

Desarrollo

- Comienzo de la trayectoria académica.
- Láseres y procesos ultrarrápidos (Master+PhD).
- Láseres de electrones libres (PhD).
- Machine learning e Inteligencia Artificial (Actualidad).

Trayectoria



VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

- 2007-2012
 - Licenciatura en Física
 - Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas

Trayectoria – Licenciatura en Física



VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

- Conocimientos de física.
- Estadística (Física Estadística y Cuántica).
- Conceptos abstractos.
- Entender y trabajar con modelos matemáticos.
- Capacidad de análisis

Trayectoria – Ingeniería Informática



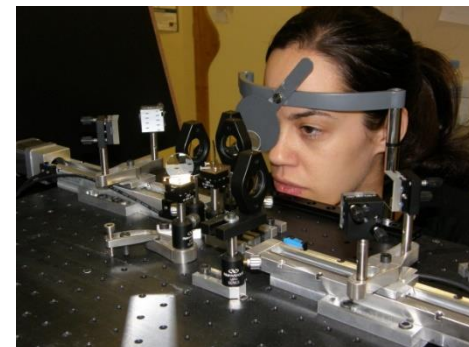
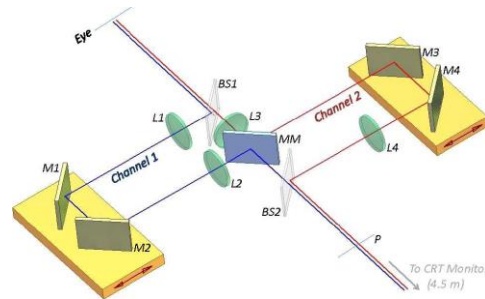
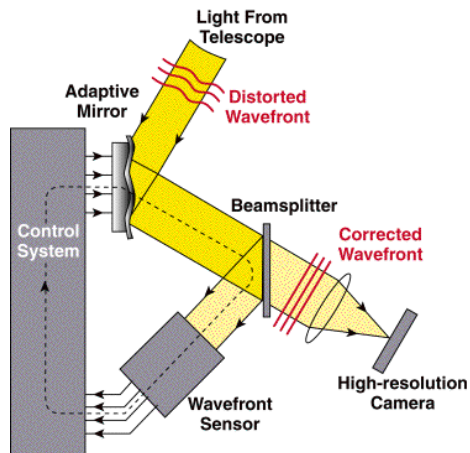
- Base sólida de ciencia de la computación:
 - Teoría de la informática
 - Algoritmos
- Base sólida de ingeniería informática:
 - Como diseñar grandes sistemas de software

Trayectoria – Becas de verano

2007-2012

Licenciatura en Física
Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas

- Verano 2010:
 - Investigación en óptica visual.
 - Óptica adaptativa.
 - Sistemas de visión simultánea (lentillas bifocales)

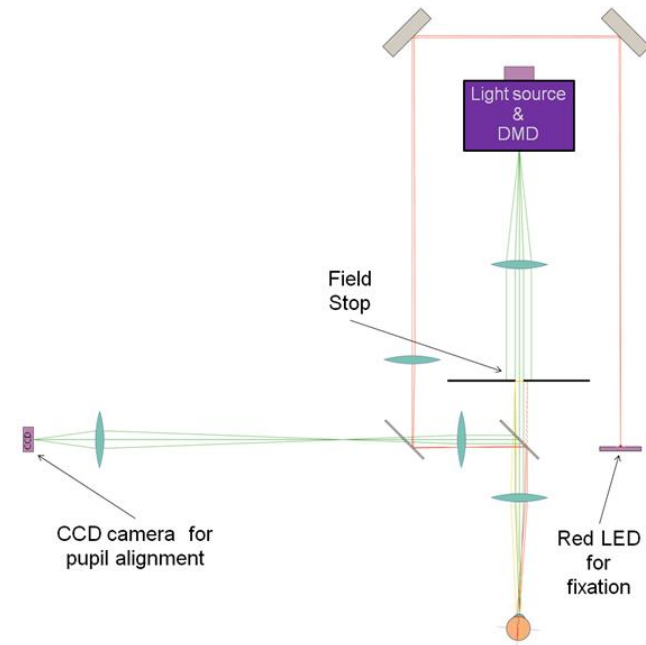
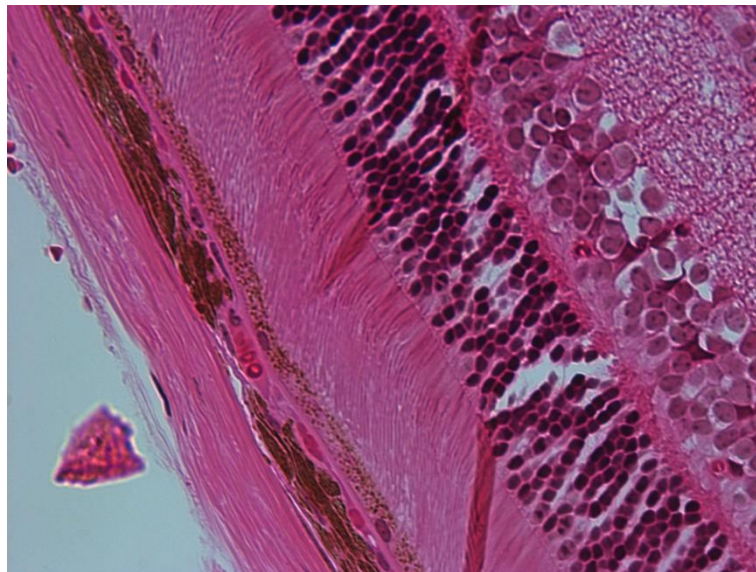
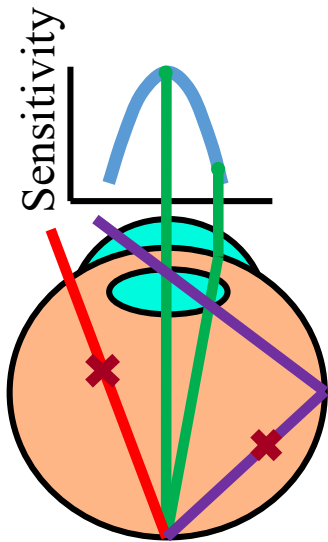


Trayectoria – Becas de verano

2007-2012

Licenciatura en Física
Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas

- Verano 2011:
 - Investigación en óptica visual
 - Fototropismo en la retina humana.



Trayectoria – Becas de verano

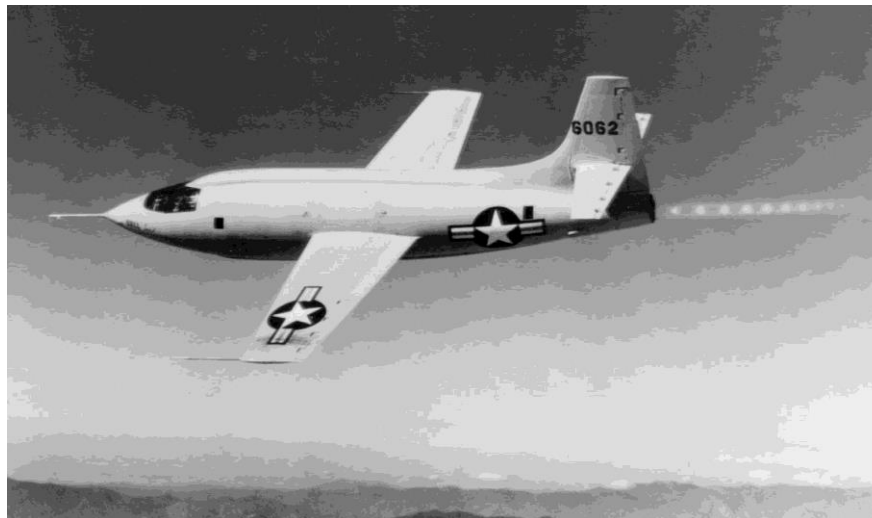
2007-2012

Licenciatura en Física
Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas

- Verano 2012:
 - Investigación con láseres ultrarrápidos
 - Software para la caracterización de un jet de gas supersónico en tiempo real



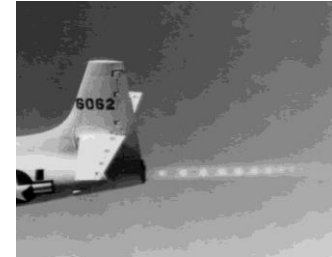
VNIVERSIDAD
D SALAMANCA
CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL



Trayectoria – Becas de verano

2007-2012

Licenciatura en Física
Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas

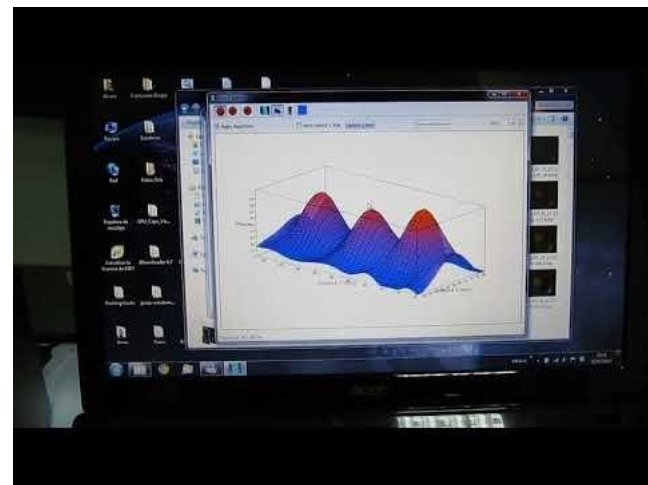
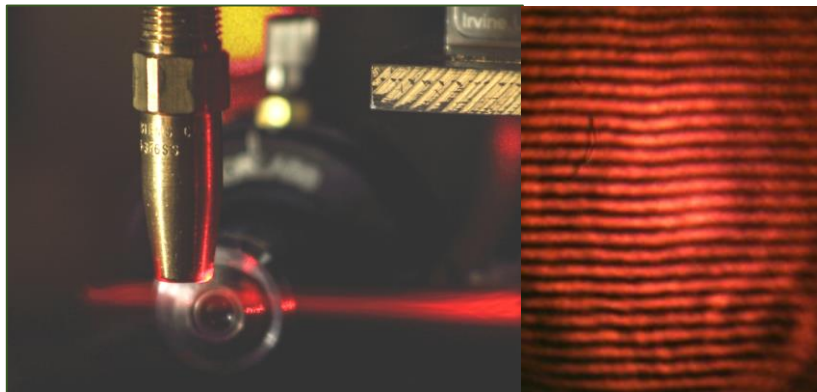


- Verano 2012:

- Investigación con láseres ultrarrápidos
 - Software para la caracterización de un jet de gas supersónico en tiempo real



**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA**
CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL



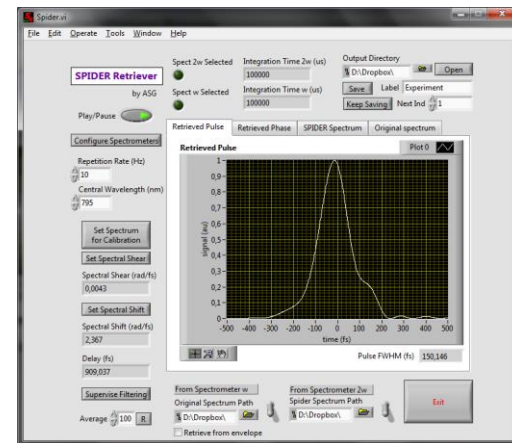
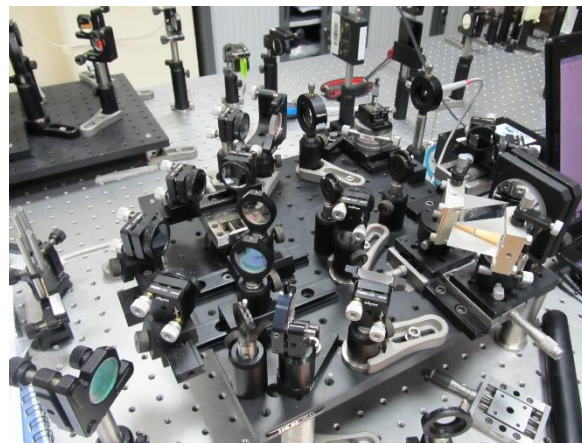
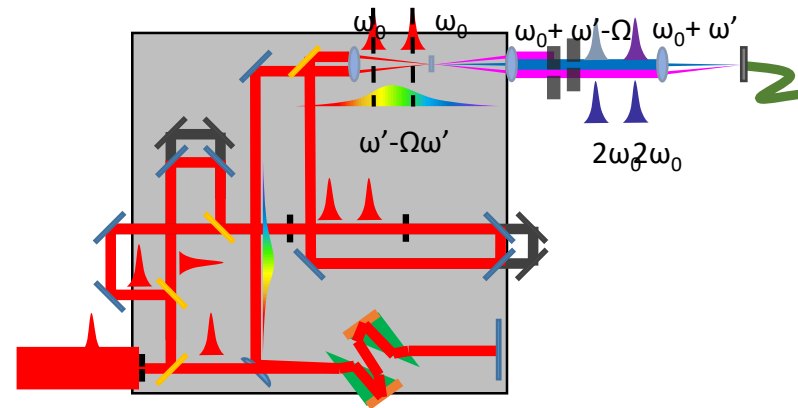
[Vídeo](#)

Trayectoria - Master



VNIVERSIDAD
D SALAMANCA
CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

- 2012-2013: Máster en ciencia y tecnología de los láseres
 - Láseres!
 - Interacción láser-materia (Cuántica)
 - Oportunidades experimentales y de simulación



Trayectoria - Doctorado

- 2013-2017
 - “Medidas ultrarrápidas con láseres de electrones libres”
 - Oportunidad para profundizar en algo
 - Punto medio entre trabajar y estudiar
 - Doctorados muy valorados en industria de alto nivel¹

Imperial College
London



Science & Technology
Facilities Council

SLAC
NATIONAL ACCELERATOR LABORATORY



¹ Al menos en otros países

Como se miden procesos rápidos

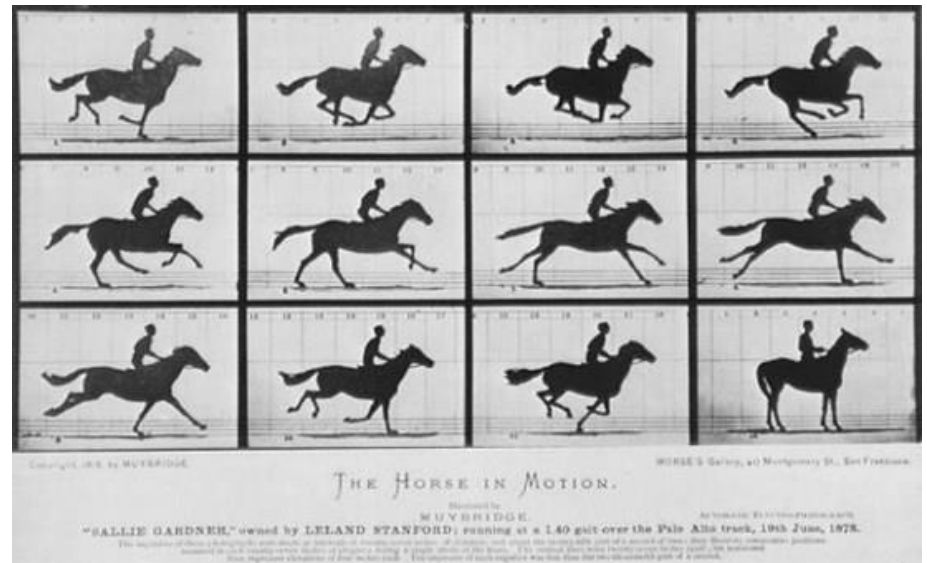
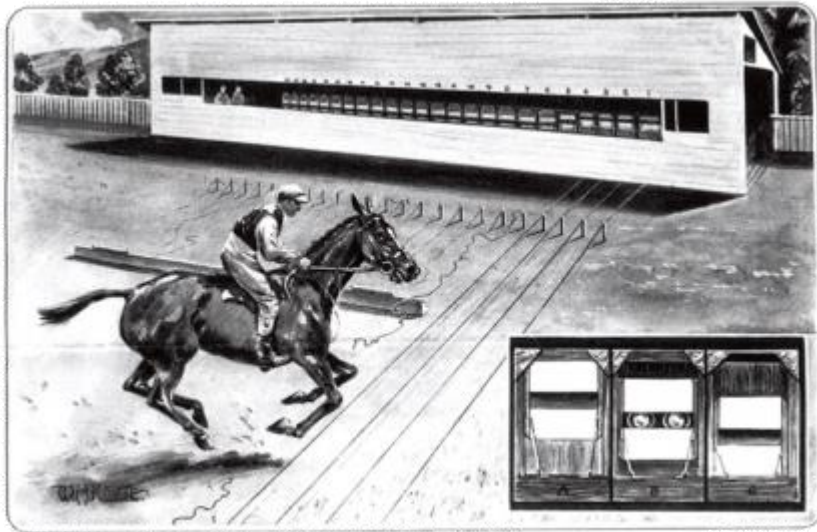
- 1878: fotografía de alta velocidad
 - Leland Stanford – gobernador de California y dueño de caballo de carreras.
 - ¿Levantán los caballos las cuatro patas del suelo al galopar?



