



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**DQ.0101.2025**

Febrero 17, 2025

**Dr. Román Linares Romero  
Presidente del Consejo Divisional  
de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
PRESENTE**

A través de este medio le solicito incluir en el orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional, la solicitud de contrato como profesor visitante del Dr. Ángel Alejandro García Chung, del 17 de marzo de 2025 al 16 de marzo de 2026.

Agradezco su atención a la presente y le envío un cordial saludo.

Atentamente  
Casa abierta al tiempo



Dr. Jorge Garza Olguín  
Jefe del Departamento de Química

**UNIDAD IZTAPALAPA**

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco 186. Col. Leyes de Reforma 1A Sección. Iztapalapa C.P. 09310. CdMx, México.  
Apartado Postal 55-534.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# PROPUESTA PARA LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE

FOLIO	PV.I.CBI.e.001.25	FECHA	DÍA	MES	AÑO
			14	02	2025

CONFORME A LO PREVISTO EN EL REGLAMENTO DE INGRESO, PROMOCIÓN Y PERMANENCIA DEL PERSONAL ACADÉMICO, SE PROPONE LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE, PARA OCUPAR CON CARÁCTER TEMPORAL LA SIGUIENTE PLAZA:

TIEMPO DE DEDICACIÓN COMPLETO	NÚM. DE HORAS (SOLO TIEMPO PARCIAL) DE CLASE:	DE OTRAS ACTIVIDADES ACADÉMICAS:
UNIDAD IZTAPALAPA	DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
DEPARTAMENTO QUÍMICA	HORARIO LUNES A VIERNES DE 9:00 A 17:00 HORAS	
DURACIÓN DE LA LA CONTRATACIÓN	FECHA DE INICIO DE LABORES	FECHA DE TÉRMINO DE LABORES
	DÍA MES AÑO 17 03 2025	DÍA MES AÑO 16 03 2026

### ACTIVIDADES A REALIZAR

LAS PROFESORAS Y LOS PROFESORES TITULARES DEBERÁN, ADEMÁS DE PODER REALIZAR LAS FUNCIONES DE LAS Y LOS ASISTENTES Y EL PROFESORADO CON CATEGORÍA DE ASOCIADO, PLANEAR, DEFINIR, ADECUAR, DIRIGIR, COORDINAR Y EVALUAR PROGRAMAS ACADÉMICOS EN EL ÁREA DE QUÍMICA CUÁNTICA, RESPONSABILIZÁNDOSE DIRECTAMENTE DE LOS MISMOS. REALIZAR LAS ACTIVIDADES ESTABLECIDAS EN EL ARTÍCULO 7-4 DEL RIPPPA Y DEMÁS NORMAS APLICABLES. REALIZAR LAS FUNCIONES DE DOCENCIA, INVESTIGACIÓN, DIFUSIÓN Y PRESERVACIÓN DE LA CULTURA. IMPARTIR CURSOS RELACIONADOS CON LOS PROGRAMAS DOCENTES DE QUÍMICA. REALIZAR LAS SIGUIENTES ACTIVIDADES:

- 1) Desarrollar aplicaciones de inteligencia artificial para resolver problemas de la química.
- 2) Construir un código para transformar la información del grafo molecular y del SMILE en un arreglo que contenga la información de la curvatura de Forman Ricci.
- 3) Crear un código para la construcción de una red neuronal artificial que será entrenada con la salida del algoritmo desarrollado en el punto anterior.
- 4) Publicar los resultados en revistas de alto impacto y participar en foros especializados.
- 5) Formar recursos humanos de excelencia a nivel de licenciatura, maestría y doctorado.

### LA PLAZA HABRÁ DE SER OCUPADA POR:

APELLIDO PATERNO GARCIA	APELLIDO MATERNO CHUNG	NOMBRE (S) ANGEL ALEJANDRO	CURP [REDACTED]
NACIONALIDAD CUBANA	R.F.C. GACA800318QZ7	FECHA DE NACIMIENTO DÍA MES AÑO 16 03 1980	EDAD SEXO 44 MASCULINO
ESTADO CIVIL CASADO	TELÉFONOS [REDACTED]	CORREO ELECTRÓNICO [REDACTED]@xanum.uam.mx	
CALLE: [REDACTED]		NÚM. EXT. 36	EDIF. DEPTO. D 203
COLONIA, FRACC. O UNIDAD HABITACIONAL [REDACTED]			
DELEGACIÓN O MUNICIPIO: [REDACTED]	ESTADO: CIUDAD DE MÉXICO	CÓDIGO POSTAL [REDACTED]	

DOCUMENTOS QUE SE ANEXAN:	CURRÍCULUM VITAE <input checked="" type="checkbox"/>	R.F.C. <input checked="" type="checkbox"/>	CURP <input checked="" type="checkbox"/>
	ACTA DE NACIMIENTO O CARTA DE NATURALIZACIÓN <input checked="" type="checkbox"/>	FORMA MIGRATORIA (FM) <input checked="" type="checkbox"/>	PASAPORTE <input type="checkbox"/>
			OTROS ESPECIFIQUE <input type="checkbox"/>

### Para uso exclusivo de la Comisión Dictaminadora

Aprobada en la Sesión Núm. _____	Categoría: _____	Nivel: _____	Puntaje: _____
del Consejo Divisional de fecha DÍA MES AÑO	FECHA: DÍA	MES	AÑO

NOTA: DENTRO DE LOS DIEZ DÍAS HÁBILES TRANSCURRIDOS A PARTIR DE LA RECEPCIÓN DE ESTA NOTIFICACIÓN DE INICIO DE LABORES EN LA RECTORÍA GENERAL, LA PERSONA GANADORA DEBERÁ ACUDIR AL ÁREA ASIGNADA EN SU UNIDAD UNIVERSITARIA DE ADSCRIPCIÓN PARA LA FIRMA AUTÓGRAFA DEL CONTRATO DE TRABAJO CORRESPONDIENTE.

PERSONA QUE INGRESARÁ COMO PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE

[REDACTED]

ÁNGEL ALEJANDRO GARCIA CHUNG

NOMBRE Y FIRMA

PERSONA TITULAR DE LA PRESIDENCIA DEL CONSEJO DIVISIONAL

[REDACTED]

NOMBRE Y FIRMA

PERSONA TITULAR DE LA PRESIDENCIA DE LA COMISIÓN DICTAMINADORA

[REDACTED]

NOMBRE Y FIRMA

PERSONA TITULAR DE LA SECRETARÍA DE LA COMISIÓN DICTAMINADORA

[REDACTED]

NOMBRE Y FIRMA

T1 DIPPPA  
T2 COMISIÓN DICTAMINADORA DIVISIONAL  
T3 JEFATURA DE DEPARTAMENTO

T4 RECTORÍA DE UNIDAD  
T5 DIRECTOR DE DIVISIÓN  
T6 CONSEJO DIVISIONAL

**NOTA:** SE UTILIZA ÚNICAMENTE AL REVERSO DEL TANTO 1

Vo. BO. PLANTILLA DE UNIDAD

SELLO

Vo. BO. PLANTILLA DE RECTORÍA GENERAL

SELLO

CODIFICACIÓN INTERNA (No. DE PLAZA EN PLANTILLA)
227
CONTROL DE PLANTILLA
NOMBRE Y FIRMA

## DECLARACIÓN PARA ASPIRANTES A FORMAR PARTE DEL PERSONAL ACADÉMICO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

FECHA	DÍA	MES	AÑO
	13	02	2025

Dra. Norma Rondero López

PERSONA TITULAR DE LA SECRETARÍA GENERAL

Conforme al requisito establecido en el artículo 3, último párrafo del Reglamento de Ingreso, Promoción y Permanencia de Personal Académico (RIPPPA), para ser aspirante a formar parte del personal académico de la Universidad Autónoma Metropolitana, manifiesto bajo protesta de decir verdad:

A CONTINUACIÓN ELIJA LA OPCIÓN SEGÚN CORRESPONDA:

a) EN CASO DE NO HABER SIDO SANCIONADA(O)

Que no se me ha sancionado mediante resolución firme emitida por alguna autoridad jurisdiccional o administrativa, por actos u omisiones relacionadas con violencia por razones de género u otras violaciones graves a derechos humanos.

b) EN CASO DE HABER SIDO SANCIONADA(O)

Que he cumplido con la reparación del daño o la reparación integral a las víctimas por haber sido sancionada(o) mediante resolución emitida por alguna autoridad jurisdiccional o administrativa, por actos u omisiones relacionadas con violencia por razones de género u otras violaciones graves a derechos humanos.

