





Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica	
Título:	Física estadística de Máquinas de Boltzmann restringidas	
Title:	Statistical Physics of Restricted Boltzmann Machines	
Supervisor/es:	Aurélien Decelle	
E-mail supervisor/es	adecelle@ucm.es	
Número de plazas:	1	
Asignación de TFG:	Selección directa 🗵	Selección por expediente

Objetivos:

Entender los principios de algoritmos de aprendizaje no supervisionado y sus interpretación como modelos desordenados, explorando la conexión con vidrios de spin. Entender los regímenes de funcionamiento del modelo a nivel teórico (cálculo de diagramas de fase) y numérico (entrenamiento).

Metodología:

El/la estudiante tendrá que estudiar teorías de campo medio de vidrios de spin de equilibrio y desarrollar cálculos de energía libre a través del método de las réplicas. La metodología se aplicará principalmente sobre modelos que describen el comportamiento de equilibrio de una Máquina de Boltzmann restringida. El/la estudiante tendrá que implementar un código para entrenar el modelo sobre un set de datos concreto, y los resultados numéricos se analizarán y compararán con resultados analíticos (diagrama de fase).

- [1] A.Fischer, C. Igel (2014), Training restricted Boltzmann machines: An introduction, Pattern Recognition,
- [2] A. Decelle and C. Furtlehner. *Restricted Boltzmann Machine, recent advances and mean-field theory,* Chinese Physics B, 2020, 10.1088/1674-1056/abd160.
- [3] J. Tubiana and R. Monasson, *Emergence of Compositional Representations in Restricted Boltzmann Machines,* Phys. Rev. Lett. 118, 138301
- [4] Decelle, A., Fundamental problems in statistical physics XIV: Lecture on Machine Learning, arXiv:2202.05670



GRADO EN FÍSICA curso 2023-24



Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física teórica	
Título:	Modelos de Potts para predecir mutaciones en proteínas	
Title:	Potts models to predict mutable sites in proteins	
Supervisor/es:	Aurélien Decelle	
E-mail supervisor/es	adecelle@ucm.es	
Número de plazas:	1	
Asignación de TFG:	Selección directa 🗵	Selección por expediente

Objetivos:

- Adquirir y profundizar en los conceptos fundamentales de la inferencia bayesiana y la física estadística inversa.
- Desarrollar habilidades para entrenar y utilizar modelos generativos de inteligencia artificial en la modelización de datos de secuencias en familias de proteínas.
- Aplicar estos modelos en la predicción de la mutabilidad en dominios de proteínas, con el objetivo de obtener resultados significativos y aplicables a la emergencia de variantes del virus SARS-Cov2.

Metodología:

El/la estudiante que realice este proyecto de trabajo de fin de grado se adentrará en el estudio de los fundamentos de la inferencia y la física estadística inversa, así como su aplicación en la modelización de paisajes mutacionales en familias de proteínas. Además, el/la alumno/a se familiarizará con modelos sencillos de inteligencia artificial con el objetivo de obtener modelos efectivos que reproduzcan las correlaciones complejas presentes en la estadística de mutaciones observadas en familias homólogas de proteínas (proteínas ligadas por una evolución común).

Se espera que el estudiante adquiera habilidades en el entrenamiento de Máquinas de Boltzmann Restringidas formuladas en términos de variables de Potts, lo que

permitirá extraer información relevante sobre las restricciones evolutivas en una familia de proteínas y utilizarla para predecir la mutabilidad en la secuencia. La estadística de las predicciones obtenidas se contrastará de manera sistemática con las bases de datos existentes sobre la evolución de proteínas asociadas al virus SARS-CoV-2.

- [1] Rodriguez-Rivas, J., Croce, G., Muscat, M., & Weigt, M. (2022). Epistatic models predict mutable sites in SARS-CoV-2 proteins and epitopes. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *119*(4), e2113118119.
- [2] Cocco, S., Feinauer, C., Figliuzzi, M., Monasson, R., & Weigt, M. (2018). Inverse statistical physics of protein sequences: a key issues review. *Reports on Progress in Physics*, *81*(3), 032601.





