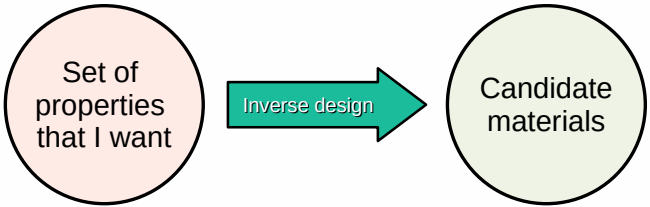
Descobrindo novos materiais usando Inteligência Artificial (e aprendendo algo novo no processo)

Daniel R. Cassar

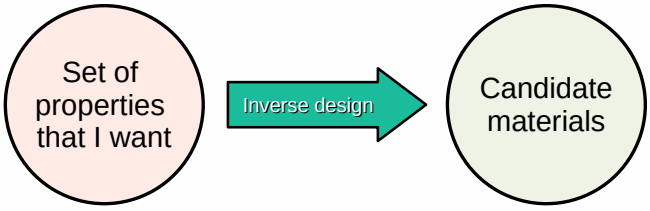
ilum escola de ciência
CNPEM
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÕES
GOVERNO FEDERAL
BRASIL
UNIÃO E RECONSTRUÇÃO

Modelos preditivos e projeto inverso



ilum escola de ciência

Modelos preditivos e projeto inverso

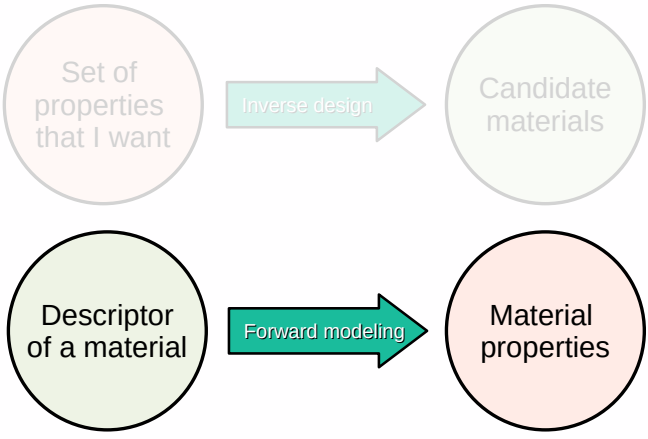


There are no physical models to solve the inverse design problem!