Describe y adjunte al presente la documentación que acredita lo anterior.

PERSONA INTERESADA

Angel Alejandro García Chung

NOMBRE Y FIRMA

T1 SECRETARÍA GENERAL  
T2 UNIDAD DE ADSCRIPCIÓN  
T3 PERSONA INTERESADA

## Plan de trabajo anual como profesor visitante en el Departamento de Química UAM Iztapalapa

Proponente: Dr. Angel Alejandro García Chung

En esta sección expongo el plan de trabajo que me propongo desarrollar durante el primer año como profesor visitante en el Departamento de Química de la UAM-I. El plan está considerado para ser desarrollado en colaboración con profesores del Departamento de Química, así como de otras instituciones, y contempla la vinculación con estudiantes. Lo anterior dependerá, naturalmente, del interés de alumnos y profesores en los temas señalados. Cabe mencionar que este plan de trabajo está enmarcado en un proyecto de investigación más ambicioso y cuyo objetivo es la exploración de las geometrías de redes de alto orden (usadas, entre otras cosas, para representar grafos moleculares y redes de reacciones químicas) y su implementación en algoritmos de aprendizaje de máquinas. A continuación ofrezco un contexto breve que sirve para entender el propósito de este proyecto y su relación con el plan de trabajo.

Muchos modelos y herramientas de Inteligencia Artificial aplicadas a la química, e.g., Artificial Neural Networks (ANNs) y Graph Neural Networks (GNNs), se enfocan en la relación **estructura - propiedades** de las sustancias [1]. En particular, utilizan la información contenida en las estructuras, átomos y enlaces, para hacer predicciones cuantitativas y cualitativas de las moléculas. Sin embargo, la información estructural se incorpora de forma distinta en los diferentes modelos. En esta dirección, los resultados más promisorios se obtienen al emplear una GNN [2-6].

El éxito relativo de las GNNs se debe a que “la vectorización” [2,3] incorpora la información del grafo molecular combinando datos sobre los átomos y enlaces con la topología de la molécula, empleando la matriz de adyacencia. Esto permite capturar mucha más estructura en las GNNs que en los esquemas de las ANNs, que están basadas en descriptores químico-informáticos obtenidos a partir del SMILE [4-6]. Es decir, las ANNs no incorporan información topológica de forma explícita. No obstante, a pesar de los logros obtenidos con las GNNs, su diseño es una mezcla “poco rigurosa” de topología molecular e información química-física (abundaré más adelante). Esto conduce a resultados exitosos pero con explicaciones opacas respecto al “por qué” de su funcionamiento [5]. Además, el éxito de las GNNs en las aplicaciones químicas está condicionado por un sesgo inherente: desconocemos cuántas arquitecturas fallan, lo que limita nuestra comprensión sobre por qué una GNN funciona en ciertos casos, por qué no lo hace en otros, cómo opera, etc. Por ello, considero valioso explorar enfoques que aborden la “vectorización” de los grafos moleculares desde la perspectiva geométrica en una ANN, y comparar estos métodos con las arquitecturas de GNNs actualmente en uso.

Para dar más detalles, recordemos la idea “básica” detrás de una GNN y consideremos un grafo molecular  $G$  dado como  $G = (V, E, \omega_V, \omega_E)$ , donde  $V$  es el conjunto de vértices que son los átomos que representan la molécula,  $E$  es el conjunto de enlaces,  $\omega_V$  es el conjunto de pesos sobre los átomos y  $\omega_E$  es el conjunto de pesos sobre los enlaces. Aquí  $\omega_V$  es una matriz  $\omega_V \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$  siendo  $n$  el número de vértices y  $m$  el número de descriptores atómicos (como masa atómica, polarizabilidad, entre otros). En una GNN se implementa un mecanismo (llamado *clustering*) el cual permite modificar los valores de los descriptores de los átomos (a los cuales se les llama *features*) involucrando la topología de la red vía la matriz de adyacencia.

El esquema para esta modificación de los descriptores es lo que llamamos GNN, la forma específica de modificar los valores de los descriptores da lugar GNNs de diferente tipo, e.g., GCNs (Graph Convolutional Networks), MPNN (Message Passing Neural Networks), GATs (Graph Attention Networks), etc. Sin embargo, este proceso tiene un punto que es muy delicado: los átomos en una molécula NO tienen ninguna estructura de orden (es decir, aunque deben numerarse para el procesamiento digital, esta numeración es artificial). De modo que TODAS las funciones que se ocupan para el cálculo de los

nuevos descriptores DEBEN ser invariantes ante el etiquetado de los átomos. Esto se resuelve empleando operaciones de “sumas” y “promedios” que no tienen ninguna explicación inmediata o justificación científica más allá de la conveniencia. En este proyecto, proponemos la solución de este punto incorporando el análisis geométrico, debido a que la geometría de un objeto, discreto o continuo, NO depende de las coordenadas, con lo cual el problema de la estructura de orden descrito desaparece. Esta perspectiva es novedosa y no se ha considerado en literatura.

Un grafo molecular admite una descripción en términos geométricos empleando lo que se conoce como curvatura de Forman-Ricci (FRC) [7]. La FRC asocia un número real a cada enlace en  $E$  empleando la información contenida en  $\omega_V$  y  $\omega_E$ . De este modo, la colección de valores de FRCs para cada enlace en una molécula forma una distribución que es invariante ante el etiquetado de los átomos. Más aún, la FRC admite generalizaciones a estructuras de alto orden como hipergrafos o hipergrafos químicos [8], lo cual permitiría caracterizar geométricamente, por ejemplo, redes de reacciones químicas, las cuales son cruciales en el análisis de rutas de reacciones químicas y en estudios del origen de la vida. En resumen, empleando la FRC podremos calcular la  $pFRC$  (distribución de valores de FRCs) de una molécula y con esta información geométrica podremos construir y entrenar una ANN para predecir propiedades químicas. Esta ANN podría resultar más eficiente que las GNNs correspondientes. Un objetivo de este proyecto es desarrollar esta ANN y comparar su desempeño con el de las GNNs empleadas en la predicción de una propiedad química muy relevante que es la solubilidad en agua [9]. Naturalmente, este estudio podría extenderse al análisis de otras propiedades.

Hasta aquí he dado los aspectos del proyecto de investigación en el que se enmarca el plan de trabajo que propongo para el primer año como profesor visitante en el Departamento de Química de la UAM-Iztapalapa. Permítanme ahora detallar el plan de trabajo no sin antes indicarles el título que daré al proyecto: **Modelos de Machine Learning Geométricos aplicados a la predicción de solubilidad en agua.**

La curvatura de Forman-Ricci es un objeto matemático que asocia un número real a una estructura (digamos que topológica) expresada, por ejemplo, en los distintos enlaces de los grafos moleculares. Esta curvatura contiene la información relacionada con “*el camino más corto que podría emplear un caminante aleatorio caminando por el grafo molecular*”. Cuando se tiene la distribución de valores de curvatura, estamos ofreciendo información global de la molécula. Por esta razón, emplear la distribución de curvaturas de Forman-Ricci de las sustancias debería proporcionar una capacidad predictiva para la solubilidad en agua comparable a la de las GNNs empleadas para el mismo problema o mejor, pero simplificando la arquitectura ya que se emplearía una ANN.

