



APLIKASI MACHINE LEARNING DALAM MERAMALKAN PROPERTI BATERAI BERBASIS ION NATRIUM

MUHAMMAD AL VANRIADI



**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024**

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.





PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Aplikasi *Machine Learning* dalam Meramalkan Properti Baterai Berbasis Ion Natrium” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Juni 2024

Muhammad Al Vanriadi
G7401201080

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak mengikuti kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



ABSTRAK

MUHAMMAD AL VANRIADI, Aplikasi *Machine Learning* Dalam Meramalkan Properti Baterai Berbasis Ion Natrium. Dibimbing oleh FAOZAN AHMAD dan ZULKaida AKBAR.

Penelitian ini berfokus pada aplikasi *machine learning* dalam meramalkan properti baterai berbasis ion natrium. Menggunakan data dari situs Material Project sebanyak 309 data. Penelitian ini mengkaji prediksi terhadap properti *average voltage*, *gravimetric capacity*, *volumetric capacity*, *gravimetric energy*, dan *volumetric energy*. Fitur-fitur yang digunakan meliputi formula, *spacegroup*, *Nsites*, *above hull*, *formation energy*, *volume*, *density*, dan *bandgap*. Untuk mendapatkan fitur struktur, unsur-unsur dalam fitur formula diurai menggunakan *library Chemparse*. Tiga kombinasi model *Artificial Neural Network* diterapkan: kombinasi pertama menggunakan fitur properti material, kombinasi kedua menggunakan fitur seluruh fitur properti dan unsur yang diurai, sementara kombinasi ketiga hanya menggunakan fitur unsur yang diurai saja. Evaluasi performa model dilakukan menggunakan metrik *R² score*, *Mean Squared Error*, dan *Root Mean Squared Error*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa kombinasi kedua yang menggunakan seluruh fitur mendapatkan performal yang paling baik. Selain itu, didapatkan temuan bahwa struktur material berupa unsur yang diurai mampu menguatkan performa model.

Kata kunci: *artificial neural network*, baterai ion natrium, *machine learning*

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



ABSTRACT

MUHAMMAD AL VANRIADI, *Application of Machine Learning in Predicting the Properties of Sodium-ion Batteries. Supervised by FAOZAN AHMAD and ZULKaida AKBAR.*

This research focuses on the application of machine learning to predict the properties of sodium-ion-based batteries. Using data from the Material Project, comprising 309 entries. This study examines the prediction of properties such as average voltage, gravimetric capacity, volumetric capacity, gravimetric energy, and volumetric energy. The features used include formula, spacegroup, Nsites, E above hull, formation energy, volume, density, and bandgap. To obtain structural features, the elements in the formula feature were parsed using the Chemparse library. Three combinations of Artificial Neural Network models were applied: the first combination used material property features, the second combination used all property features and parsed elements, while the third combination used only the parsed elements. The performance of the models was evaluated using R2 score, Mean Squared Error, and Root Mean Squared Error metrics. The results indicate that the second combination, which utilized all features, achieved the best performance. Additionally, it was found that the structural features in the form of parsed elements were able to enhance the model's performance.

Key words: artificial neural network, sodium-ion batteries, machine learning.

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :

a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah

b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
- a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah.
- b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2024¹
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.



APLIKASI MACHINE LEARNING DALAM MERAMALKAN PROPERTI BATERAI BERBASIS ION NATRIUM

MUHAMMAD AL VANRIADI

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Fisika

**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024**

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Pengaji pada Ujian Skripsi:

- 1 Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada, S.Si., M.Si.
- 2 Prof. Dr. Ir. Irzaman, M.Si.



Judul skripsi : Aplikasi *Machine Learning* Dalam Meramalkan Properti Baterai Berbasis Ion Natrium
Nama : Muhammad Al Vanriadi
NIM : G7401201080

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Faozan, M.Si.

