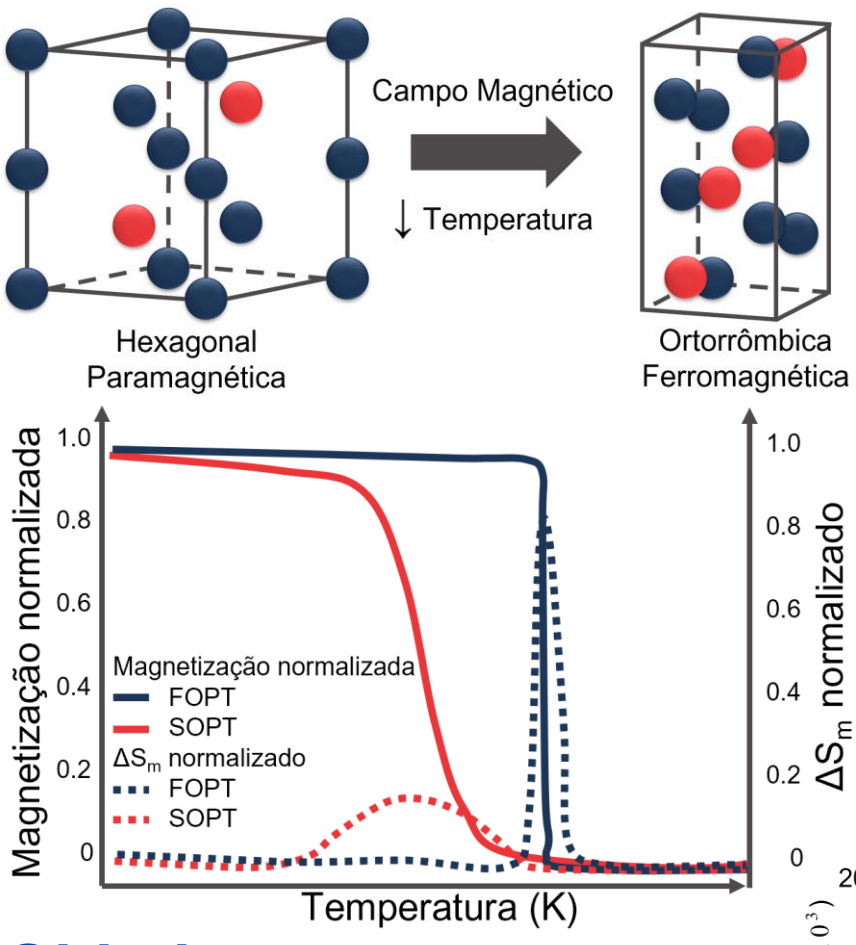
cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

# Exploração Iterativa de HEAs Magnetocalóricas por Meio de Active Learning

Caroline Binde Stoco[1]; Pedro Henrique de Siqueira Mancilha[1]; Francisco Gil Coury[1]
1. Universidade Federal de São Carlos, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, São Carlos-SP

## Introdução




## Objetivos

- Machine Learning → Previsão de propriedades magnetocalóricas de interesse: $\Delta T_{MST}$, $\Delta S_M$, $T_C$
- Active Learning + Experimental → Melhoria ML

