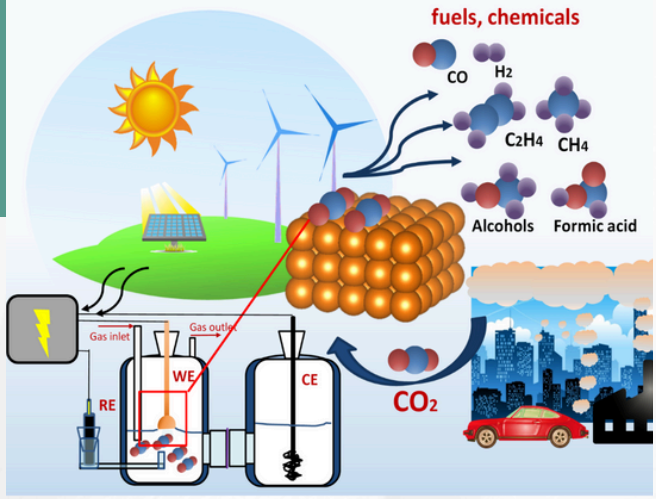
ISFAHAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

MCGILL UNIVERSITY

طراحی کاتالیزور با استفاده از هوش مصنوعی

بررسی کشف کاتالیزورهای تحت هدایت هوش مصنوعی برای کاهش الکتروشیمیایی CO_2، با تمرکز بر نقش یادگیری ماشین در شناسایی بهینه‌ترین کاتالیزورهای جامد، به‌ویژه آلیاژهای اتم تکی.



چکیده

این سمینار به از استفاده از یادگیری ماشین (ML) برای شناسایی بهترین کاتالیزورهای جامد در دستگاه‌های کاهش الکتروشیمیایی CO_2 ، با تمرکز اصلی بر روی آلیاژهای اتم تکی (SAAs) میپردازد.

انجام آزمایشات یا محاسبات بر روی صدها هزار نامزد کاتالیزور امری غیر عملی است. برای رفع این چالش، از یادگیری ماشین (ML) برای مدل‌سازی پیش‌بین استفاده می‌شود. با طراحی یک مدل ML، زمان محاسباتی به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد و جستجوی کاتالیزور بهینه برای کاربردهای کاهش CO_2 ساده‌تر می‌شود.

این پروژه با ارزیابی جامع کارایی شاخص‌های مبتنی بر باندهای d، که بر پایه نظریه واکنش‌پذیری باند d است، برای پیش‌بینی انرژی‌های میانبری SAAs آغاز می‌شود. با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT)، تجزیه و تحلیل عمیقی از انرژی جذب کننده‌ها روی سطوح SAAs صورت می‌پذیرد و در طول این مسیر، متوجه می‌شویم که شاخص‌های باند d سنتی اغلب نمی‌توانند پیش‌بینی‌های کمیتی دقیقی ارائه دهند، به ویژه زمانی که با نقاط نامعمول هندسی مواجه می‌شوند.

با توسعه ویژگی‌های وابسته به مولکول جذب شونده، که به "باند p" شناخته می‌شوند، یک فضای ویژگی دقیق‌تر و کارآمدتر برای پیش‌بینی انرژی‌های جذب ایجاد می‌شود.
این تلاش منجر به ایجاد یک مدل ML قوی می‌شود که قادر به ارائه پیش‌بینی‌های دقیق و قابل تعمیم است. این مدل نه تنها درک ما از کاتالیزورهای جامد در SAAs را افزایش می‌دهد، بلکه جستجوی کاتالیزورهای بهینه را ساده‌تر می‌کند و فرآیند را کارآمدتر می‌کند.
با بهره‌گیری از ML، هدف ما دست‌یافتن به مدل‌های پیش‌بین دقیق و قابل تعمیم است، که برای پیشرفت فناوری‌های کاهش CO_2 ضروری هستند. این پیشرفت‌ها باعث می‌شود که بتوانیم به طریقی موثرتر و کارآمدتر به طراحی دستگاه‌های کاهش الکتروشیمیایی بپردازیم و از این راه بتوانیم به مبارزه با تغییرات آب و هوا کمک کنیم.

زمان و محل برگزاری

زمان

- شنبه ۲۶ خرداد ۱۴۰۳
- ساعت ۱۱:۰۰ صبح

مکان

- دانشگاه صنعتی اصفهان, دانشکده شیمی, طبقه ۵, سالن سمینار

دکتر محمد جواد شیرانی

محمدجواد شیرانی دارای مدرک کارشناسی از دانشگاه صنعتی اصفهان است و پس از آن به برنامه دکترا مستقیم در دانشگاه مک‌گیل پذیرفته شد. اخیراً دوره دکترا خود را به پایان رسانده است و تحقیقات او در حوزه شیمی فیزیک بوده و به طور خاص بر استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین برای داده‌های تولید شده توسط DFT برای کاربردهای کاهش CO_2 تمرکز داشته است. دکتر شیرانی امیدوار است که از طریق کار خود در مدل‌سازی پیش‌بین و طراحی کاتالیزورها به پیشرفت فناوری در این حوزه کمک کند.