Pembimbing 2:
Zulkaida Akbar, S.Si., M.S., PhD.

Diketahui oleh

Ketua Departemen Fisika:
Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada, S.Si., M.Si.
NIP. 19720519 1997021001





Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



PRAKATA

Assalamu 'alaikum Warahmatullahi Wabarakatuh

Alhamdulillahi Rabbil'Alamin, segala puji dan Syukur penulis haturkan kepada Allah Azza wa Jalla berkat Rahmat, Hidayah, serta Kemurahan hati-Nya penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi ini dengan lancar. Shalawat beriring salam semoga senantiasa tercurahkan kepada manusia biasa tapi sangat luar biasa yaitu Nabi Muhammad SAW beserta keluarga dan sahabatnya.

Penyusunan skripsi yang berjudul “Aplikasi *Machine Learning* Dalam Meramalkan Properti Baterai Berbasis Ion Natrium” dibuat sebagai salah satu bukti bahwa penulis telah menyelesaikan perkuliahan di Departemen Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam IPB University.

Pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar - besarnya kepada seluruh pihak yang telah membantu pada setiap proses penelitian tugas akhir yang penulis kerjakan. Penulis ingin mengucapkan rasa terima kasih kepada:

1. Allah Azza wa Jalla
2. Nabi Muhammad SAW
3. Kedua orang tua, terkhususnya mama yang telah menjadi sosok ibu yang luar biasa bagi penulis walau membesarkan penulis seorang diri
4. Seluruh keluarga besar penulis yang berbaik hati membantu penulis mulai dari awal perkuliahan sampai dengan penulis dapat lulus
5. Bapak Dr. Faozan Ahmad, M.Si. Selaku dosen pembimbing 1 tugas akhir yang telah membimbing, memberikan saran, dukungan, serta motivasi bagi penulis untuk dapat menyelesaikan penelitian tugas akhir ini
6. Bapak Zulkaida Akbar, S.Si., M.S, PhD. Selaku dosen pembimbing 2 tugas akhir yang dengan sabar membimbing penulis dengan mengajarkan *machine learning* serta mengenalkan penulis dengan kegiatan – kegiatan riset di BRIN
7. Rekan – rekan RA di BRIN yang menemani penulis di tempat kerja
8. Putri Aribah, yang telah menemani dan membantu penulis sehingga penulis dapat dengan rajin (cepat – cepat) menulis skripsi
9. AWIA, tempat bercerita, canda, tawa, serta rumah kedua bagi penulis
10. Seluruh pihak yang telah membantu penulis

Tangerang Selatan, Mei 2024

Muhammad Al Vanriadi

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.





DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Baterai	3
2.2 Baterai Ion Natrium	3
2.3 Perkembangan Material Katoda Baterai	4
2.4 <i>Machine Learning</i>	4
2.5 Model <i>Machine Learning</i>	5
2.6 <i>Artificial Neural Network</i>	6
2.7 <i>Support Vector Regression</i>	7
2.8 <i>Hyperparameter dan Optimizer</i>	8
III METODE	9
3.1 Waktu dan Tempat	9
3.2 Alat dan Bahan	9
3.3 Prosedur Penelitian	9
3.3.1 Pengunduhan Data	9
3.3.2 Analisis Deskriptif	10
3.3.3 Pra Proses Data	10
3.3.4 Ekstraksi Fitur	10
3.3.5 Training dan Optimasi Model	10
3.3.6 Evaluasi Model	10
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	11
4.1 Pengunduhan Data Material Baterai Ion Natrium	10
4.2 Analisis Deskriptif	12
4.3 Pra Proses Data	14
4.4 Ekstraksi Fitur	15
4.5 Analisis Hasil Regresi	16
4.5.1 Analisis Model Kombinasi Pertama	17
4.5.2 Analisis Model Kombinasi Kedua	24
4.5.3 Analisis Model Kombinasi Ketiga	30
4.6 Perbandingan Model Kombinasi Pertama dan Ketiga	34
4.7 Perbandingan Model Kombinasi Kedua dengan Penelitian Lain	35
4.8 Evaluasi dengan Data Uji pada Kombinasi Terbaik	35
V SIMPULAN DAN SARAN	37
5.1 Simpulan	37
5.2 Saran	37