Primer grabado heliográfico: 1825

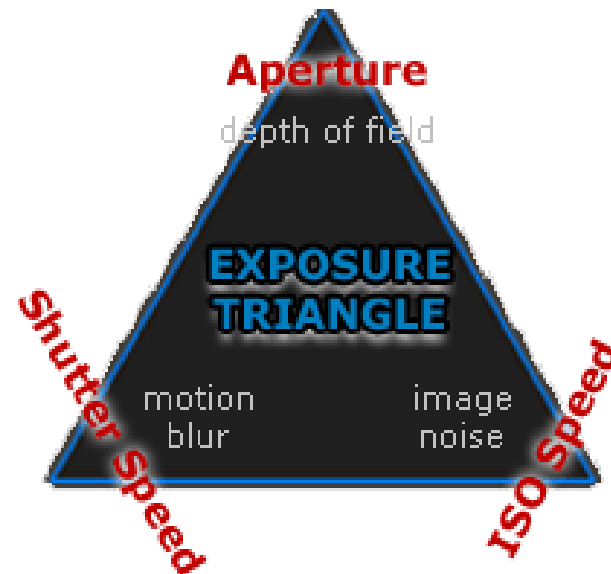
Como se miden procesos rápidos

- 1878: fotografía de alta velocidad
 - Eadweard Muybridge



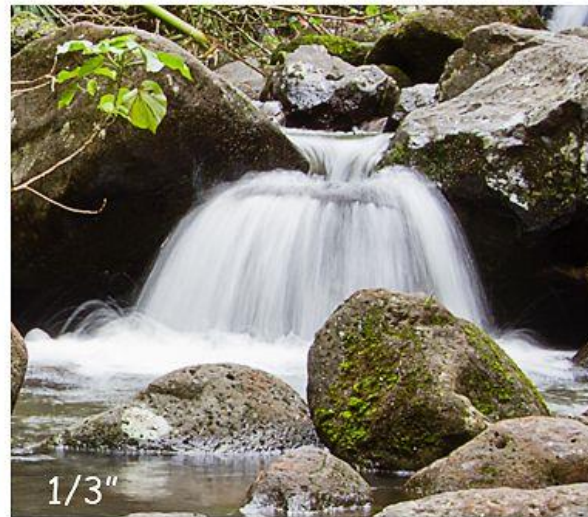
Fotografía básica

- Tiempo de exposición
- Apertura
- ISO



Fotografía básica

- Tiempo de exposición
- Apertura
- ISO



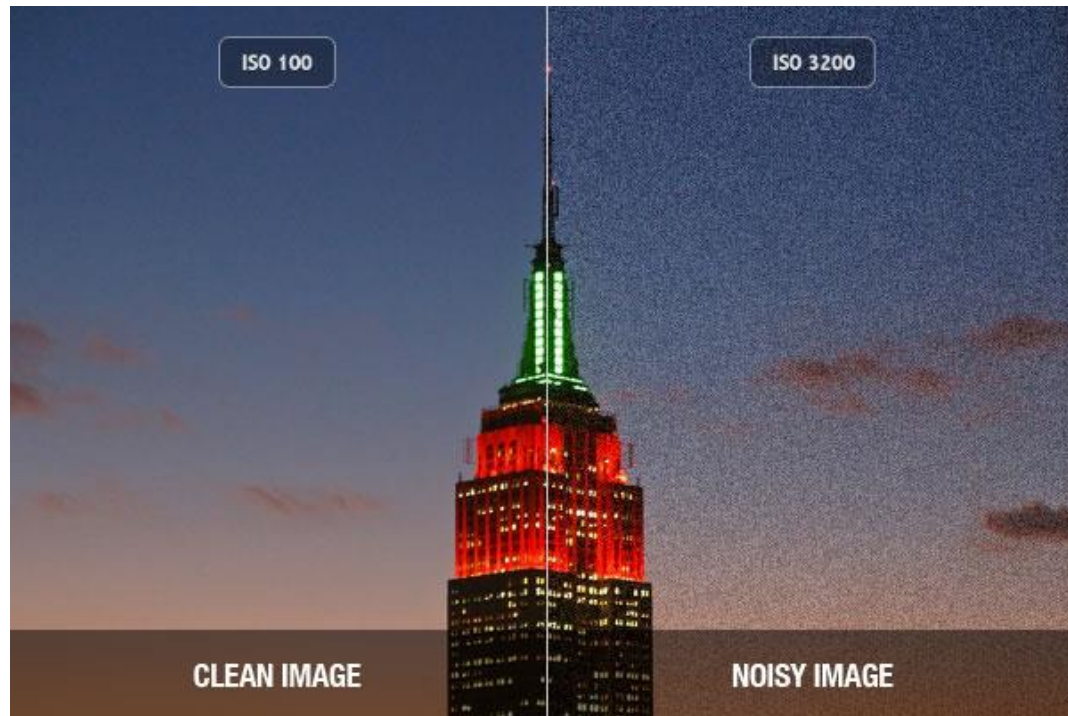
Fotografía básica

- Tiempo de exposición
- Apertura
- ISO



Fotografía básica

- Tiempo de exposición
- Apertura
- ISO



Fotografía básica

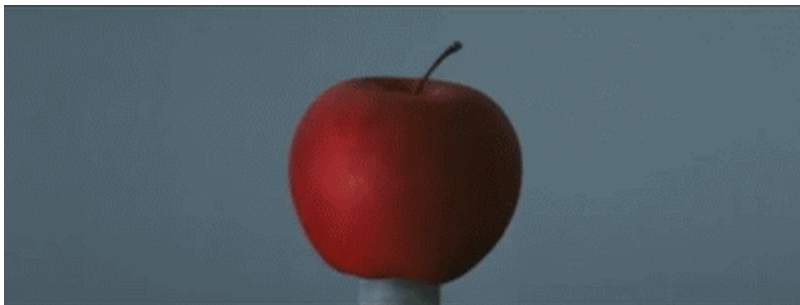
- Flash de luz: Permite
 - Reducir el ISO/ruido
 - Reducir la apertura/
aumentar la profundidad
de campo
 - Aumentar el tiempo
de obturación



- Para medir un proceso rápido, hace falta otro proceso más rápido

¿Cómo se miden procesos rápidos?

- Flash/luz estroboscópica:
 - Tiempo de exposición: ms ($1e-3$) – μ s ($1e-6$)



Como se miden procesos rápidos

- Proceso rápido: ms ($1e-3$ s) – μ s ($1e-6$ s)

Como se miden procesos rápidos

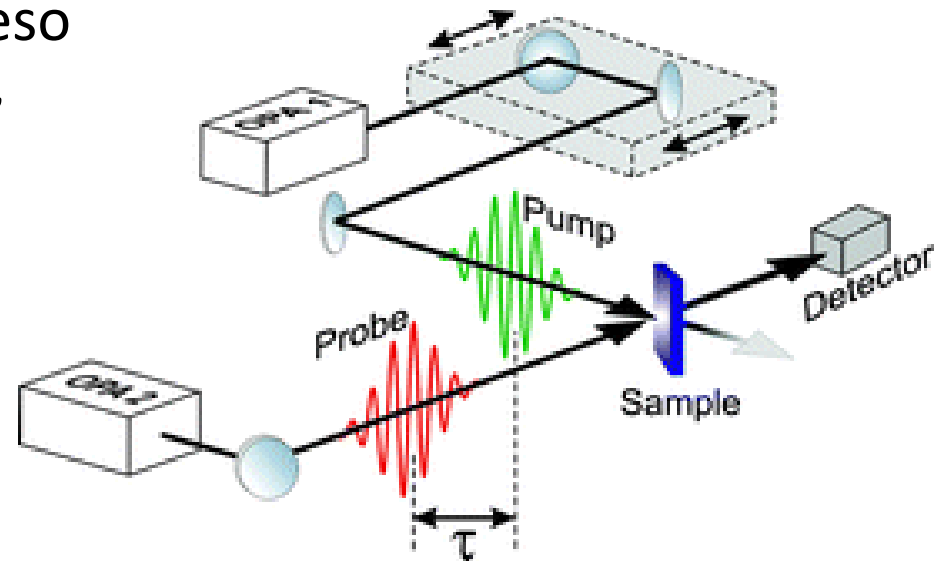
- Proceso rápido: ms ($1e-3$ s) – μ s ($1e-6$ s)



- Proceso ultrarrápido: ps ($1e-12$ s) – as ($1e-18$ s)
 - Reacciones químicas ($1e-11$ – $1e-14$ s)
 - Movimiento de núcleos en moléculas ($1e-13$ – $1e-15$ s)
 - Movimiento de electrones en moléculas ($1e-15$ – $1e-18$ s)

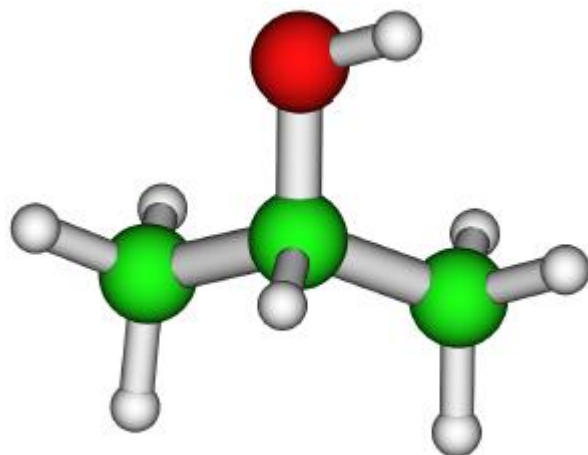
¿Cómo hacer vídeos de procesos ultrarrápidos?

- No hay cámara que pueda tomar varias imágenes en un intervalo de 1 ps ($1e-12$) o 1 fs ($1e-15$)
- Técnica *pump & probe* con dos pulsos láser:
 - Pulso *pump*: Inicia el proceso
 - Pulso *probe*: Saca la “foto”
 - Repetir varias veces con distinto retardo (τ)
 - Un fotograma de la película por cada retardo

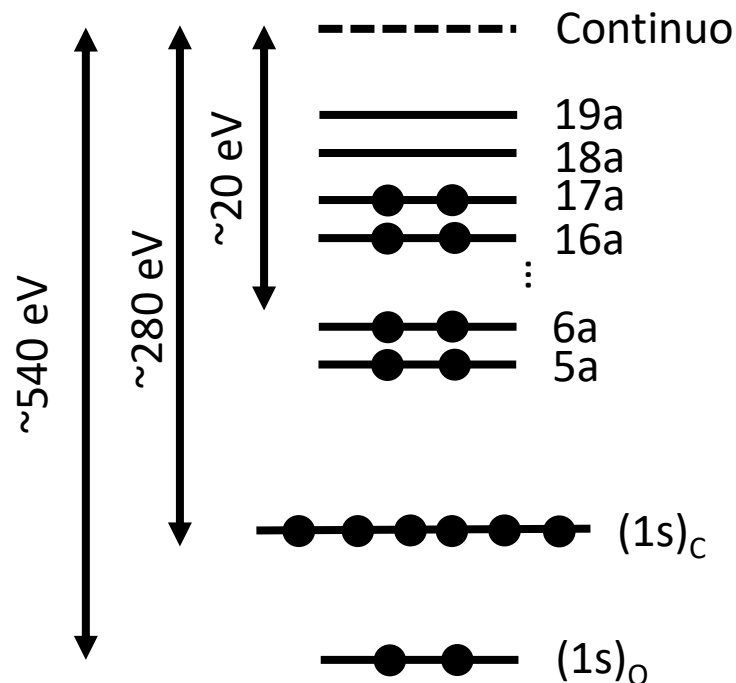


Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

- Molécula de isopropanol

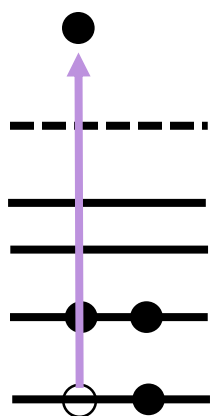
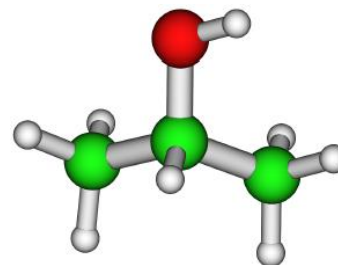


- Configuración electrónica (34 electrones)



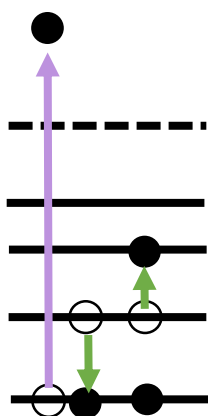
Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

- ¿Qué pasa si ionizamos un electrón?



$|1h_i\rangle$

Estado
One-hole



$|2h_{ij} 1p_a\rangle$

Estado
Two-hole-one-particle

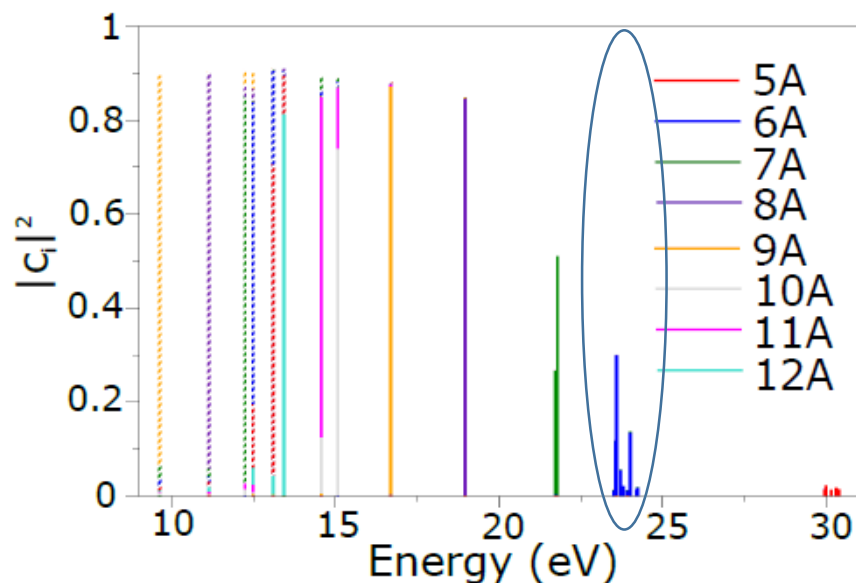
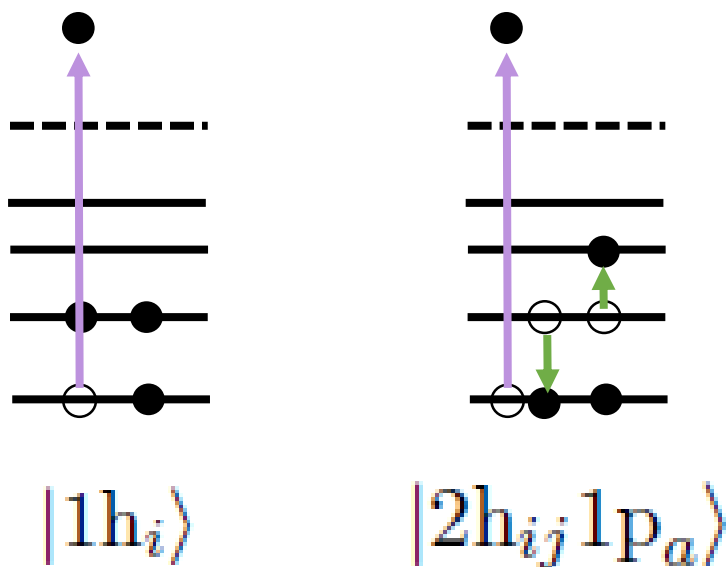
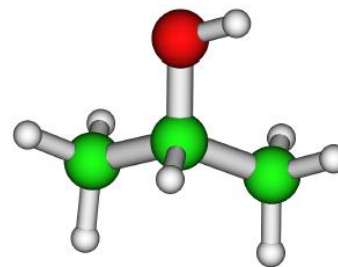
Función de onda después de la ionización:
combinación de 1h y 2h1p

$$|\Phi\rangle = \sum_i c_i |1h_i\rangle + \sum_{i,j,a} b_{ij}^a |2h_{ij} 1p_a\rangle$$

$$\sum_i |c_i|^2 + \sum_{i,j,a} |b_{ij}^a|^2 = 1.$$

Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

- ¿Qué pasa si ionizamos un electrón?

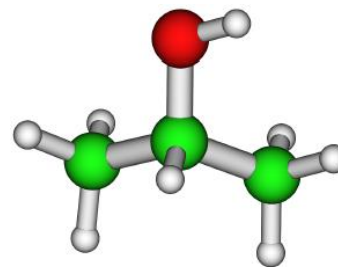


$$|\Phi\rangle = \sum_i c_i |1h_i\rangle + \sum_{i,j,a} b_{ij}^a |2h_{ij} 1p_a\rangle$$

Coeficientes de los estados propios del Hamiltoniano de la molécula de isopropanol ionizada

Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

- ¿Qué pasa si ionizamos un electrón?
- Simplificando:



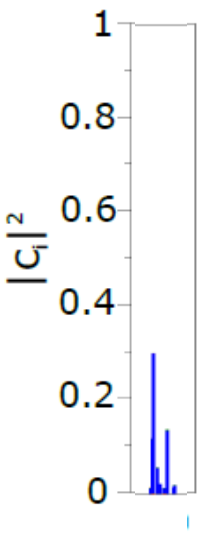
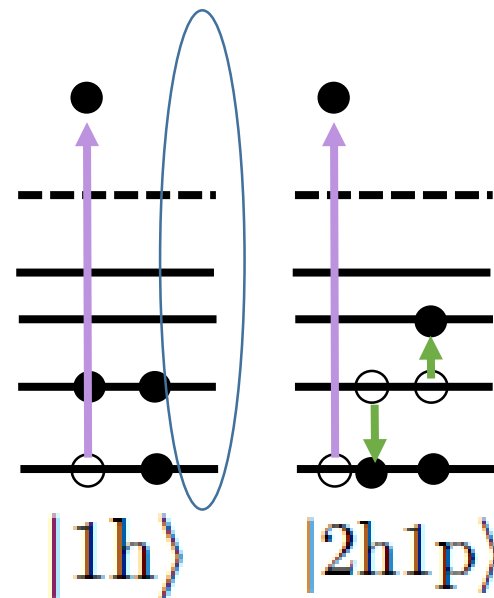
- Dos estados: 1h and 2h1p
- Dos estados propios del Hamiltoniano

$$|\Phi_1(E = E_1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1h\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |2h1p\rangle$$

$$|\Phi_2(E = E_2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1h\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |2h1p\rangle,$$

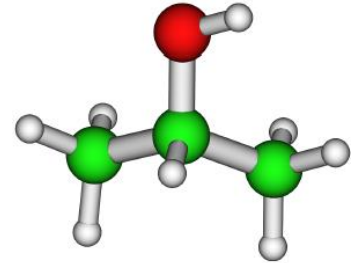
- Estado inicial:

$$|\Psi(t = 0)\rangle \sim |1h\rangle$$



Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

- ¿Qué pasa si ionizamos un electrón?



- Estado inicial en términos de estados propios:

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_2\rangle = |1h\rangle$$

- ¿Como evoluciona ese estado?

