

PREDIKSI SIFAT ELEKTRODA SEBAGAI ANODA UNTUK BATERAI LI-ION MENGGUNAKAN METODE *MACHINE LEARNING*

ALIZA SALSABILA FEBRIANTY



**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

- 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 “Prediksi Sifat Elektroda sebagai Anoda untuk Baterai Li-ion Menggunakan Metode *Machine Learning*” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apapun 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 2025

Aliza Salsabila Febrianty
NIM. G7401211026



ABSTRAK

ALIZA SALSABILA FEBRIANTY. Prediksi Sifat Elektroda sebagai Anoda untuk Baterai Li-ion Menggunakan Metode *Machine Learning*. Dibimbing oleh FAOZAN AHMAD dan HUSIN ALATAS.

Penelitian ini berfokus pada pembangunan model *machine learning* untuk prediksi sifat elektroda sebagai anoda baterai Li-ion, yang menjadi solusi untuk analisis struktur material dengan DFT yang dinilai kurang efektif dari segi waktu. Dataset yang digunakan terdiri dari 13 kolom dan 1.942 baris, fitur material pada dataset diuraikan dengan *library Chemparse*. Tiga kombinasi model *machine learning* yang berbasis *decision tree* yaitu *Random Forest*, *XGBoost*, dan *CatBoost* diterapkan pada penelitian ini dengan dua variabel target yaitu *binding energy at most stable site* (eV) dan *charge transfer from Li at most stable site* (e), masing-masing variabel target di-setting dengan dua skenario, yang pertama dengan melibatkan semua fitur sebagai variabel prediktor, dan kedua hanya melibatkan komposisi material. Performa model dievaluasi dengan metrik MAE, MSE, RMSE, dan R^2 . Hasil yang diperoleh dalam penelitian ini menunjukkan bahwa model terbaik yaitu model *XGBoost* dengan melibatkan semua fitur pada dataset sebagai variabel prediktor, selain itu didapatkan juga variabel yang paling berpengaruh dari segi unsur yaitu H dan dari segi bukan unsur adalah *area* (\AA^2).

Kata kunci: baterai lithium ion, *catboost*, *extreme gradient boosting*, *machine learning*, *random forest*

ABSTRACT

ALIZA SALSABILA FEBRIANTY. Prediction of Electrode Properties as Anode Materials for Lithium-ion Batteries Using Machine Learning Methods. Supervised by FAOZAN AHMAD and HUSIN ALATAS.

This study focuses on the development of machine learning models to predict the properties of electrode as potential anodes in lithium-ion batteries. The approach serves as time-efficient alternative to structure analysis using Density functional theory (DFT), which is often computationally expensive. The dataset used consists of 13 features and 1,942 entries, with material descriptors extracted using the Chemparse library. Three tree-based machine learning models Random Forest, XGBoost, and CatBoost were implemented, targeting two output variables, first binding energy at the most stable site (eV), and second, charge transfer from Li at the most stable site (e). Each target variable was analyzed under two feature scenarios: one involving all available features and another involving only elemental composition. Model performance was evaluated using MAE, MSE, RMSE, and R^2 metrics. The results indicate that XGBoost yielded the best predictive performance when all features were included. Additionally, feature importance analysis revealed that hydrogen (H) was the most influential elemental feature, while *area* (\AA^2) was the most significant non-elemental descriptor.

Keywords: lithium-ion battery, catboost, extreme gradient boosting, machine learning, random forest

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 2047¹
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.

PREDIKSI SIFAT ELEKTRODA SEBAGAI ANODA UNTUK BATERAI LI-ION MENGGUNAKAN METODE *MACHINE LEARNING*

ALIZA SALSABILA FEBRIANTY

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
2025**

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.

Penguji pada ujian Skripsi :

1. Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada Wijaya Puspita, S.Si., M.Si.
2. Dr. Erus Rustami, S.Si., M.Si.

Judul Skripsi : Prediksi Sifat Elektroda sebagai Anoda untuk Baterai Li-ion
Menggunakan Metode *Machine Learning*
Nama : Aliza Salsabila Febrianty
NIM : G7401211026

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Faozan, S.Si., M.Si.

Pembimbing 2:
Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si.



