อาริษา แก้วประทุม : การออกแบบเชิงนวัตกรรมของตัวเร่งปฏิกิริยาสำหรับปฏิกิริยารีดักชันคาร์บอนไดออกไซด์ โดยการการผสมผสานระหว่างการสร้างแบบจำลองหลายระดับความละเอียดและการเรียนรู้ของเครื่อง (INNOVATIVE CATALYST DESIGN FOR CO_2 REDUCTION REACTION: A COMBINED MULTISCALE MODELLING AND MACHINE LEARNING APPROACH)
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 78 หน้า

คำสำคัญ: ปฏิกิริยารีดักชันคาร์บอนไดออกไซด์ การสร้างแบบจำลองจลนพลศาสตร์ระดับจุลภาคแบบจำลองการเรียนรู้ของเครื่อง

ระดับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ในชั้นบรรยากาศเป็นประเด็นที่สำคัญ จำเป็นต้องหานวัตกรรมใหม่ ๆ เพื่อลดผลกระทบ หนึ่งในแนวทางที่มีแนวโน้มที่ดีคือปฏิกิริยารีดักชันคาร์บอนไดออกไซด์ ให้กลายเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีมูลค่า วิทยานิพนธ์นี้นำเสนอ กระบวนการทำงานแบบจำลองหลายระดับความละเอียดและการเรียนรู้ของเครื่อง (ML) ที่ออกแบบมาเพื่อค้นหาตัวเร่งปฏิกิริยา เริ่มต้นด้วยการสร้างฐานข้อมูลโครงสร้างตัวเร่งปฏิกิริยากว่า 1,632 โครงสร้าง ซึ่งประกอบด้วยโลหะบริสุทธิ์และโลหะผสม การศึกษาใช้แบบจำลอง ML ที่เรียกว่า Fairchem เพื่อคำนวณพลังงานการดูดซับ ซึ่งจะเป็นข้อมูลป้อนเข้าสำหรับ แบบจำลองไมโครไคเนติก เพื่อทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยาและค่าการเลือกเกิดผลิตภัณฑ์ นอกจากนี้ ยังพัฒนาแบบจำลอง ML เพื่อทำนายประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา โดยโครงข่ายประสาทเทียม ให้ประสิทธิภาพดีที่สุดในการทำนายค่าการเลือกเกิดผลิตภัณฑ์ ขณะที่ตัวจัดประเภทแบบซัพพอร์ตเวกเตอร์ ทำหน้าที่ได้ดีที่สุดในการทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยารวม เพื่อให้เข้าถึงได้ง่าย เราสร้างเว็บไซต์ที่สามารถทำนายผลลัพธ์ได้ทันทีโดยใช้สูตรเคมีเป็นข้อมูลป้อนเข้า ข้อจำกัดสำคัญคือความคลาดเคลื่อนระหว่างการทำนายและผลการทดลองจริง ซึ่งมาจากลักษณะทั่วไปของ Fairchem และการไม่ได้คำนึงถึงปัจจัยการทดลอง เช่น ผลกระทบจากตัวทำละลายและสมบัติพลวัตอื่นๆ แนวทางแก้ไขคือการ ปรับจูนแบบจำลองด้วยข้อมูลเฉพาะ หรือใช้แนวทางการเรียนรู้แบบ delta learning โดยสรุปแล้ว งานวิจัยนี้ช่วยให้การออกแบบตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นเรื่องง่ายขึ้นและมีส่วนอย่างมากในการค้นหาวัสดุพลังงานที่ยั่งยืน

สถานสหวิทยาการและนานาชาติ ลายมือชื่อนักศึกษา อาริษา แก้วประทุม
ปีการศึกษา 2568 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

ARISA KAEWPRATUM : INNOVATIVE CATALYST DESIGN FOR CO_2 REDUCTION REACTION: A COMBINED ULTISCALE MODELLING AND MACHINE LEARNING APPROACH.
THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 78 PP.

Keyword: CO_2 reduction reaction, Microkinetic modelling, Machine learning models.

The levels of atmospheric CO_2 are a crucial issue, making it necessary to find innovative solutions to mitigate its impact. One promising approach is the CO_2 reduction reaction (CO_2RR) to valuable products. This thesis introduces a multiscale modeling and machine learning (ML) framework designed to accelerate the discovery of CO_2RR catalysts. The methodology began with the creation of a 1,632 structures catalyst database, including pure metals and bimetallic alloys. We used a ML potential, Fairchem, to calculate adsorption energies, which served as input for a microkinetic model to predict rates and selectivity. We also developed ML models for rapid performance prediction. An Artificial Neural Network was optimal for predicting selectivity, while a Support Vector Classifier performed best for predicting the overall rate. To enhance accessibility, a web application was created for instant predictions based on a chemical formula input. A key limitation is the discrepancy between our predictions and experimental results. This is attributed to the general nature of the Fairchem potential and the exclusion of experimental factors like solvent effects and dynamic properties. The way to improve accuracy is by fine-tuning models with specific DFT data or implementing a delta learning approach. This research provides a practical workflow for rational catalyst design, offering an alternative to traditional high-cost computational screening and contributing significantly to the field of sustainable energy material discovery.

Department of Interdisciplinary Science and Internationalization
Academic Year 2025

Student's Signature _____
Advisor's Signature _____