

Nama : Jozanda Aulia

NPM : 21081010209

Mata Kuliah : Riset Informatika C081

Judul	<i>"ML-SAFT: A Machine Learning Framework for PCP-SAFT Parameter Prediction"</i>
Jenis Penelitian	experimental
Penulis	Kobi C. Felton, Lukas Raßpe-Lange, Jan G. Rittig, Kai Leonhard, Alexander Mitsos, Julian Meyer-Kirschner, Carsten Knösche, Alexei A. Lapkin
Publish	Chemical Engineering Journal , Volume 492 (2024), with DOI: 10.1016/j.cej.2024.151999.
Latar belakang dan tujuan	Studi ini berfokus pada tantangan prediksi sifat termodinamika fasa cair, yang penting dalam berbagai aplikasi teknik kimia. Metode tradisional untuk mengatur parameter model termodinamika seperti PCP-SAFT memerlukan banyak data eksperimental, yang memakan waktu dan tenaga. Tantangan inilah yang mendorong pengembangan ML-SAFT, sebuah kerangka pembelajaran mesin yang memanfaatkan data untuk memprediksi parameter PCP-SAFT langsung dari struktur molekul. Tujuan utama dari penelitian ini adalah untuk mengembangkan kerangka pembelajaran mesin yang mengotomatisasi regresi dan prediksi parameter PCP-SAFT, yang digunakan untuk memprediksi termodinamika fasa cair pada berbagai molekul. Kerangka ini mengevaluasi arsitektur pembelajaran mesin yang berbeda dan membandingkan kinerjanya dalam memprediksi parameter PCP-SAFT.
Permasalahan utama	Permasalahan utama yang diangkat adalah kompleksitas dan intensitas tenaga yang dibutuhkan untuk melakukan parameterisasi eksperimen terhadap persamaan PCP-SAFT untuk berbagai molekul. Masalah ini menghambat adopsi yang lebih luas dari PCP-SAFT dalam memprediksi sifat termodinamika.
Metodologi	Penelitian ini menggunakan kerangka ML-SAFT, yang melibatkan: <ul style="list-style-type: none">• Membangun dataset yang terdiri dari 871 molekul dengan parameter PCP-SAFT yang dihasilkan melalui regresi.• Membandingkan beberapa model pembelajaran mesin seperti random forest (RF), feed-forward network (FFN), dan graph neural networks (GNN) untuk memprediksi parameter-parameter tersebut.• Penggunaan metode seperti deep learning, heuristik, dan regresi skala besar untuk membangun model yang memprediksi tekanan uap dan densitas.

Dataset	Dataset yang digunakan mencakup 988 molekul unik dengan data eksperimental yang diperoleh dari Dortmund Data Bank (DDB). Data ini disaring untuk menghilangkan data yang tidak sesuai untuk regresi, sehingga tersisa 871 molekul untuk melatih model pembelajaran mesin
Hasil	<ul style="list-style-type: none"> • Akurasi: Model pembelajaran mesin terbaik mencapai deviasi absolut rata-rata (AAD) sebesar 40% dalam prediksi tekanan uap dan 8% AAD dalam prediksi densitas. • Kinerja Model: Model random forest (RF) menunjukkan kinerja terbaik dalam prediksi tekanan uap, sementara model message-passing neural network (MPNN) memberikan hasil terbaik untuk prediksi densitas (ML-SAFT_ A machine lear...). • Perbandingan: ML-SAFT terbukti lebih akurat dibandingkan dengan metode tradisional seperti metode kuantum mekanik (QM) dan metode kontribusi kelompok (GC). Selain itu, ML-SAFT mampu menghasilkan prediksi lebih cepat dan mencakup lebih banyak molekul.
Kesimpulan	Kerangka ML-SAFT menawarkan alternatif yang menjanjikan untuk memprediksi parameter PCP-SAFT, dengan peningkatan signifikan dalam hal kecepatan dan akurasi dibandingkan metode tradisional. Penelitian ini menyimpulkan bahwa pembelajaran mesin dapat secara efektif menggantikan parameterisasi eksperimen yang memakan banyak tenaga, sehingga membuat model PCP-SAFT lebih mudah diakses untuk berbagai aplikasi dalam industri kimia.