

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO				
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS				
MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)				
Introducción al machine learning y redes neuronales				
Clave	Semestre 2024-2	Créditos 8	Campo de conocimiento	Materia Condensada y Nanociencias
Modalidad	Curso (x) Taller () Lab () Sem ()		Tipo	T () P () T/P (X)
Carácter	Obligatorio () Optativo () Obligatorio E () Optativo E (x)		Horas	
Duración del programa		Semestral		Semana
				Teóricas: 4
				Prácticas: 0
				Total: 4
				Semestre
				Teóricas: 64
				Prácticas: 0
				Total: 64

Objetivo general: El alumnado aprenderá los fundamentos e implementación de diversas metodologías de machine learning y redes neuronales.			
Objetivos específicos:			
<ul style="list-style-type: none"> • Entender los fundamentos e intuición detrás del machine learning. • Aprender a programar y entrenar dichos modelos. • Aprender el marco de referencia “Educational Framework (EDF)” para crear modelos de machine learning claros y generalizables. • Realizar un proyecto final de investigación. 			
Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción al Machine Learning	8	2
2	Introducción a las Redes Neuronales	12	6
3	Redes neuronales en grafos	4	2
4	Redes neuronales convolucionales	6	2
5	Redes recurrentes y Transformers	6	8
6	Proyecto final	2	6
Total		38	26
Suma total de horas		64	

Contenido Temático	
Unidad 1	<i>Machine Learning</i>
1.1	Conceptos fundamentales de aprendizaje
1.2	Aproximadores
1.3	Conceptos de aprendizaje estadístico
1.4	Teorema de Bayes
1.5	Tipos de aprendizaje
1.6	Manejo de bases de datos en PyTorch
Unidad 2	<i>Redes Neuronales (RN)</i>
2.2	El perceptrón y perceptrón multi-capa
2.3	El teorema de aproximación universal
2.4	RN completamente conectadas
2.5	Introducción el EDF
2.6	Tipos de redes neuronales
Unidad 3	<i>Redes neuronales en grafos (RNG)</i>
3.1	Grafos
3.2	Redes neuronales en grafos
3.3	Moléculas y su representación
3.4	Intercambio de mensajes en RNG
3.5	Convoluciones en RNG
3.6	Implementación de RNG en PyTorch
Unidad 4	<i>Redes neuronales convolucionales</i>
4.1	Fundamentos de RN convolucionales
4.2	Modelos convolucionales profundos
4.3	MNIST
4.4	Interpretación de características
4.5	Explainable AI
4.6	Implementación en EDF
Unidad 5	<i>Redes recurrentes y Transformers</i>
5.1	Redes recurrentes (RNNs)
5.2	Gated RNNs
5.3	LSTMs
5.4	Entrenamiento de RNNs
5.5	Transformers
5.6	Implementación en EDF
Unidad 6	Proyecto final
6.1	Descripción de proyectos
6.2	Estructura de proyectos en ML
6.3	Presentación de proyectos finales

Estrategias didácticas	Evaluación del aprendizaje
-------------------------------	-----------------------------------

Exposición	X	Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo	X	Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación	X	Presentación de tema	X
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos	X	Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	

Bibliografía básica:

1. *Machine Learning Meets Quantum Physics*. K.T. Schütt, S. Chmiela, O.A. von Lilienfeld, A. Tkatchenko, K.-R. Müller. Springer (2020)
2. *Deep Learning*. I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville. MIT Press (2017)
3. *Machine learning force fields*. O.T. Unke, S. Chmiela, H.E. Sauceda, M. Gastegger, I. Poltavsky, K.T. Schütt, A. Tkatchenko, K.-R. Müller *Chemical Reviews* 121 (16), 10142-10186 (2021)

Bibliografía complementaria:

1. *The Elements of Statistical Learning*. T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman. Springer (2008)
2. *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulations*. M.E. Tuckerman Oxford Graduate Texts (2010).

Perfil profesiográfico:

Quienes impartan esta actividad deberán contar con el grado de Maestro(a) o Doctor(a) o con la dispensa de grado otorgada por el Comité Académico, en alguna disciplina afín a los contenidos de esta actividad académica; experiencia académica o profesional relacionadas con la docencia en los campos del conocimiento del Programa. Tener producción académica o profesional reciente, demostrada con obra académica o profesional reconocida. Manejo y conocimiento de técnicas de enseñanza y aprendizaje.