Solution: trial-and-error or optimization algorithms

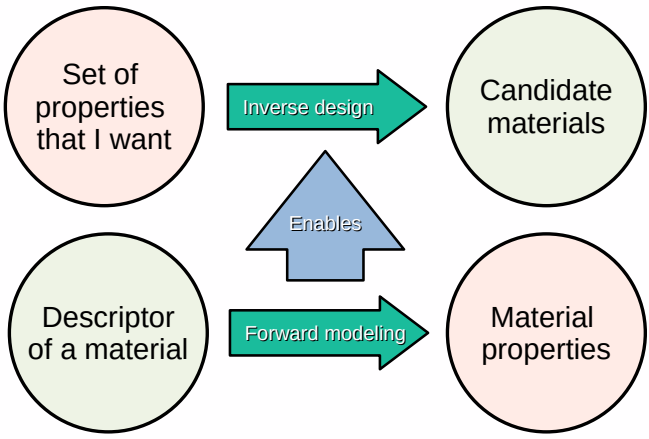
ilum escola de ciência

Modelos preditivos e projeto inverso



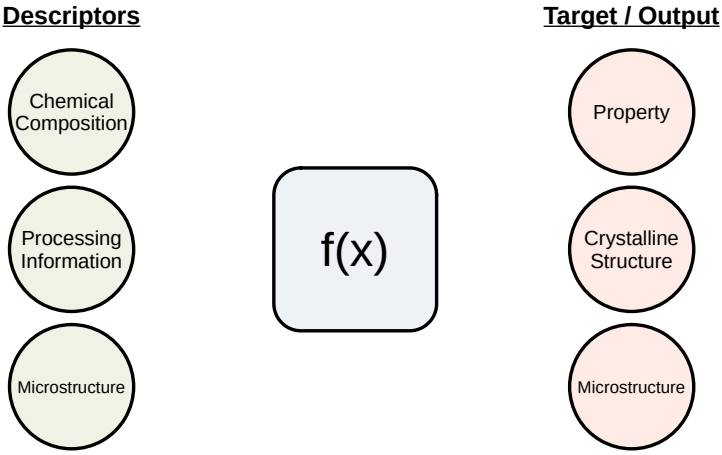
ilum escola de ciência

Modelos preditivos e projeto inverso



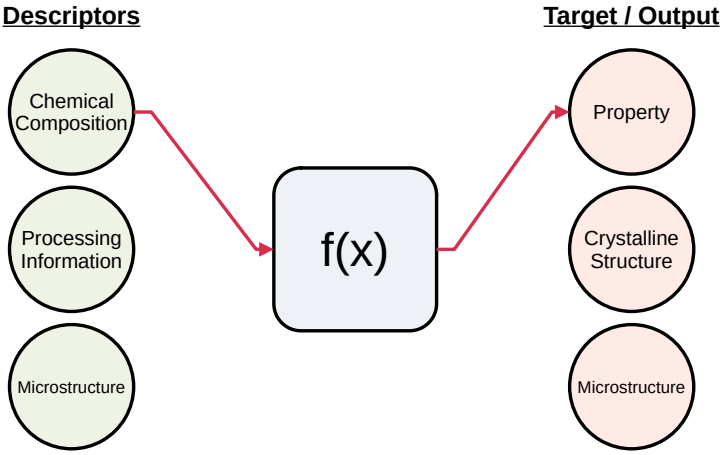
ilum escola de ciência

Modelos preditivos



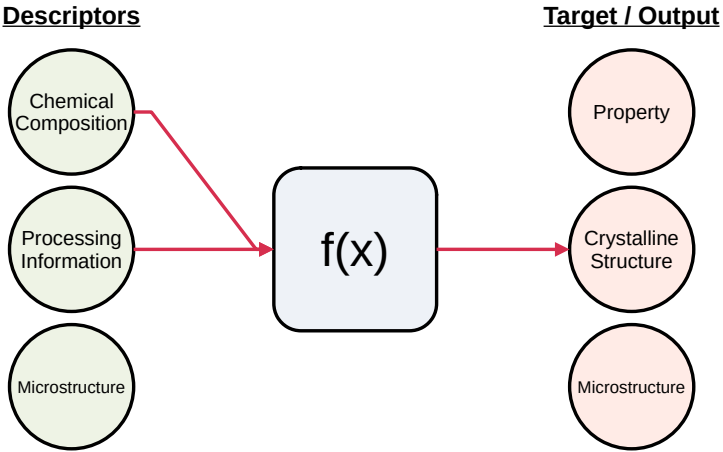
ilum escola de ciência

Modelos preditivos



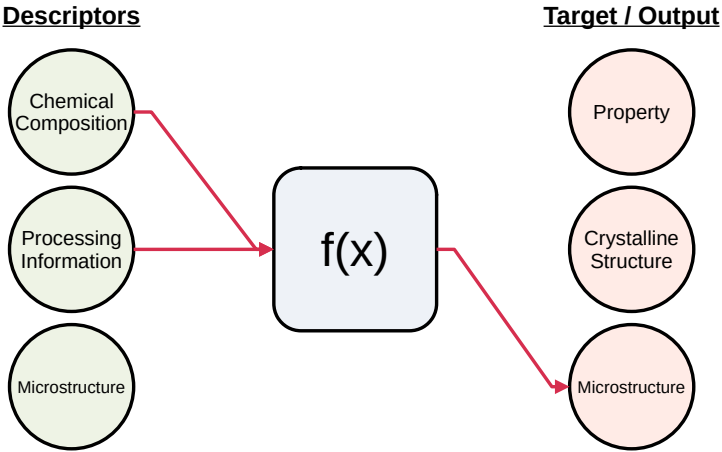
ilum escola de ciência

Modelos preditivos



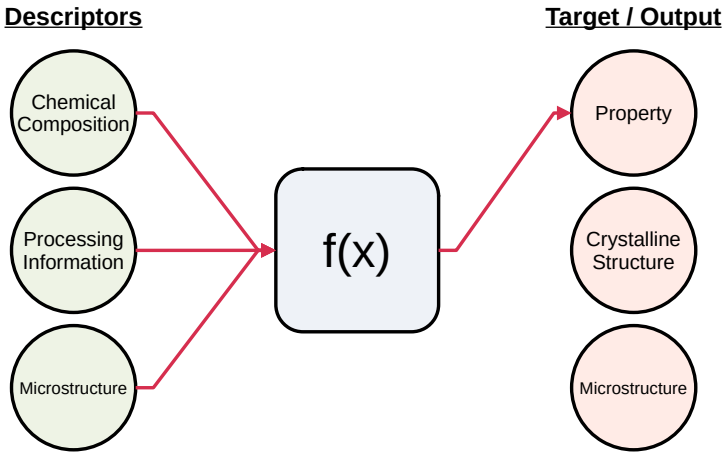
ilum escola de ciência

Modelos preditivos



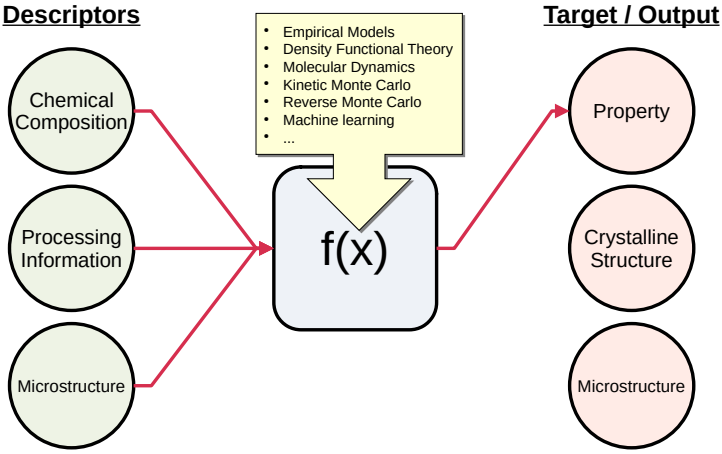
ilum escola de ciência

Modelos preditivos