GRADO EN FÍSICA curso 2023-24

Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física teórica	
Título:	Aprendizaje automático fuera equilibrio	
Title:	Out-of-Equilibrium Mach	ine Learning
Supervisor/es:	Aurélien Decelle	
E-mail supervisor/es	adecelle@ucm.es	
Número de plazas:	1	
Asignación de TFG:	Selección directa 🗵	Selección por expediente
basado en el método de difusión estable, un método directamente relacionado con la física fuera del equilibrio. Se podrá explorar analíticamente cómo entender la dinámica de aprendizaje usando la mecánica estadística fuera de equilibrio y sus relaciones con el modelo de Ising (en el caso de datos binarios) y/o implementar una realización de este tipo de modelo en python.		
Metodología: El/la estudiante tendrá que estudiar los principios básicos del aprendizaje automatizado con un enfoque propio en los modelos de difusión, o fuera de equilibrio. Debería ser capaz de implementarlos a nivel práctico en una base de datos real usando python. El/la estudiante tendrá que entender la parte teórica del modelo y ser capaz de adaptarla a distintos contextos (cambio de arquitectura, variación del método). El/la estudiante tendrá que escribir un programa en Python para entrenar el modelo, estudiar el resultado cambiando la arquitectura del modelo y entender cómo el tiempo total de difusión afecta a la calidad de las muestras generadas desde el punto de vista de la física.		

- [1] **Deep unsupervised learning using nonequilibrium thermodynamics**, Sohl-Dickstein et al.
- [2] **Denoising Diffusion Probabilistic Models**, Ho et al.
- [3] Generative Modeling by Estimating Gradients of the Data Distribution, Song et al.







Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física teórica	
Título:	Dinámica vítrea en el aprendizaje de modelos de aprendizaje automático	
Title:	Glassy dynamics in the learning behavior of Machine Learning models	
Supervisor/es:	Aurélien Decelle	
E-mail supervisor/es	adecelle@ucm.es	
Número de plazas:	1	
Asignación de TFG:	Selección directa $oximes$	Selección por expediente

Objetivos:

- Aprender a identificar y caracterizar las propiedades principales de la dinámica vítrea.
- Estudiar cómo medir la presencia de comportamiento vítreo durante el aprendizaje. Explorar el comportamiento del desplazamiento cuadrado medio y la presencia de heterogeneidad dinámica en la evolución de los parámetros del modelo.
- Familiarizarse con el proceso y los programas de aprendizaje automático de una red neuronal simple.

Metodología:

El/la estudiante que realice este proyecto de trabajo de fin de grado se adentrará en el estudio de los fundamentos de la teoría de los vidrios y en particular, en los efectos de la dinámica vítrea. El objetivo de este TFG será estudiar la presencia de dinámica vítrea durante el entrenamiento de modelos de aprendizaje automático. Se espera que el/la alumno/a se familiarice con modelos sencillos de inteligencia artificial con el objetivo de aprender a entrenarlos y después que sea capaz de analizar la dinámica de aprendizaje de los parámetros del modelo para investigar propiedades típicas de los vidrios como el enjaulamiento o el envejecimiento.

El TFG se centrará en el estudio de redes generativas simples, las llamadas Máquinas de Boltzmann Restringidas, y los resultados se compararán con los de redes de neuronas de tipo "feed-forward" donde este tipo de efectos se han ya estudiado con anterioridad.

- [1] Comparing dynamics: Deep neural networks versus glassy systems, ICML2018, Marco Baity-Jesi et al.
- [2] Subaging in underparametrized deep neural networks, Machine Learning: Science and Technology 2022, Carolina Herrera Segura et al.



GRADO EN FÍSICA curso 2023-24



Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica		
Título:	Métodos de Monte Carlo modernos para sistemas de espines desordenados		
Title:	Advanced Monte Carlo M systems	Advanced Monte Carlo Methods for disordered spin systems	
Supervisor/es:	Víctor Martín Mayor		
E-mail supervisor/es	vicmarti@ucm.es		
Número de plazas:	1		
Asignación de TFG:	Selección directa 🗵	Selección por expediente	

Objetivos:

En este trabajo se estudiarán las propiedades de las cadenas de Markov y su uso en simulaciones de Monte Carlo en Física. Se aprenderá a caracterizar series temporales estocásticas, y a discriminar la calidad de los diferentes algoritmos de Montecarlo atendiendo a dicha caracterización. Se considerarán algoritmos específicos para el estudio de sistemas de espines desordenados (simulated annealing, parallel tempering). Si el tiempo lo permite, se aplicarán esos algoritmos al estudio de algunas propiedades de los vidrios de espín.