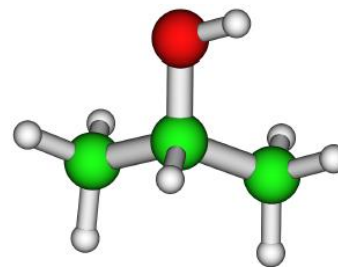
$$|\Psi(t)\rangle = \frac{e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}}{\sqrt{2}} |\Phi_1\rangle + \frac{e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}}{\sqrt{2}} |\Phi_2\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} |\Phi_1\rangle + \frac{e^{-\frac{i(E_2 - E_1)t}{\hbar}}}{\sqrt{2}} |\Phi_2\rangle \neq |1h\rangle$$

- ¿Cuál es la probabilidad de supervivencia del estado inicial?

$$S(t) = |\langle 1h | \Psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1 + e^{-\frac{i(E_2 - E_1)t}{\hbar}}}{2} \right|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

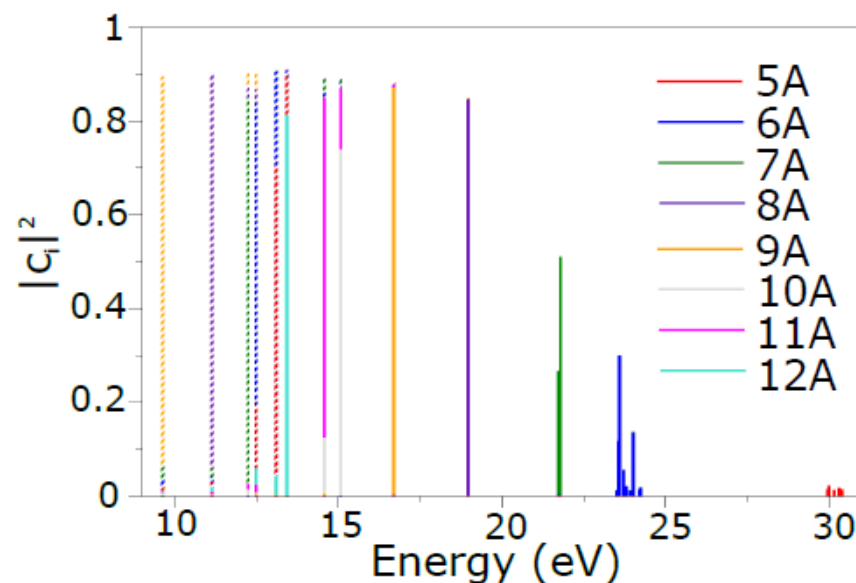
Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

- ¿Qué pasa si ionizamos un electrón?



$$S(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

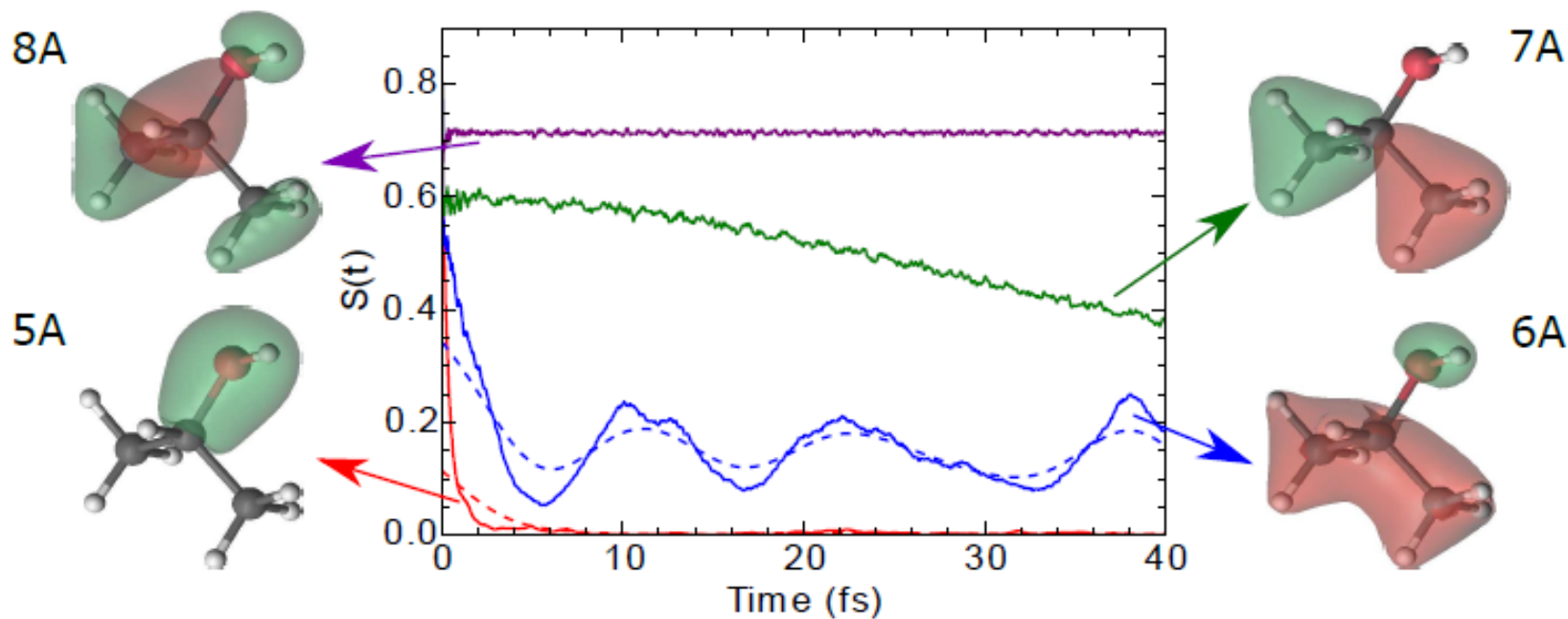
- $E_2 - E_1 = 1\text{eV} \rightarrow T = 4\text{fs}$



Estados propios de la molécula de isopropanol ionizada

Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

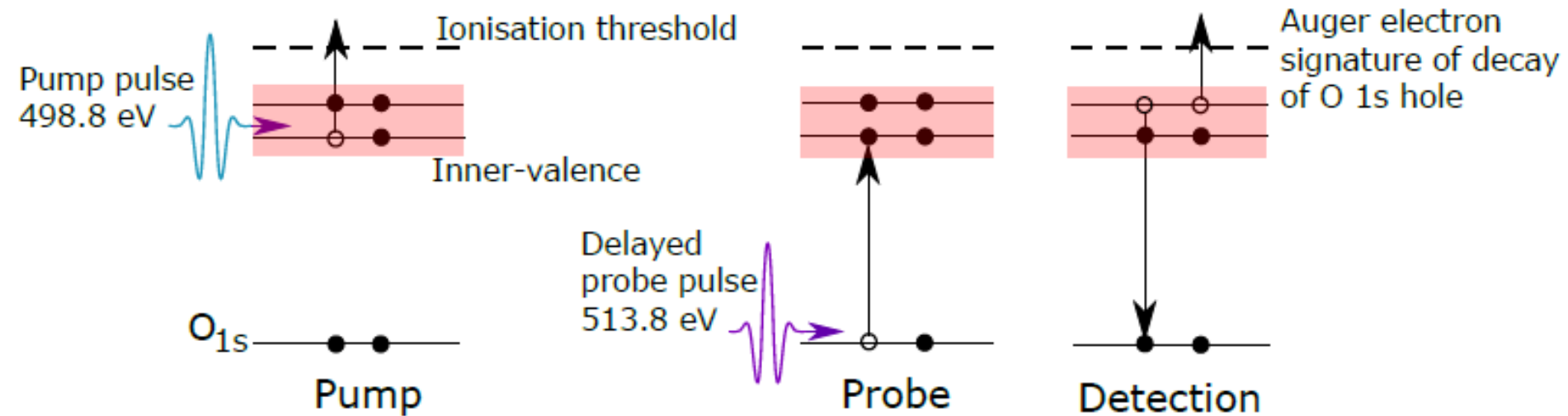
- Probabilidad de supervivencia esperada



- ¡¡¡Evolución de la función de onda!!!

Ejemplo de proceso electrónico ultrarrápido

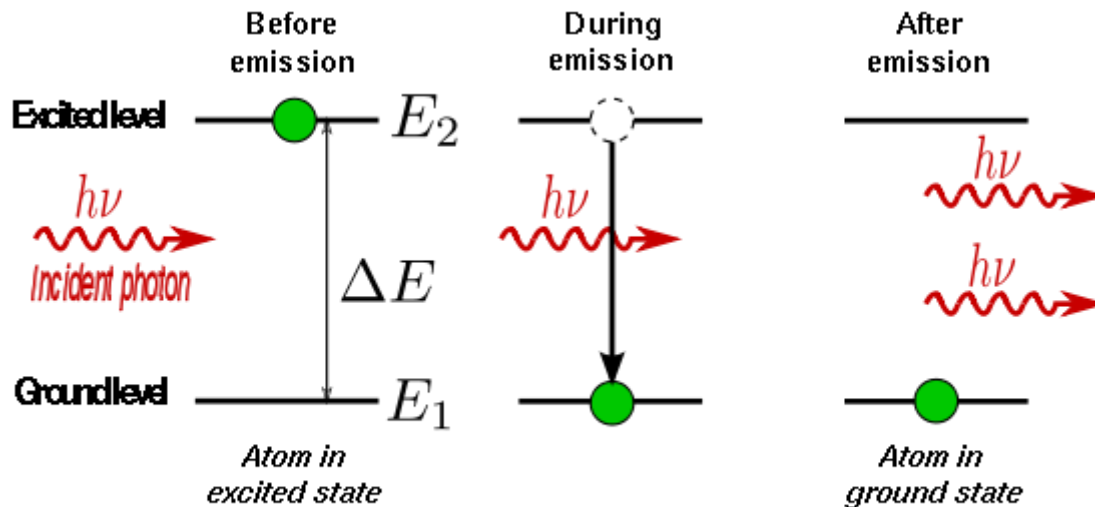
- ¿Cómo medimos la probabilidad de supervivencia?



- ¡¡¡Midiendo la evolución de la función de onda!!!

¿Y los pulsos?

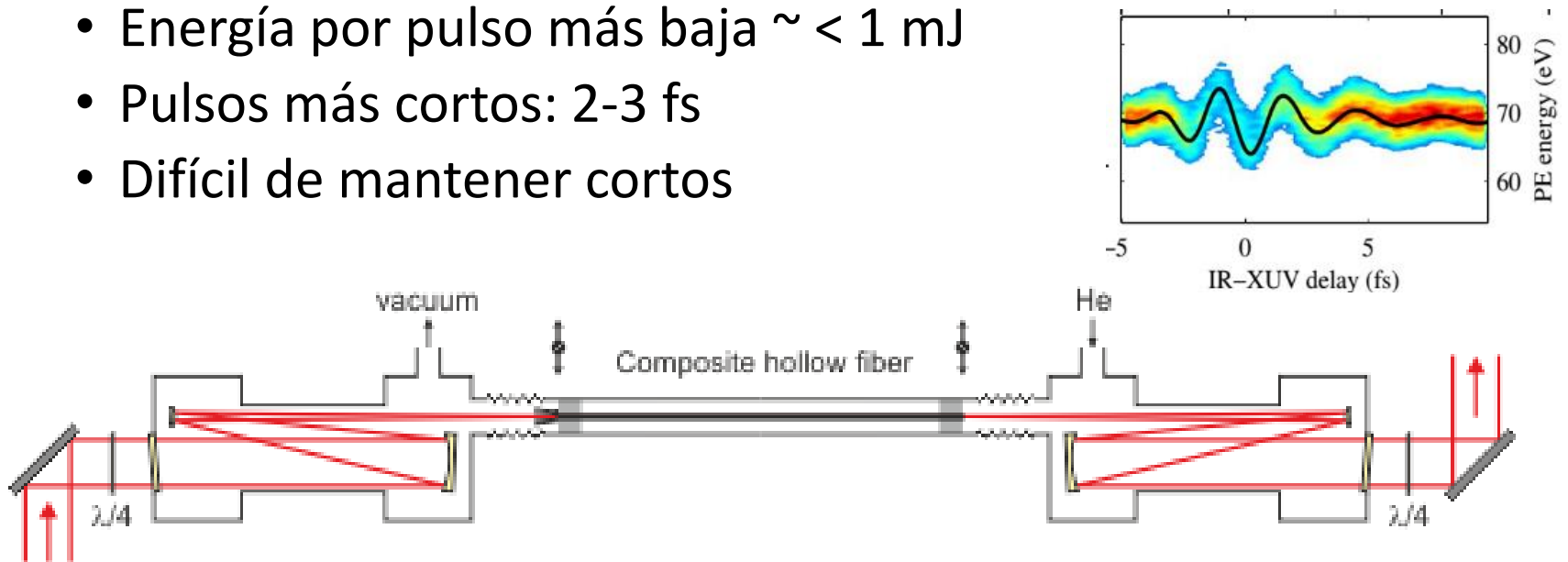
- Láseres infrarrojos de femtosegundo (Ti:Sapphire)
 - Emisión estimulada a 800 nm ($T=2.66$ fs)
 - Pulsos “largos”: $>\sim 30$ fs
 - Energía de fotón baja (1.55 eV)
 - Alta energía por pulso \sim mJ



$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu$$

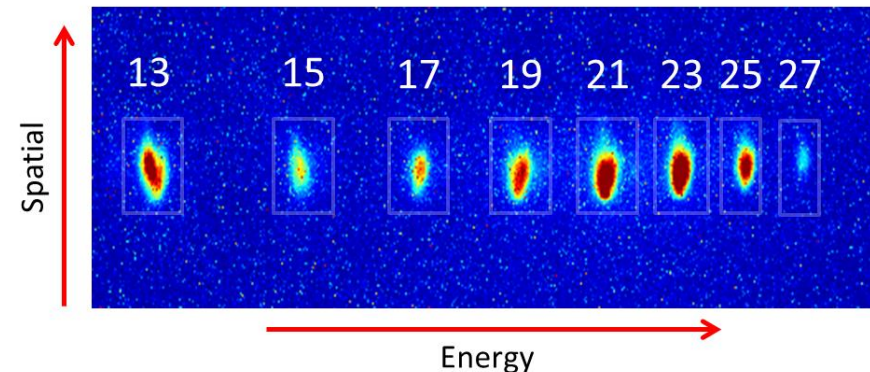
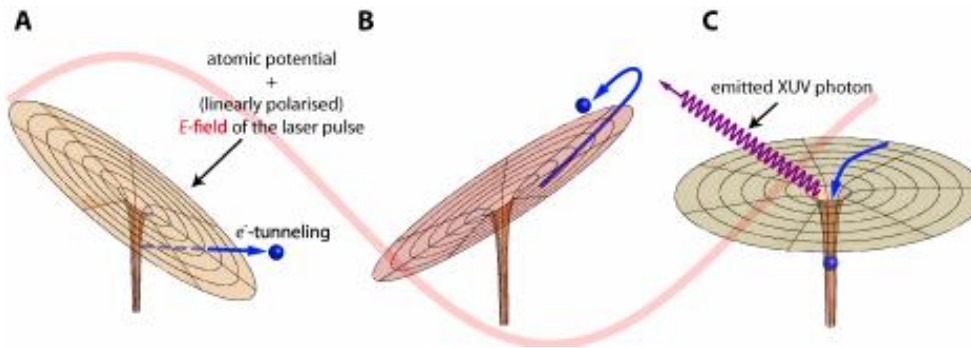
¿Y los pulsos?

- Láseres comprimidos de pocos ciclos (Ti:Sapphire)
 - Compresión de 800 nm en fibra hueca (T=2.66 fs)
 - Energía de fotón baja (1.55 eV)
 - Energía por pulso más baja $\sim < 1$ mJ
 - Pulsos más cortos: 2-3 fs
 - Difícil de mantener cortos



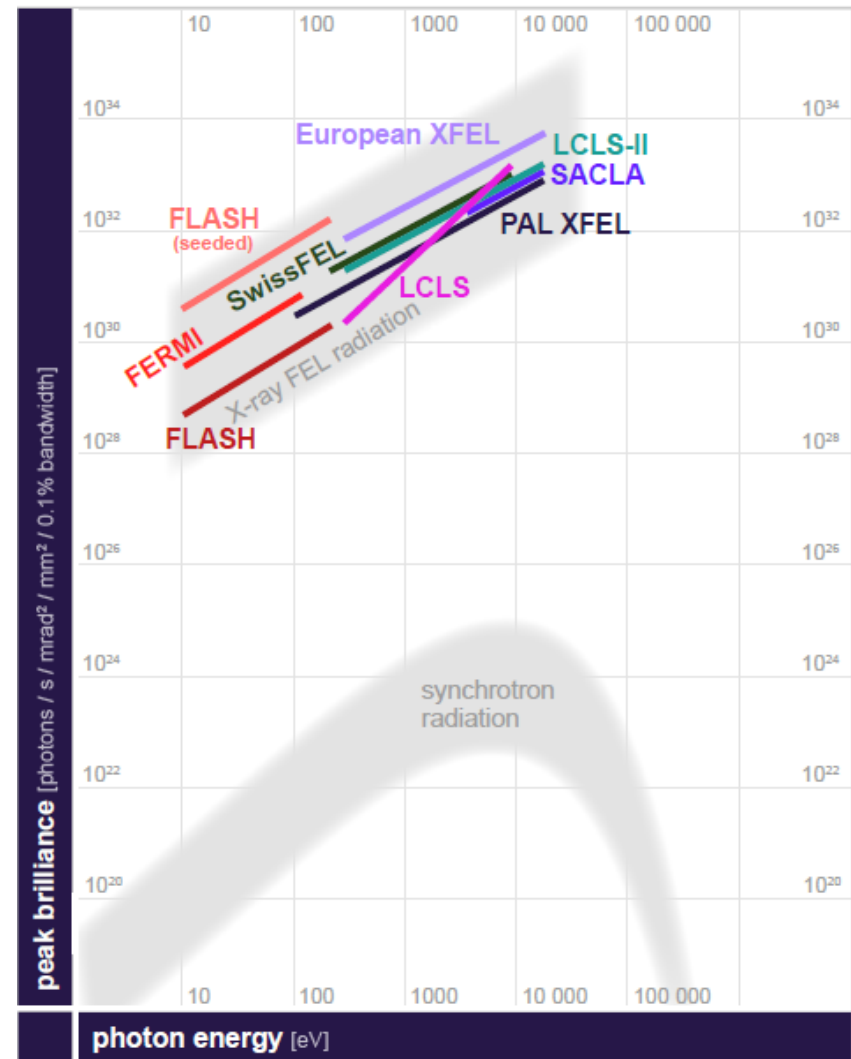
¿Y los pulsos?

