

BAB 1 PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Perkembangan pesat dalam bidang *quantum chemistry* dan didukung oleh kemajuan perangkat lunak untuk melakukan simulasi berbasis *density functional theory* (DFT), telah membuka peluang luas untuk mengeksplorasi dan merancang material baru, khususnya dalam bidang *heterogeneous catalysis*. Salah satu pendekatan yang berkembang pesat adalah pencarian dan evaluasi kandidat material berbasis *bimetallic alloy*, yang dikenal memiliki potensi besar dalam meningkatkan kinerja katalitik melalui efek sinergi antar logam penyusunnya [1,3]. Dalam proses katalisis, interaksi antara permukaan katalis dan molekul adsorbat menjadi faktor yang sangat menentukan. Salah satu parameter penting yang digunakan untuk menggambarkan kekuatan interaksi ini adalah energi adsorpsi.

Adsorpsi merupakan proses ketika molekul atau atom yang disebut adsorbat menempel pada suatu permukaan material logam atau paduan logam yang berperan sebagai adsorben. Energi adsorpsi penting karena dapat menunjukkan seberapa kuat interaksi antara molekul dan permukaan. Energi adsorpsi yang terlalu rendah membuat molekul mudah lepas, sedangkan energi adsorpsi yang terlalu tinggi menunjukkan ikatan terlalu kuat sehingga molekul sulit dilepaskan dan dapat menghambat reaksi lanjutan pada permukaan katalis. Dalam penelitian ini, molekul CH dipilih sebagai adsorbat karena berperan sebagai tahapan perantara yang terbentuk saat reaksi katalitik, khususnya yang melibatkan pembentukan atau pemutusan ikatan C-H. Keberadaan CH di permukaan *bimetallic alloy* dapat menjadi indikator penting untuk memahami kestabilan interaksi permukaan dengan molekul hidrokarbon, serta membantu memperkirakan seberapa mudah permukaan tersebut bereaksi dengan molekul serupa.

CH adalah komponen kunci dalam proses industri berbasis hidrokarbon. Misalnya, CH terbentuk dalam tahap awal reformasi metana untuk menghasilkan hidrogen, dalam produksi bahan bakar sintesis, dan dalam reaksi pembentukan bahan kimia penting di industri. Dengan memahami interaksi CH dengan permukaan katalis,

perancangan katalis bisa menjadi lebih efisien dan hemat energi untuk industri energi, petrokimia, dan konversi bahan bakar.

Pada penelitian sebelumnya telah memanfaatkan metode DFT untuk menghitung energi adsorpsi. Metode ini mampu memberikan akurasi tinggi, namun sangat mahal secara komputasi terutama ketika diaplikasikan pada skala data besar. Simulasi satu konfigurasi material dapat menghabiskan waktu sehari-hari pada sistem komputasi berkinerja tinggi. Untuk menghadapi keterbatasan tersebut, pendekatan berbasis pembelajaran mesin digunakan dengan memanfaatkan sejumlah parameter atau fitur yang dapat digunakan untuk memprediksi energi adsorpsi suatu sistem. Fitur – fitur tersebut dikelompokkan menjadi tiga, yaitu fitur geometrik, energetik, dan elektronik. Fitur geometrik didapatkan dari posisi *atomic*, seperti *coordination number* yang menunjukkan jumlah atom tetangga terdekat, *atomic symmetry function* yang menggambarkan simetri lokal atom dan *graph representations* yang menggambarkan keterhubungan antar atom [1,2].

Beberapa penelitian sebelumnya telah mengimplementasikan model pembelajaran mesin, seperti *regresi linier*, *random forest*, dan *graph neural network* (GNN), untuk memprediksi energi adsorpsi. Meskipun model – model ini menunjukkan peningkatan kecepatan prediksi dibandingkan perhitungan DFT penuh, sebagian besar model masih mengandalkan ekstraksi fitur secara manual dari data material. Oleh karena itu, pendekatan pembelajaran mesin berbasis CNN mulai diperkenalkan karena proses ekstraksi fitur secara langsung dari data mentah dapat dilakukan secara otomatis [1].

Dalam penelitian ini, pendekatan pembelajaran mesin berbasis CNN digunakan untuk memprediksi energi adsorpsi CH dengan memanfaatkan data DOS sebagai representasi input. Berbeda dengan model pembelajaran mesin tradisional yang memerlukan proses ekstraksi fitur secara manual, CNN mampu mengekstraksi fitur secara otomatis dari data DOS numerik hasil perhitungan DFT, yang merepresentasikan distribusi keadaan energi elektron pada permukaan *bimetallic alloy*. Fitur yang digunakan dalam prediksi ini diperoleh langsung dari data DOS, yang mempresentasikan distribusi keadaan energi elektron dalam sistem. Data DOS mengandung informasi penting terkait struktur elektronik permukaan, seperti posisi

d-band center yang berkorelasi dengan kekuatan ikatan adsorbat. Model CNN yang digunakan bernama DOSnet, digunakan untuk mengenali ciri – ciri utama pada data DOS dan mengestimasi nilai energi adsorpsi yang sesuai.