Metodología:

Tras el correspondiente estudio de la bibliografía, se implementará de manera eficiente (en lenguaje C) los algoritmos de simulación y análisis de datos estudiados. Estos programas se utilizarán en simulaciones de Monte Carlo (unas 1000 horas de CPU), para obtener resultados de alta calidad estadística, que permitan una discusión detallada de la calidad de los diferentes algoritmos.

Bibliografía:

Alan Sokal, *Simulations of Statistical Mechanics Models* (Les Houches lecture, 2005) Daniel Amit and Víctor Martín Mayor, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, (third edition, 2005, World Scientific Singapore).

E. Marinari, J.J. Ruiz Lorenzo and G. Parisi en *Spin glasses and Random Fields,* Ed.. Peter Young (World Scientific Singapore, 1998).

L.A. Fernández, E. Marinari, V. Martín-Mayor, G. Parisi, D. Yllanes, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, **12**, 123301 (2016).



GRADO EN FÍSICA curso 2023-24



Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica	
Título:	Integrabilidad, caos y entrelazamiento en sistemas cuánticos	
Title:	Integrability, chaos and entanglement in quantum systems	
Supervisor/es:	Federico Finkel Morgenstern y Artemio González López	
E-mail supervisor/es	ffm@ucm.es, artemio@ucm.es	
Número de plazas:	2	
Asignación de TFG:	Selección directa	Selección por expediente

Objetivos:

En este tema se abordan distintas cuestiones relacionadas con las nociones de solubilidad, integrabilidad y caos y propiedades de entrelazamiento en sistemas cuánticos. Dada la amplitud del tema, se procurará adaptar el trabajo propuesto a la formación y los intereses del alumno. Más concretamente, se pretende que el alumno alcance alguno de los siguientes objetivos:

- Estudiar las propiedades fundamentales de los modelos cuánticos integrables de muchos cuerpos de tipo Calogero–Sutherland, y su relación con cadenas de espines solubles con interacciones de largo alcance.
- Aprender los conceptos básicos de la teoría de matrices aleatorias y su aplicación en la determinación del comportamiento integrable/caótico de los sistemas cuánticos.
- Entender la definición de la entropía de entrelazamiento en un sistema cuántico, y evaluarla para alguna cadena de espines integrable sencilla (por ejemplo, el modelo de Heisenberg de tipo XX).

Metodología:

Lectura de capítulos de libros y/o artículos científicos introductorios relacionados con los objetivos propuestos (ver Bibliografía). En algunos casos, se pedirá que el alumno realice algún cálculo, comprobación o simulación utilizando el programa de cálculo simbólico *Mathematica*.

Bibliografía:

 J.C. Barba, F. Finkel, A. González-López, M.A. Rodríguez, The Berry-Tabor conjecture for spin chains of Haldane-Shastry type, *Europhys. Lett.* 83, 27005 (2008).

- J.A. Carrasco, F. Finkel, A. González-López, M.A. Rodríguez, Supersymmetric spin chains with nonmonotonic dispersion relation: Criticality and entanglement entropy, *Phys. Rev. E* 93, 155154 (2016).
- F. Finkel, A. González-López, Global properties of the spectrum of the Haldane-Shastry spin chain, *Phys. Rev. B* 72, 174411 (2005).
- P. J. Forrester, *Log-gases and Random Matrices*, Princeton University Press, 2010.
- J. I. Latorre, A. Riera, A short review on entanglement in quantum spin systems, J. Phys. A: Math. Theor. 42, 504002 (2009).
- M. L. Mehta, *Random Matrices*, Elsevier, 2010.
- M. A. Nielsen, I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, 10th anniversary ed., Cambridge University Press, 2010.
- A. P. Polychronakos, The physics and mathematics of Calogero particles, J. Phys. A 39, 12793 (2006).
- H.J. Stöckmann, Quantum Chaos. An Introduction, Cambridge University Press, 1999.
- B. Sutherland, *Beautiful Models. 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-Body Problems*, World Scientific, 2004.







Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica	
Título:	Lentes gravitacionales y halos galácticos	
Title:	Gravitational lenses and galactic haloes	
Supervisor/es:	Felipe J. Llanes Estrada	
E-mail supervisor/es	fllanes@ucm.es	
Número de plazas:	1	
Asignación de TFG:	Selección directa	Selección por expediente

Objetivos:

Comprender la desviación gravitacional de la luz y su uso para revelar campos gravitatorios cuya fuente no se conozca, presumiblemente, halos de materia oscura. Ser capaz de extraer características básicas de esos halos.

