Análisis de nanopartículas — labkit

Predicción de toxicidad + optimización bayesiana

Generado: 2026-09-27 17:37

Contexto

Dataset: nanopartículas UCI (881 muestras, 5 tipos de NP, 9 features de síntesis).

Predicción de toxicidad

Random Forest con validación cruzada 5-fold. Accuracy media: 0.917 (±0.097).

Predictores más informativos

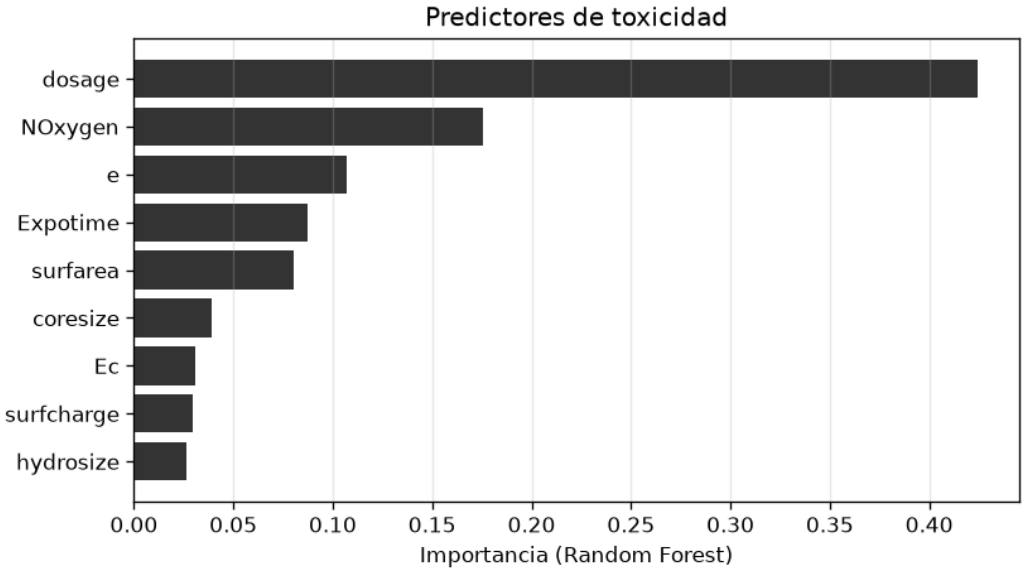
• dosage: 0.424

• NOxygen: 0.175

• e: 0.107

• Expotime: 0.088

• surfarea: 0.080



Optimización bayesiana (demo)

Ilustración con función sintética 4-D (fluencia + duración pulso + tasa repetición + velocidad escaneo). Convergencia en 30 experimentos, acquisition function = Expected Improvement.

Adaptación a datos experimentales reales del grupo requiere definir la función objetivo (tamaño NP medio, dispersión, rendimiento) a partir de mediciones concretas.

labkit — kit de análisis reproducible para grupos de investigación