

Artigo: **Calibrating DFT Formation Enthalpy Calculations by Multifidelity Machine Learning** (A aplicação de aprendizado de máquina multifidelidade para calibração de cálculos de entalpia de formação feitos por DFT).

Autores: Sheng Gong, Shuo Wang, Tian Xi, Woo Hyun Chae, Runze Liu, Yang Shao-Horn, and Jeffrey C. Grossman.

Dados bibliográficos: JACS Au 2022, 2, 9, 1964–1977
(doi.org/10.1021/jacsau.2c00235)

Nome do discente apresentador: Ezequiel Lorenzetti

Área de concentração: Físico Química

Data de apresentação: 24 de outubro de 2022, às 13h 30min

Local da apresentação:

Resumo: Através de um modelo de aprendizado de máquina multifidelidade foi possível determinar a entalpia de formação com maior precisão de previsão do que os feitos por DFT. Posteriormente se utilizou o modelo para calibrar a entalpia de formação DFT de um banco de dados onde se encontrou materiais com estabilidade subestimada explicando sua capacidade de ser sintetizado ou não. Em última análise, o modelo explica a fuga das medições de DFT com relação a medições experimentais.