- Generación de armónicos (HHG):
 - Pulsos muy cortos: >43 as
 - Energía de fotón alta (300-400 eV)
 - Energía por pulso muy baja \sim nJ
 - Propagación en vacío



Láseres de rayos X electrones libres

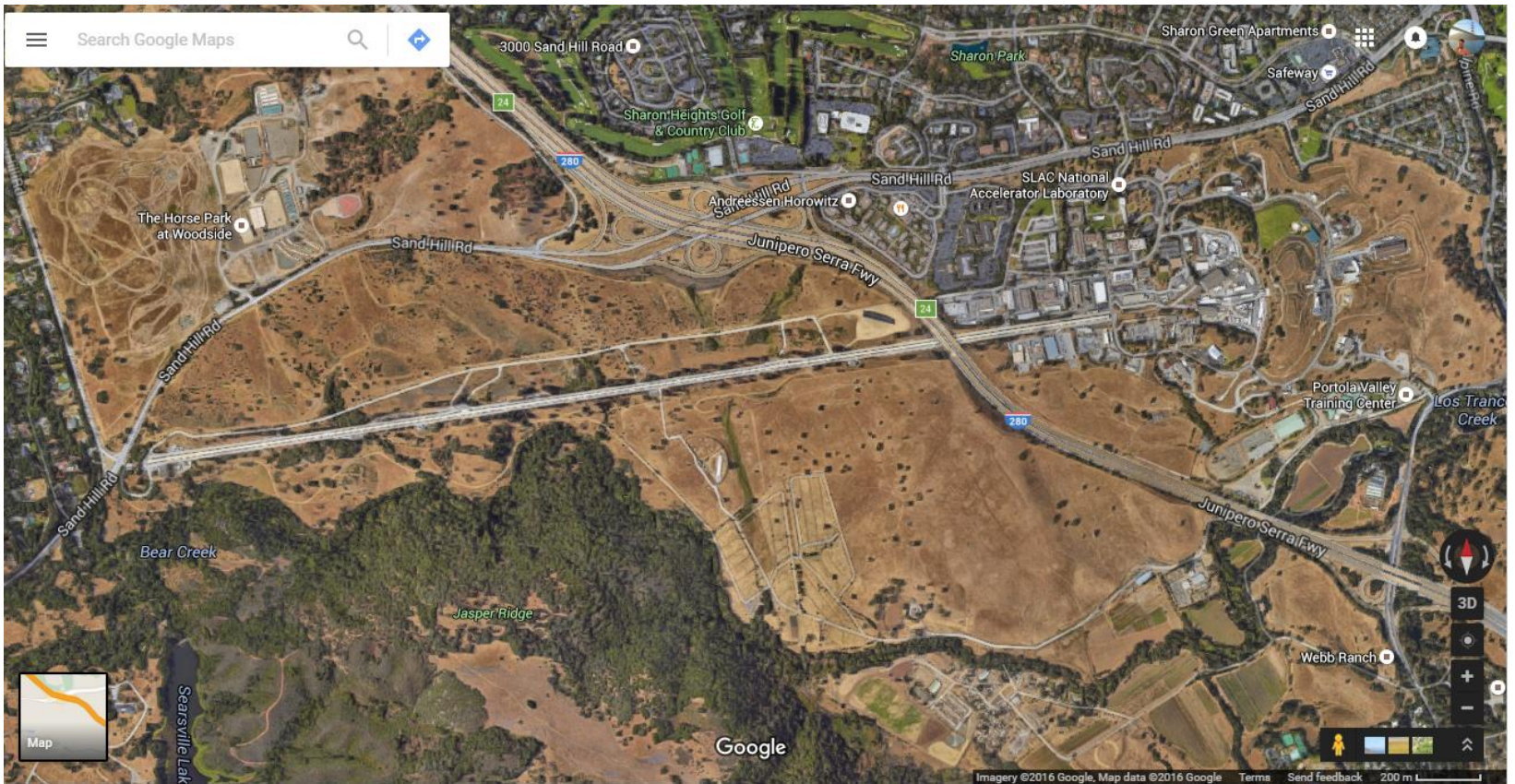
- Fuente sintonizable:
 - 300 eV – 20 keV
- Alta energía por pulso:
 - Hasta 300 mJ
- Pulsos ultracortos
 - Hasta 260 as
- Fuente coherente
- Unos pocos en el mundo:
 - LCLS, SACLA, FLASH, SwissFEL, FERMI,... XFEL, LCLS-2



Láseres de rayos X de electrones libres

Linac Coherent Light source (LCLS)
SLAC National Accelerator Laboratory
Menlo Park, California

~5 km

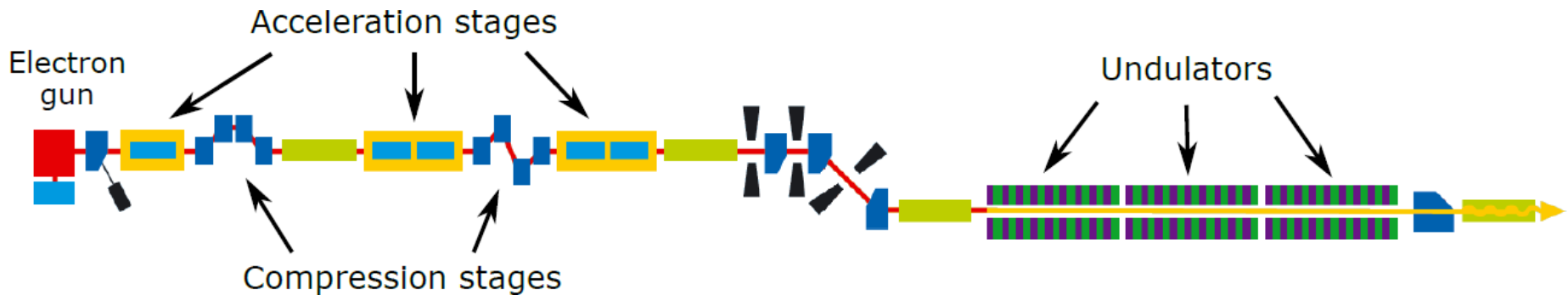


Láseres de rayos X de electrones libres

SACLA
Spring-8
Japan



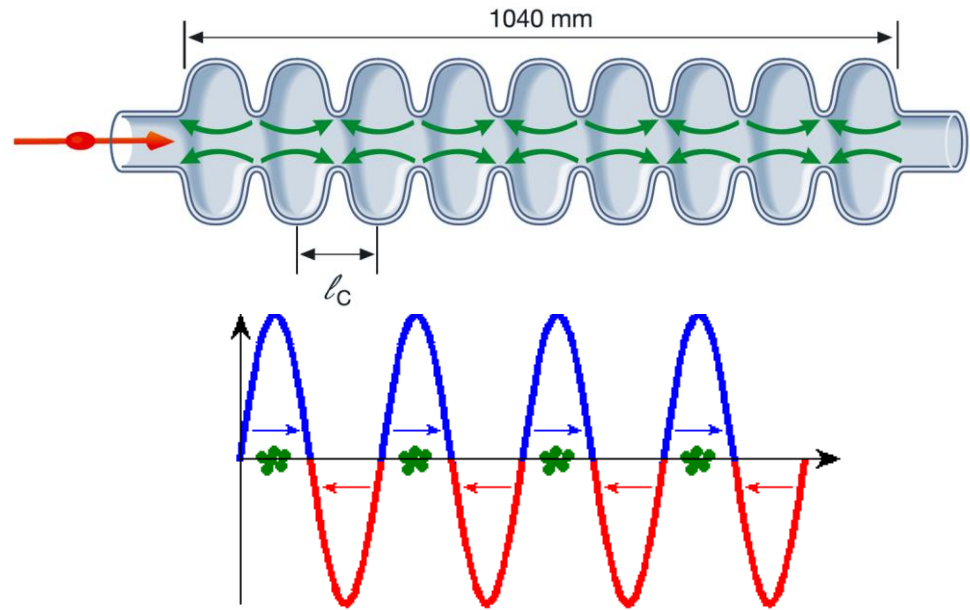
Láseres de rayos X de electrones libres



- Muchos componentes a lo largo de unos km
- Control muy complejo, con interacciones no triviales.
 - Difícil de mantener estable con precisión de fs.

¿Cómo funciona?

- Manejando un paquete de electrones
 - Aceleración:
 - RF cavities
 - Hasta 3.5 GeV
 - $\beta = 0.999999989$

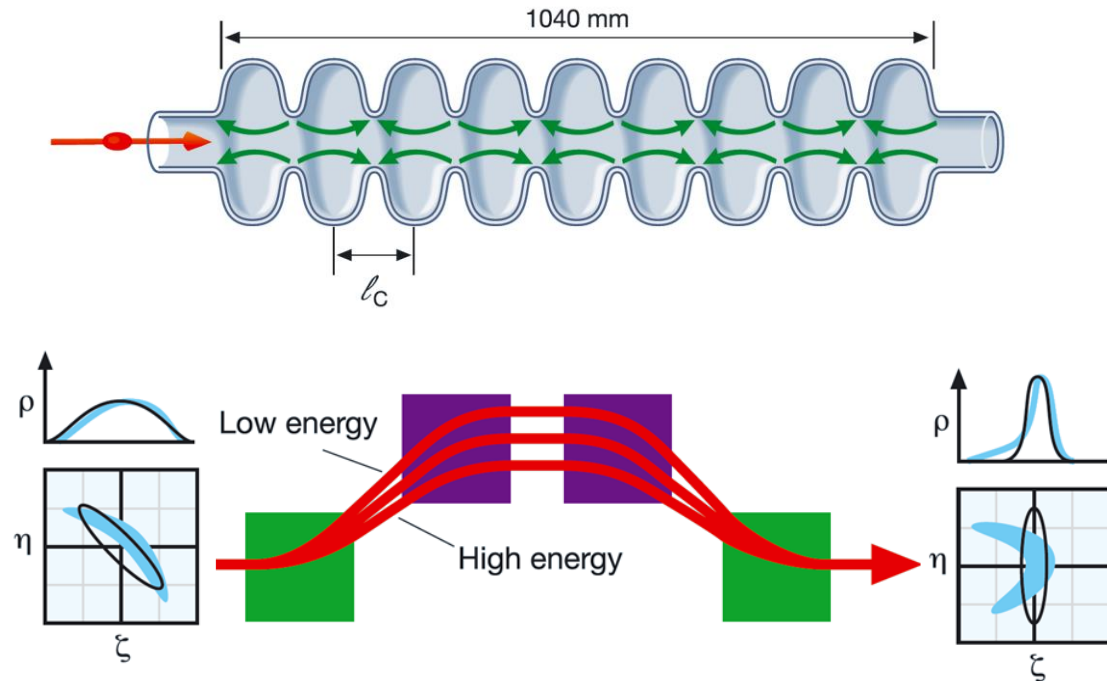


¿Cómo funciona?

- Manejando un paquete de electrones

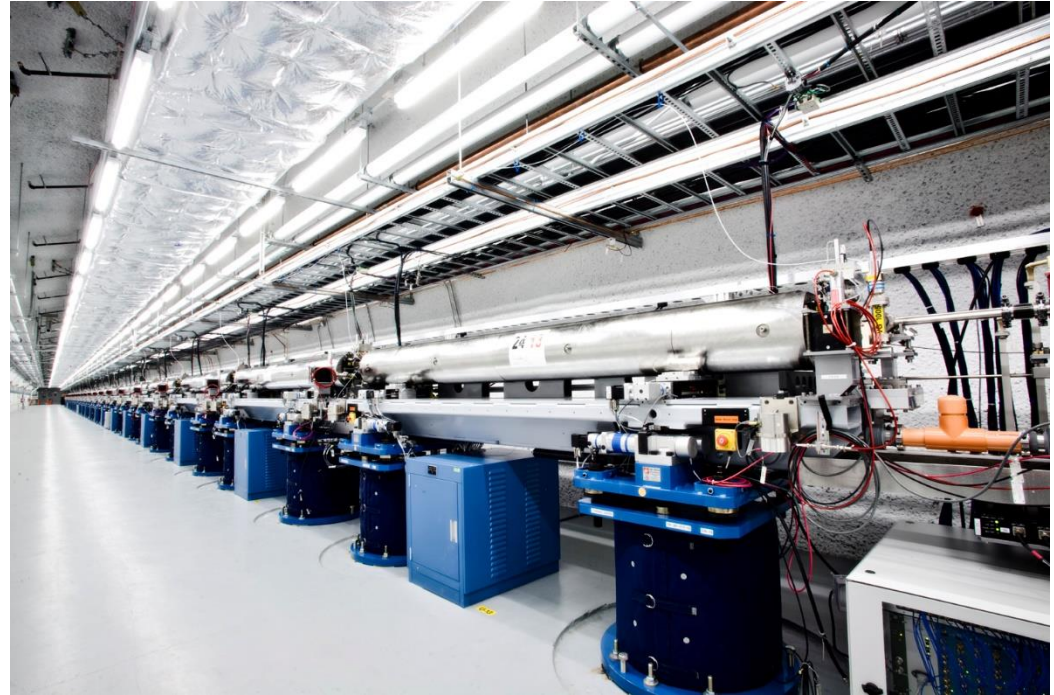
- Aceleración:
 - RF cavities
 - Hasta 3.5 GeV
 - $\beta = 0.999999989$

- Compresión:
 - Magnetic Chicane

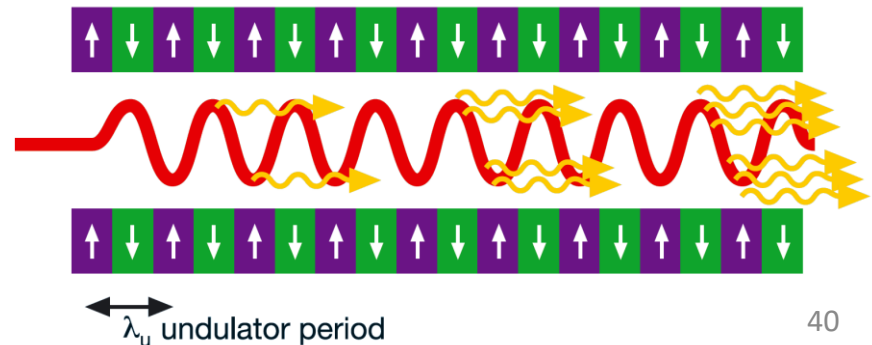


¿Cómo funciona?

- Manejando un paquete de electrones
 - Aceleración:
 - RF cavities
 - Hasta 3.5 GeV
 - $\beta = 0.999999989$



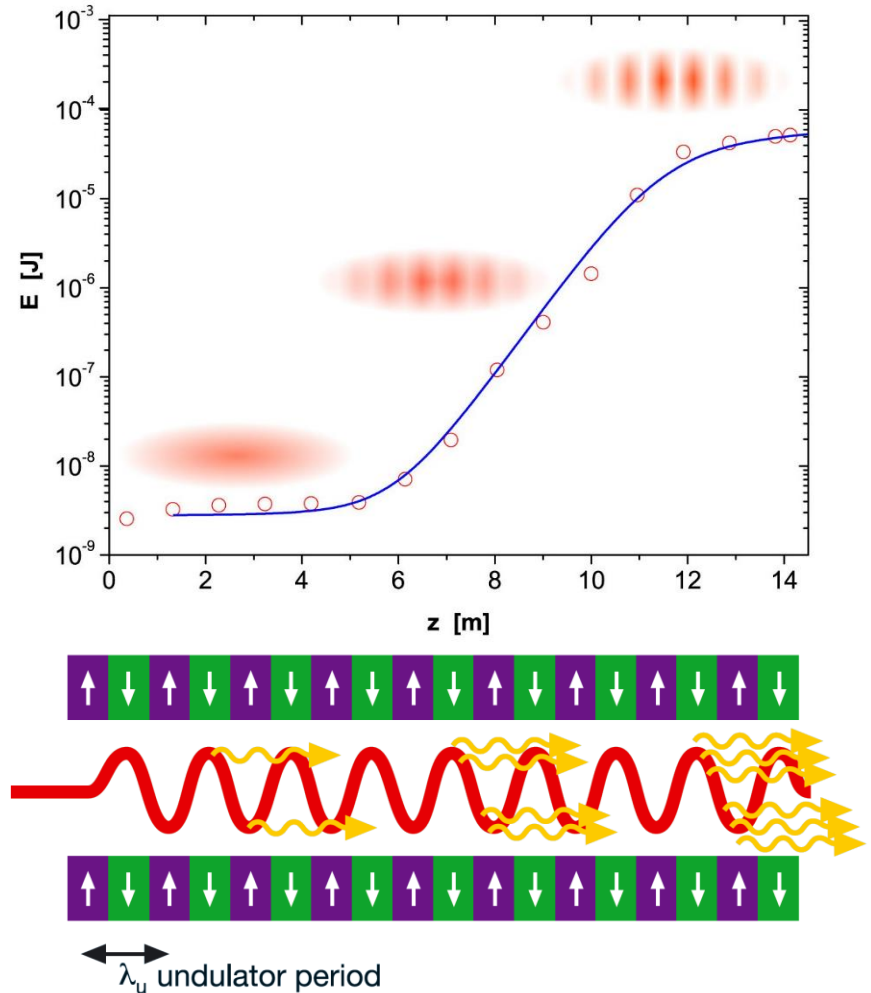
- Compresión:
 - Magnetic Chicane
- Emisión:
 - Ondulador



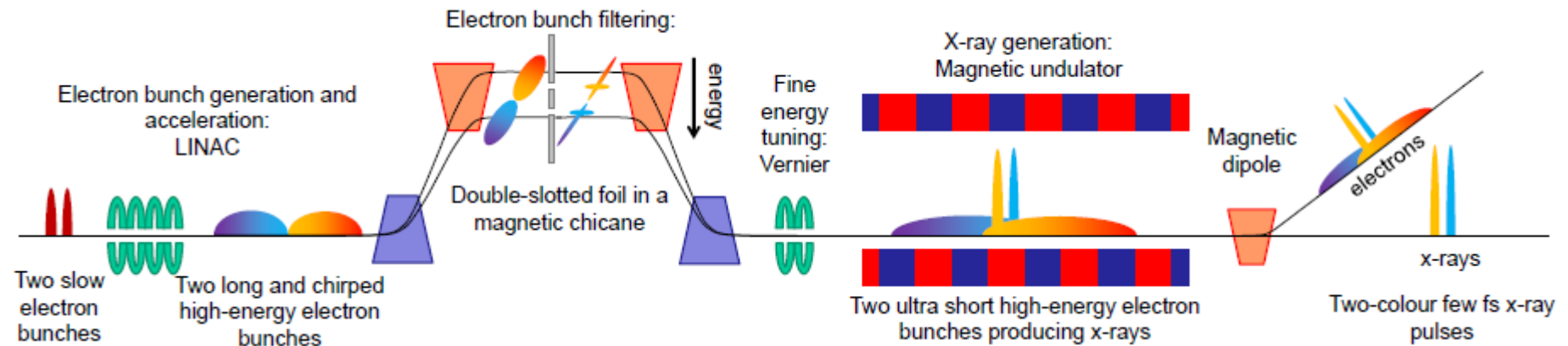
¿Cómo funciona?

