



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: *Introducción a Redes Neuronales y Aprendizaje por Refuerzo*

Clave: Semestre: 2026-1 Campo de conocimiento: Química No. Créditos: 6

Carácter: Optativa de elección	Horas por semana		Total horas/ semana	Total horas/ semestre
	Teoría:	Práctica:	3	48

Tipo: Curso	Teoría:	Práctica:	3	48
	28	20		

Modalidad: Teórica/Numérico Duración del programa: 16 semanas

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica

Objetivo general:
El alumnado aprenderá los fundamentos e implementación, así como la intuición detrás de las redes neuronales (RN) y a usar estas en el contexto de aprendizaje por refuerzo (RL, Reinforcement Learning), además de aprender a aplicar estas técnicas en el contexto de problemas de estructura electrónica, en particular usando Monte Carlo Variacional Cuántico.

Objetivos específicos:

1. Entender los fundamentos e intuición detrás de las redes neuronales y el aprendizaje por refuerzo.
2. Aprender a programar y entrenar dichos modelos.
3. Realizar simulaciones de Monte Carlo de sistemas de electrones con ansatz basados en redes neuronales.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Machine Learning y bases de datos	6	1
2	Redes Neuronales	9	5
3	Introducción al problema de Reinforcement Learning	3	3
4	Procesos de Decisión de Markov finitos	3	1
5	Aprendizaje de Diferencia Temporal	6	8
6	Aplicaciones en Monte Carlo Variacional Cuántico	2	2
Total de horas teóricas:		28	
Total de horas prácticas:		20	
Suma total de horas:		48	

Contenido Temático	
Unidad 1	<i>Machine Learning y bases de datos</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-capas
2.3	El teorema de aproximación universal
2.4	RN completamente conectadas
2.5	Entrenamiento de redes neuronales
2.6	Tipos de redes neuronales
Unidad 3	<i>Introducción al problema de Reinforcement Learning</i>
3.1	Definición del problema
3.2	Ejemplos
3.3	Definición de conceptos clave (agente, ambiente, recompensa, estado, etc)
3.4	Ejemplo extendido (Ej. juego del gato, equilibrar pesa, etc)

Unidad 4	<i>Procesos de Decisión de Markov finitos</i>
4.1	Agente, Ambiente, Metas y Recompensas
4.2	Tareas continuas y episódicas, políticas y funciones de valor
4.3	Ecuaciones de Bellman, Optimalidad y aproximaciones
4.4	Programación Dinámica
4.5	Evaluación de política
4.6	programación dinámica asíncron
Unidad 5	<i>Aprendizaje de Diferencia Temporal</i>
5.1	Predicción TD
5.2	SARSA
5.3	Q-Learning
5.4	Expected SARSA
5.5	Métodos Monte Carlo
5.6	Predicción, estimación y control de Monte Carlo
Unidad 6	<i>Aplicaciones en Monte Carlo Variacional Cuántico</i>
6.1	Planteamiento del problema
6.2	Sistemas de dos electrones
6.3	Moléculas diatómicas

Bibliografía básica actualizada:

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. *Reinforcement Learning. An Introduction*. R.S Sutton and A.G. Barto. MIT Press Segunda edición (2018)

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).

Sugerencias didácticas:

Exposición oral	(X)
Exposición audiovisual	(X)
Ejercicios dentro de clase	(X)
Ejercicios fuera del aula	()
Seminarios	(X)
Lecturas obligatorias	(X)
Trabajo de investigación	(X)
Prácticas de taller o laboratorio	()
Prácticas de campo	()
Otras: _____	()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	(X)
Examen final escrito	()
Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Exposición de seminarios por los alumnos	(X)
Participación en clase	(X)
Asistencia	()
Seminario	()
Otras:	()