

# Tabla de Contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Objetivos . . . . .	1
1.3. Alcances . . . . .	2
1.4. Recursos disponibles . . . . .	2
<b>2. Antecedentes</b>	<b>3</b>
2.1. Materiales Celulares . . . . .	3
2.2. Paneles Sándwich . . . . .	4
2.3. Cristales Fonónicos . . . . .	5
2.4. Band Gaps Fonónicos . . . . .	6
2.5. Aprendizaje de Máquinas . . . . .	7
2.5.1. Aprendizaje supervisado . . . . .	7
2.5.2. Métodos de Regresión . . . . .	7
2.5.2.1. Support Vector Regression . . . . .	7
2.5.2.2. Gaussian Process Regression . . . . .	8
2.5.3. Métricas de evaluación . . . . .	9
2.5.3.1. Coeficiente de determinación . . . . .	9
2.5.3.2. Raíz del error cuadrático medio . . . . .	9
2.5.4. Selección de hiperparámetros . . . . .	9
<b>3. Formulación</b>	<b>10</b>
3.1. Estructuras . . . . .	10
3.1.1. Pirámide Cuadrada . . . . .	11
3.1.2. Kagome Tridimensional . . . . .	13
3.1.3. Pirámide Central . . . . .	15
3.2. Cálculo de características del Band Gap . . . . .	17
<b>4. Metodología</b>	<b>18</b>
4.1. Base de datos . . . . .	18
4.2. Enfoques . . . . .	19
4.2.1. Enfoque I: Un modelo para cada estructura . . . . .	20
4.2.2. Enfoque II: Un modelo por cada banda . . . . .	20
4.2.3. Enfoque III: Predicción directa de band gap . . . . .	20
4.3. Preproceso de datos . . . . .	20
4.4. División de base de datos . . . . .	21
4.5. Selección de hiperparámetros . . . . .	21
4.5.1. SVR . . . . .	21

4.5.2. GPR . . . . .	21
4.6. Positividad del dataset . . . . .	22
<b>5. Resultados</b>	<b>23</b>
5.1. Enfoque I . . . . .	24
5.2. Enfoque II . . . . .	26
5.2.1. Estructura pirámide cuadrada . . . . .	26
5.2.2. Estructura kagome . . . . .	27
5.2.3. Estructura pirámide central . . . . .	27
5.3. Enfoque III . . . . .	29
5.3.1. Estructura pirámide cuadrada . . . . .	29
5.3.2. Estructura kagome . . . . .	30
5.3.3. Estructura pirámide central . . . . .	31
5.4. Selección de hiperparámetros . . . . .	32
5.5. Positividad en datasets . . . . .	32
<b>6. Discusión</b>	<b>34</b>
6.1. Sobre el enfoque I . . . . .	34
6.2. Sobre el enfoque II . . . . .	34
6.3. Sobre el enfoque III . . . . .	35
6.4. Sobre la selección de hiperparámetros . . . . .	35
6.5. Comparación de enfoques . . . . .	35
6.6. Sobre la positividad en datasets . . . . .	36
<b>7. Conclusión</b>	<b>37</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>38</b>
<b>Anexo A. Resultados gridsearch</b>	<b>40</b>
A.1. SVR . . . . .	40
A.2. GPR . . . . .	43
<b>Anexo B. Códigos</b>	<b>45</b>
B.1. Códigos análisis positividad . . . . .	45
B.2. Códigos gridsearch . . . . .	57