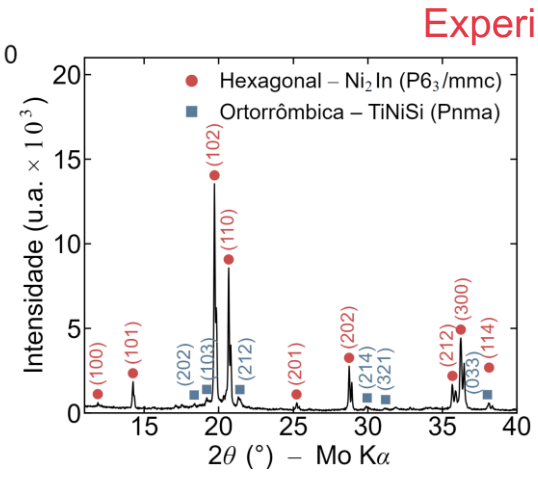
## Resultados e Discussão

| Modelos: | SVR | RF | GBR | GPR |
|---|---|---|---|---|
| | $\Delta S_M$ | | | |
| RMSE [J/Kg.K] | 9.37 | 10.47 | 10.91 | 10.53 |
| $R^2$ | 0.49 | 0.36 | 0.31 | 0.35 |
| | $T_{MST}$ | | | |
| RMSE [K] | 26.51 | 39.99 | 38.73 | 29.41 |
| $R^2$ | 0.87 | 0.71 | 0.73 | 0.84 |
| | $T_{C_HEX}$ | | | |
| RMSE [K] | 21.77 | 27.32 | 27.64 | 26.10 |
| $R^2$ | 0.74 | 0.59 | 0.58 | 0.63 |
| | $T_{C_ORTHO}$ | | | |
| RMSE [K] | 43.07 | 50.60 | 54.63 | 48.85 |
| $R^2$ | 0.69 | 0.57 | 0.50 | 0.60 |

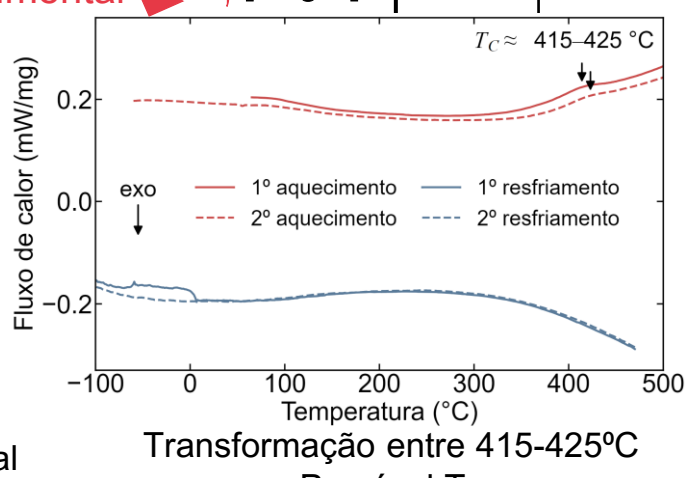
Active Learning

| | Liga 1 | Liga 2 |
|---|---|---|
| Co [at.%] | 25.30 | 6.77 |
| Ni [at.%] | 5.27 | 20.40 |
| Fe [at.%] | 13.31 | 15.90 |
| Mn [at.%] | 22.79 | 23.60 |
| Si [at.%] | 1.64 | 27.90 |
| Ge [at.%] | 31.69 | 5.43 |
| $\Delta S_M$ [J/kg.K] | 44.65 | 54.52 |
| Incerteza [J/kg.K] | 18.81 | 17.90 |