Dataset yang digunakan dalam penelitian ini merupakan kumpulan data hasil perhitungan DFT yang diperoleh dari <https://github.com/vxfung/DOSnet>. Dataset ini mencakup pasangan konfigurasi permukaan *bimetallic alloy* dan adsorbat CH beserta profil DOS dan nilai energi adsorpsinya. Data DOS direpresentasikan sebagai vektor distribusi energi dengan resolusi tertentu, sementara energi adsorpsi diberikan dalam satuan eV. Dataset ini berupa data numerik dan sudah melalui proses normalisasi agar sesuai dengan masukan model. Dengan cakupan yang cukup luas dan keragaman material, dataset ini memungkinkan pelatihan model yang lebih dapat digeneralisasi terhadap berbagai jenis permukaan katalis [1].

Kebutuhan akan metode prediksi energi adsorpsi yang cepat dan akurat semakin penting seiring dengan meningkatnya permintaan untuk merancang katalis yang efisien dan berkelanjutan dalam industri energi dan kimia. Pemilihan data DOS sebagai masukan utama berdasarkan pada kemampuannya dalam merepresentasikan karakteristik elektronik material secara langsung, sehingga informasi yang relevan untuk prediksi energi adsorpsi dapat diperoleh tanpa proses ekstraksi fitur manual. Dengan memanfaatkan CNN untuk mengekstraksi fitur langsung dari data DOS, penelitian ini diharapkan dapat memberikan alternatif yang lebih cepat dan efisien untuk memprediksi energi adsorpsi, serta membuka jalan bagi desain material katalis yang lebih efektif.

1.2. Rumusan Masalah

Dalam konteks ini, muncul pertanyaan penting yang menjadi inti dari penelitian ini:

- Bagaimana implementasi pembelajaran mesin berbasis CNN dalam mengekstraksi fitur secara otomatis dari data DOS untuk memprediksi energi adsorpsi pada sistem *bimetallic alloy*?

- Bagaimana pembelajaran mesin dapat memberikan akurasi tinggi dan efisiensi komputasi yang lebih baik dibandingkan metode konvensional berbasis perhitungan DFT penuh?

1.3. Tujuan dan Manfaat

Berdasarkan rumusan masalah tersebut, maka tujuan penelitian ini:

- Untuk mengimplementasikan pendekatan pembelajaran mesin berbasis CNN yang mampu secara otomatis mengekstraksi dari data DOS untuk memprediksi energi adsorpsi pada sistem bimetallic alloy.
- Untuk mengeksplorasi metode pembelajaran mesin mengetahui akurasi tinggi dan efisiensi komputasi yang lebih baik dibandingkan pendekatan konvensional berbasis DFT penuh.

1.4. Batasan Masalah

Pada pekerjaan ini, hasil evaluasi kinerja model pembelajaran mesin akan dilakukan berdasarkan pengukuran kualitas model seperti nilai MAE dan RMSE. Objek prediksi pemodelan hanya difokuskan pada data material *bimetallic* yang berinteraksi dengan CH (gas/molekul Carbon Hidrogen).

1.5. Metode Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan membangun sebuah model pembelajaran mesin berbasis CNN untuk memprediksi nilai energi adsorpsi dari data DOS yang diperoleh dari permukaan logam dan molekul adsorben. Proses dimulai dengan pengumpulan dan pemrosesan data DOS, di mana data dinormalisasi dan dibagi menjadi data latih dan data uji. Selanjutnya, peneliti merancang arsitektur model CNN yang terdiri dari beberapa lapisan konvolusional yang digunakan. Model kemudian dilatih dengan beberapa konfigurasi epoch dan batch size untuk mengetahui pengaruhnya terhadap hasil prediksi. Evaluasi dilakukan dengan mengukur nilai MAE dan RMSE baik pada data latih maupun data uji.

1.6. Jadwal Pelaksanaan

Berisi jadwal pelaksanaan pengerjaan Tugas Akhir. Perlu ditetapkan beberapa milestone untuk menentukan pencapaian pekerjaan.

Jadwal pelaksanaan akan menjadi acuan dalam mengevaluasi tahap-tahap pekerjaan seperti yang tertuang dalam milestone yang sudah ditetapkan.

Tabel 1.1 Jadwal Pelaksanaan Tugas Akhir

No.	Deskripsi Tahapan	Bulan 1	Bulan 2	Bulan 3	Bulan 4	Bulan 5	Bulan 6
1	Studi Literatur						
2	Persiapan Dataset						
3	Perancangan Model						
4	Implementasi Model						
5	Pengujian Model						
6	Penyusunan Laporan/Buku TA						