

PEMODELAN DATA *ROTATIONAL ANISOTROPY SECOND HARMONIC GENERATION* PADA *MALACHITE GREEN* MENGGUNAKAN *MACHINE LEARNING*

NADA NAFISAH



**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**

- 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 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.

PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini Saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “*Pemodelan Data Rotational Anisotropy Second Harmonic Generation pada Malachite Green Menggunakan Machine Learning*” 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, Juli 2026

Nada Nafisah
G7401221032



ABSTRAK

NADA NAFISAH. Pemodelan Data *Rotational Anisotropy Second Harmonic Generation* pada *Malachite Green* Menggunakan *Machine Learning*. Dibimbing oleh HENDRADI HARDHIENATA dan HUSIN ALATAS.

Malachite Green (MG) merupakan kontaminan pangan toksik yang penting untuk dideteksi pada permukaan. Teknik *Second Harmonic Generation* (SHG) sensitif terhadap molekul teradsorpsi, namun pemodelan polanya umumnya bergantung pada model fisis yang memerlukan asumsi tertentu. Penelitian ini menerapkan dan membandingkan pendekatan *machine learning* berbasis data untuk memodelkan pola intensitas SHG MG pada permukaan silikon sebagai fungsi sudut polarisasi, serta menilai posisinya terhadap *Simplified Bond Hyperpolarizability Model* (SBHM). Sudut polarisasi ditransformasi menjadi fitur sinus dan kosinus, lalu *Support Vector Regression*, *Polynomial Regression*, dan *Random Forest* dilatih pada data eksperimen tujuh variasi konsentrasi. *Support Vector Regression* dan *Polynomial Regression* derajat enam menunjukkan performa terbaik, sedangkan *Random Forest* kurang sesuai untuk pola kontinu RA-SHG. Kedua model merekonstruksi kurva setara atau lebih baik daripada SBHM secara numerik, tetapi diposisikan sebagai pelengkap karena SBHM unggul dalam interpretasi fisis.

Kata kunci: *Machine learning, malachite green, polynomial regression, second harmonic generation, support vector regression*

ABSTRACT

NADA NAFISAH. Machine learning-Based Modeling of *Rotational Anisotropy Second Harmonic Generation Data* of *Malachite Green*. Supervised by HENDRADI HARDHIENATA and HUSIN ALATAS.

Malachite Green (MG) is a toxic food contaminant that is important to detect on surfaces. *Second Harmonic Generation* (SHG) is highly sensitive to adsorbed molecules; however, its pattern modeling generally relies on physical models that require specific assumptions. This study applies and compares data-driven machine learning approaches to model the SHG intensity pattern of MG on a silicon surface as a function of polarization angle and evaluates their relationship to the *Simplified Bond Hyperpolarizability Model* (SBHM). The polarization angle was transformed into sine and cosine features, and *Support Vector Regression*, *Polynomial Regression*, and *Random Forest* were *Trained* using Experimental data from seven concentration variations. *Support Vector Regression* and sixth-degree *Polynomial Regression* showed the best performance, while *Random Forest* was less suitable for the continuous RA-SHG pattern. Both models reconstructed the curves with numerical performance comparable to or better than SBHM, although they are positioned as complementary approaches because SBHM remains superior in providing physical interpretation.

Keywords: *Machine learning, malachite green, polynomial regression, second harmonic generation, support vector regression*



@Hak cipta milik 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 2026
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.

PEMODELAN DATA *ROTATIONAL ANISOTROPY SECOND HARMONIC GENERATION* PADA *MALACHITE GREEN* MENGGUNAKAN *MACHINE LEARNING*

NADA NAFISAH

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
2026**



@Hak cipta milik 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.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

1. Abd. Djamil Husin, S.Si., M.Si.
2. Dr. Faozan, S.Si., M.Si.

Judul Skripsi : *Pemodelan Data Rotational Anisotropy Second Harmonic Generation pada Malachite Green Menggunakan Machine Learning*

Nama : Nada Nafisah
NIM : G7401221032

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. rer. nat. Hendradi Hardhienata, S.Si., M.Si.
NIP. 19830114 200812 1 001



Pembimbing 2:
Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si.
NIP. 19710604 199802 1 001



Diketahui oleh

Ketua Departemen Fisika:
Dr. Ir. Irmansyah, M.Si.
NIP. 19680916 199403 1 001



Tanggal Ujian: 10 Agustus 2026

Tanggal Lulus:

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

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Subhanahu wa Ta'ala atas segala rahmat, karunia, dan izin-Nya sehingga skripsi yang berjudul “Pemodelan Data *Rotational Anisotropy Second Harmonic Generation* pada *Malachite Green* Menggunakan *Machine Learning*” dapat diselesaikan dengan baik. Shalawat serta salam semoga senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad Shallallahu ‘alaihi wa sallam.

Penulis menyampaikan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada Bapak Dr.rer.nat. Hendradi Hardhienata, S.Si., M.Si. dan Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si. selaku dosen pembimbing atas bimbingan, arahan, dan dukungan selama proses penelitian dan penyusunan skripsi ini. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada dosen penguji, dosen pembimbing akademik, serta seluruh dosen dan tenaga kependidikan Departemen Fisika, FMIPA, IPB University atas ilmu dan bantuan yang diberikan selama masa studi.