Experimental

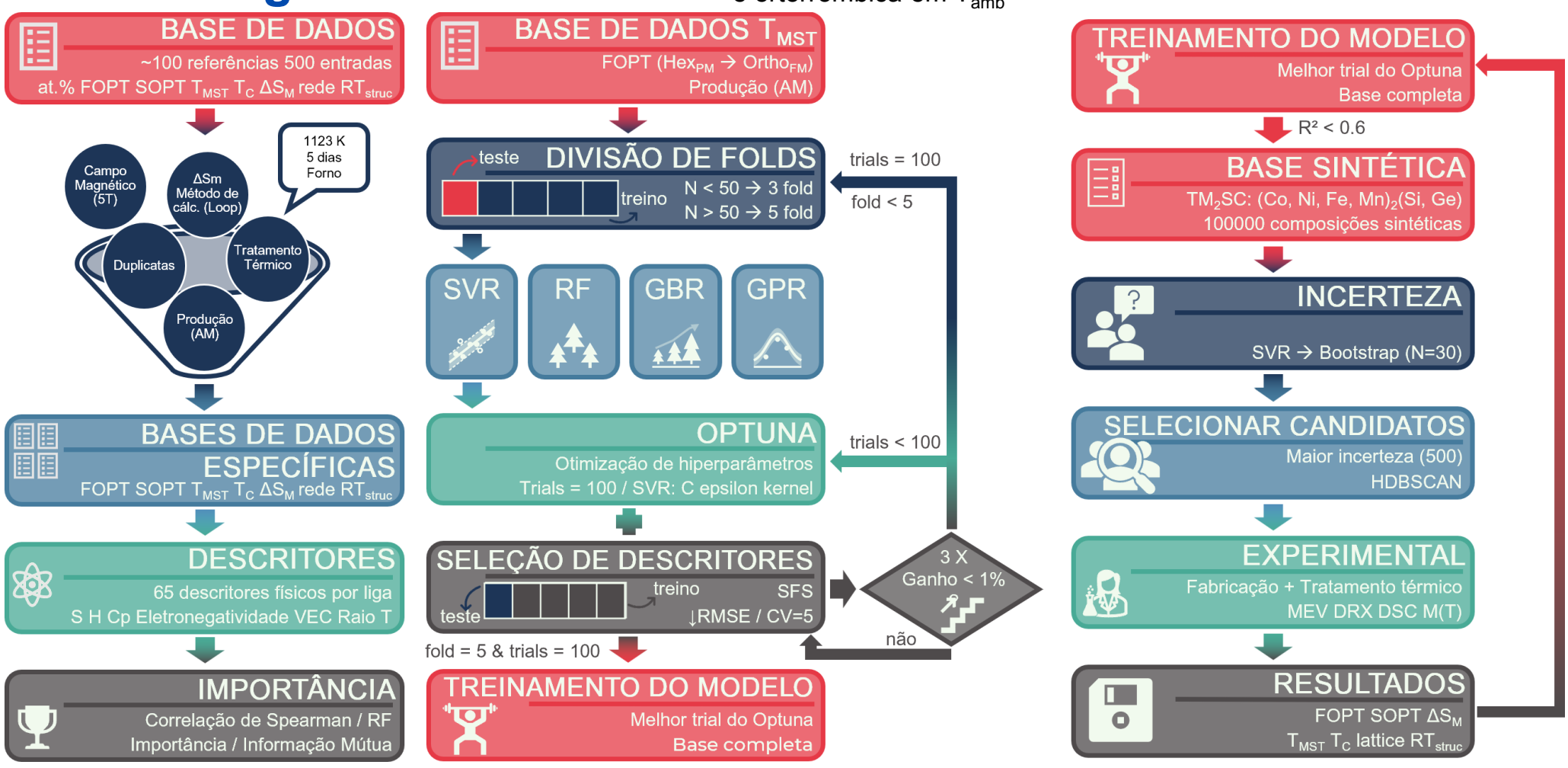



Coexistência de fase hexagonal e ortorrômbica em $T_{amb}$




Transformação entre 415-425ºC
Provável $T_C$

## Metodologia




## Referências e Agradecimentos

QIAO, K. et al. Giant room-temperature magnetocaloric effect MM′X alloys explored by ML. Acta Mater., v. 297, p. 121344, 2025
LAW, J. Y.; FRANCO, V. Review on magnetocaloric high-entropy alloys. J. Mater. Res., v. 38, p. 37-51, 2023
BISWAS, A. et al. Designed materials with the giant magnetocaloric effect near room temperature. Acta Mater., v. 180, p. 341-348, 2019

FAPESP Processo número 2024/21293-0.
O presente trabalho foi realizado com apoio da CAPES – Código de Financiamento 001

## Conclusões

- SVR → Algoritmo de ML com maior poder preditivo
- $\Delta T_{MST}$ → $R^2$ 0.87 / $T_C$ → $R^2$ 0.74/0.69;
- $\Delta S_M$ → $R^2$ 0.49 → Menor $R^2$ levou à escolha para Active Learning
- Uso de incerteza para seleção de ligas para etapa experimental
- Experimental em progresso