Metodología:

El alumno(a) estudiará la desviación de la luz en un campo esférico, y a continuación el trabajo de Turyshev y Toth sobre la deflexión en un campo sin esa simetría. Estudiará el trazado de rayos y la dependencia con la forma del campo gravitatorio de las imágenes obtenidas de las fuentes en el fondo; con el perfil de densidad de la lente, etc. Aplicará la teoría conocida al caso concreto de una galaxia típica como Andrómeda o la Vía Láctea.

La memoria del trabajo estará escrita en registro académico libre de faltas gramaticales o de ortografía.

Asignaturas (orientativamente) más relevantes: Óptica, Mecánica clásica, Relatividad General, Cosmología, Física Computacional.

- 1) Cosmology, Steven Weinberg, Oxford University Press, 2008.
- 2) S. Turyshev y V. Toth, Phys. Rev. D 105 024022 (2022).
- 3) A. Bariego-Quintana et. al. Phys. ReV. D **107** 083524 (2023).
- 4) The Elements of Style, de William Strunk JR. y E.B. White, Guía para escribir de manera clara y concisa un trabajo universitario.



GRADO EN FÍSICA curso 2023-24



Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica	
Título:	Resonancias con varios quarks pesados	
Title:	Resonances with several heavy quarks	
Supervisor/es:	Felipe J. Llanes Estrada	
E-mail supervisor/es	fllanes@ucm.es	
Número de plazas:	3	
Asignación de TFG:	Selección directa $oximes$	Selección por expediente \Box

Objetivos:

Comprender (a) el método básico de Hartree-Fock en teoría de muchos cuerpos y (b) las interacciones entre quarks t o entre quarks c, b en el modelo estándar y extensiones sencillas.

Ser capaz de decidir críticamente cuándo varios quarks (o quarks-antiquarks) forman un estado resonante detectable.

Metodología:

El alumno(a) realizará un cálculo numérico de Hartree-Fock incorporando las interacciones del modelo estándar entre quarks pesados (la teoría efectiva pNRQCD en todos los casos, y además, el intercambio de un bosón de Higgs en el caso de los quarks top). A continuación probará a variar la interacción dentro de lo permitido por la teoría HEFT que extiende el modelo estándar y estudiará someramente (1) la detectabilidad de los posibles estados resonantes en los distintos sectores, y (2) la máxima separación del modelo estándar que permitiría la no detección de un estado resonante multi-t.

Se anima a la colaboración en equipo, pero cada memoria reflejará los aspectos del estudio propios, será individual y escrita en registro académico libre de faltas gramaticales o de ortografía.

Asignaturas (orientativamente) más relevantes: Estructura de la Materia, Mecánica Cuántica, Partículas Elementales, Campos Cuánticos, Física Atómica y Molecular, Física Computacional.

- 1) M.Kuchiev, V.Flambaum y E.Shuryak, *Phys.Rev.D* **78** (2008) 077502
- 2) Jos Thijssen, "Computational Physics", Cambridge University Press 2012
- 3) https://arxiv.org/abs/2303.15061 (Observación exptal. de 4 quarks t)
- 4) F.Llanes Estrada, O.Pavlova, R.Williams Eur.Phys.J.C 72 (2012) 2019
- 5) The Elements of Style, de William Strunk JR. y E.B. White, Guía para escribir de manera clara y concisa un trabajo universitario.



GRADO EN FÍSICA curso 2023-24



Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física teórica	
Título:	Un modelo generativo con varias capas ocultas	
Title:	A generative model with various hidden layers	
Supervisor/es:	Aurélien Decelle	
E-mail supervisor/es	adecelle@ucm.es	
Número de plazas:	1	
Asignación de TFG:	Selección directa	Selección por expediente

Objetivos:

Entender y reproducir un modelo de red de neuronas generativo basado en modelo de Ising, la "Deep-Boltzmann Machine". Este modelo permite generar muestras estadísticamente similares a un conjunto de datos. En este TFG, se estudiará este modelo con dos capas ocultas y se implementará un programa python para realizar el aprendizaje. Se explorará también el efecto de añadir más capas ocultas al modelo en la calidad de las muestras producidas y se estudiarán los efectos de equilibrio/no equilibrio en el entrenamiento.

