

UNIVERSIDAD ABIERTA Y A DISTANCIA DE MÉXICO

DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERÍAS Y
TECNOLOGÍAS

Ingeniería en Desarrollo de Software

UNIDAD 2: EVIDENCIA DE APRENDIZAJE

*Requerimientos para diseñar
un programa orientado a
objetos*

Docente:

Martha Michaca Leano

Alumno:

A. Fernando Cisneros Gaytán

ES202113379

23 de Febrero de 2021

Índice general

Introducción	2
Entrevista	2
Especificación de Requerimientos	4
Funcionales	4
No Funcionales	4
Fases de Estandarización	4
Restricciones	4
Modelo de desarrollo de software	4
Bibliografía	4

Introducción

Machine Learning (ML) es una disciplina científica del ámbito de la inteligencia artificial que desarrolla sistemas basados en algoritmos que aprenden automáticamente a través del análisis de datos. Actualmente el campo de ML está tomando cada vez mayor relevancia debido al aumento exponencial de información accesible al investigador. En el campo de la ciencias naturales, específicamente en ciencia de los materiales esta información es generada mediante experimentos o cálculos computacionales. Desde hace algunos años existen bases de datos que contienen información sobre algunas de las propiedades de materiales obtenidas principalmente por cálculos cuánticos. Por ejemplo, *Aflow* cuenta en este momento con más de 3 millones de materiales catalogados mientras que *Materials Project* cuenta con casi 2 millones de materiales.

Por lo tanto, en este proyecto se propone desarrollar un software capaz de diseñar nuevos materiales usando técnicas de ML. Los modelos serán alimentados con la información almacenada en las diferentes bases de datos. La correcta selección de características o propiedades resulta ser un paso crucial al desarrollar algoritmos eficientes de ML con un alto poder predictivo. En cuanto a la aplicación de ML en el área de ciencia de materiales, los siguientes datos han demostrado ser determinantes en el diseño de nuevos materiales.

- Energía: Calculada mediante programas de estructura electrónica.
- Energía por átomo: Energía normalizada por átomo en la celda unitaria.
- Volumen: Volumen final del material.
- Densidad electrónica: Disposición de los electrones en el espacio tridimensional.
- Elementos: Arreglo de los elementos en el material.
- Estructural cristalina: Disposición geométrica de los átomos dentro de la celda unitaria.
- Cargas atómicas: Carga parcial de cada átomo.
- Densidad de Estados, Estructura de bandas y *band gap*: Propiedades electrónicas de los materiales.
- Momento magnético.
- Propiedades termodinámicas y elásticas.

Se espera que la aplicación pueda leer archivos en formato txt, csv y json y muestre los resultados en formato texto como gráfico.

Entrevista

La siguiente entrevista fue realizada al Dr. Andrés Garay Tapia del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV) Unidad Monterrey.

1. ¿Cuál es el problema a resolver?

Desarrollar un software que implemente modelos de Machine Learning de la categoría del Aprendizaje No Supervisado para diseñar nuevos materiales em-

pleados como cátodos en baterías de ion litio. El entrenamiento del modelo se realizará utilizando datos sobre las propiedades magnéticas, termodinámicas y especialmente sobre las electrónicas, tales como la densidad electrónica y las cargas atómicas.

2. ¿Qué información va a ser procesada?

Archivos txt, csv y json provenientes de las bases de datos que contengan información sobre propiedades de los materiales de interés.

3. ¿Deben guardarse los datos por algún periodo de tiempo?

Si, el cual estará en función de la capacidad de almacenamiento de la información.

4. ¿Bajo que sistema operativo debe funcionar el software?

De preferencia en sistemas GNU/Linux.

5. ¿Existen restricciones de la velocidad de ejecución, tiempo de respuesta o rendimiento?

De momento no, mientras el software sea capaz de hacer predicciones coherentes el tiempo no es factor.

6. ¿La aplicación puede integrarse a otros sistemas existentes?

Si, a nuestra base de datos donde esta almacenada la información sobre los estudios que hemos realizado recientemente.

7. ¿Se requiere alguna documentación?

Si, un manual de usuario.

8. ¿Cómo se distribuirá el software?

Como software libre

9. ¿Existen requisitos especiales sobre licenciamiento?

El sistema se registrará bajo las reglas de las licencias generales públicas (GNU), es decir será gratuito, código abierto en el que cualquiera podrá cambiar el software, sin patentes y sin garantías.

10. ¿Cuántos análisis se analizarán al día?

En promedio se espera que se realicen 50 análisis.

11. ¿Qué funcionalidades se desea que realice la aplicación? Principalmente la aplicación de modelos de Machine Learning a un conjunto de datos y la posterior visualización de los resultados de forma gráfica.

12. ¿Quiénes utilizarán el software desarrollado? Profesores y estudiantes.

13. ¿Cuál es el nivel de habilidad de cada tipo de usuario?

Los usuarios tendrán que tener conocimientos básicos en las áreas de estadística y probabilidad para obtener el mayor aprovechamiento de la aplicación.

14. ¿Cómo valoraría que la solución ha tenido éxito? Mientras que la aplicación sea capaz de reproducir resultados ya reportados con anterioridad indicará que es un sistema confiable para ser usado en la predicción de nuevos materiales o propiedades.

Especificación de Requerimientos

Funcionales

No Funcionales

Fases de Estandarización

Restricciones

Modelo de desarrollo de software

INEGI. Censo de Población y Vivienda 2010: Tabulados del Cuestionario Básico

Fecha de elaboración: 17/02/2011

Población total por municipio y edad desplegada según sexo

Población 3

Entidad federativa	Municipio	Edad desplegada	Población total¹	Sexo	
				Hombres	Mujeres
11 Guanajuato	Total	Total	5,486,372	2,639,425	2,846,947
11 Guanajuato	Total	0	104,937	53,225	51,712
11 Guanajuato	Total	01 años	105,898	53,870	52,028
11 Guanajuato	Total	02 años	111,810	56,617	55,193
11 Guanajuato	Total	03 años	112,048	56,450	55,598
11 Guanajuato	Total	04 años	112,773	57,098	55,675
11 Guanajuato	Total	05 años	112,917	57,499	55,418
11 Guanajuato	Total	06 años	114,237	57,989	56,248
11 Guanajuato	Total	07 años	114,512	57,631	56,881
11 Guanajuato	Total	08 años	117,644	60,026	57,618
11 Guanajuato	Total	09 años	119,811	60,552	59,259
11 Guanajuato	Total	10 años	123,007	62,473	60,534
11 Guanajuato	Total	11 años	112,989	57,022	55,967

Figura 1: Captura de pantalla de los datos recabados en el estado de Guanajuato por el INEGI.

Bibliografía

- Universidad Abierta y a Distancia de México (20 Febrero 2021). Reque-
rimientos para el análisis del diseño orientado a objetos. Recuperado de:
<https://campus.unadmexico.mx/>.