Self Amplified Spontaneous Emission

- Mecanismo de emisión:
SASE
 - Amplificación exponencial
 - Sensible a fluctuaciones

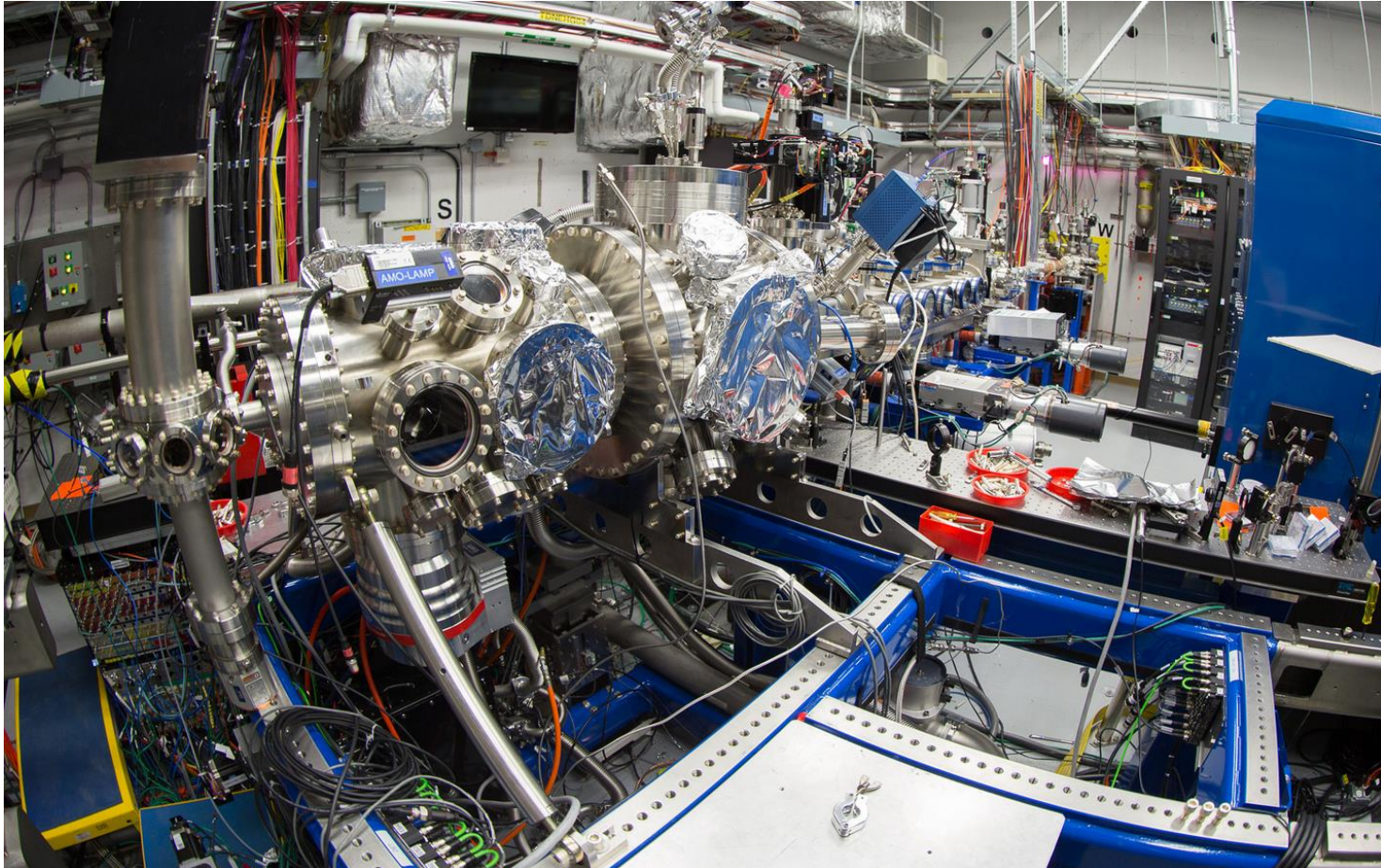


Experimento Pump & Probe



- Pares de pulsos sintonizables
 - Extremadamente sensible a fluctuaciones

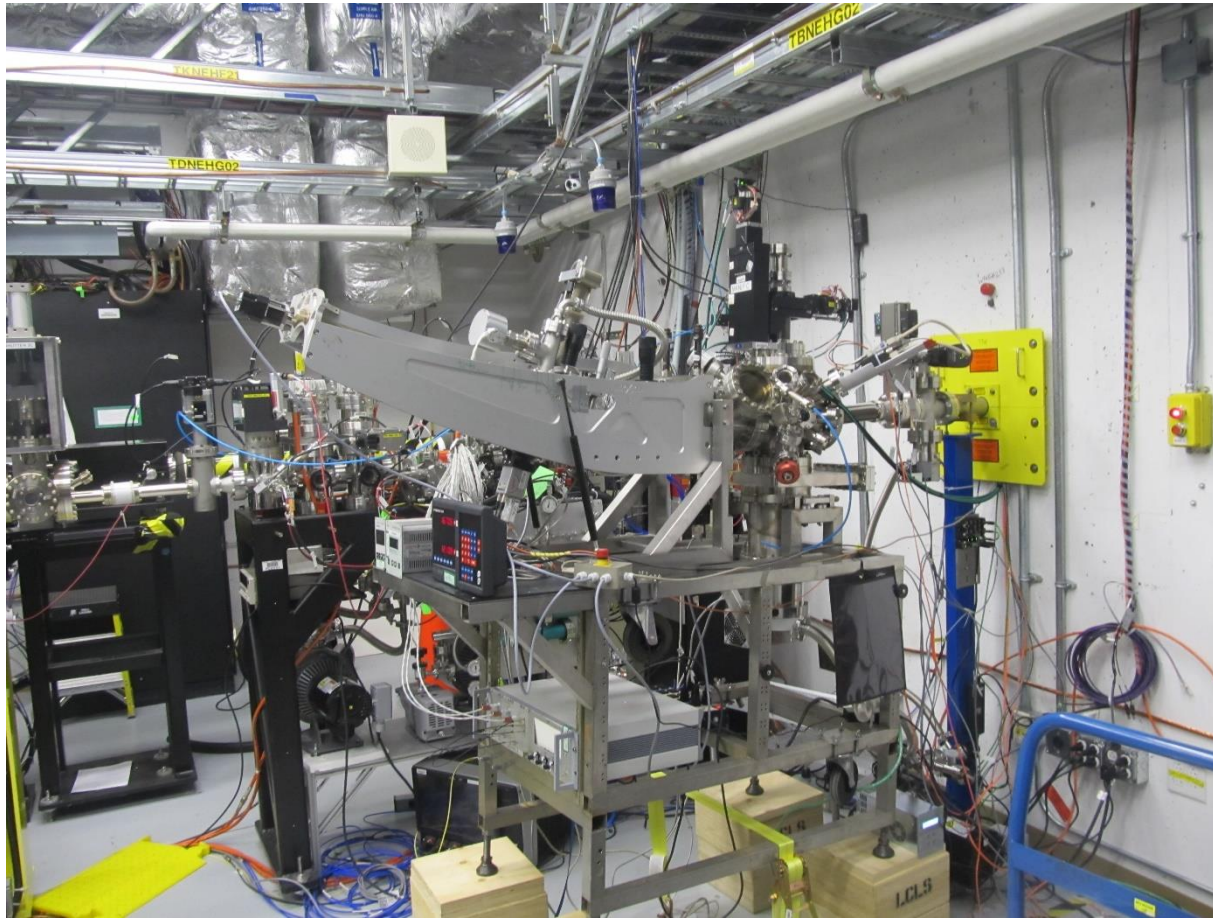
Sala experimental de LCLS



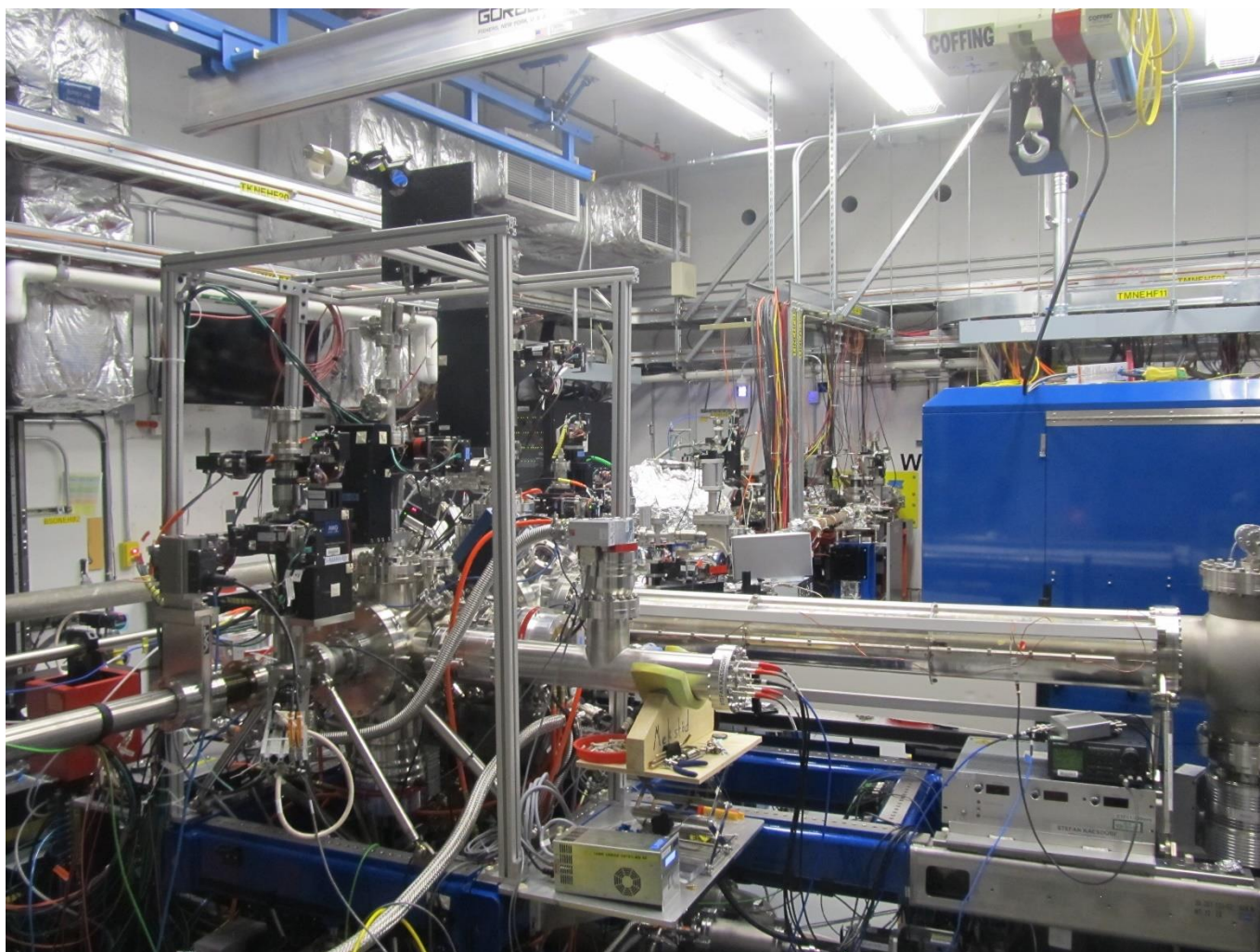
Sala experimental de FLASH



Espectrómetro de rayos X

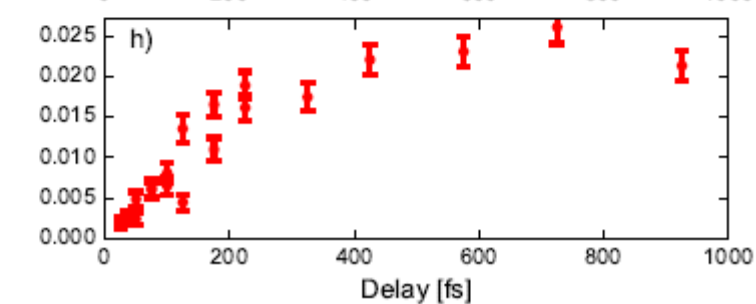
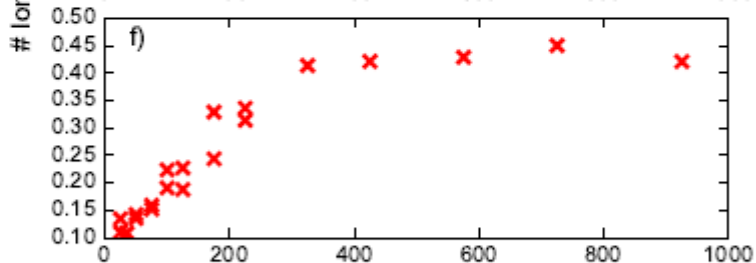
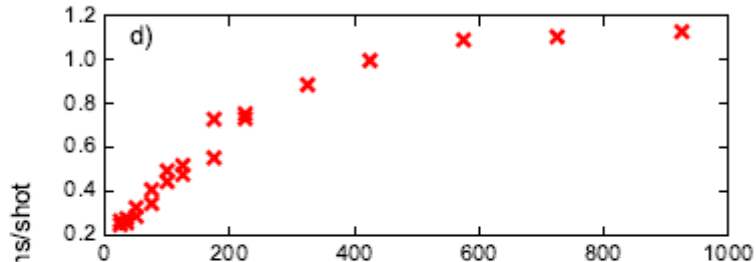
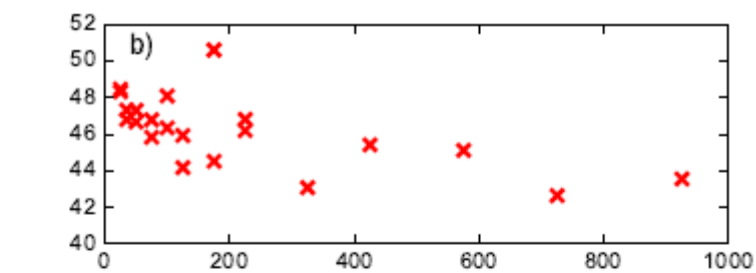
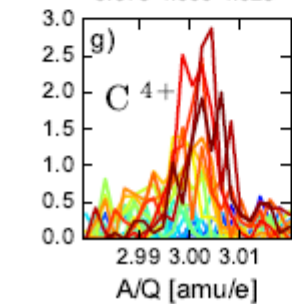
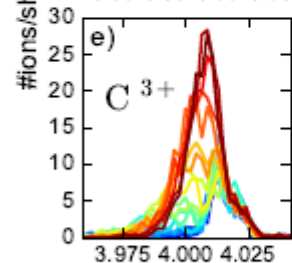
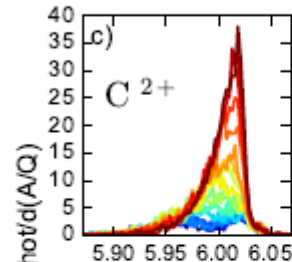
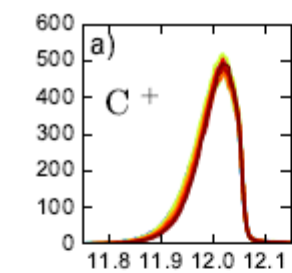
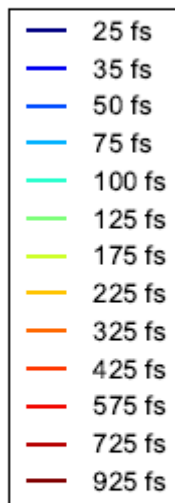
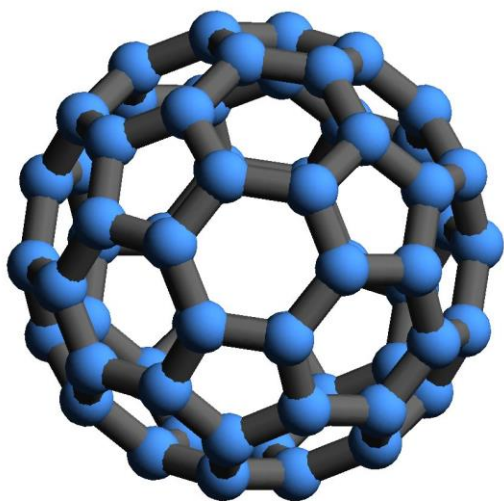


Botella magnética

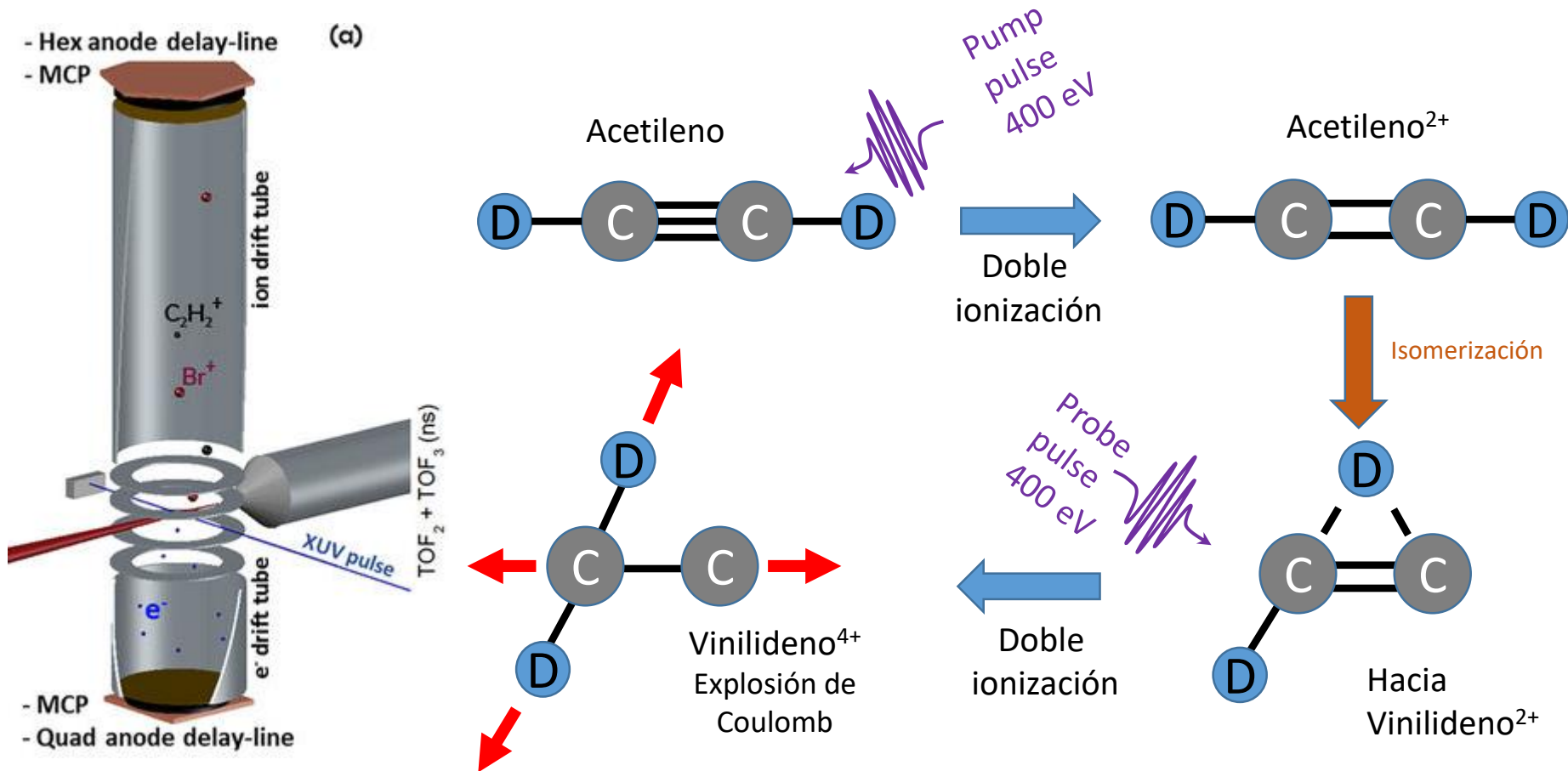


Ejemplo: Explosión de C_{60}

- Tiempo de la explosión
 - Tras ionización con pulso de 640 eV
- Espectroscopía de masas

