

Aprendizaje Automático e Inteligencia Artificial: Aplicación en el Descubrimiento de Materiales

Código: 45737

Créditos: 3

2026/2027

Titulación	Tipo	Curso
Nanociencia Aplicada: de Materiales a Dispositivos / Applied Nanoscience: From Materials to Devices	OP	1

Profesor/a de contacto

Nombre : Marta Gonzalez Silveira

Correo electrónico : marta.gonzalez@uab.cat

Equipo docente

Manel del Valle Zafra

Equipo docente (externo a la UAB)

Andrés Henao Aristizábal

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

Conocimiento de las características de los materiales y (recomendable) cierto conocimiento del lenguaje de programación Python, pero no esencial.

Objetivos

El presente curso tiene como objetivo:

- Introducir a los estudiantes en el aprendizaje automático para la modelización de las propiedades de los nanomateriales
- Familiarizarse con el análisis, la visualización y la modelización de datos de bases de datos de nanomateriales
- Introducir conceptos de minería de datos e inteligencia artificial en el contexto del descubrimiento de nuevos nanomateriales y la predicción de sus propiedades

Resultados de aprendizaje

- CA17 (Validar el reconocimiento de patrones, supervisado y no-supervisado, en el procesado y análisis de imágenes.) Validar el reconocimiento de patrones, supervisado y no-supervisado, en el procesado y análisis de imágenes.
- KA15 (Reconocer las herramientas apropiadas en la determinación de propiedades de nanomateriales funcionales.) Reconocer las herramientas apropiadas en la determinación de propiedades de nanomateriales funcionales.
- KA16 (Identificar el uso de enfoques genéricos no supervisados en la determinación de parámetros específicos de los nanomateriales.) Identificar el uso de enfoques genéricos no supervisados en la determinación de parámetros específicos de los nanomateriales.
- SA19 (Utilizar herramientas estándar de aprendizaje automático en la implantación de un modelo de regresión múltiple para diferentes cantidades que permita generar parámetros para diferentes tipos de nanomateriales.) Utilizar herramientas estándar de aprendizaje automático en la implantación de un modelo de regresión múltiple para diferentes cantidades que permita generar parámetros para diferentes tipos de nanomateriales.
- SA20 (Analizar grandes volúmenes de datos de materiales usando diferentes bases de datos.) Analizar grandes volúmenes de datos de materiales usando diferentes bases de datos.
- SA21 (Interpretar las capacidades de las técnicas de aprendizaje automático y sus limitaciones fundamentales en función de los términos que el modelo incorpora.) Interpretar las capacidades de las técnicas de aprendizaje automático y sus limitaciones fundamentales en función de los términos que el modelo incorpora.

Contenidos

El temario de la asignatura está subdividido en las lecciones:

1. Introducción al aprendizaje automático para la nanociencia y los nanomateriales.
2. Herramientas para la predicción de las propiedades de los materiales. Algoritmos de regresión multivariante. QSAR.
3. Reconocimiento de Patrones: aprendizaje no supervisado para la clasificación de materiales. Análisis de componentes principales. K-means.
4. Aprendizaje supervisado. Algoritmos de clasificación. Árboles de decisión y bases de datos y visualización. Uso de APIs de Python para la minería de datos.
5. Uso de la base de datos Computational 2D Materials (C2DB).
6. La base de datos del proyecto Materials. Herramientas de análisis para inspirar y diseñar nuevos materiales.
7. La base de datos Jarvis. Una infraestructura diseñada para automatizar el descubrimiento y optimización de materiales.
8. Optimización e interpretación de los modelos obtenidos. Ajuste de hiperparámetros y exploración de los factores de influencia mediante SHAP.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Entrega colaborativa del caso de estudio final	25	1	CA17, SA20, SA21
Lecciones teóricas	8	0,32	KA15, SA21
Sesiones de problemas y prácticas	10	0,4	CA17, KA16, SA19, SA20
Entregas individuales de casos prácticos	30	1,2	CA17, KA15, KA16, SA19, SA20

Los contenidos de la asignatura se impartirán mediante presentaciones a cargo de los profesores asignados y

actividades prácticas en el aula de informática de la Facultad de Ciencias, bajo la supervisión de los instructores. Las diapositivas de las presentaciones estarán disponibles en la página de Moodle del curso. A lo largo de la asignatura, los estudiantes profundizarán en la materia mediante trabajos individuales centrados en el descubrimiento de materiales y la predicción de algunas de sus características y propiedades específicas, seleccionados a partir de una lista de casos de estudio de acceso público. Se prestará especial atención a la práctica de la minería de datos utilizando bases de datos consolidadas en el campo. Un caso de mayor complejidad, desarrollado de forma colaborativa -por ejemplo, en parejas-, permitirá adquirir una perspectiva global y aplicar las competencias adquiridas.

Uso de la IA

Para esta asignatura, se permite el uso de tecnologías de Inteligencia Artificial (IA) exclusivamente en labores de soporte, como la búsqueda bibliográfica o de información, la corrección de textos o las traducciones. En caso de que se utilice la IA, el estudiante deberá identificar claramente qué partes han sido generadas con esta tecnología, especificar las herramientas empleadas e incluir una reflexión crítica sobre cómo éstas han influido en el proceso y el resultado final de la actividad. La no transparencia en el uso de la IA en una actividad evaluable se considerará falta de honestidad académica y podrá acarrear una penalización parcial o total en la nota de la actividad.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Quizzes	30%	1	0,04	CA17, KA15, KA16, SA19, SA21
Entregas individuales	30%	0,75	0,03	CA17, KA15, KA16, SA19, SA20, SA21
Entrega final	40%	0,25	0,01	CA17, KA15, KA16, SA19, SA20, SA21

La evaluación constará de los siguientes componentes:

- (i) Cuestionarios (preguntas de tipo test), utilizando el campus virtual - esto es para motivar a los estudiantes a repasar los conceptos (30%)
- (ii) 3 trabajos individuales (uno para cada una de las grandes bases de datos indicadas). Para entregar a través del campus virtual (30%)
- (iii) 1 trabajo final, de mayor alcance, realizado por parejas y que deberán defender oralmente (40%).

La realización de cualquier irregularidad en un acto de evaluación (fraude académico, plagio o uso indebido de la IA, salvo que este uso esté autorizado

expresamente en la guía docente), que pueda conducir a una variación significativa de la calificación, supone que este acto se calificará con un 0. En

en caso de que la guía docente prevea que para superar la asignatura sea requisito imprescindible haber obtenido una nota mínima en este acto de evaluación

o que se produzcan diversas irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de esta asignatura es 0. Al

margen de ello, se podrá instruir un proceso disciplinario al estudiante que incurra en alguna de estas irregularidades.

Bibliografía

Chris Albon, Machine learning with Python cookbook: practical solutions from preprocessing to deep learning

O'Reilly Media, 2018.

Eric Mathes, Python crash course : a hands-on, project-based introduction to programming.

No Starch Press, Inc., 2019.

Software

Python (v.3.14) y las correspondientes librerías y APIs necesarias para el desarrollo de los materiales.

El software para la realización de la asignatura estará disponible en el aula informática de la Facultad de Ciencias.

Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre. A partir de esta fecha, podrá consultar el idioma de cada grupo a través de este [enlace](#). Para acceder a la información, será necesario introducir el CÓDIGO de la asignatura

Tipo de docencia	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(TEEm) Teoría (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	tarde