

Propuesta de Trabajos Fin de Grado, curso académico 2019-20

PROFESOR/A: Florentino Borondo y Jezabel Curbelo

1.- TÍTULO: Espacios de fase en dinámica molecular

Resumen/contenido: La teoría de sistemas dinámicos [1] nos permite entender la dinámica de las reacciones químicas [2] desde un punto de vista geométrico, buscando variedades invariantes. El objetivo de este TFG es realizar una revisión bibliográfica del tema.

Bibliografía/referencias:

[1] Stephen Wiggins : Introduction To Applied Nonlinear Dynamical Systems And Chaos, Springer (2003).

[2] Thomas Bartsch, Jeremy M. Moix, Rigoberto Hernandez, Shinnosuke Kawai, and Turgay Uzer. Time-dependent transition state theory. Adv. Chem. Phys.140, 191–238 (2008).

2.- TÍTULO: Deep learning para ecuaciones en derivadas parciales

Resumen/contenido: Muchos fenómenos naturales se modelan utilizando ecuaciones en derivadas parciales (EDP) que en la mayoría de los casos, son difíciles de resolver [2]. El objetivo de este TFG es describir cómo usar “Deep learning” para resolver EDP [1], revisando sus conceptos básicos [3].

Bibliografía/referencias:

[1] Jiequn Han, Arnulf Jentzen, Weinan E (2018) Solving high-dimensional partial differential equations using deep learning. PNAS 115 (34) 8505-8510

<https://doi.org/10.1073/pnas.1718942115>

[2] Evans, L. C. “Partial differential equations”. Second edition. Graduate Studies in Mathematics, 19. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.

[3] Goodfellow I, Bengio Y, Courville A (2016) Deep Learning (MIT Press, Cambridge, MA)