	3
Docencia	Dirección de Proyectos Terminales	3
	Dirección de Tesis de Maestría	2
	Dirección de Tesis de Doctorado	1
Preservación y difusión de la cultura	Conferencias de divulgación impartidas	2

12. FECHA DE INICIO, DURACIÓN Y PLANEACIÓN A TRES AÑOS

Se propone que el proyecto de inicio a partir del 1 de julio de 2024 con una duración de tres años.

13. PALABRAS CLAVE

Superintegrabilidad, Hamiltonianos integrables, simetrías, cadena de osciladores armónicos, redes neuronales, sistemas atómicos y moleculares, Machine Learning

14. MECANISMOS PARA INTEGRAR LOS AVANCES GENERADOS

- Una reunión quincenal (modalidad presencial) entre los participantes del proyecto. Durante la reunión se presentarán los avances parciales y se discutirán los resultados obtenidos.
- Reuniones quincenales en modalidad virtual entre los participantes del proyecto.
- Seminarios extraordinarios para invitar a miembros externos de la comunidad científica relacionados con el tema del proyecto tanto para presentar nuestros avances como escuchar sus resultados con el fin de tener una retroalimentación crítica y especializada.
- Guardar en la nube las bases de datos que se vayan generando y dar acceso libre a los participantes del proyecto.
- Escribir un manual completo con los resultados de los protocolos implementados.

15. PERSPECTIVAS A FUTURO



(I) Aprendizaje y desarrollo de herramientas de Machine Learning en Física Aplicada y fundamental

- Formación de recursos humanos en IA aplicada en sistemas dinámicos



(II) Colaboración internacional y proyección institucional

- Intercambio académico entre investigadores y estudiantes en el área de sistemas integrables y superintegrables, sistemas atómicos y moleculares confinados
- Organización de eventos internacionales de investigación y difusión



(III) Fortalecimiento y creación de nuevas líneas de investigación entre el Departamento de Física de la UAM-I Y otros Departamentos de la UAM

- Enfoque multidisciplinario, incorporación de investigadores de otras Unidades al proyecto
- Integración interdepartamental

En relación con el punto I, es importante señalar que 2 estudiantes de Maestría de la UAM-I se encuentran haciendo sus trabajos de investigación en esa dirección.

Respecto al punto II, se han iniciado pláticas y acercamientos con expertos internacionales en sistemas superintegrables para establecer colaboraciones académicas. En particular, con investigadores de la Universidad Complutense de Madrid (España), la Universidad de Queensland (Australia) y la Universidad técnica de Praga (República Checa). El [seminario de Física-Matemática](#) en conjunto con el Cinvestav suma de forma positiva a este objetivo. Actualmente, un investigador postdoctoral realiza su estancia en la UAM-I en nuestro grupo de trabajo.

Respecto al punto III, aproximadamente desde hace un año el responsable del presente proyecto ha estado codirigiendo Proyectos Terminales de Licenciatura con el Dr. Humberto Laguna Galindo (Departamento de Química, UAM-I) y ha realizado material de divulgación con el grupo encabezado por el Dr. Jorge Garza (Departamento de Química, UAM-I) en temas directamente relacionados con puntos cuánticos y métodos aproximados en Mecánica Cuántica.



Dr. Adrián Mauricio Escobar Ruiz

Responsable Técnico. Profesor Asociado D T.C.

Departamento de Física

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I)