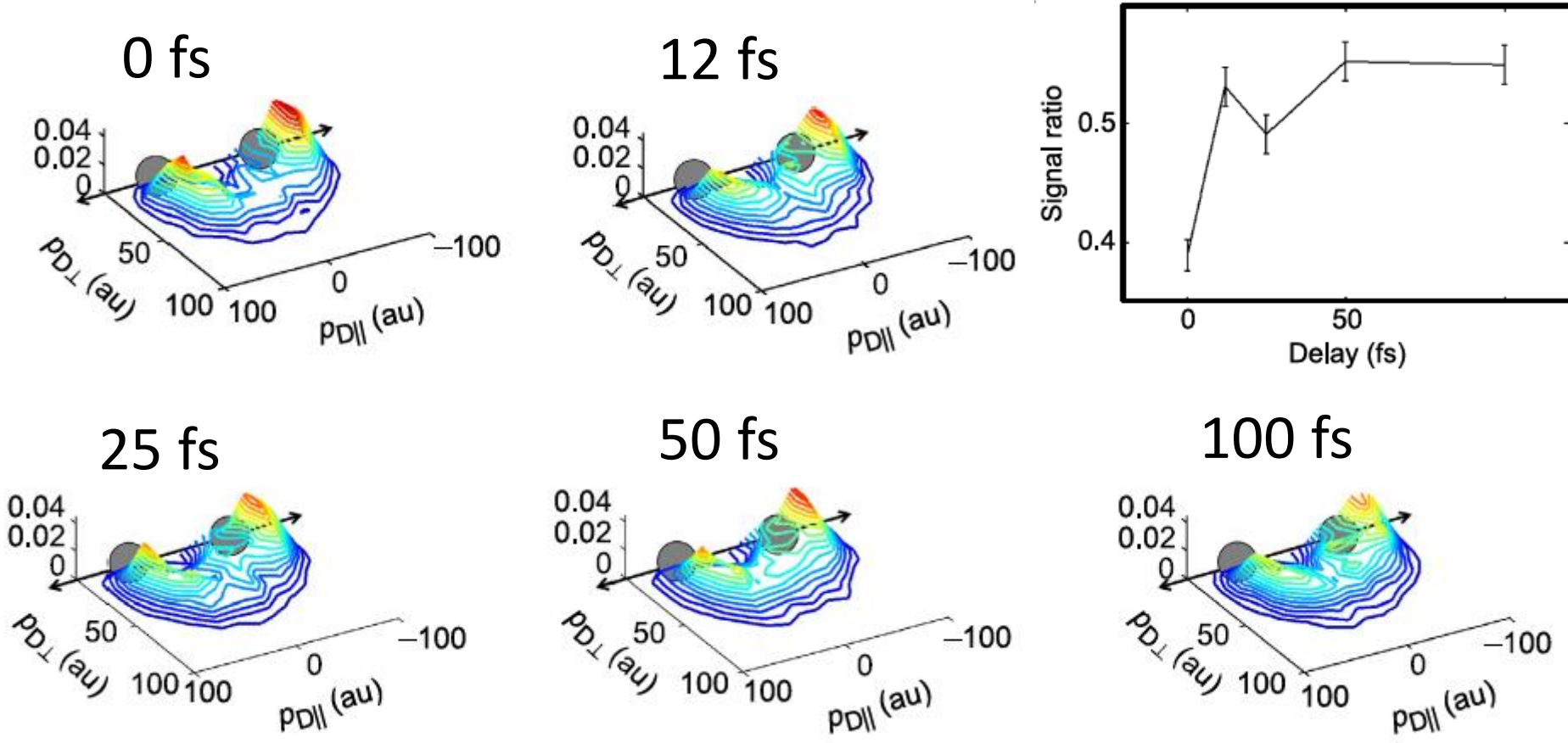


Ejemplo: Isomerización de acetileno



Ejemplo: Isomerización de acetileno

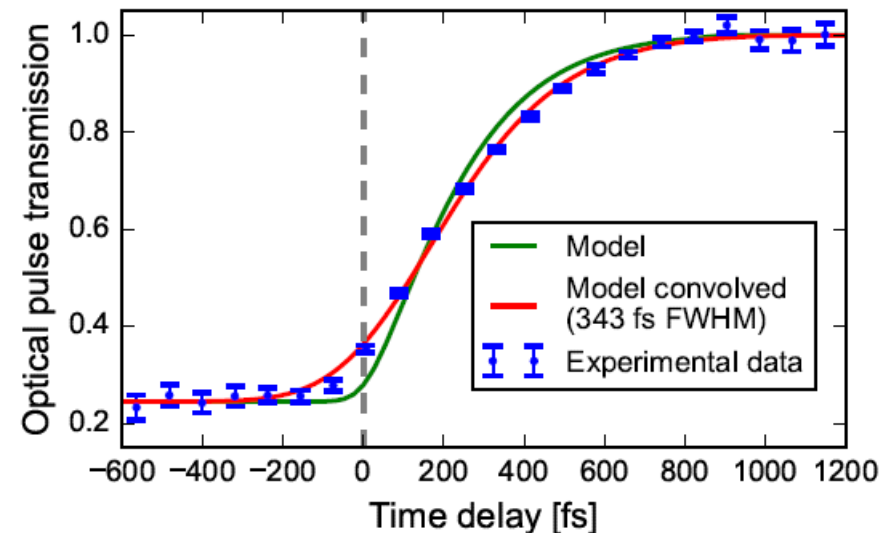
- Dinámica de isomerización



C. E. Liekhus-Schmaltz, I. Tenney, T. Osipov, A. Sanchez-Gonzalez, et al., "Ultrafast isomerization initiated by X-ray core ionization," *Nature Communications*, 6, no., 2015.

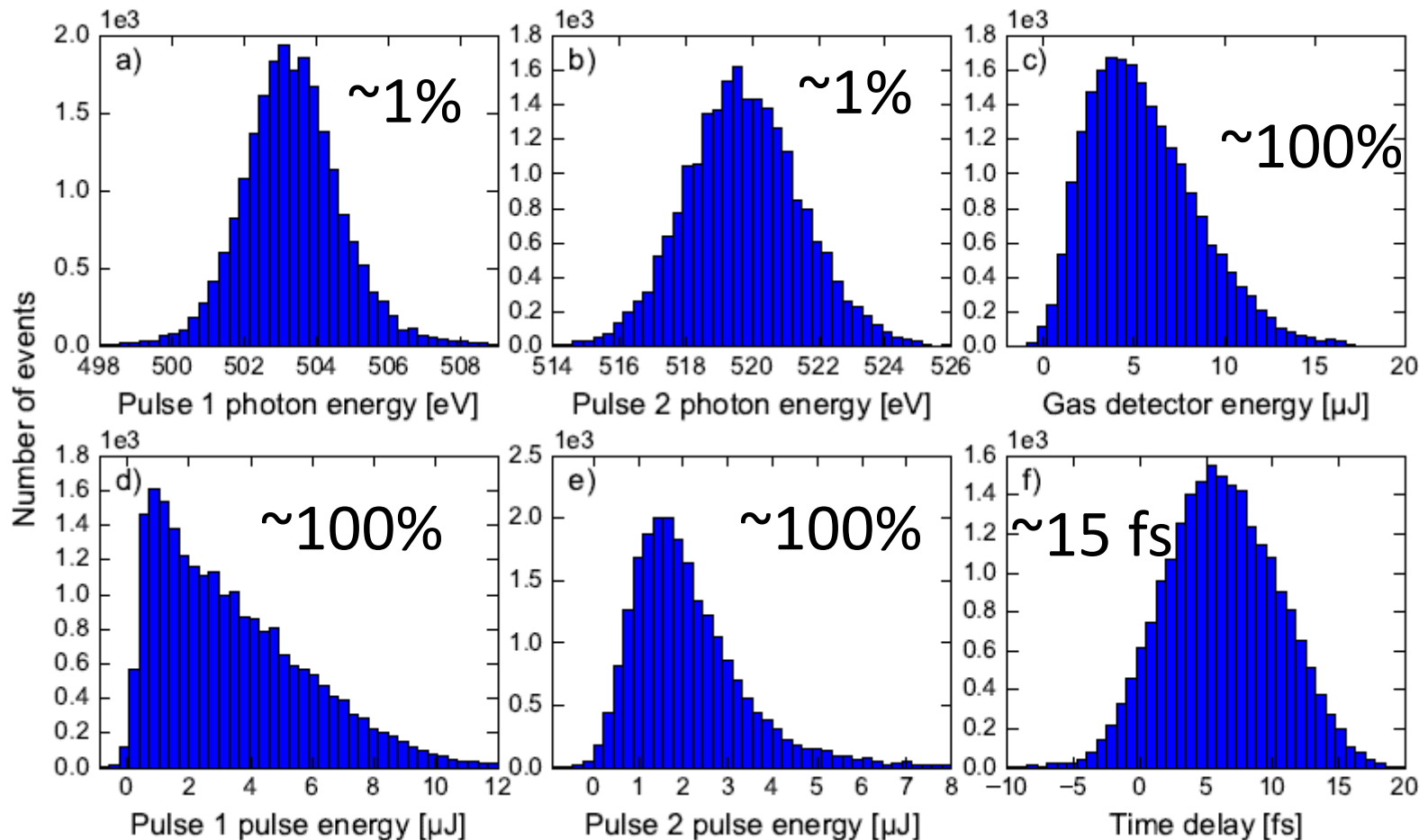
Ejemplo: Metalización de Ce:YAG

- Transparencia de Ce:YAG (dieléctrico)
 - Pulso rayos X (pump)
 - Pulso óptico (probe)
- Si el pulso óptico llega antes:
 - Material es transparente (dieléctrico)
- Si el pulso rayos X llega antes:
 - Material es opaco (Pasa de dieléctrico a metal por la ionización)

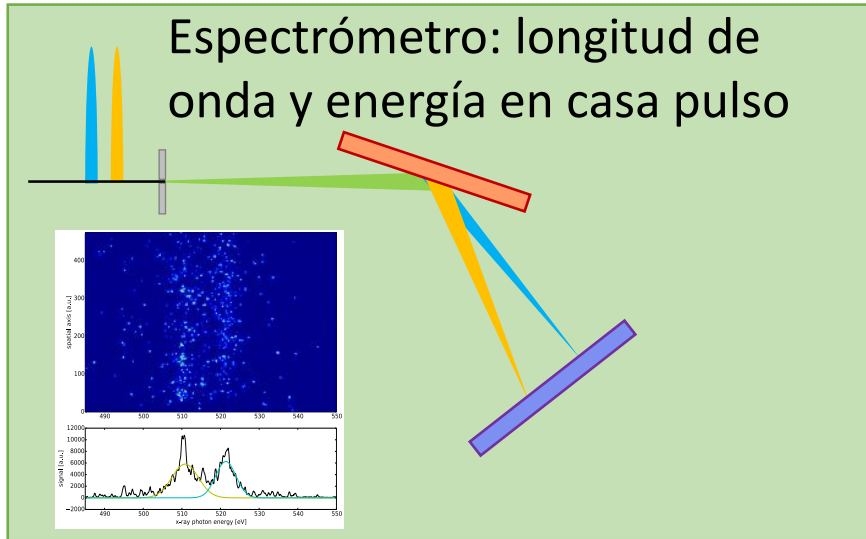


Problema: fluctuaciones

- Distribuciones de las propiedades de los pulsos

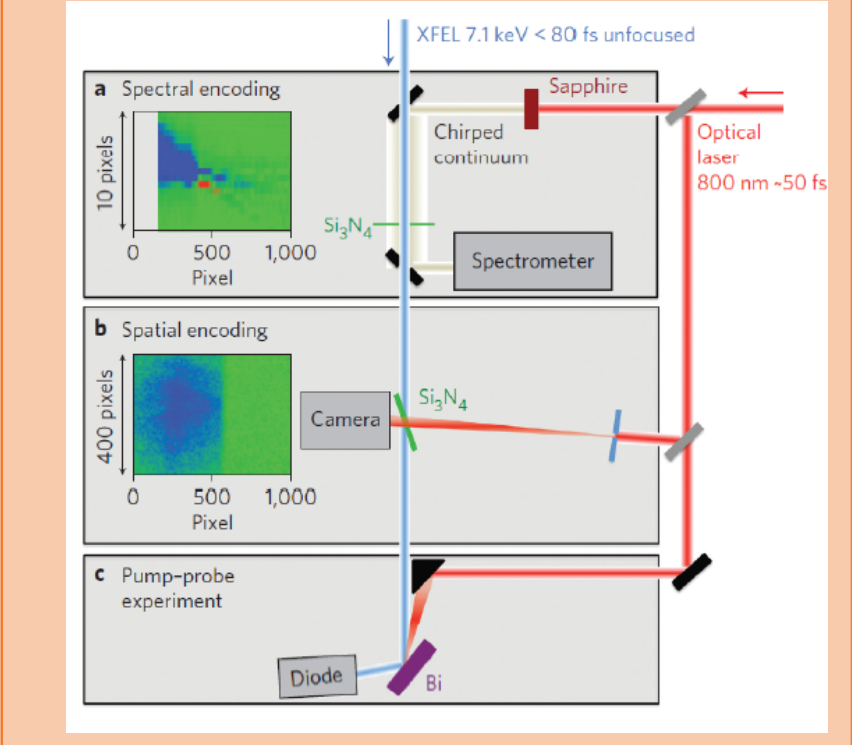
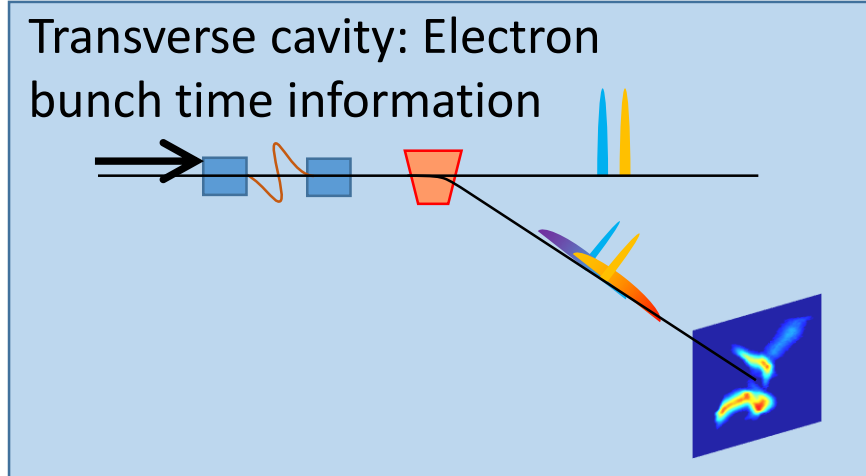


Solución: Caracterización de TODOS los pulsos



Detector de gas: energía total

Time-tool: sincronización entre pulsos ópticos y pulsos de rayos X



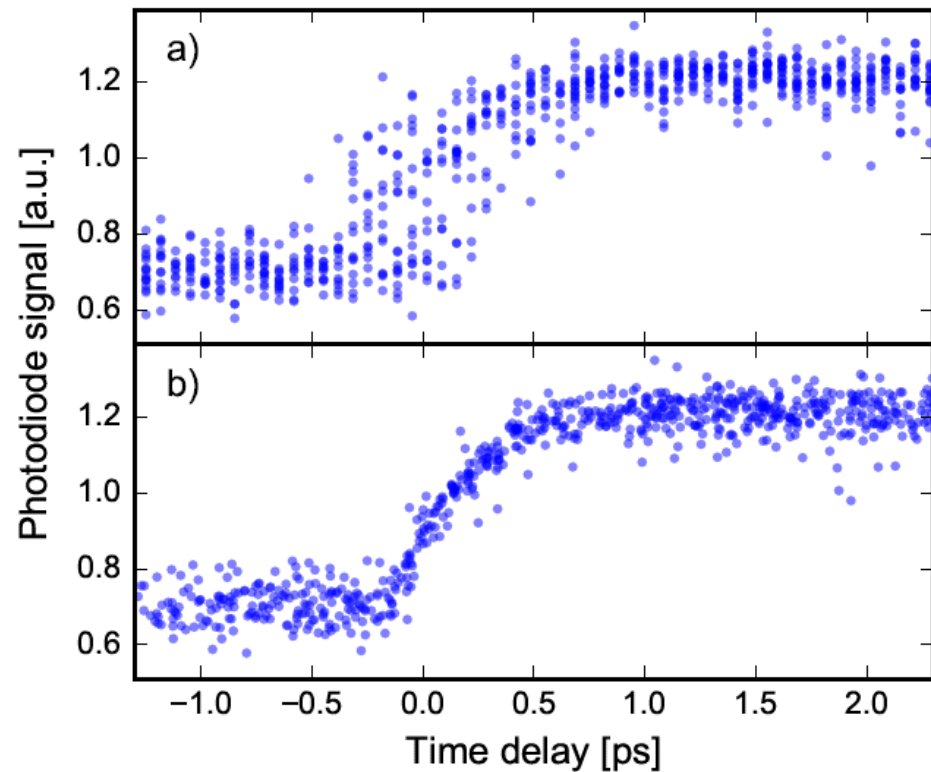
Y muchos más...