Para realizar este proyecto, propongo el siguiente plan de trabajo:

1. Reproducir las GNNs más eficientes reportadas para predecir la solubilidad en agua.
2. Construir un código para transformar la información del grafo molecular y del SMILE en un arreglo que contenga la información de la curvatura de Forman Ricci.

Debido a mi colaboración con el Instituto Max Planck para las Matemáticas en las Ciencias en Leipzig y el grupo de Bioinformática de la Universidad de Leipzig, ya cuento con los datos limpios de solubilidad contenidos en toda la base de Datos de Reaxys. Son alrededor de 47 mil valores reportados hasta la fecha lo cual supera el número de valores de libre acceso.

3. Crear un código para la construcción de la ANN que será entrenada con la salida del algoritmo desarrollado en el punto anterior.
4. Entrenar las GNNs del Punto 1 y del Punto 3 con los datos de Reaxys.
5. Comparar los resultados empleando las siguientes métricas: MSE (mean square error) tanto para entrenamiento, como para validación y prueba. Evaluar la complejidad de las arquitecturas atendiendo al número de parámetros.

6. Analizar los patrones de activación de las neuronas en la ANN y evaluar su relación con las  $pFRC$ . Así podremos saber por qué aprenden, cómo aprenden y qué aprenden las ANN usadas.
7. Exponer los resultados en el Seminario del Departamento de Química.
8. Publicar los resultados en una revista de alto impacto.
9. Exponer los resultados en un Congreso Nacional y un Congreso Internacional.

**Docencia:** De forma resumida y paralela a lo anterior, estoy interesado en impartir cursos de docencia tanto a nivel licenciatura como en posgrado y tanto al interior del Departamento de Química como de apoyo a otros departamentos y divisiones. A continuación ofrezco un listado de algunas de las UEA's que puedo impartir en las distintas instancias.

- División de CBI: Álgebra y geometría analítica, Geometría y trigonometría, Comunicación en las Ciencias y las Ingenierías.
- Licenciatura en Química: Estructura de la Materia, Físicoquímica IV, V y VI, entre otras relacionadas con química cuántica.
- Posgrado en Química: Físicoquímica General, Estructura atómica y molecular, Teoría de Grupos aplicada a la química, Química Cuántica Avanzada, entre otras.

Adicionalmente y de ser posible, podría impartir cursos para que los estudiantes adquieran no solo las herramientas computacionales y las matemáticas para abordar temas de aprendizaje de máquinas, sino de otros temas que puedan resultar de interés y actualidad como son:

- Teoría (algebraica) de redes,
- Teoría de grupos de Lie y sus representaciones,
- Cómputo cuántico, tanto de fermiones como de muestreo de bosones (Gaussian Boson Sampling),
- Matemática de aprendizaje de máquinas,
- Lenguaje Qiskit.

#### Herramientas docentes de interés

- Gestión e instalación de modelos LLMs privados como asistente para estudiantes.

**Divulgación:** Aparte de las presentaciones de los resultados en seminarios y congresos, planeo crear un taller mensual con estudiantes en el que abordemos temas de actualidad y de interés científico. Tengo experiencia en la gestión de estos espacios con estudiantes y doy cuenta del impacto que tienen en su apreciación de la carrera.

#### **Referencias**

1. Tkatchenko, A. Machine learning for chemical discovery. Nat Commun 11, 4125 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-17844-8>
2. Zhiyuan Liu, Jie Zhou - Introduction to Graph Neural Networks-Morgan & Claypool (2020).
3. Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications. <https://arxiv.org/abs/1812.08434>
4. Wu, Z., Wang, J., Du, H. et al. Chemistry-intuitive explanation of graph neural networks for molecular property prediction with substructure masking. Nat Commun 14, 2585 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41467-023-38192-3>
5. Méndez-Lucio, O., Nicolaou, C.A. & Earnshaw, B. MolE: a foundation model for molecular graphs using disentangled attention. Nat Commun 15, 9431 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-53751-y>
6. David, L., Thakkar, A., Mercado, R. et al. Molecular representations in AI-driven drug discovery: a review and practical guide. J Cheminform 12, 56 (2020). <https://doi.org/10.1186/s13321-020-00460-5>
7. Wilmer Leal, Guillermo Restrepo, Peter Stadler and Jürgen Jost. Forman–Ricci curvature for hypergraphs, <https://doi.org/10.1142/S021952592150003X>
8. Angel Garcia-Chung, Marisol Bermúdez-Montaña, Peter F. Stadler, Jürgen Jost and Guillermo Restrepo. Chemically inspired Erdős–Rényi hypergraphs. [10.1007/s10910-024-01595-8](https://doi.org/10.1007/s10910-024-01595-8)
9. Veysel Gider, Cafer Budak, Drug solubility prediction: a comparative analysis of GNN, MLP, and Traditional machine learning algorithms. doi: 10.29109/gujsc.1371519.



Casa abierta al tiempo

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
**Unidad Iztapalapa**

**DQ.0100.2025**

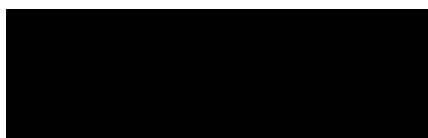
Febrero 14, 2025

**Dr. Román Linares Romero**  
**Presidente del Consejo Divisional**  
**de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería**  
**PRESENTE**

El cuerpo directivo del departamento de química solicita la contratación del Dr. Ángel Alejandro García Chung como profesor visitante del Área de Química Cuántica en el período 17 de marzo de 2025 al 16 de marzo de 2026. A través de un proceso de selección interno, acordado por el Departamento de Química, se encontró que el perfil académico del Dr. García Chung es idóneo para las necesidades de docencia, investigación y difusión de la cultura del Departamento de Química. En la parte de investigación desarrollará una línea de investigación relacionada con el desarrollo de aplicaciones de inteligencia artificial para resolver problemas de la química. En la parte de docencia se integrará al grupo de profesores que imparten los cursos de fisicoquímica a nivel teórico, además de apoyar cursos de la Licenciatura en Química en todas sus etapas, así como los del Posgrado en Química. En la difusión de la cultura participará en la divulgación de las ciencias que ha emprendido el Departamento de Química.

Agradecemos su atención a la presente solicitud.

Atentamente  
Casa abierta al tiempo



Dr. Rafael Arturo Zubillaga Luna  
Jefe del Área de Biofisicoquímica



Dra. Nancy Coromoto Martín Guaregua  
Jefa del Área de Catálisis

**UNIDAD IZTAPALAPA**

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco No. 186, Col. Leyes de Reforma 1ª. Sección, Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09310, Ciudad de México.

Edificio R primer piso. Oficina R-118. Apartado Postal 55-534. Tel: (52)5804-4665.