Dengan penuh rasa hormat, penulis mengucapkan terima kasih kepada Bapak Supriadi dan Ibu Fitriyah selaku orang tua penulis atas doa, kasih sayang, dukungan, dan pengorbanan yang tidak pernah putus. Terima kasih juga kepada keluarga besar yang senantiasa memberikan semangat dan doa selama proses studi.

Ucapan terima kasih turut penulis sampaikan kepada teman-teman terdekat, yaitu Ayu Bonita Pertiwi Harianja, Mirananda Chairunissa Amin, Siti Puji Rahayu, Fathya Yeriza, Fuji Rahma Febriyanti, Alifia Atika, Naila Sakhsiya, Adinda Rachmalia, Ika Nurjannah, Azzahra Farhatusakinah atas dukungan dan kebersamaan selama masa perkuliahan. Penulis juga menyampaikan terima kasih kepada seorang laki-laki yang pernah menjadi bagian dari perjalanan penulis dan memberikan pelajaran berharga yang turut membentuk proses pendewasaan penulis selama penyusunan skripsi ini. Selain itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada seluruh teman-teman Fisika Angkatan 59 yang telah memberikan pengalaman dan pembelajaran berharga selama masa studi.

Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada seluruh pihak yang telah membantu secara langsung maupun tidak langsung dalam pelaksanaan penelitian ini. Terakhir, penulis mengapresiasi diri sendiri atas usaha, ketekunan, dan perjuangan yang telah dilalui hingga skripsi ini dapat diselesaikan.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih memiliki keterbatasan. Oleh karena itu, kritik dan saran yang membangun sangat diharapkan. Semoga karya ilmiah ini dapat memberikan manfaat dan berkontribusi bagi pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya pada bidang optik nonlinier dan penerapan *machine learning* dalam analisis data eksperimen fisika.

Bogor, Juli 2026

Nada Nafisah



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Ruang Lingkup Penelitian	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Optik Nonlinier	4
2.2 <i>Second Harmonic Generation (SHG)</i>	4
2.3 <i>Rotational Anisotropy Second-Harmonic Generation (RA-SHG)</i>	5
2.4 <i>Simplified Bond Hyperpolarizability Model (SBHM)</i>	5
2.5 Kontaminan Pangan <i>Malachite Green</i>	7
2.6 Pembelajaran Mesin (<i>Machine learning</i>)	7
2.7 Metrik Evaluasi	9
III METODE	11
3.1 Waktu dan Tempat	11
3.2 Alat dan Bahan	11
3.3 Prosedur Kerja	11
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	18
4.1 Karakteristik Dataset dan Praproses	18
4.2 Performa Model pada Data Uji	18
4.3 Titik Kritis pada <i>Polynomial Degree 4</i>	20
4.4 Analisis Kestabilan dan Indikasi <i>Overfitting</i>	21
4.5 Sensitivitas Rasio dan Batas Minimum Data Latih	22
4.6 Perbandingan dengan Model Fisis SBHM	24
4.7 Pengaruh Konsentrasi terhadap Intensitas dan Performa Model	26
4.8 Uji Prediksi pada Sudut Tersembunyi	27
4.9 Visualisasi Pola Anisotropi	28
4.10 Ringkasan Temuan	29
V SIMPULAN DAN SARAN	31
5.1 Simpulan	31
5.2 Saran	31
DAFTAR PUSTAKA	32
RIWAYAT HIDUP	34

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



DAFTAR TABEL

1	Variasi proporsi <i>train-test split</i> yang diuji dalam analisis sensitivitas	14
2	Parameter GridSearchCV untuk SVR dan <i>Random Forest</i>	15
3	Metrik evaluasi yang digunakan dalam penelitian	16
4	Jumlah titik data dan <i>step</i> sudut rekonstruksi per eksperimen	18
5	Ringkasan performa model berdasarkan rata-rata tujuh eksperimen (proporsi 70:30)	19
6	<i>Test R²</i> per eksperimen untuk SVR, <i>polynomial deg 6</i> , dan <i>Random Forest</i>	19
7	Kestabilan performa model terhadap lima variasi <i>seed</i> acak ($5 \text{ seed} \times 7$ eksperimen)	21
8	Rata-rata <i>Test R²</i> tujuh model pada sembilan proporsi <i>train-test</i> (rata-rata tujuh eksperimen)	23
9	Rata-rata <i>test</i> RMSE (satuan arbitrer) tujuh model pada sembilan proporsi	23
10	Perbandingan <i>Full R²</i> antara SBHM, SVR, <i>Polynomial deg 6</i> , dan <i>Random Forest</i> per eksperimen	25
11	Intensitas maksimum dan <i>Test R²</i> model terhadap variasi konsentrasi MG	27
12	Hasil <i>blind test</i> pada tujuh eksperimen	27

DAFTAR GAMBAR

1	Output intensitas RA-SHG MG/Si(001); (a) P-out simulasi SBHM dari referensi Hardhienata <i>et al.</i> 2025, (b) P-out eksperimen dari referensi Gassin <i>et al.</i> 2016	5
2	Diagram alir pelaksanaan penelitian	12
3	Performa Avg <i>Test R²</i> <i>Polynomial Regression</i> terhadap <i>degree</i>	20
4	Distribusi <i>Test R²</i> model pada variasi <i>seed</i> acak	22
5	<i>Heatmap Test R²</i> per eksperimen dan rasio <i>Train-test</i>	24
6	Perbandingan kurva intensitas SHG untuk tujuh konsentrasi	26
7	Representasi polar intensitas SHG untuk tujuh konsentrasi	29