ilum escola de ciência

Modelos preditivos

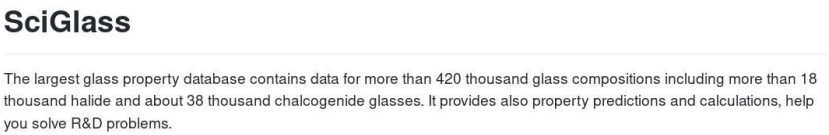


ilum escola de ciência

Para ter o modelo preditivo por ML, precisamos de dados!

ilum escola de ciência

Disponibilidade de dados — vidros inorgânicos

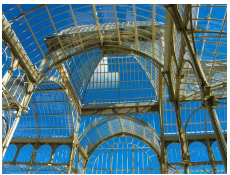


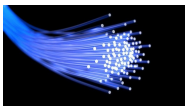
- Licença `Open Database`
- Mais de 10^5 entradas

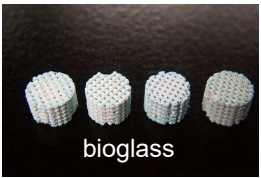
ilum escola de ciência

`https://github.com/epam/SciGlass`

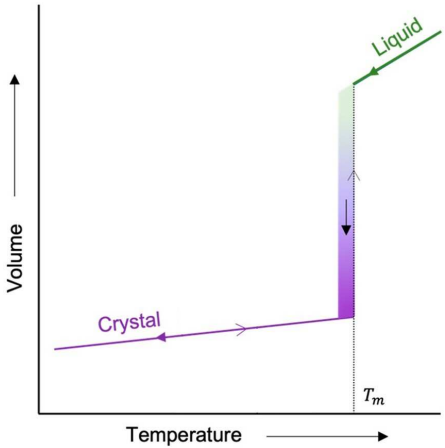
A presença dos vidros na sociedade







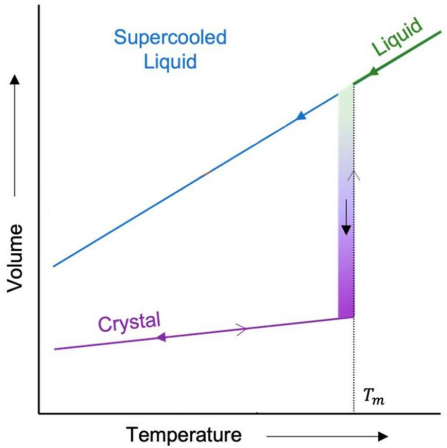
Formação de vidros



Kirchner, K.A. et al. Chemical Reviews 123, 1774–1840.