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
- a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- b. Pengutipan tidak mengugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



DAFTAR PUSTAKA	38
LAMPIRAN	40

DAFTAR TABEL

Contoh model machine learning	6
Data fitur hasil pengunduhan	11
Salinan data target	11
Data setelah dilakukan ekstraksi fitur menggunakan Chemparse	16
Hasil pembagian data	16
Seluruh model dengan fiturnya	17
Parameter terbaik untuk model ANN kombinasi pertama	18
Parameter terbaik untuk model SVR kombinasi pertama	19
Hasil evaluasi model ANN kombinasi pertama	22
Hasil evaluasi model SVR kombinasi pertama	24
Perbandingan nilai R 2 Score pada jenis model kombinasi pertama	24
Hasil tuning parameter kombinasi kedua	25
Hasil evaluasi model ANN kombinasi kedua	28
Parameter terbaik untuk model SVR kombinasi kedua	28
Hasil metrik evaluasi model SVR kombinasi kedua	30
Perbandingan nilai R 2 Score pada kombinasi kedua	30
Hasil evaluasi model ANN kombinasi ketiga	33
Hasil metrik evaluasi model SVR kombinasi ketiga	34
Perbandingan hasil evaluasi kombinasi pertama dan ketiga model ANN	34
Persen kenaikan nilai R 2 Score K3 dibandingkan K1	34
Hasil evaluasi penelitian dengan fitur yang berbeda pada jenis baterai (Torp 2020)	35
Hasil ekstrapolasi menggunakan model ANN kombinasi kedua	36
Akurasi model ANN kombinasi kedua (Terbaik)	36



1	Prinsip kerja baterai ion natrium	3
2	Artificial Neural Network Architecture	6
3	Representasi skematis neuron	7
4	<i>Support Vector Regression Illustration</i>	7
5	Diagram alir penelitian	9
6	Data fitur baterai ion natrium dari website material project	9
7	Grafik sebaran data <i>Average Voltage</i> (a), Grafik sebaran data <i>Gravimetric Capacity</i> (b), Grafik sebaran data <i>Volumetric Capacity</i> (c), Grafik sebaran data <i>Gravimetric Energy</i> (d), Grafik sebaran data <i>Volumetric Energy</i> (e) yang merupakan target	12
8	Grafik sebaran data spacegroup (a), grafik sebaran data Nsites (b), grafik sebaran data E Above Hull (c), grafik sebaran data formation Energy (d), grafik sebaran data volume (e), grafik sebaran data density (f), grafik sebaran data band gap (g) yang merupakan properti material	13
9	Deskripsi data target dan fitur	14
10	Korelasi variabel input dan output	15
11	Data setelah melalui pemrosesan	17
12	Grafik loss function kombinasi pertama untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model ANN	20
13	Grafik evaluasi model kombinasi pertama untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model ANN	21
14	Grafik evaluasi model kombinasi kedua untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model SVR	29
15	Grafik loss function kombinasi kedua untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model ANN	26
16	Grafik evaluasi model kombinasi kedua untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model ANN	27
17	Grafik evaluasi model kombinasi kedua untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model SVR	29
18	Grafik loss function kombinasi ketiga untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model ANN	31
19	Grafik evaluasi model kombinasi ketiga untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model ANN	32
20	Grafik evaluasi model kombinasi ketiga untuk model 1 (a), model 2 (b), model 3 (c), model 4 (d), dan model 5 (e) dengan model SVR	33

DAFTAR GAMBAR

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
- a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- b. Pengutipan tidak mengugikan kepentingan yang wajar IPB University.