ABSTRAK

Semakin berkembangnya Convolutional Neural Network (CNN) yang cukup akurat dan bisa diterapkan diberbagai bidang. Umumnya CNN dipakai dalam pengolahan citra, Namun metode ini jarang digunakan dalam bidang lain sebagai contoh dalam bidang material sains. Dengan adanya dataset DOSnet yang menyimpan informasi intrinsik dari sifat suatu material yang tersedia secara umum di internet, kita dapat memanfaatkan dataset ini dan menggunakan metode convolusional neural network untuk memprediksi salah satu karakteristik material sebagai contoh energi adsorpsi. Energi adsorpsi menjadi penting di dalam domain material sains karena dapat menentukan seberapa efektif suatu metallic alloy dalam menyerap gas atau molekul radikal yang ada dalam udara. Tingginya energi adsorpsi mengindikasikan bahwa material tersebut merupakan material yang baik yang bisa digunakan sebagai katalitik filter. Dalam pekerjaan ini, kita memanfaatkan CNN untuk memprediksi nilai energi adsorpsi. Model berbasis pembelajaran mesin dengan metode CNN menggunakan dataset model DOSnet, mampu memprediksi energi adsorpsi dari suatu permukaan bimetallic alloy terhadap molekul CH dengan baik. Nilai MAE terbaik sebesar 0.1368 dan nilai RMSE terbaik sebesar 0.1877.

Kata Kunci: pembelajaran mesin | Convolutional Neural Network (CNN) | Density of States (DOS)