ilum escola de ciência

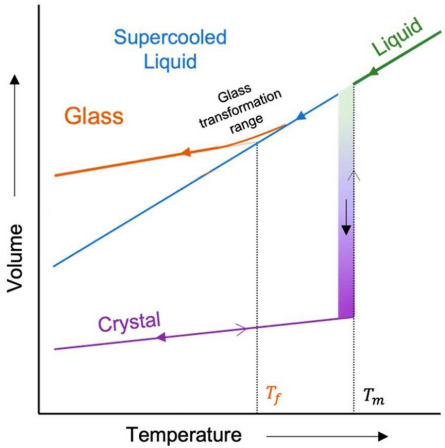
Formação de vidros



Kirchner, K.A. et al. Chemical Reviews 123, 1774–1840.

ilum escola de ciência

Formação de vidros

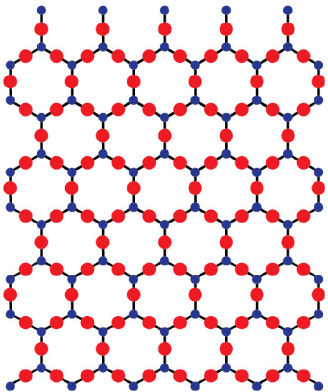


Kirchner, K.A. et al. Chemical Reviews 123, 1774–1840.

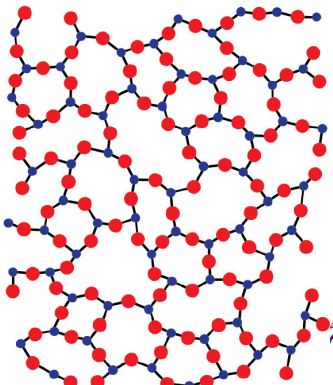
ilum escola de ciência

Estrutura atômica

Cristal



Vidro ou líquido



escola de ciência

Da composição à aplicação — ciência dos materiais

- **Composition**

- **Processing**

- **Structure**

- **Properties**

- **Application**

ilum escola de ciência

Da composição à aplicação — ciência dos materiais

- **Composition**
- **Processing**
- **Structure**
- **Properties**
- **Application**

How about Glasses?

ilum escola de ciência

Da composição à aplicação — ciência dos materiais

- **Composition**
- **Processing**
- **Structure**
- **Properties**
- **Application**

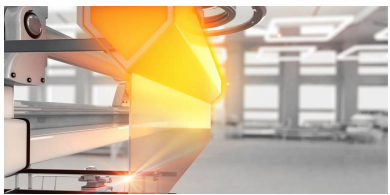
How about Glasses?

ilum escola de ciência

Da composição à aplicação — ciência dos materiais

- **Composition**
- **Processing**
- **Structure**
- **Properties**
- **Application**

How about Glasses?

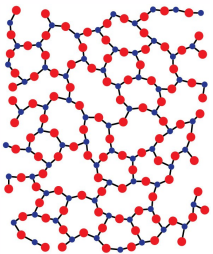


ilum escola de ciência

Da composição à aplicação — ciência dos materiais

- **Composition**
- **Processing**
- **Structure**
- **Properties**
- **Application**

How about Glasses?



ilum escola de ciência

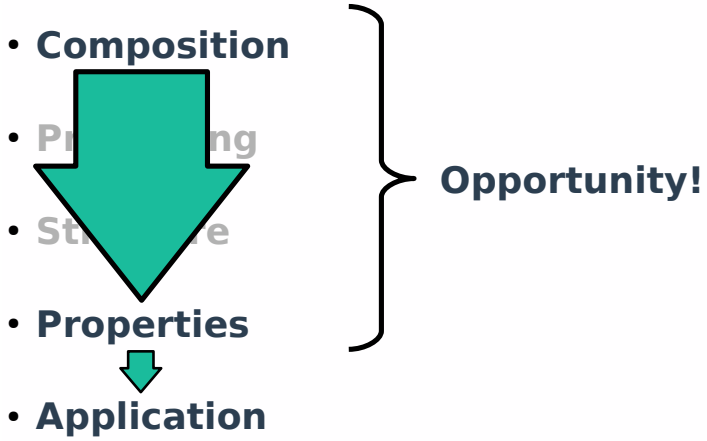
Da composição à aplicação — ciência dos vidros

- **Composition**
- **Pr ng**
- **St e**
- **Properties**
- **Application**

How about Glasses?

(Cuidado! Isto é uma simplificação!!!)

Da composição à aplicação — ciência dos vidros



(Cuidado! Isto é uma simplificação!!!)

Quer descobrir seu próprio vidro?

`https://github.com/drcassar/mlschool23`
`https://colab.research.google.com`

ilum escola de ciência