Ejemplo de corrección

- Proceso de metalización en Ce:YAG

Sin corrección

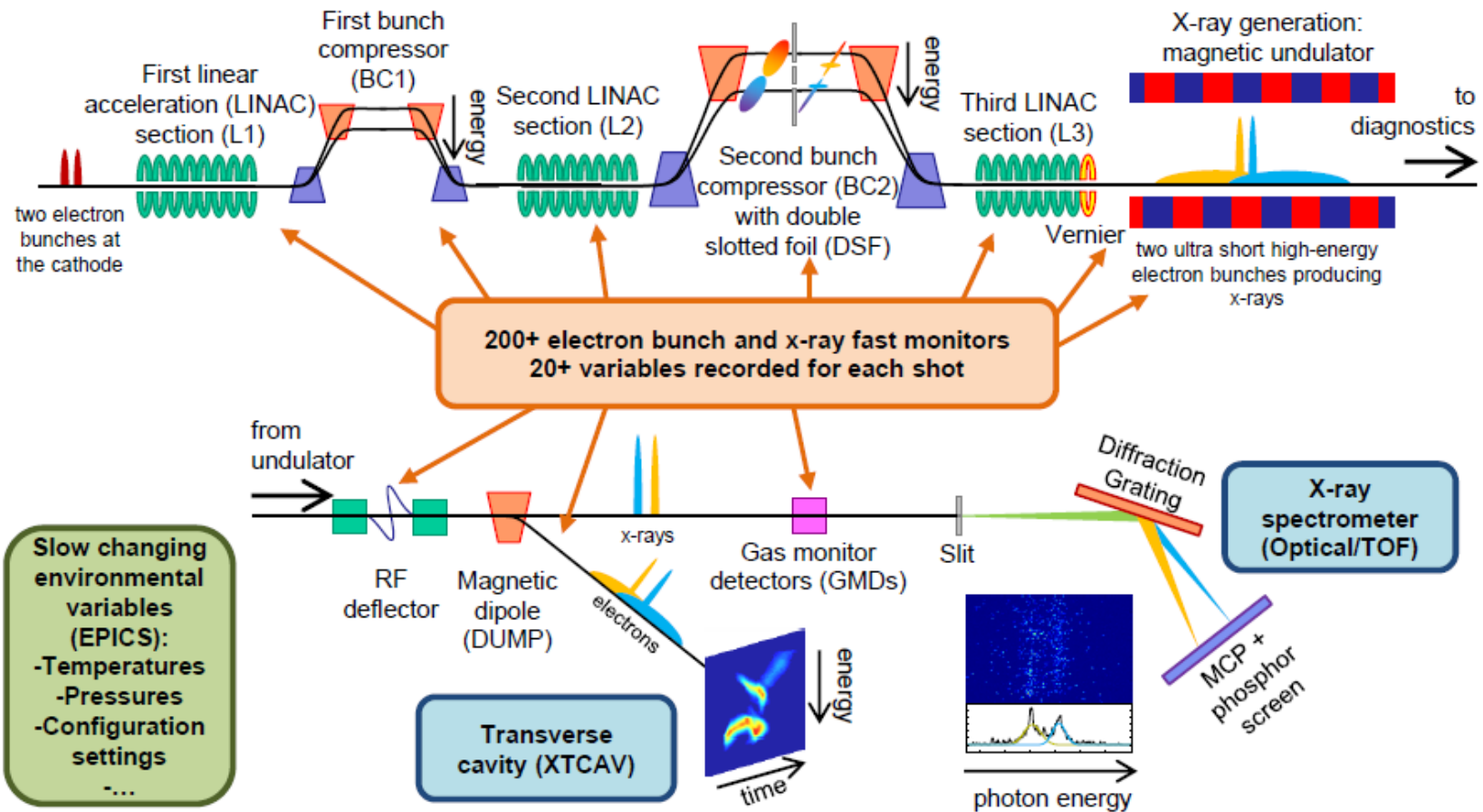
Con corrección



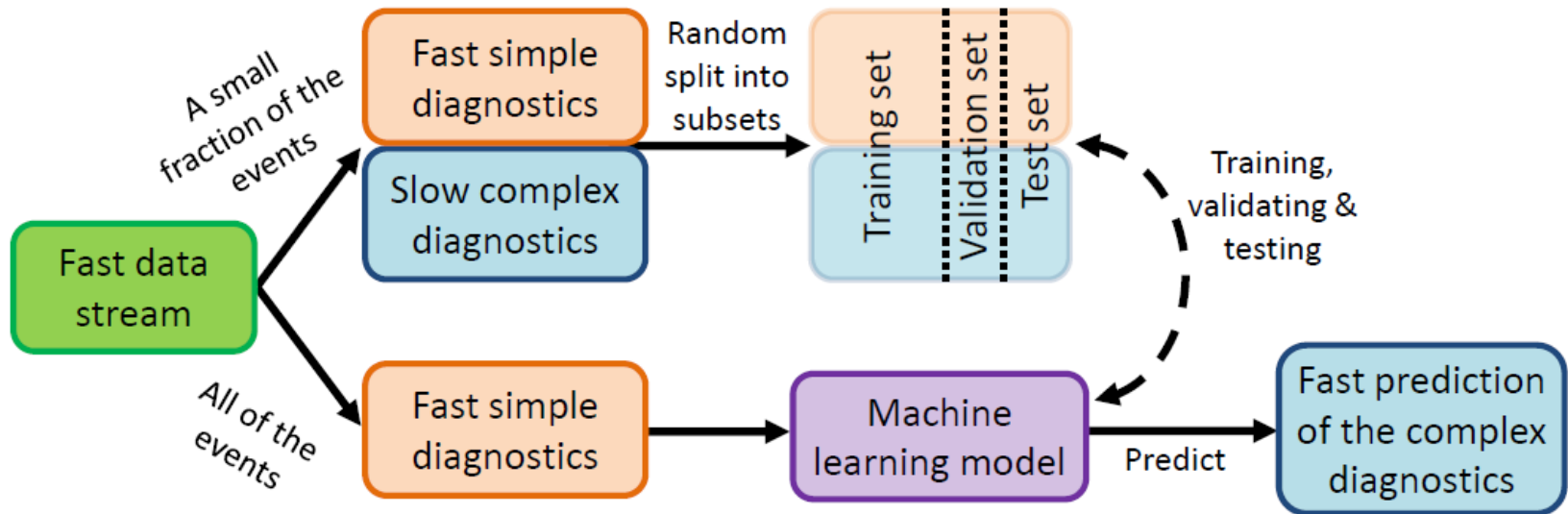
- No siempre se pueden medir las variables requeridas para realizar la corrección

XFELs y Big Data

- Cientos of variables registradas para cada pulso



Machine learning al rescate



- Machine learning model \leftrightarrow Universal function approximator f_a

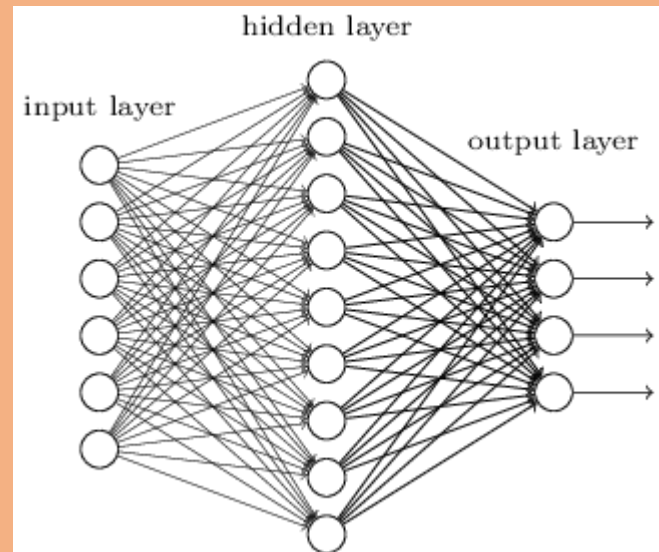
“Accurate prediction of X-ray pulse properties from a free-electron laser using machine learning.” A. Sanchez-Gonzalez et al. [doi:10.1038/ncomms15461](https://doi.org/10.1038/ncomms15461)

Modelos de machine learning

Modelos lineales

Modelos Polinómicos

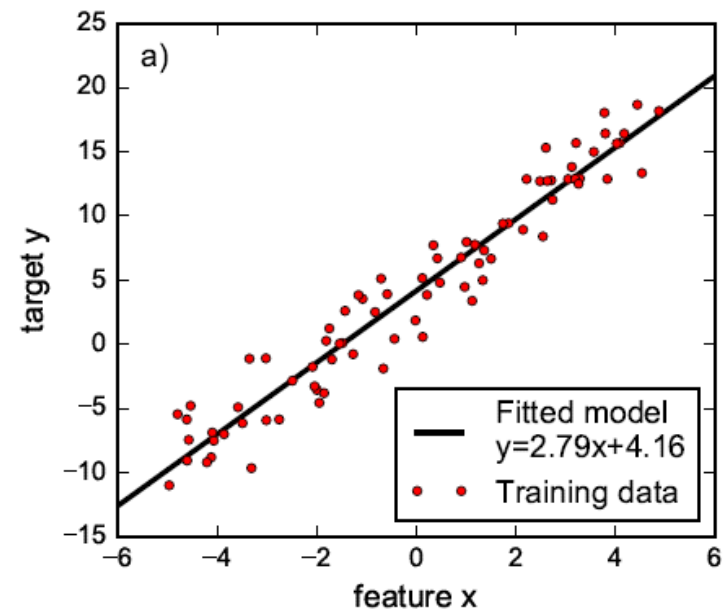
Redes neuronales



Machine learning: modelo lineal

- *Supervised learning* consiste en ajustar funciones a datos:
 - La regression lineal también es machine learning!!
- Encontrar coeficientes tal que:

$$y_i = a_0^i + \sum_{j=1}^{n_f} a_j^i x_j$$

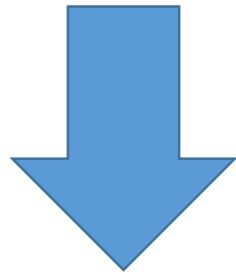


- Solución exacta: matriz pseudoinversa

Machine learning: modelo polinómico

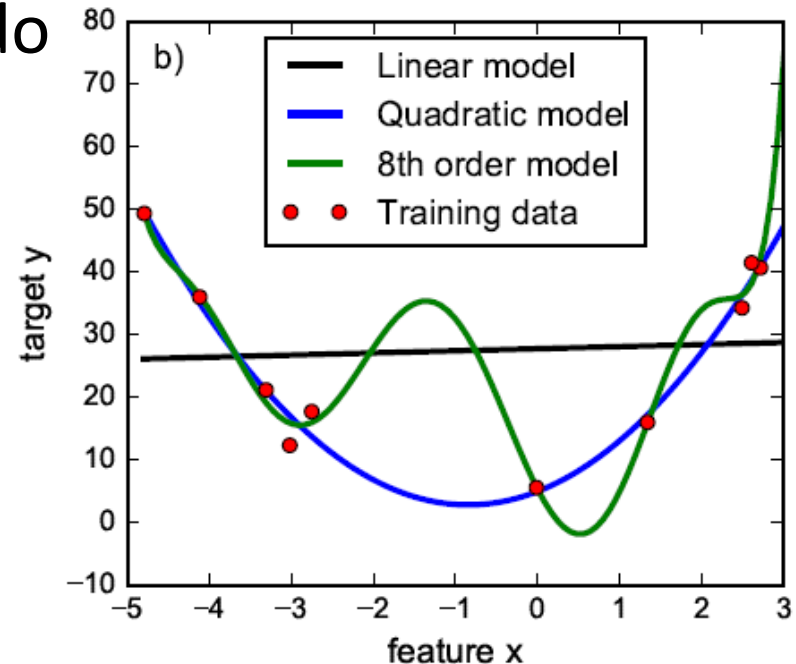
- Regresión lineal, expandiendo las variables de entrada
- Ejemplo cuadrático:

$$\mathbf{X} = (x_1, x_2, x_3)$$

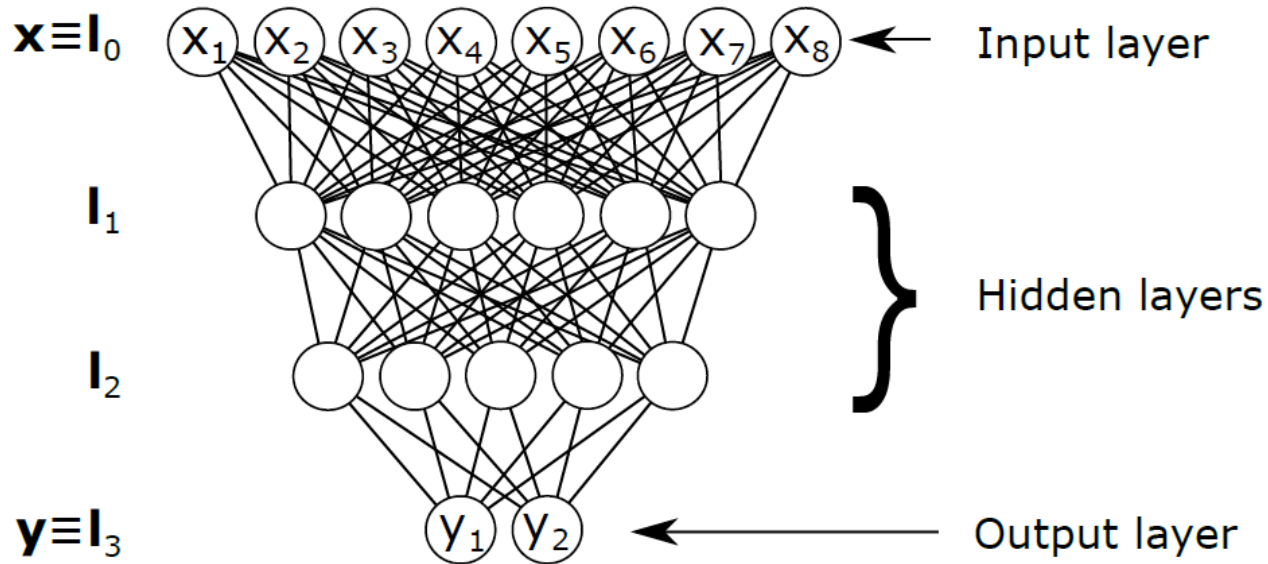


$$\mathbf{X}_{\text{aux}} = (1, x_1, x_2, x_3, x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3)$$

- También tiene solución exacta



Machine learning: Red neuronal



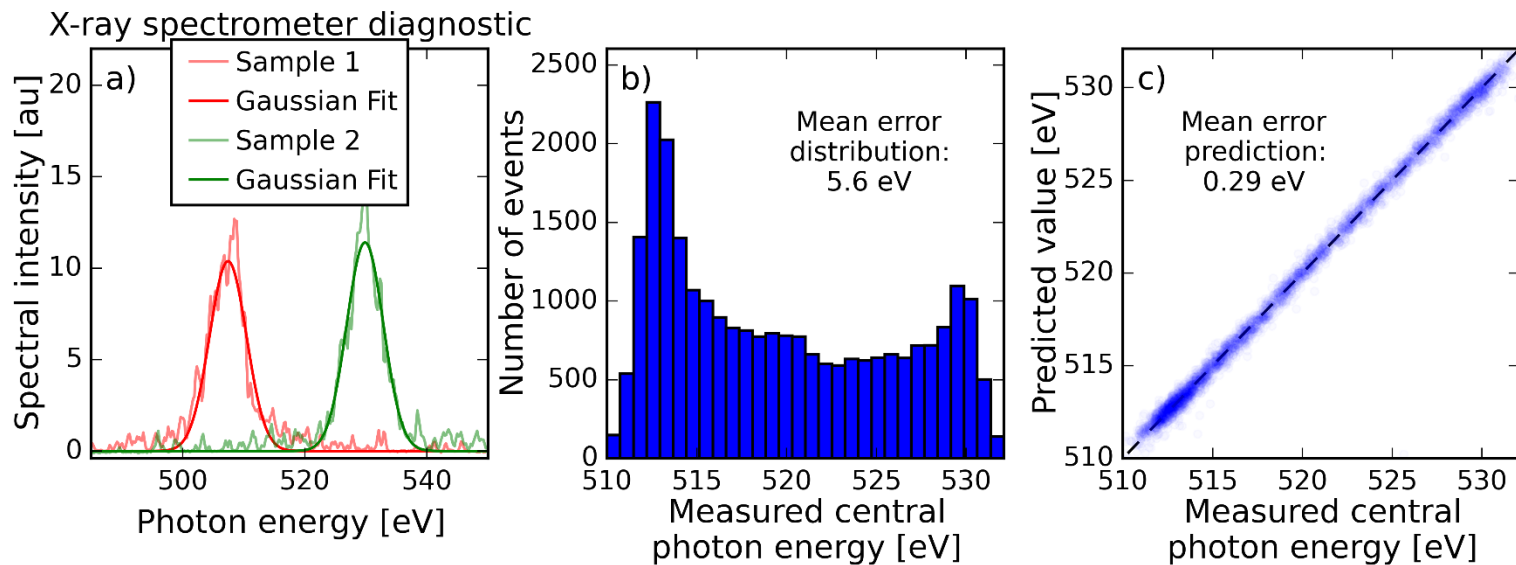
$$\mathbf{l}_{i+1} = \phi(\mathbf{b}_i + \mathbf{A}_i \mathbf{l}_i)$$

$$\phi(x) = \begin{cases} x & \text{if } x \geq 0 \\ 0 & \text{if } x < 0 \end{cases}$$

- Varias capas con matrices de coeficientes \mathbf{A}_i and \mathbf{b}_i
- Solución: Optimización no convexa

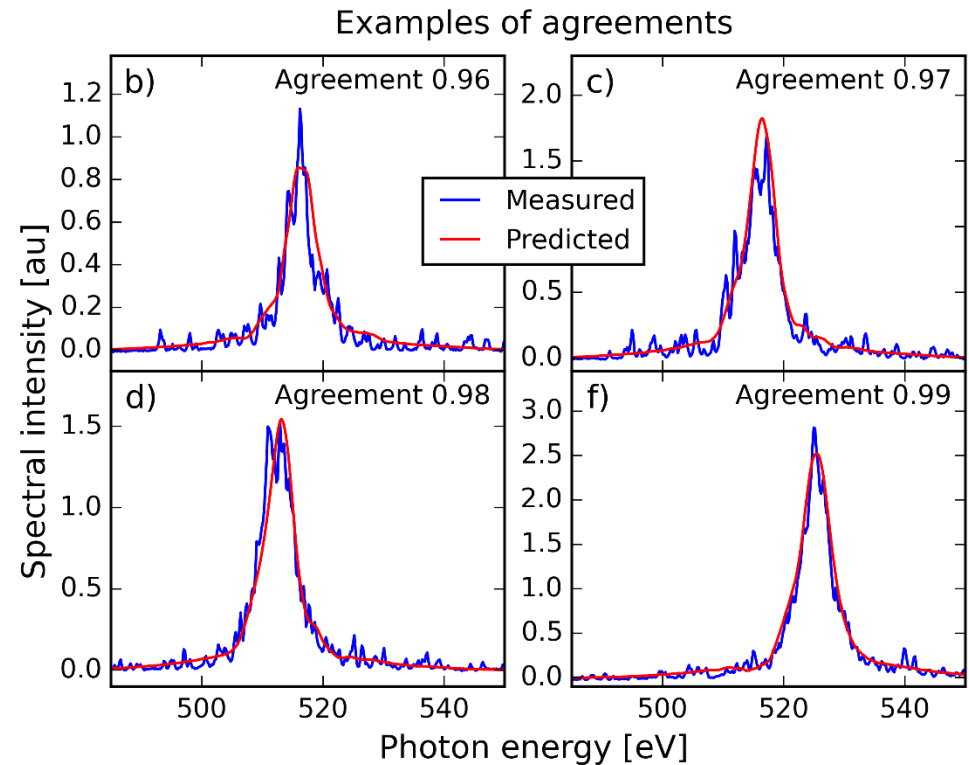
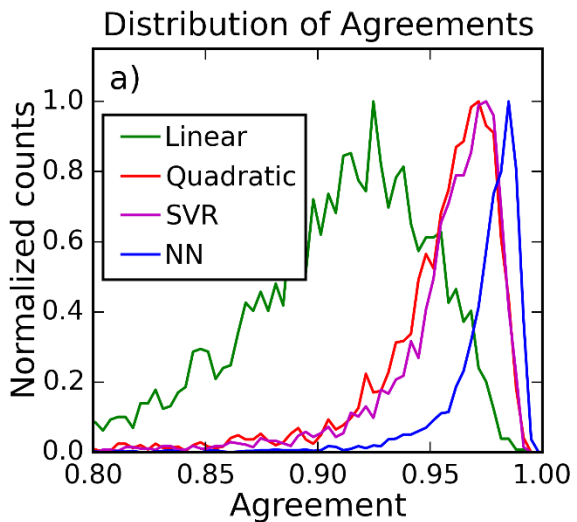
Predicción de la energía de fotón

