

Title: Inferencia de acoplamientos efectivos a partir de redes neuronales

Alfonso de Jesús Navas Gómez, Universidad Complutense de Madrid

Seminario de Física Teórica. Física. Edificio B

Viernes 29 de mayo de 2026. 12.00 h

Abstract:

Los métodos de máxima entropía, arraigados en el problema inverso de Ising/Potts de la física estadística, han sido fundamentales para inferir modelos de interacciones entre pares en sistemas complejos. Estos modelos han encontrado aplicaciones de gran impacto en campos como la bioinformática, donde se utilizan para inferir contactos estructurales entre proteínas, y en la neurociencia, para describir patrones de actividad neuronal. A pesar de su considerable éxito, estos enfoques no logran capturar interacciones de orden superior que podrían ser cruciales para una descripción completa del comportamiento colectivo. En contraste, los métodos modernos de aprendizaje automático pueden modelar dichas interacciones, pero su interpretabilidad suele conllevar un costo computacional prohibitivo. Las máquinas de Boltzmann restringidas (RBMs) ofrecen una alternativa computacionalmente eficiente para codificar correlaciones estadísticas mediante unidades ocultas en una arquitectura bipartita. En esta charla, introducimos un método que mapea las RBMs sobre modelos de Potts generalizados, lo que permite extraer interacciones de un orden arbitrario. En general, se presentará un marco robusto para recuperar interacciones de orden superior en modelos generativos más complejos. La validación con datos sintéticos demuestra una recuperación precisa de las interacciones de dos y tres cuerpos. Aplicado a datos de secuencias de proteínas, nuestro método reconstruye mapas de contacto con alta fidelidad y supera a los modelos inversos de Potts de última generación. Estos resultados establecen las RBMs como una herramienta poderosa y eficiente para modelar estructuras de orden superior en datos categóricos de alta dimensionalidad.

[1] Decelle, A., Furtlehner, C., Navas Gómez, A. D. J., & Seoane, B. (2024). Inferring effective couplings with restricted Boltzmann machines. *SciPost Physics*, 16(4), 095

[2] Decelle, A., Navas Gómez, A. D. J., & Seoane, B. (2025). Inferring Higher-Order Couplings with Neural Networks. *Physical Review Letters*, 135(20), 207301