



# Seminario de Estudiantes 2018-B

*Invita a la plática:*

**“Machine Learning en Ciencia de Materiales.”**

Presenta

**\*M.C. Jesús Andrés Arzola Flores**

Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas” (BUAP)

## RESUMEN

La inteligencia artificial (IA) es una rama de la informática enfocada en el desarrollo de algoritmos matemáticos y computacionales capaces de imitar comportamientos inteligentes. Dentro del campo de la IA se encuentran áreas como la robótica, procesamiento de lenguaje natural (NLP), reconocimiento de patrones (imágenes y voz), etc. Por otro lado, Machine Learning es una rama de la IA, que busca dotar a los algoritmos computacionales de capacidad de aprendizaje, entendiendo el aprendizaje, como la generación de conocimiento a partir de un conjunto de experiencias (datos). Este aprendizaje puede dividirse en tres grupos distintos, aprendizaje supervisado, no supervisado y profundo o reforzado (deep learning).

Es bien conocido que es posible utilizar modelos basados en primeros principios, como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para la predicción de ciertas propiedades de los materiales, sin embargo, en la mayoría de las ocasiones se requiere un gasto computacional elevado (Faber et al., (2016)). Hoy en día es posible utilizar algoritmos de Machine Learning que son capaces de predecir propiedades de los materiales con un gasto computacional mucho menor comparado con métodos basados en primeros principios (Ramprasad et al., (2017)). Además, también es posible entrenar algoritmos de aprendizaje supervisado que sirvan como herramienta de apoyo para el diseño de procedimientos experimentales, con la finalidad de optimizar recursos (Dieb & Tsuda (2018)).

En la presente plática se discutirá una herramienta complementaria a la aproximación de dipolo discreto (DDA) para la predicción de la resonancia del plasmón superficial localizada (LSPR) en nanopartículas de Au, empleando algoritmos de aprendizaje supervisado.

Fecha: **11 de Septiembre de 2018**

Lugar: **Auditorio del IFUAP**

Horario: **16:00 hrs.**

- \*email: [jarzola@ifuap.buap.mx](mailto:jarzola@ifuap.buap.mx)
- Contacto: [seminario\\_estudiantes@ifuap.buap.mx](mailto:seminario_estudiantes@ifuap.buap.mx)
- [www.ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.php](http://www.ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.php)
- <https://www.facebook.com/SE.IFUAP>