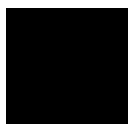
E-mail: [quam@izt.uam.mx](mailto:quam@izt.uam.mx). <http://www.quimica.izt.uam.mx>





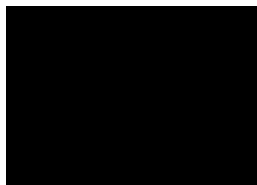
Casa abierta al tiempo

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
**Unidad Iztapalapa**



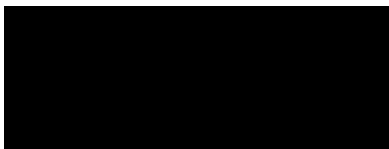
---

Dra. Laura Galicia Luis  
Jefa del Área de Electroquímica



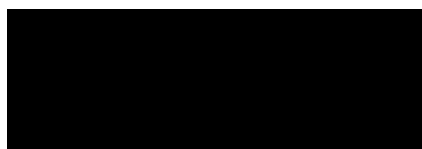
---

Dr. Salomón Cordero Sánchez  
Jefe del Área de Fisicoquímica de Superficies



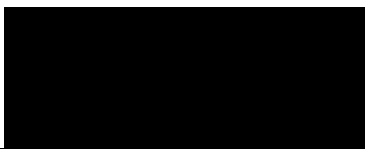
---

Dra. Rubicelia Vargas Fosada  
Jefa del Área de Fisicoquímica Teórica



---

Dr. Guillermo Arnulfo Vázquez Coutiño  
Jefe del Área de Química Analítica



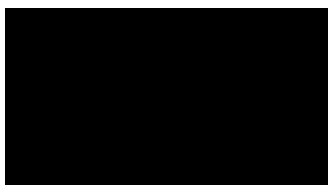
---

Dr. Eduardo González Zamora  
Jefe del Área de Química Inorgánica



---

Dr. Rodolfo Octavio Esquivel Olea  
Jefe del Área de Química Cuántica



---


Dr. Jorge Garza Olguín  
Jefe del Departamento de Química

**UNIDAD IZTAPALAPA**

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco No. 186, Col. Leyes de Reforma 1ª. Sección, Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09310, Ciudad de México.

Edificio R primer piso. Oficina R-118. Apartado Postal 55-534. Tel: (52)5804-4665.

E-mail: @izt.uam.mx. <http://www.quimica.izt.uam.mx>

# Curriculum Vitae

## Información Personal

Nombre: Ángel Alejandro García Chung.

(Residencia permanente en México)

Emails: [REDACTED]@tec.mx, [REDACTED]@mis.mpg.de

## Habilidades

- Idiomas: Español (Lengua Materna), Inglés C1 (Toefl ITP 610, Abril 2022).
- Programación: MatLab, Python, Mathematica.
- Modelado Matemático: Experiencia en el desarrollo de modelos matemáticos para sistemas físicos y redes complejas.
- Probabilidad y Estadística: Dominio de técnicas avanzadas aplicadas a la ciencia de datos y sistemas dinámicos y complejos.
- Teoría de redes complejas: Aplicación de la teoría de redes para la caracterización de estructuras de alto orden y su criticalidad.
- Análisis funcional y métodos numéricos: Uso de herramientas de análisis funcional y métodos numéricos para la simulación de sistemas.

## Reconocimientos

- Medalla al Mérito Estudiantil, Graduación Doctorado, 2014.
- Nivel 1, Sistema Nacional de Investigadores (2015 - 2025).

## Resumen

- Doctorado en Ciencias (Física), 2014,
- Maestría en Física, 2008,
- Licenciatura en Física, 2004, (Título de Oro)
- Asesor para el entrenamiento de Olimpiada de Física,
- 1 curso impartido en Preparatoria,
- 18 cursos de Licenciatura impartidos,
- 3 cursos de Posgrado impartidos,
- 21 artículos publicados, citas: 176 (Google Scholar),
- Colaboraciones nacionales: Instituto de Ciencias Nucleares (UNAM), Centro de Ciencias Matemáticas (UNAM), UAM-Cuajimalpa, Tecnológico de Monterrey (CEM), Universidad Iberoamericana, Universidad de Chihuahua.
- Colaboraciones internacionales: Instituto Max Planck para las Matemáticas en las Ciencias (Alemania), Universidad de Leipzig (Alemania), Universidad de Amberes (Bélgica), Instituto Bernoulli (Holanda), Universidad de Camerino (Italia), Universidad de York (UK), Universidad de Alberta (Canadá).

## Formación Académica en Física y Matemáticas Aplicadas

- Doctorado en Física (con enfoque en Matemáticas, particularmente Teoría de Supervariedades y Análisis Funcional), Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa (2014).
  - Título de la Tesis: "Un modelo para el propagador polimérico del campo de Dirac libre". *Idea: Este trabajo involucró el uso de herramientas de análisis funcional adaptadas a espacios de Grassmann reales.*

- Maestría en Física (con enfoque en Matemáticas, particularmente en análisis funcional adaptado a integrales de trayectorias), Instituto Balseiro, Centro Atómico de Bariloche, Provincia de Río Negro, Argentina (2008).
  - Título de la Tesis: “Teoría cuántica de campos con singularidades móviles”. *Idea: Este proyecto introduce herramientas de análisis funcional y teoría de la medida para incorporar la frontera en el Efecto Casimir dinámico como una interacción del campo cuántico.*
- Licenciado en Física (con enfoque en Matemáticas Aplicadas, particularmente en estadística y modelación computacional), Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba (2004).
  - Título de la Tesis: “Estudio del ruido magnético de Barkhausen empleando un modelo de Ising”. *Idea: En este proyecto se realizó una simulación del Modelo de Ising 2D para realizar un primer paso en el desarrollo de un catálogo de ruido.*

### **Formación Docente**

- Curso de Planeación de la Enseñanza, Programa de profesionalización, capacitación y actualización para docentes. DGIRE, UNAM Junio de 2021.

### **Posiciones Académicas**

- Investigador Postdoctoral en el Área de Química Cuántica, Departamento de Química, UAM-Iztapalapa, Ciudad de México, México (Febrero 2024 -Enero 2026).
- Profesor Visitante, Max Planck Institute para las Matemáticas en las Ciencias, Leipzig, Alemania, (Junio 2022 - Septiembre 2024).
- Profesor Cátedra, Departamento de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México, México, (Agosto 2021 - Febrero 2024).
- Profesor Asociado D, Departamento de Física, UAM-Iztapalapa, Ciudad de México, México. (Septiembre 2018 a Septiembre 2022).
- Profesor Tiempo Parcial, Área 1, Prepa Varonil UP, Ciudad de México, México. (Agosto 2020 a Diciembre 2021).
- Investigador Postdoctoral (Proyecto Conacyt) en el Área de Gravitación y Cosmología del Departamento de Física, UAM-Iztapalapa, Ciudad de México, México. (Septiembre 2017 a Agosto 2018).
- Investigador Postdoctoral (DGAPA UNAM) en el Departamento de Altas Energías del Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Ciudad de México, México. (Septiembre 2015 - Agosto 2017).
- Investigador Postdoctoral (Proyecto Conacyt) en el Área de Sistemas Complejos del Departamento de Física, UAM-Iztapalapa, Ciudad de México, México. (Enero – Julio, 2015).
- Profesor Ayudante C, Posgrado en Física, UAM-Iztapalapa. (Marzo 2012 - Marzo 2015).
- Profesor Adiestrado, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba. (Septiembre 2004 - Diciembre 2005).

### **Experiencia docente en Matemáticas y Física**

#### Cursos en Nivel Medio-Superior:

- Profesor Asesor en el Entrenamiento para la 22 y la 24 Olimpiada Metropolitana de Física. Octubre 2011 y Octubre 2013.
- Profesor Asesor en el Entrenamiento para la 22 y la 24 Olimpiada Nacional de Física. Noviembre 2011 y Noviembre 2013.
- Profesor de asignatura, “Física IV”, Prepa UP Varonil. Período 2020 - 2021

Cursos en Nivel Licenciatura:

- Matemáticas Aplicadas y programación
  - Pensamiento Matemático I, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2021
  - Razonamiento Matemático, Tec de Monterrey, Semestres 1 y 2, 2022
  - Aplicaciones de las leyes de conservación en sistemas ingenieriles, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2022
  - Aplicaciones de la Termodinámica en sistemas ingenieriles, Tec de Monterrey, Semestre 1, 2022 y 2024
  - Análisis Estadístico, Tec de Monterrey, Semestre 1, 2022
  - Aplicación de métodos numéricos al ambiente construido, Tec de Monterrey, Semestre 1, 2023
  - Análisis de fenómenos en el ambiente construido con probabilidad y estadística, Tec de Monterrey, Semestre 1, 2023
- Física
  - Física Moderna II, UAM-I, 2018
  - Mecánica Elemental I, UAM-I, 2019
  - Mecánica Elemental II, UAM-I, 2019
  - Fluídos y calor, UAM-I, 2020
  - Modelación del movimiento en ingeniería, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2022
  - Modelación del movimiento en bioingeniería y procesos químicos, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2022
  - Modelación del movimiento en ciencias, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2023
  - Modelación computacional del movimiento, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2023
  - Modelación computacional aplicando leyes de conservación, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2023
  - Aplicaciones de las leyes de conservación en ciencias, Tec de Monterrey, Semestre 2, 2023
  - Análisis de sistemas eléctricos en sistemas ingenieriles, Tec de Monterrey, Semestre 1, 2024

Cursos en Nivel Posgrado:

- “An Introduction to the polymer quantization scheme”, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, University of Guilan, Irán (Mayo 31 - Junio 8, 2021).
- “Una visita a la Mecánica Cuántica Polimérica”, Posgrado de la Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí. (Enero 31 - Febrero 2 de 2018).
- “Introducción a la Teoría Cuántica de Campos”, **Posgrado en Física**, Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. (Septiembre 2018 - Diciembre 2018).

Talleres y Ferias de Ciencias:

- Introducción a la computación cuántica, Tec de Monterrey, Campus Estado de México, Nov 2023 - Enero 2024.
- “Viajando del nano-mundo al Cosmos”, Semana de la Ciencia 2011, Departamento de Física, noviembre 2011.
- “Una mirada inquisitiva al mundo cuántico”, Semana de la Física, Departamento de Física, Octubre 2022.

Cursos en preparación:

- Teoría de redes y machine learning aplicadas a la química. (Este curso está en preparación para ser impartido a los estudiantes de la división de Ciencias Básicas e Ingenierías de la UAM-I en el primer semestre del 2025).

**Artículos publicados (por línea de investigación)****• Física y gravitación cuántica**

1. “*What happens once a detector has detected a Rindler particle*” Angel Garcia-Chung, Benito Juárez-Aubry and Daniel Sudarsky. *Phys. Rev. D* **108**, 025002 (2023).
2. “*Constraining the quantum gravity polymer scale using LIGO data*”, Angel Garcia-Chung, Matthew F. Carney, James B. Mertens, Aliasghar Parvizi, Saeed Ratsgoo and Yaser Tavakoli. *Class. Quantum Grav.* 41 (2023)
3. “*What gravitational waves detectors say about Polymer quantum effects?*”, Angel Garcia-Chung, Matthew F. Carney, James B. Mertens, Aliasghar Parvizi, Saeed Ratsgoo and Yaser Tavakoli. *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, 11, 054 (2022).
4. “*Dirac’s formalism for time-dependent Hamiltonian systems in the extended phase space*”, Angel Garcia-Chung, Daniel Gutierrez-Ruiz y David Vergara. *Universe*, 7, 109 (2021).
5. “*Propagation of quantum gravity-modified gravitational waves on a classical FLRW spacetime*”. Angel Garcia-Chung, James B. Mertens, Saeed Ratsgoo, Yaser Tavakoli and Paulo Vargas Moniz. *Physical Review D* 103, 084053 (2021).
6. “*Bounds on the Polymer Scale from Gamma Ray Bursts*”. Yuri Bonder, Angel Garcia-Chung and Saeed Rastgoo, *Physical Review D* **96**, 106021 (2017).
7. “*Instanton solutions on the polymer harmonic oscillator*”. Joan Austrich-Olivares, Angel A. García-Chung and José D. Vergara, *Class. Quant. Grav.* **34**, 11 (2017).
8. “*Polymer Dirac field propagator: A model*”. Angel A. García-Chung and Hugo A. Morales-Técotl. *Physical Review D* **89**, 065014 (2014).

**• Matemáticas y Matemáticas Aplicadas**

9. “*The flow method for the Baker-Campbell-Hausdorff formula: exact results*” Federico Zadra, Alessandro Bravetti, Angel García Chung and Marcello Seri. *J. Physics A: Math. Theor.* **56** 385206 (2023).
10. “*A geometric approach to the generalized Noether theorem*”, Alessandro Bravetti and Angel Garcia-Chung. *J. Phys. A: Math. Theor.* **54** 095205 (2021).
11. “*From geometry to coherent dissipative dynamics in quantum mechanics*”, Hans Cruz Prado, Alessandro Bravetti and Angel García Chung, *Quantum Reports*, 3, 664-683, (2021).
12. “*Some applications of the relation between the symplectic group  $Sp(4, R)$  and its Lie algebra*”, Guillermo Chacón-Acosta y Angel García-Chung. *Physical Review D*, **104**, 126006 (2021).
13. “*Symplectic group in polymer quantum mechanics*”, Angel Garcia-Chung, *Physical Review D* 101, 106004 (2020).
14. “*A visit to the Stone-von Neumann theorem*”. Angel Garcia-Chung, REF-UNAH-V6N1 (2018).
15. “*Exact Baker-Campbell-Hausdorff formula for the contact Heisenberg algebra*”. Alessandro Bravetti, Angel Garcia-Chung and Diego Tapias, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** 105203 (2017).
16. “*Polymer-Fourier quantization of the scalar field revisited*”. Angel Garcia-Chung and José D. Vergara, *International Journal of Modern Physics A* **32**, 1650166 (2016).

**• Teoría de información y de redes**

17. “*Chemically inspired Erdős-Rényi oriented hypergraphs*”, Angel Garcia-Chung, Marisol Bermúdez-Montaña, Peter F. Stadler, Jürgen Jost, Guillermo Restrepo. *Journal of Mathematical Chemistry* 62 (6), 2024.
18. “*Entropic uncertainty relations and mutual information correlations sums in two-level superposition states of coupled oscillators*”, Saúl J. C. Salazar, Angel Garcia Chung, Humberto Laguna and Robin Sagar. *Journal of the Mexican Chemical Society* 68 (4), 2024.

### • **Sistemas dinámicos y complejos**

19. “Zero-Hopf bifurcations in Yu-Wang type systems”, Abimael Abengochea, Angel Garcia-Chung y Ernesto Pérez Chavela. Eur. Phys. J. Spec. Top. (2021). <https://doi.org/10.1140/epjs/s11734-021-00347-y>
20. “On the description of Brownian particles in confinement on a non-Cartesian coordinate basis”. Leonardo Dagdug, Angel A. García-Chung and Guillermo Chacón-Acosta, The Journal of Chemical Physics **145**, 074105 (2016).
21. “On the covariant description of diffusion in two-dimensional confined environments”. Angel A. García-Chung, Guillermo Chacón-Acosta and Leonardo Dagdug-Lima. The Journal of Chemical Physics **142**, 064105 (2015).