Metodología:

El/la estudiante tendrá que estudiar los principios básicos del aprendizaje automático, con un especial enfoque en los modelos generativos, las máquinas de Boltzmann en particular. Deberá ser capaz de implementar computacionalmente un entrenamiento del modelo usando python y aplicarlo al estudio de bases de datos reales. El/la estudiante tendrá que entender la parte teórica del modelo y su relación con la física estadística y el diagrama de fase del modelo.

El/la estudiante tendrá que caracterizar la máquina entrenada: como crece el tiempo de relajación del modelo en función del aprendizaje, y mirar como las propiedades de este pueden afectar a la calidad de la generación de datos sintéticos con la máquina entrenada.

- [1] Restricted Boltzmann machine: Recent advances and mean-field theory, Decelle et al.
- [2] Equilibrium and non-equilibrium regimes in the learning of restricted **Boltzmann machines**, Decelle et al.
- [2] Statistical-mechanical study of deep Boltzmann machine given weight parameters after training by singular value decomposition, Ichikawa et al.







Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica		
Título:	Ondas en el agua	Ondas en el agua	
Title:	Water Waves		
Supervisor/es:	Manuel Mañas Baena		
E-mail supervisor/es	manuel.manas@ucm.es		
Número de plazas:	2		
Asignación de TFG:	Selección directa 🗵	Selección por expediente	

Objetivos:

Entender los principios físicos y técnicas matemáticas para la descripción y análisis de las ondas en el agua.

Metodología:

Para las ecuaciones de Euler para un fluido ideal irrotacional se considera un problema de frontera libre para la ola en el agua. Aplicando técnicas de escalas múltiples se deriva la ecuación de Korteweg-de Vries para ondas longitudinales en aguas someras, y la ecuación de Kadomtsev-Petviashvili para el caso en que se permita una transversalidad débil. Estudio del caso de aguas profundas y la ecuación de Schrödinger no lineal.

La metodología es el estudio de temas seleccionada de la bibliografía y búsqueda bibliográfica adicional.

- Mark J. Ablowitz, Nonlinear Dispersive Waves. Cambridge University Press (2011).
- R. S. Johnson, A Modern Introduction to the Mathematical Theory of Water Waves, Cambridge University Press (1997).
- G. K. Batchelor, An Introduction to Fluid Dynamics, Cambridge University Press (2007).
- Sir Horace Lamb, Hydrodynamics, Dover (1945).







Ficha de Trabajo de Fin de Grado

Departamento:	Física Teórica	
Título:	Efecto de curvatura y alineación en materia activa	
Title:	Curvature and alignment effects in active matter systems	
Supervisor/es:	Daniel Alejandro Matoz Fernandez	
E-mail supervisor/es	dmatoz@ucm.es	
Número de plazas:	2	
Asignación de TFG:	Selección directa	Selección por expediente 🗵

Objetivos:

- -Estudiar cómo sistemas de materia activa tales como insectos, células y baterías se comportan en presencia de curvatura.
- -Usando high-performance-computing analizar cómo los diferentes mecanismo de alineación entre partículas afectan al comportamiento colectivo de agentes en presencia de curvatura.
- -Desarrollar nuevos métodos numéricos para estudiar el comportamiento de sistemas activos en espacios curvados
- -Extender teoría de Toner-Tu a espacios curvados.

Metodología:

El alumno se familiarizará con el problema a través de la lectura de artículos científicos introductorios relacionados con los objetivos propuestos. El trabajo incluirá una reseña bibliográfica de los trabajos de materia activa y su relación con sistemas biológicos. El trabajo incluirá ejercicios con simulaciones computacionales que el alumno deberá realizar (se proveerá el código fuente).

- M. C. Marchetti, et al. Rev. Mod. Phys. **85**, 1143 2013
- John Toner and Yuhai Tu Phys. Rev. E 58, 4828 -1998
- Silke Henkes, et al. Phys. Rev. E 97, 042605 2018
- Suraj Shankar, et al. Phys. Rev. X 7, 031039 -2017
- The Geometry of Physics, Frankel Theodore, Cambridge University Press
- D A Matoz-Fernandez et al. Soft Matter, 19, 2297-2310-2023