Diketahui oleh

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



Tanggal Ujian: 18 Juli 2025

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.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

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 kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Penelitian ini dilaksanakan sejak bulan Agustus 2024 sampai bulan Mei 2025 dengan judul “Prediksi Sifat Elektroda sebagai Anoda untuk Baterai Li-ion Menggunakan Metode *Machine Learning*”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada semua pihak yang terlibat dalam proses penelitian ini hingga selesai. Semua pihak yang bersangkutan diantaranya yaitu:

1. Orang tua tersayang yakni Ibu Paoziah dan Bapak Mahpud atas semua do'a dan dukungan baik dari segi ekonomi dan banyak hal lainnya sehingga penulis bisa menempuh pendidikan di tingkat universitas hingga skripsi ini dapat terselesaikan;
2. Saudara-saudara perempuan penulis yakni Intan Azizah, S.Pd.,Gr. sebagai kakak tersayang penulis yang telah memberikan motivasi dan dukungan berupa materi, Imanda Amalia adik tercinta penulis yang selalu kebersamai, menghibur, dan memberi semangat kepada penulis dalam setiap situasi dan kondisi sehingga skripsi ini dapat terselesaikan;
3. Dr. Faozan, S.Si., M.Si. dan Prof. Dr. Husin Alatas, S.Si., M.Si. selaku dosen pembimbing penulis, yang membantu penulis dengan dedikasi penuh dari awal penelitian hingga karya ini terselesaikan;
4. Semua dosen dan staf Departemen Fisika untuk semua ilmu dan pelayanan yang diberikan untuk mendukung segala kegiatan mahasiswa;
5. Semua jajaran pengurus LSI yang telah memberikan layanan dan fasilitas yang sangat memuaskan untuk semua pengunjung, sehingga penulis dapat dengan nyaman untuk belajar dan menyusun tugas akhir ini;
6. Azali Farabi, S.Mat. yang telah memberikan ilmu, waktu, dukungan, motivasi, dan candaan sehingga tulisan ini terselesaikan;
7. Sahabat seperjuangan satu daerah yakni Ela, Thony, Amel, Wira, Hasri, Tri, Ica, Yogi, dan Reza yang telah kebersamai perjuangan di Bogor sebagai mahasiswa di IPB University.
8. Teman-teman Fisika 58 yang telah kebersamai penulis pada saat menempuh pendidikan di bangku perkuliahan dan penulis jadikan sebagai bahan refleksi diri untuk terus meningkatkan kualitas diri.
9. Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada Wijaya Puspita, S.Si., M.Si. dan Dr. Erus Rustami, S.Si., M.Si. selaku penguji skripsi.
10. Terakhir, terimakasih saya ucapkan untuk diri saya sendiri. Terima kasih karena telah berjuang sampai di titik ini, terima kasih karena tetap bertahan dan mengupayakan semuanya dengan usaha yang maksimal. Untuk kedepannya, jadilah pribadi yang lebih baik dan tetap semangat untuk tantangan-tantangan yang akan datang.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juli 2025

Aliza Salsabila Febrianty



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

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 ISI

DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Baterai	3
2.2 Baterai Li-ion	3
2.3 <i>Charge and Discharge</i>	4
2.4 Material 2D	5
2.5 <i>Machine Learning</i> (ML)	5
2.6 <i>GridSearchCV</i>	6
2.7 <i>Random Forest</i> (RF)	6
2.8 <i>XGBoost</i> (XGB)	8
2.9 <i>CatBoost</i> (CB)	10
2.10 <i>StandardScaler</i>	11
2.11 <i>RobustScaler</i>	11
III METODE	13
3.1 Lokasi dan Waktu Penelitian	13
3.2 Sumber Data	13
3.3 Definisi Operasional	13
3.4 Prosedur Analisis Data	14
3.5 Diagram Alir Penelitian	16
3.6 <i>Model Evaluation</i>	17
3.7 Perangkat Lunak	19
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
4.1 <i>Preprocessing Data</i> (Pra-pemrosesan Data)	20
4.2 <i>Exploratory Data Analysis</i> (EDA)	29
4.3 <i>Model Building</i> (Pembangunan Model)	30
4.4 <i>Model Evaluation</i> (Evaluasi Model)	34
4.5 <i>Model Prediction</i> (Prediksi Model)	40
V SIMPULAN DAN SARAN	45
5.1 Simpulan	45
5.2 Saran	45
DAFTAR PUSTAKA	46
LAMPIRAN	49
RIWAYAT HIDUP	52

