

Tabla de contenido

Capítulo 1 Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.1.1. Objetivo general.....	2
1.1.2. Objetivos específicos.....	2
1.2. Alcances.....	2
Capítulo 2 Antecedentes	4
2.1. Materiales celulares	4
2.1.1. Paneles tipo sándwich	5
2.1.2. Band Gaps.....	7
2.2. Aprendizaje de máquinas.....	8
2.2.1. K-Vecinos más Cercanos	9
2.2.2. Redes Neuronales Artificiales.....	10
2.2.3. Estandarización de datos	11
2.2.4. Ajustes de hiperparámetros.....	11
2.2.5. Métricas de evaluación	12
Capítulo 3 Aproximación al problema.....	13
3.1. Estructuras utilizadas	13
3.1.1. Caracterización de los datos	15
3.2. Cálculo de band gap	17

Capítulo 4 Metodología	20
4.1. Enfoques de resolución.....	20
4.2. Inspección de datos	21
4.3. Procedimiento	24
4.3.1. Preprocesamiento.....	25
4.3.2. Implementación y ajuste de modelos.....	25
4.3.3. Predicción y posprocesamiento	25
4.3.4. Evaluación	26
4.4. Modificación de la proporción de datos con band gap	27
Capítulo 5 Resultados	28
5.1. Enfoque 1	29
5.2. Enfoque 2.....	31
5.3. Variación de la proporción de muestras con band gap	33
Capítulo 6 Análisis y discusión	36
Capítulo 7 Conclusión	39
Bibliografía	41
Anexos	43
Anexo A Gráficos para la inspección de datos	43
A.1 Histogramas de valores mínimos y máximos de bandas	44
A.2 Histogramas de bandas que producen band gaps	52
A.3 Histogramas de frecuencia media y ancho de band gaps positivos.....	53
A.4 Histogramas de frecuencia media y ancho de band gaps negativos y nulos	54
Anexo B Códigos.....	55
B.1 Código enfoque 1	56

B.2	Código enfoque 2.....	61
B.3	Código variación proporción de band gaps.....	65
Anexo C Hiperparámetros seleccionados		68
C.1	Hiperparámetros del enfoque 1	68
C.2	Hiperparámetros del enfoque 2.....	69
Anexo D Gráficos de los resultados		70
D.1	Enfoque 1	71
D.2	Enfoque 2.....	77
D.3	<i>R2</i> y <i>MAE</i>	83