

Bab IV Hasil dan Pembahasan

IV.1 Pelatihan Model

Pada tahap pelatihan ini, tiga model Machine Learning diterapkan, yaitu *Artificial Neural Network* (ANN), *Convolutional Neural Network* (CNN), dan *Recurrent Neural Network* (RNN).

IV.1.1 Pelatihan Model ANN

Arsitektur ANN yang digunakan dirancang untuk memproses data tabular atau non-sequensial. *Input* model didefinisikan melalui parameter *input_shape*, yang sesuai dengan jumlah fitur pada data training. Model ini terdiri dari tiga lapisan tersembunyi (*hidden layers*), masing-masing dengan 128, 64, dan 32 neuron, yang menggunakan fungsi aktivasi ReLU untuk menangkap hubungan non-linear antara fitur. Lapisan keluaran (*output layer*) memiliki satu neuron tanpa fungsi aktivasi, karena model ditujukan untuk tugas prediksi yang menghasilkan nilai kontinu, yaitu berupa nilai prediksi nilai HOMO-LUMO gap (eV). Model dikompilasi menggunakan *optimizer* Adam untuk pembaruan bobot yang cepat dan stabil, Dengan fungsi kehilangan *Mean Squared Error* (MSE) untuk mengukur kesalahan prediksi, serta metrik evaluasi seperti *Mean Absolute Error* (MAE), *Root Mean Squared Error* (RMSE), dan R-squared dan model dievaluasi secara menyeluruh. Arsitektur ini cocok untuk tugas prediktif berbasis fitur numerik yang memerlukan analisis hubungan non-linear, dengan konfigurasi sederhana namun efektif.

Pada model ANN, dilakukan *fine-tuning* dengan konfigurasi *hyperparameter* yang berbeda untuk meningkatkan performa model. Hal ini bertujuan untuk menemukan kombinasi parameter pelatihan yang paling optimal sehingga model dapat mempelajari pola data dengan baik tanpa mengalami *overfitting* atau *underfitting*. Pada proses ini, jumlah *epoch* yang diuji adalah 100, 200, 300, 400, dan 500, dengan variasi parameter pembelajaran (*learning rate*) sebesar 0,01, 0,001, dan 0,0001. Setiap kombinasi konfigurasi *hyperparameter* diuji secara sistematis, dan kinerjanya dievaluasi menggunakan metrik MAE. Tabel IV.1 menunjukkan hasil MAE untuk setiap konfigurasi pada pelatihan.

Tabel IV.1 Hasil *Mean Absolute Error* (MAE) untuk Konfigurasi Epoch dan Learning Rate pada Pelatihan Model ANN.

<i>Learning Rate</i>	<i>Epoch</i>				
	100	200	300	400	500
0,01	0,2121	0,1819	0,1657	0,1783	0,1308
0,001	0,1822	0,1536	0,1374	0,1276	0,1162
0,0001	0,1304	0,0995	0,0836	0,0831	0,0608

Tabel IV.1 menunjukkan hasil *Mean Absolute Error* (MAE) untuk setiap konfigurasi pelatihan. Berdasarkan tabel tersebut, MAE menunjukkan penurunan seiring bertambahnya jumlah epoch, terutama pada *learning rate* yang lebih kecil seperti 0,0001, yang memberikan hasil pelatihan paling stabil dengan MAE terendah pada 500 *epoch*. Namun, learning rate yang lebih tinggi seperti 0,01 menghasilkan MAE yang lebih fluktuatif, menunjukkan pelatihan yang kurang stabil. Hasil analisis ini membantu dalam menentukan konfigurasi *hyperparameter* yang paling efektif untuk memastikan model ANN bekerja secara optimal dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap.

IV.1.2 Pelatihan Model CNN

Arsitektur CNN yang digunakan dirancang untuk memproses data numerik sekuensial guna melakukan prediksi berbasis data tersebut. Model dibangun menggunakan kerangka kerja *TensorFlow/Keras* dan dimulai dengan mendefinisikan bentuk input melalui variabel *input_shape*, yang menggambarkan jumlah fitur dalam data setelah *preprocessing* dan satu fitur per elemen *sekuens*. Model diimplementasikan secara berurutan menggunakan *keras.Sequential*, dimulai dengan lapisan input yang menerima data sesuai dengan bentuk yang telah ditentukan.

Lapisan berikutnya adalah *Conv1D*, yang memiliki 32 filter dan ukuran kernel 3, bertugas menangkap pola lokal dalam data sekuensial. Fungsi aktivasi ReLU diterapkan untuk memperkenalkan non-linearitas, yang penting untuk mempelajari hubungan kompleks antar fitur. Setelah itu, lapisan *MaxPooling1D* dengan ukuran pool 2 digunakan untuk mereduksi dimensi data, sehingga membantu mengurangi kompleksitas dan risiko *overfitting*. Selanjutnya, data yang telah diproses oleh

lapisan konvolusi diratakan menggunakan *Flatten*, yang mengubah data menjadi vektor 1 dimensi agar kompatibel dengan lapisan *dense*. Kemudian, lapisan *dense* dengan 64 neuron dan fungsi aktivasi ReLU digunakan untuk memproses fitur lebih lanjut. Lapisan terakhir adalah lapisan *output* dengan satu neuron, yang menghasilkan nilai kontinu sebagai hasil prediksi, sesuai dengan tugas regresi.