### **Artículos en preparación**

1. “Effects of political tension upon rare-earth research”, Angel Garcia Chung, Marisol Bermudez Montaña, Jürgen Jost, Peter Stadler y Guillermo Restrepo (Borrador en fase final).
2. “What Bohmian mechanics says about the time of arrival of squeezed states”. Angel Garcia-Chung y Humberto Laguna. (Borrador en fase final)
3. “Harmonic oscillator squeezed states and entropic time revivals of the unsqueezed state”. Angel Garcia-Chung, Saúl Salazar, Humberto Laguna y Robin Sagar. (Borrador en fase final)
4. “On the Forman-Ricci curvature as a Hamiltonian for random graphs models”, Angel Garcia Chung, Marisol Bermúdez Montaña, Guillermo Restrepo y Jürgen Jost. (En fase de análisis de resultados)
5. “A power law for the community emergence using chemical hypergraphs”, Francisco Betancourt, Humberto Laguna, Guillermo Restrepo, Jürgen Jost y Angel Garcia Chung. (En fase de análisis de resultados)
6. “The role of chemical reactions in the expansion of the chemical space: a computational and socio-historical approach”, Angel Garcia Chung, Marisol Bermudez Montaña, Jürgen Jost, Peter Stadler y Guillermo Restrepo. (En fase de análisis de resultados)

### **Proceedings, capítulos en libros y publicaciones de divulgación**

1. “The EPR paper: a pedagogical approach”. Angel García Chung. arXiv: 2105.02384.
2. “On the geometric phase for Gaussian states”. Angel García Chung. arXiv:2004.14204.
3. “On the covariance matrix for Gaussian states”. Angel García Chung. arXiv:2003.11063.
4. “Squeezed operator: a classical view”. Angel García Chung. arXiv:2003.04257.
5. Capítulo en libro: “Espacios de Hilbert y las representaciones de Schrödinger y polimérica”, en el libro de divulgación “Henri Poincaré y David Hilbert, y los fundamentos de la física matemática moderna”, publicado por la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, 2016. ISBN: 978-607-28-0788-4.
6. “Thermal properties for an ensemble of polymer Fermi”, Guillermo Chacón-Acosta, Angel A. García-Chung and Héctor H. Hernandez-Hernandez, Journal of Physics: Conference Series (Vol. 654, No. 1, p 012002).
7. “Towards polymer quantum mechanics for fermionic systems”, Angel A. García-Chung, Hugo A. Morales-Técotl and Juan D. Reyes, AIP Conf. Proc. 1548, pp. 161-166.
8. “What are the mechanical degrees of freedom of the Dirac field?”, Angel A. García-Chung and Hugo A. Morales-Técotl. AIP Conf. Proc. 1473, pp. 163 – 167.
9. “On causality in polymer scalar field theory”, Angel A. García-Chung and Hugo A. Morales-Técotl. AIP Conf. Proc. 1396, pp. 104 – 108.

### **Conferencias, seminarios y eventos organizados**

#### **Conferencias:**

- “La curvatura de los procesos químicos”, MexSIAM 2024, Mérida, Diciembre 2024 (**a realizarse**).

- “Una mirada polimérica a la Teoría algebraica de grafos”, Mexilazos 2024, Morelia, Noviembre 2024.
- “How random has been the historical expansion of the chemical space?”, Instituto Max Planck para las matemáticas en las ciencias, Leipzig, Alemania. Enero 2024.
- “Mecánica cuántica polimérica: una acercamiento a la criticalidad”, Mexilazos 2022, BUAP, Puebla, Noviembre 2022.
- “Una mirada inquisitiva a la mecánica cuántica” Semana de la Física, UAMI, CDMX, 2022
- “Sobre relojes relacionales y poliméricos”, Congreso Nacional de Matemáticas. Octubre 2021.
- “Una mirada Bohmiana al entrelazamiento de estados comprimidos”. VI Encuentro de Modelado en Física y Geometría, UAM-A. 30 de agosto de 2021.
- “Técnicas geométricas para el estudio de la difusión en sistemas confinados”, XV Taller de la Materia Condensada y Molecular. 21-23 de Junio de 2021.
- “Las transformaciones canónicas lineales en la Mecánica Cuántica polimérica”, V Encuentro de Modelado Matemático en la Física y Geometría, UAM-C, MCTP y BUAP. 27-30 de Octubre 2020.
- “Grupo simpléctico en la mecánica cuántica polimérica”, IV Encuentro de Modelado Matemático en Física y Geometría, Casa Galván, UAM, CDMX, 5-6 de diciembre de 2019.
- “Transformaciones canónicas lineales en la mecánica cuántica polimérica”. Mexilazos-2019, Centro de Ciencias Matemáticas de la UNAM, Morelia, Michoacán. 15-16 de Noviembre de 2019.
- “On the linear canonical transformations group in polymer quantum mechanics”, III Encuentro de Modelado Matemático en Física y Geometría, Universidad Autónoma de Chiapas y Centro Mesoamericano de Física Teórica, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, Noviembre 2018.
- “Time-dependent Hamiltonians within the path integral formalism and the extended phase space”, Instituto de Física, BUAP, Octubre 2016.
- “Soluciones de instantones en la mecánica cuántica polimérica”, 1er Encuentro de Modelado Matemático en Física y Geometría, UAM-Cuajimalpa, Julio 2016.
- “On the geometrical description of the effective diffusion in confined environments: 3D channels”, Diffusion Fundamentals, Dresden, Alemania, Agosto 2015.
- “Comentarios sobre los estados atrapados en una guía de ondas: reporte”, Reunión de ondas y materiales, Instituto de Ciencias Físicas, Cuernavaca, Morelos, Junio-Julio 2015.
- “Una invitación a la teoría de campos polimérica”, Instituto de Cibernética Matemática y Física, Cuba, Abril 2015.
- “Técnicas geométricas en el cálculo de la difusión efectiva”, 6to Coloquio de Física-Matemática, UAM-Cuajimalpa, Diciembre 2014.
- “Una revisión de la cuantización a la Fock del campo de Dirac”, Encuentro de Gravitación y Física Matemática, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Mayo 2014.
- “Comentarios sobre la teoría de campos polimérica: reporte”, MexiLazos 2014, Instituto de Física Ing. Luis Rivera Terrazas, BUAP, Puebla, Noviembre 2014.
- “Oscilador de Fermi”, MexiLazos 2013, Casa de la Primera Imprenta, CDMX, Noviembre 2013.
- “Towards polymer quantum mechanics for fermionic systems”, IX Escuela de la División de Gravitación y Física Matemática, Puerto Vallarta, Diciembre 2012.
- “Hacia la mecánica cuántica polimérica de sistemas fermiónicos”, MexiLazos 2012, Centro de Ciencias Matemáticas, UNAM - Morelia, Noviembre 2012.
- “Cuantización y propagador del campo de Dirac en variable mecánicas”, IX Taller de la División de Gravitación y Física Matemática, Universidad de Colima, Noviembre 2011.
- “Sobre el análisis canónico de algunos modelos con vínculos de segunda clase”, VIII Taller de la División de Gravitación y Física-Matemática, Universidad Autónoma de Chiapas, Noviembre 2010.
- “Sobre la teoría de campos en espacio tiempos cuánticos”, Encuentro de estudiantes UAM-Cinvestav, El Colegio Nacional, Julio 2010.

**Seminarios:**

- “Modeling the chemical space with (Chemical) hypergraphs”, Universidad de Amberes, Bélgica, Junio 2024.
- “On conserved quantities in the Bohmian description of entangled state”, Instituto Bernoulli, Universidad de Groningen, Holanda, Enero 2023.
- “¿Hacia dónde va la química? Una perspectiva desde la teoría de redes” Seminario del Departamento de Química, UAMI, 27 de septiembre de 2023.
- “¿De qué trata el artículo de EPR?”, Departamento de Ingeniería y Quantum Lab, ITAM. 7 de octubre de 2021.
- “Un mirada Bohmiana al entrelazamiento de estados comprimidos”. Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa. 19 de agosto de 2021.
- “Difusión de sistemas confinados, un enfoque geométrico”. Departamento Regional de Ciencias de la región CDMX, Tecnológico de Monterrey. 21 de Abril de 2021.
- “Un acercamiento a la misteriosa mecánica cuántica”, Departamento de Matemáticas Aplicadas del ITAM. 30 de Octubre de 2019.
- “Cálculo de la difusión efectiva en canales 3D: avances”, Seminario del Departamento de Física, Departamento de Física, UAM-I, Mayo 27, 2015.
- “Sobre la descripción geométrica de la difusión en canales 2D”, Seminario del Departamento de Física, Departamento de Física, UAM-I, Febrero 25, 2015.
- “Un nuevo enfoque para el cálculo de la difusión efectiva”, Seminario de estudiantes de del IFUAP, BUAP, Febrero 3, 2015.
- “Técnicas geométricas en el cálculo de la difusión efectiva”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Octubre 28, 2014.
- “Un acercamiento a las álgebras de Grassmann en la física”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Febrero 20, 2014.
- “Acercamiento a un modelo de campo de Dirac polimérico”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Enero 14, 2014.
- “Hacia la mecánica cuántica polimérica fermiónica”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Mayo 21, 2013.
- “Sobre el campo de Dirac como osciladores de Fermi”, Seminario de estudiantes, Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Junio 21, 2012.
- “Osciladores de Fermi en el campo de Dirac”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Septiembre 18, 2012.
- “Un acercamiento a la causalidad de la teoría cuántica de campos cuantizada poliméricamente”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Junio 21, 2011.
- “Comentarios de teoría cuántica de campos: gravedad cuántica por lazos”, Seminario de estudiantes de posgrado en física, Departamento de Física, UAM-I, Febrero 10, 2010.