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

DAFTAR TABEL

1	Definisi operasional variabel pada dataset	13
2	Data hasil dari penguraian formula material dengan menggunakan <i>library chemparse</i>	20
3	Pelacakan data kosong pada semua variabel	22
4	Jumlah data yang kosong pada semua variabel	23
5	Jumlah <i>outlier</i> pada variabel target	26
6	Informasi statistik dataset dari proses EDA	29
7	Optimasi untuk nilai dari <i>hyperparameter</i> yang paling baik menggunakan <i>GridSearchCV</i> pada model <i>random forest</i>	31
8	Optimasi untuk nilai dari <i>hyperparameter</i> yang paling baik menggunakan <i>GridSearchCV</i> pada model <i>xgboost</i>	32
9	Optimasi untuk nilai dari <i>hyperparameter</i> yang paling baik menggunakan <i>GridSearchCV</i> pada model <i>catboost</i>	33
10	Hasil evaluasi model untuk variabel target <i>binding energy at most stable site</i> (eV)	34
11	Hasil evaluasi model untuk variabel target <i>charge transfer from Li at most stable site</i> (e)	37
12	Sepuluh material dengan jumlah unsur H terbanyak dalam formulanya	39
13	Hasil prediksi semua model untuk data acak dengan semua variabel target diuji dengan semua variabel prediktor	41
14	Hasil prediksi semua model untuk data acak dengan semua variabel target diuji dengan variabel prediktor berupa komposisi material saja	41
15	Nilai delta (Δ) hasil prediksi semua model untuk data acak dengan semua variabel target diuji dengan semua variabel prediktor	42
16	Nilai delta (Δ) hasil prediksi semua model untuk data acak dengan semua variabel target diuji dengan variabel prediktor berupa komposisi material saja	43
17	Hail metrik uji prediksi <i>binding energy</i> oleh <i>charge transfer</i>	44

DAFTAR GAMBAR

1	Komponen-komponen dari baterai Li-ion	4
2	Baterai Li-ion saat proses <i>discharge</i> dan <i>charge</i>	4
3	Alur <i>random forest</i>	7
4	Skema diagram dari model <i>XGB regression tree</i>	8
5	Diagram <i>CatBosst</i>	10
6	<i>Machine learning workflow</i>	17
7	Visualisasi sebaran data variabel target <i>binding energy at most stable site</i> (eV)	21
8	Visualisasi sebaran data variabel <i>charge transfer from Li at most stable site</i> (e)	21
9	Visualisasi korelasi semua variabel dengan <i>heatmap</i>	24
10	Visualisasi sebaran data variabel <i>thermodynamic_stability</i> [C2DB]	25

11	Visualisasi sebaran data variabel <i>bandgap</i> (eV)[C2DB]	25
12	Visualisasi hasil deteksi <i>outlier</i> pada semua variabel	27
13	Visualisasi hasil sebaran data sebelum dan setelah diterapkannya proses transformasi untuk aspek penting dalam stabilitas material 2D sebagai anoda baterai Li-Ion yaitu <i>dynamic stability stiffness</i>	28
14	Visualisasi hasil sebaran data sebelum dan setelah diterapkannya proses transformasi untuk aspek penting dalam stabilitas material 2D sebagai anoda baterai Li-Ion yaitu <i>dynamic stability phonons</i>	28
15	Visualisasi hubungan variabel <i>thermodynamic_stability</i> [C2DB] dan <i>rms displacement per area</i> (I/A)	29
16	Grafik pemeringkatan fitur <i>random forest</i> dengan variabel prediktor hanya unsur (a), grafik pemeringkatan fitur <i>random forest</i> dengan variabel semua fitur pada dataset (b), grafik pemeringkatan fitur <i>xgboost</i> dengan variabel target hanya unsur (c), grafik pemeringkatan fitur <i>xgboost</i> dengan variabel semua fitur pada dataset (d), grafik pemeringkatan fitur <i>catboost</i> dengan variabel target hanya unsur (e), grafik pemeringkatan fitur <i>catboos</i> dengan variabel semua fitur pada dataset (f) untuk kasus variabel targetnya adalah <i>binding energy at most stable site</i> (eV)	36
17	Grafik pemeringkatan fitur <i>random forest</i> dengan variabel prediktor hanya unsur (a), grafik pemeringkatan fitur <i>random forest</i> dengan variabel semua fitur pada dataset (b), grafik pemeringkatan fitur <i>xgboost</i> dengan variabel target hanya unsur (c), grafik pemeringkatan fitur <i>xgboost</i> dengan variabel semua fitur pada dataset (d), grafik pemeringkatan fitur <i>catboost</i> dengan variabel target hanya unsur (e), grafik pemeringkatan fitur <i>catboos</i> dengan variabel semua fitur pada dataset (f) untuk kasus variabel target <i>charge transfer from Li at most stable site</i> (e)	38

DAFTAR LAMPIRAN

1	<i>Library</i> yang digunakan	50
2	Penguraian komposisi material dengan <i>library chemparse</i>	50
3	Nama semua kolom pada keseluruhan dataset	50
4	Informasi statistik variabel target <i>binding energy at most stable site</i> (eV)	50
5	Informasi statistik variabel target <i>charge transfer from Li at most stable site</i> (e)	51
6	Informasi statistik variabel target <i>charge transfer from Li at most stable site</i> (e)	51
7	Kodingan untuk membangkitkan data acak	51

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

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

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.