- Error más pequeño que 0.3 eV



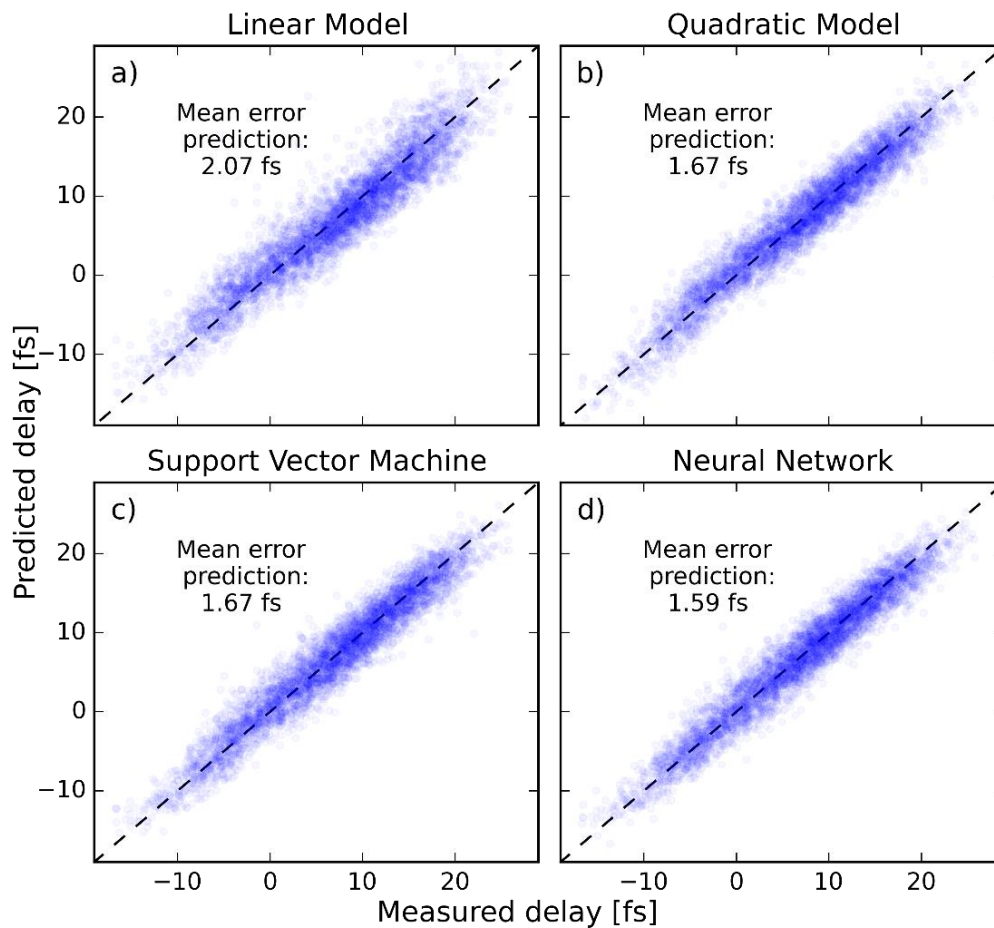
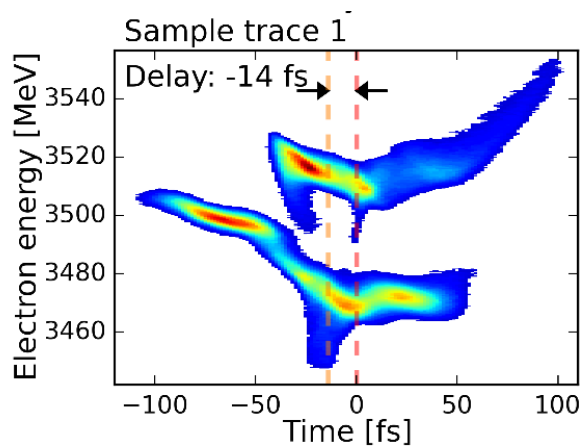
Predicción del espectro del pulso

- Coincidencia del media del 97%



Predicción del retardo

- Preciso 1.59 fs de media



Trayectoria – Después del Doctorado

- 2017 - Actualidad
 - ¿Academia o industria?
- Academia:
 - Posibilidad de continuar la misma línea de investigación.
 - Incertidumbre laboral inicial y oportunidades limitadas.
- Industria:
 - Cambio en la línea de trabajo.
 - Oportunidades más amplias.
- Combinación de ambas: Investigación en industria

Trayectoria – Después del Doctorado

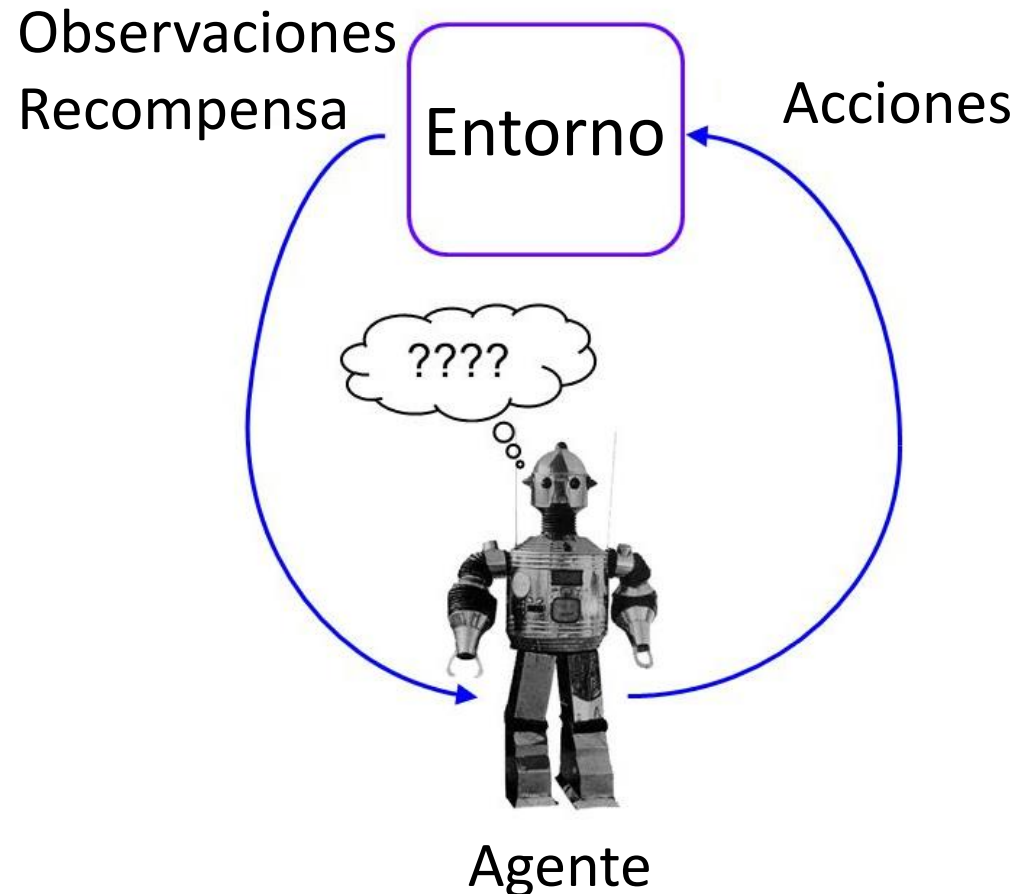
- 2017 - Actualidad
 - ¿Academia o industria?
- Combinación de ambas: Investigación en industria
 - Campo de inteligencia artificial (*Hot-topic*)



- Aplicaciones en todos los campos (Incluida la física)

IA: Deep Reinforcement Learning

- Aprendizaje por refuerzo
- Problema de decisión de Markov
- ¿Qué acciones tomar a lo largo del tiempo para obtener la máxima recompensa?



IA: Deep Reinforcement Learning

- Atari 2014
 - Observación:
 - Píxeles
 - Controles:
 - Derecha
 - Izquierda
 - Arriba
 - Abajo
 - Botón rojo
 - Recompensa:
 - Puntos



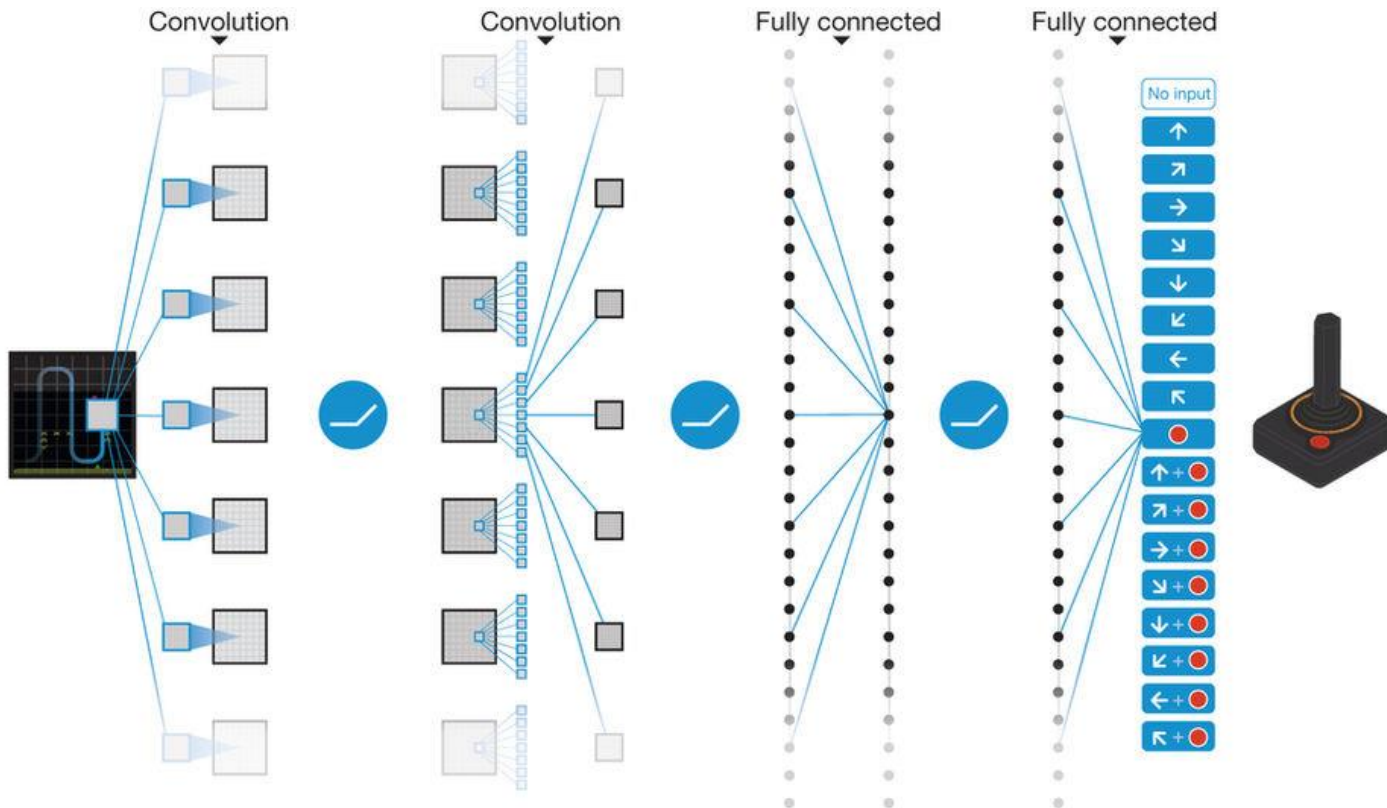
IA: Deep Reinforcement Learning

- Atari 2014
 - Observación:
 - Píxeles
 - Controles:
 - Derecha
 - Izquierda
 - Arriba
 - Abajo
 - Botón rojo
 - Recompensa:
 - Puntos



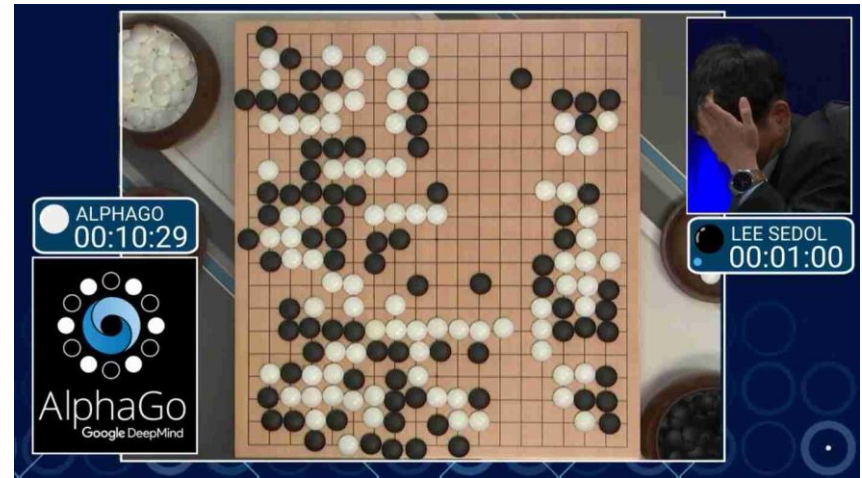
IA: Deep Reinforcement Learning

- Red neuronal que toma las decisiones



IA: Deep Reinforcement Learning

- AlphaGo 2015
 - Recompensa:
 - +1 Si gana, -1 Si pierde
- Juego ancestral chino Go:
 - Número de posiciones posibles: 1.74×10^{172}
 - Número de partidas posibles: 1.3×10^{661}
 - Intuición requerida
- Entrenado con partidas humanas
- Venció Lee Sedol Ke Jie



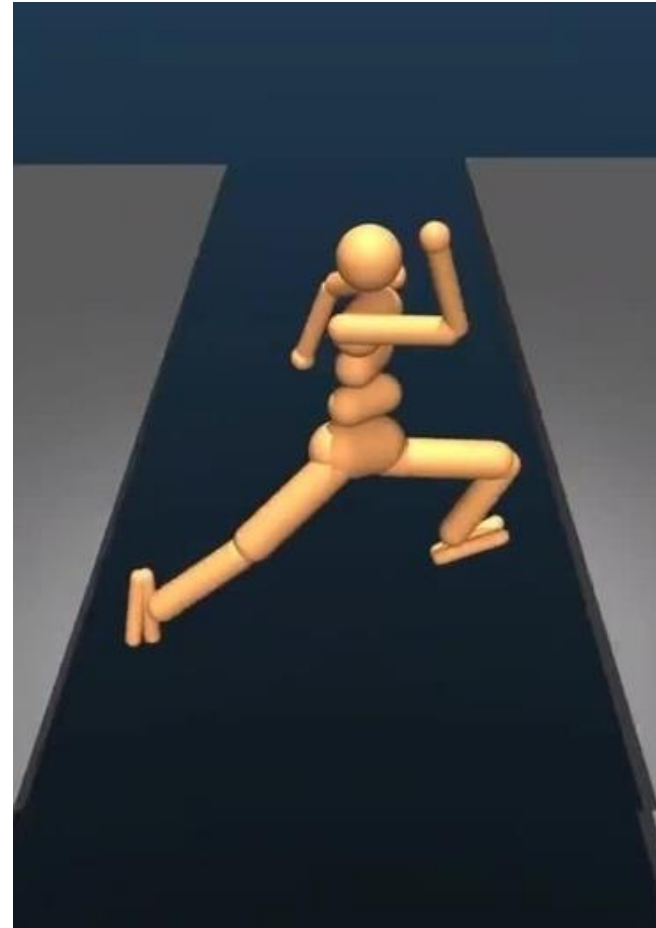
AlphaGo vs. Lee Sedol



AlphaGo vs. Ke Jie

IA: Deep Reinforcement Learning

- Parkour 2017
 - Observación:
 - Propiocepción
 - Mapa de altura
 - Controles:
 - Fuerza a aplicar sobre los músculos
 - Recompensa:
 - Incremento de distancia avanzada



IA: Deep Reinforcement Learning

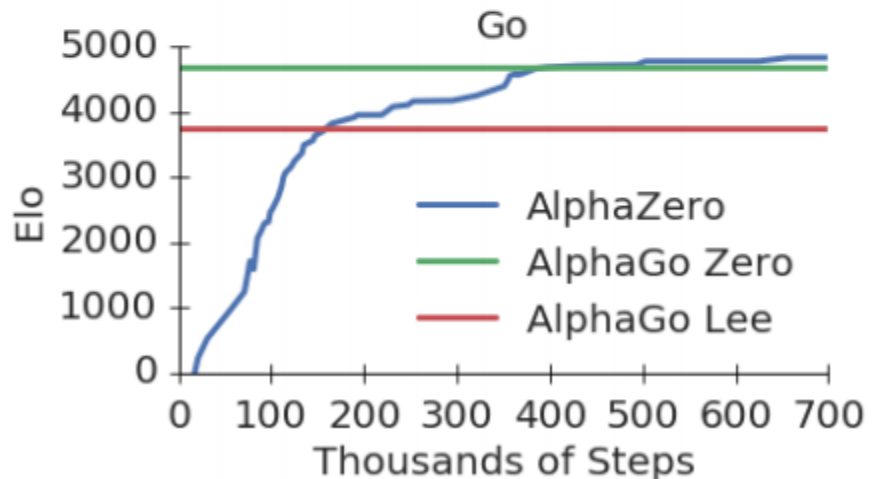
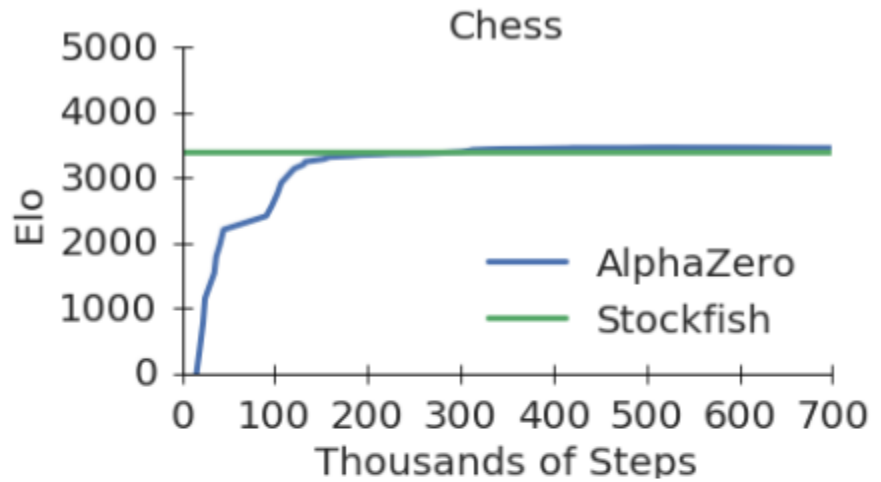
- Parkour 2017
 - Observación:
 - Propiocepción
 - Mapa de altura
 - Controles:
 - Fuerza a aplicar sobre los músculos
 - Recompensa:
 - Incremento de distancia avanzada



[Vídeo](#)

IA: Deep Reinforcement Learning

- AlphaZero 2017
- Self-play:
 - Juega contra sí mismo muchas partidas durante 3 días
 - Sin usar partidas humanas
- Descubrió de forma independiente todas las estrategias humanas más comunes...
...e incluso algunas nuevas.
- Vence a los mejores humanos y a los mejores programas existentes.
- Aplicable a cualquier* juego



Conclusiones

- La física da muchas salidas 😊
 - Pensamiento abstracto y analítico
 - Estadística
 - Matemáticas
 - Finanzas
- Moverse todo lo posible:
 - Siempre hay oportunidades para el que las busca
 - Desarrollar otras competencias: Comunicación, idiomas
- Valorar y estar abierto todas las opciones:
 - No es oro todo lo que reluce...
 - ...ni algo necesita relucir para ser oro.



VNIVERSIDAD
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL



UNIVERSITY of
ROCHESTER

Imperial College
London

Procesos ultrarrápidos, láseres de electrones libres e

¡Gracias por la atención!
¿Preguntas?

Alvaro Sánchez-González

Imperial College, London

Google DeepMind



Science & Technology
Facilities Council



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

SLAC
NATIONAL ACCELERATOR LABORATORY



DeepMind