**Participación en escuelas, comités, jurados y eventos organizados**

- Editor invitado del número especial: Hamiltonians systems de la editorial MDPI ([https://www.mdpi.com/topics/\\_HAT](https://www.mdpi.com/topics/_HAT)).
- Fundador y organizador del Seminario de Estudiantes de Posgrado en Física, UAM-I, CDMX.
- Organizador de las conferencias anuales “Mexican-HAT” (Sistemas Hamiltonianos: Aplicaciones y Teoría). Ediciones 2020, 2021, 2023. IIMAS, UNAM, UAM-A, Tec de Monterrey.
- Organizador de las conferencias “Mexilazos 2018” y “Mexilazos 2013”, Casa del Tiempo y Casa de la Primera Imprenta, UAM.



- Organizador del evento “Encuentro de Modelado Matemático en Física y Geometría”, ediciones 2023 y 2024.
- Referí en las revistas: Mathematics, MDPI y Journal of Complex Networks.
- Sinodal Pre-doctoral del trabajo “Estudio de los efectos del acoplamiento y la topología de la red sobre la sincronización en osciladores neuronales” del estudiante Agustín Farrera Megchun, UAM-Cuajimalpa, 28 de octubre de 2024.
- Jurado en el Taller “Jornada de Validación de reactivos”, Universidad Panamericana, Octubre 2020.
- I Reunión de la red de Cuerpos Académicos de Gravitación y Física Matemática, Promep, León, Guanajuato, Enero 2013.
- 5th ICTP-CLAF Latin American String School, Sao Paulo, Brazil, 2010.
- Quantum Gravity Summer School, UNAM Morelia, 2010.
- XVIII Reunión Anual de la División de Gravitación y Física Matemática, Unidad de Seminarios Ignacio Chávez, UNAM Abril 2010.
- XVII Reunión Anual de la División de Gravitación y Física Matemática, UAM-I, 2009.
- VII Latin American Symposium on High Energy Physics and IX Argentine Symposium of Particles and Fields, Centro Atómico de Bariloche, Argentina Enero 2009.
- Ten years of AdS/CFT, Ciudad Universitaria de Buenos Aires, Argentina 2007.
- 4th Latin American School of Strings, Bariloche, Argentina Enero 2007

### Presentaciones de estudiantes en congresos

- Título de Presentación: “Análisis de una red de colaboraciones en un departamento de investigación e la UAM-Iztapalapa”. LXVI Congreso Nacional de Física, Morelia, Michoacán, 8 - 13 de octubre de 2023. Estudiante: Sara Vélez Montesinos, Departamento de Física, UAM-I.

### Formación de Recursos Humanos

#### *Servicio Social de estudiantes:*

- Sebastián Ruiz González, (Licenciatura en Física, UAM-I),
  - Título del Proyecto de Servicio Social: “Sobre la ley de entropía y área para un oscilador armónico cuántico en un baño térmico”.
  - Fecha: Noviembre 2021 a Mayo 2022.
- Sara Vélez Montesinos, (Licenciatura en Física, UAM-I). En Co-Asesoría con el Profesor Dr. Humberto Laguna Galindo.
  - Título del Proyecto de Servicio Social: “Aplicaciones de ciencia de redes para la solución de problemas con interés social, científico y tecnológico”.
  - Fecha: Octubre 2022 a Julio de 2024.
- Erick Ríos González, (Licenciatura en Física, UAM-I). En Co-Asesoría con el Profesor Dr. Marco Maceda Santamaría.
  - Título del Proyecto de Servicio Social: “Análisis de las operaciones aritméticas empleando cómputo cuántico”.
  - Fecha: Noviembre 2023 a Mayo 2024.
- César Augusto Cásales Pérez, (Licenciatura en Física, UAM-I). En Co-Asesoría con el Profesor Dr. Humberto Laguna Galindo.
  - Título del Proyecto de Servicio Social: “Aplicaciones de ciencia de redes para la solución de problemas con interés social, científico y tecnológico”.

- Fecha: Julio 2024 a Febrero 2025

#### *Proyecto Terminal de estudiantes:*

- *Erick Ríos González*, (Licenciatura en Física, UAM-I). En Co-Asesoría con el Profesor Dr. Marco Maceda Santamaría.
  - Título de Proyecto Terminal: “Estudio de la transición de fase de un modelo de Ising 2D empleando variables topológicas”
  - Fecha: Febrero 2023 a Octubre 2023.
- *Omar Aldair Hernández Velasco*, (Licenciatura en Matemáticas Aplicadas, UAM-C). En Co-Asesoría con el Profesor Dr. Guillermo Chacón Acosta.
  - Título del Proyecto Terminal: “Aplicaciones de la curvatura de Forman Ricci a la difusión en redes”.
  - Fecha: Julio 2024 - Presente
- *Omar Yamil Castañeda Castillo*, (Licenciatura en Matemáticas Aplicadas, UAM-C). En Co-Asesoría con el Profesor Dr. Guillermo Chacón Acosta.
  - Título del Proyecto Terminal: “Aplicaciones de la curvatura de Forman Ricci a la difusión en redes”.
  - Fecha: Julio 2024 - Presente

#### *Estudiantes en Posgrado:*

- *Rodrigo Correa López*, Maestría en Ingeniería Tec de Monterrey, Campus Estado de México. En Co-Asesoría de Maestría con el Profesor Dr. José Antonio Otero.
  - Título del Proyecto de Maestría: “Cálculo del módulo de Young y el coeficiente de Poisson empleando una red neuronal artificial”.
  - Fecha: Agosto 2024 - Presente
- *Emiliano Montoya González*, Posgrado en Ciencias Naturales del Departamento de Ingeniería y Ciencias, UAM-Cuajimalpa. Participación como asesor. Director de Proyecto de Maestría: Profesor Dr. Roberto Bernal. Co-director: Profesor Dr. Guillermo Chacón.
  - Título del Proyecto de Maestría: “Optimización en computación cuántica: estudio y realización del algoritmo QOA”
  - Fecha: Marzo 2024 - Presente.

#### **Líneas de investigación principales (no en orden de prioridad)**

- *Física cuántica y teoría de la información.*

Nombre de la línea de investigación: Trayectorias de Bohm de estados comprimidos entrelazados y análisis del entrelazamiento empleando métricas de Teoría de la Información (Shannon, Kulback-Leibler, Wasserstein, Fisher, etc).

Idea: En esta línea de investigación estudiamos de forma analítica y eventualmente, numérica, las soluciones de las ecuaciones de Bohm de distintos sistemas físicos de interés. En esta etapa del proyecto, estamos enfocados principalmente en el análisis de los estados comprimidos empleados en óptica cuántica, tanto en 1D como en 2D. En etapas futuras consideramos estados relacionados con reacciones químicas. Parte del plan es vincular los conceptos e interpretaciones que se tienen de las distintas medidas en la teoría de la información y su interpretación a la luz de las trayectorias obtenidas empleando Bohm. Naturalmente, esto permitirá un mayor entendimiento ontológico del fenómeno en cuestión, e.g., las relaciones químicas.

