



# Universidade: presente!



XXXI SIC

21.25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE



## Estudo do mecanismo de síntese de nanopartículas de sulfetos de cobre e antimônio usando Machine Learning

Aluna: Luísa Avencourt Soares Orientador: Marcos José Leite

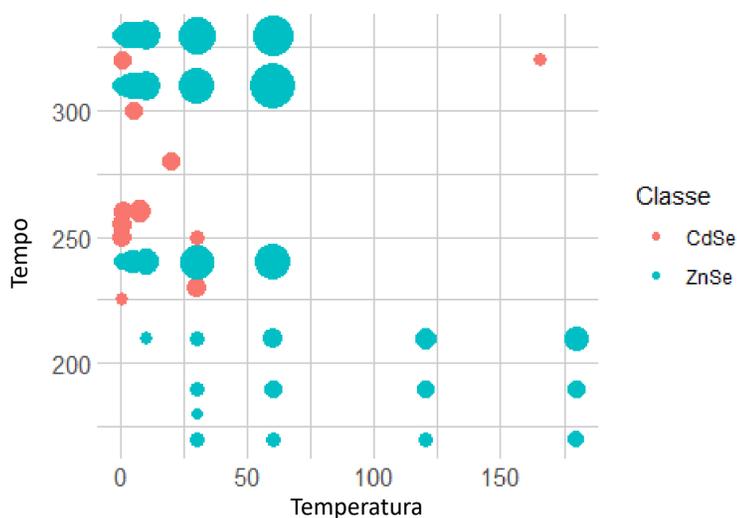
### Introdução

- Principais aplicações de nanopartículas

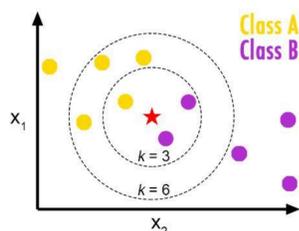


### Sínteses de CdSe e ZnSe

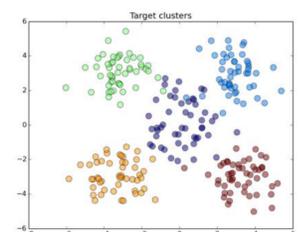
Utilizou-se tamanho, temperatura e tempo de síntese para diferenciar as nanopartículas.



### Algoritmos de classificação



**K-NN:** algoritmo de reconhecimento de padrões supervisionado.



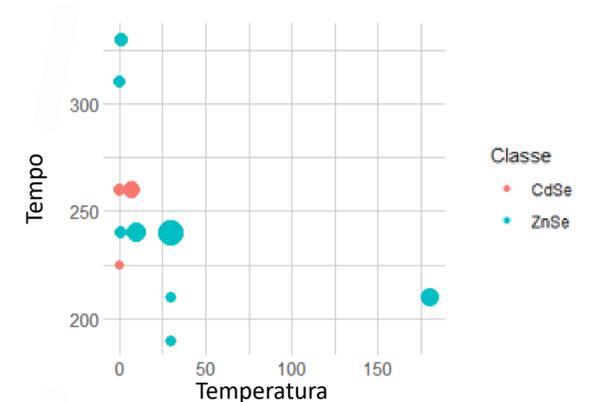
**K-Means:** algoritmo de reconhecimento de padrões não-supervisionado.

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}$$

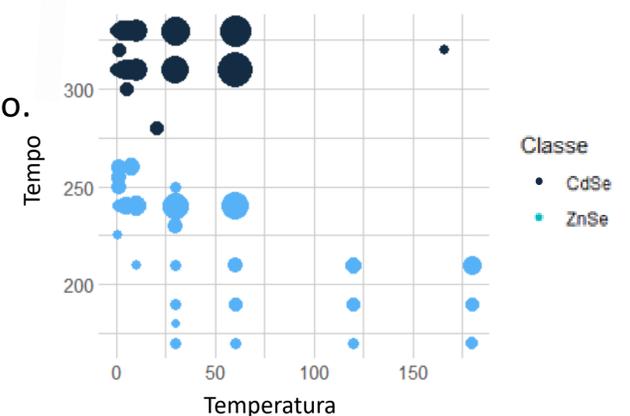
**Naive-Bayes:** algoritmo de reconhecimento de padrões supervisionado.

### Resultados e Discussões

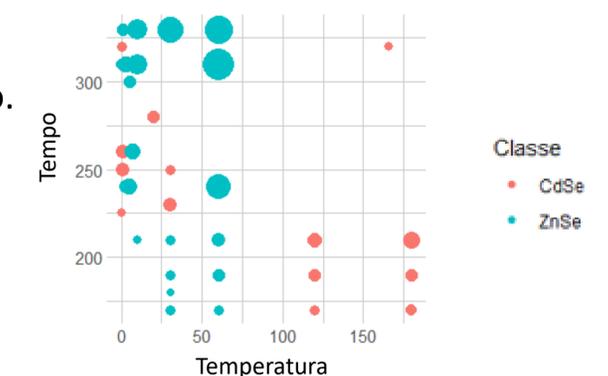
**K-NN:** 81% de acerto.  
80% para treino.



**K-Means:** 81% de acerto.  
Algoritmo não-supervisionado.



**Naive-Bayes:** 86% de acerto.  
26% para treino.



### Conclusões

Utilizando dados de temperatura, tempo e tamanho de 15 artigos totalizando 18 sínteses de CdSe e 23 de ZnSe analisou-se com os algoritmos classificadores. Com Naive Bayes apresentando 86% de acerto na diferenciação das sínteses de CdSe e ZnSe. A fim de aperfeiçoar a classificação, além de aumentar a base de dados estuda-se levar em consideração a concentração, a proporção molar entre os precursores, a espécie ligante e o solvente. Para as próximas etapas, pretende-se estudar e prever comportamentos das nanopartículas