Herramientas: En esta etapa, la mayor parte del análisis se realiza de forma teórica-computacional con baja demanda de capacidad de cómputo. La razón es que la mayoría de los resultados actuales son expresiones analíticas cerradas. Se espera que más adelante, cuando nos movamos hacia el análisis de sistemas

relacionados con reacciones químicas, la demanda de recursos de alto cómputo sea importante. Preparados para ese escenario, contamos con los servicios del cluster de la UAM-I.

Colaboradores: Dr. Alessandro Bravetti (Universidad de Camerino), Dr. Humberto Laguna (UAM-I), Dr. Robin Sagar (UAM-I), Dr. Saúl Salazar (UAM-I), Dr. Marcello Seri (Instituto Bernoulli, Universidad de Groningen), Dr. Federico Zadra (Universidad de Amberes).

- *Teoría de redes y criticalidad*

Nombre de la línea de investigación: Modelos de redes (simples e hipergráficas) para estudiar las estructuras de alto orden<sup>1</sup>, su criticalidad, difusividad y curvatura.

Idea: Esta línea de investigación, la puedo subdividir en cuatro subgrupos, (i) Modelación de redes de reacciones químicas, (ii) Caracterización de redes de alto orden, (iii) Diffusion en redes y (iv) Mecánica estadísticas de redes.

- (i) *Modelación de redes de reacciones químicas*: En esta sub-línea desarrollamos modelos matemáticos para explicar (y eventualmente predecir) las tendencias que se registran en las distintas redes de reacciones químicas, tanto aquellas con carácter histórico (redes temporales) como las relacionadas con la biotecnología (atemporales) como las rutas y mapas metabólicos. El objetivo principal es entender estas redes como un lenguaje y explorar las gramáticas de éste y sus implicaciones en la planeación de rutas químicas.
- (ii) *Caracterización de redes de alto orden*: En esta sub-línea nos enfocamos en caracterizar, desde la perspectiva de las métricas tradicionales de la teoría de redes, los modelos de redes desarrollados en la sub-línea anterior. Prestamos especial atención a la emergencia de fenómenos y la criticalidad. También desarrollamos métricas nuevas adaptadas a la naturaleza de los modelos, como sucede por ejemplo con la curvatura de Forman-Ricci. El objetivo principal es encontrar el alcance de los modelos y cómo éstos se apartan de las redes de orden inferior donde no hay estructura ni en los nodos ni en las aristas. Cabe señalar que en este punto, tenemos acceso a las distintas bases de datos (e.g., Reaxys, OpenAlex, Agora) con las cuales se comparan nuestros resultados.
- (iii) *Diffusion en redes*: En la etapa actual de esta sub-línea estamos adaptando las distintas definiciones de la difusión en redes simples a las redes de alto orden. Planteamos modificar algunas de estas definiciones para adaptarlas a entornos más realistas desde la perspectiva física. Por ejemplo, introducir la noción de flujo para implementar la 1ra Ley de Fick y posteriormente, la Ecuación de continuidad correspondiente, tanto para la red directa como para su dual sobre las aristas. En la siguiente etapa, planeamos extender los resultados a hipergrafos y luego a redes de reacciones químicas modeladas como hipergrafos químicos.
- (iv) *Mecánica estadísticas de redes*: En esta sub-línea implementamos la construcción estadística de los modelos aleatorios desarrollados en la sub-línea (i). Este enfoque se inspira en lo que se conoce como mecánica estadística de redes complejas desarrollada por Albert-Lászlo Barabási. También, adaptamos modelos físicos convencionales e.g., Modelo de Ising, para el análisis de las relaciones entre variables y observables físicos con las variables topológicas del modelo. Esta sub-línea tiene como objetivo principal la exploración de las transiciones de fase en redes así como su criticalidad desde la perspectiva matemática, de modo que se complementa con la sub-línea (ii).

Herramientas: Programación en Python o Matlab. Muchas herramientas de análisis estadístico y de análisis funcional como teoría de la medida, etc.

Colaboradores: Dra. Marisol Bermúdez (Tec de Monterrey, CEM), Dr. Francisco Betancourt (Universidad Iberoamericana), Dr. Guillermo Chacón (UAM-Cuajimalpa), Dr. Jürgen Jost (Instituto Max Planck para las matemáticas en las ciencias), Dr. Humberto Laguna (UAM-I), Dr. Guillermo Restrepo (Instituto Max Planck para las matemáticas en las ciencias), Dr. Peter Stadler (Universidad de Leipzig).

---

<sup>1</sup> Por redes de alto orden me refiero a estructuras del tipo hipergrafos y complejos celulares.

- Machine learning y redes neuronales

Nombre de la línea de investigación: Construcción de redes neuronales artificiales para el estudio de fenómenos físicos.

Idea: En esta línea de investigación indagamos la solución de problemas inversos en física y en química empleando redes neuronales artificiales. Actualmente, trabajamos en dos proyectos. El primer consiste en predecir el valor del módulo de Young y el coeficiente de Poisson para materiales laminados (e.g., Ácido poliláctico y Acetato de polivinilo) utilizando las expresiones analíticas de las constantes de Lamé. El objetivo es utilizar estas expresiones para crear el conjunto de datos de entrenamiento para luego resolver el problema inverso. El segundo proyecto, consiste en entrenar una red neuronal (específicamente una Graph Neural Network) para predecir valores de solubilidad en agua de sustancias químicas empleadas en el diseño de baterías eléctricas. El proceso de entrenamiento empleará los datos de solubilidad descargados de la base de datos Reaxys, que es la mayor base de datos de sustancias y reacciones químicas a la fecha.

Herramientas: Matlab y Python.

Colaboradores: Dra. Marisol Bermúdez (Tec de Monterrey, CEM), Dr. Humberto Laguna (UAM-I), Dr. José Otero (Tec de Monterrey, CEM), Erika Roldán (ScaDS.AI, Leipzig, Alemania).

### **Colaboradores y estancias de Investigación nacionales e internacionales:**

- Max Planck Institute for the mathematics in the Sciences, Leipzig, Germany.
- Colaborador(es): Profesor Dr. Jürgen Jost y Dr. Guillermo Restrepo (visita y publicaciones).
- Grupo de Bioinformática, Universidad de Leipzig, Leipzig, Alemania
- Colaborador(es): Profesor Dr. Peter Stadler (visita y publicaciones)
- Departamento de Matemáticas, Universidad de Amberes, Amberes, Bélgica
- Colaborador(es): Dr. Federico Zadra (visita y publicaciones)
- Instituto Bernoulli, Universidad de Groningen, Holanda
- Colaborador(es): Profesor Dr. Marcello Seri (visita y publicaciones)
- Centro de Ciencias Matemáticas, UNAM, Campus Morelia
- Colaborador(es): Profesor Dr. Alejandro Corichi (visita)
- Institute for Gravitation and the Cosmos, Penn State University, USA
- Colaborador(es): Profesor Dr. Martin Bojowald (visita)
- New Brunswick University, Fredericton, Canada
- Colaborador(es): Profesor Dr. Viqar Husain (visita)
- Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, UNAM
- Colaborador(es): Dr. José Martín Mijangos y Profesor Dr. Pablo Padilla (visita)
- Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
- Colaborador(es): Profesor Dr. David Vergara y Profesor Dr. Daniel Sudarsky (visita y publicaciones)
- Department of Mathematics, University of York, UK
- Colaborador(es): Dr. Benito A. Juárez Aubry (publicaciones)
- Universidad de Camerino, Italia
- Colaborador(es): Profesor Dr. Alessandro Bravetti (publicaciones)
- Universidad de Alberta, Canadá
- Colaborador(es): Profesor Dr. Saeed Ratsgoo (publicaciones)