Model ini dikompilasi dengan *optimizer* Adam, yang dikenal karena efisiensinya dalam memperbarui bobot secara adaptif, serta fungsi *Mean Squared Error* (MSE) untuk mengukur kesalahan prediksi, serta metrik evaluasi seperti *Mean Absolute Error* (MAE), *Root Mean Squared Error* (RMSE), dan *R-squared*. Dengan arsitektur ini, model memiliki kemampuan untuk mengenali pola dalam data sekuensial dan menghasilkan prediksi akurat. Desainnya yang seimbang antara efisiensi dan kompleksitas memastikan model dapat mempelajari pola yang relevan tanpa risiko *overfitting*, menjadikannya solusi yang sesuai untuk tugas prediksi yaitu estimasi nilai HOMO-LUMO gap.

Pada model CNN, dilakukan *fine-tuning* dengan berbagai konfigurasi *hyperparameter* untuk meningkatkan performa model. Tujuannya adalah menemukan kombinasi parameter pelatihan yang optimal sehingga model mampu mempelajari pola data secara efektif tanpa mengalami *overfitting* atau *underfitting*. Dalam proses ini, jumlah *epoch* yang diuji meliputi 100, 200, 300, 400, dan 500, dengan variasi *learning rate* sebesar 0,01, 0,001, dan 0,0001. Setiap kombinasi konfigurasi *hyperparameter* diuji secara sistematis, dan performa model dievaluasi menggunakan metrik MAE. Hasil evaluasi MAE untuk setiap konfigurasi ditampilkan dalam Tabel IV.2.

Tabel IV.2 Hasil *Mean Absolute Error* (MAE) untuk Konfigurasi Epoch dan Learning Rate pada Pelatihan Model CNN.

<i>Learning Rate</i>	<i>Epoch</i>				
	100	200	300	400	500
0,01	0,1227	0,1146	0,0608	0,0506	0,0459
0,001	0,0922	0,0701	0,0550	0,0386	0,0293
0,0001	0,0495	0,0448	0,0430	0,0445	0,0359

Tabel IV.2 menunjukkan hasil evaluasi performa model CNN berdasarkan metrik MAE untuk berbagai konfigurasi learning rate (0,01, 0,001, dan 0,0001) pada jumlah *epoch* tertentu (100, 200, 300, 400, dan 500). Dengan *learning rate* 0,01, model menunjukkan penurunan MAE secara signifikan pada awal pelatihan, tetapi nilai MAE tetap lebih tinggi dibandingkan konfigurasi lainnya setelah 500 *epoch*, yaitu sebesar 0,0459. Untuk *learning rate* 0,001, model menghasilkan nilai MAE yang lebih rendah pada setiap epoch dibandingkan 0,01, dengan hasil terbaik pada *epoch* 500 sebesar 0,0293, menunjukkan konvergensi yang baik. Pada *learning rate* 0,0001, MAE mulai dari nilai yang relatif kecil yaitu 0,0495 dan menurun secara perlahan. Setelah 500 *epoch*, nilai MAE mencapai 0,0359, yang meskipun stabil, masih sedikit lebih tinggi dibandingkan konfigurasi 0,001. Dari hasil ini, dapat disimpulkan bahwa *learning rate* 0,001 dan *epoch* 500 memberikan keseimbangan terbaik antara kecepatan konvergensi dan hasil akhir, menjadikannya pilihan optimal untuk pelatihan model CNN dalam studi ini.

IV.1.3 Pelatihan Model RNN

Arsitektur yang digunakan merupakan *Recurrent Neural Network* (RNN) sederhana dengan lapisan SimpleRNN yang dirancang untuk memproses data sekuensial seperti SMILES. Model ini memiliki tiga lapisan utama yaitu lapisan pertama adalah SimpleRNN dengan 64-unit dan fungsi aktivasi ReLU, yang bertugas memproses data secara berurutan dan menangkap hubungan temporal antar langkah waktu. Lapisan kedua adalah lapisan *Dense* dengan 32 neuron, menggunakan fungsi aktivasi ReLU untuk menangkap pola non-linear dari keluaran RNN. Lapisan terakhir adalah *Dense* dengan satu neuron tanpa fungsi aktivasi, menghasilkan *output* kontinu berupa nilai target, yaitu HOMO-LUMO gap. Model ini dikompilasi dengan optimizer Adam, yang menggabungkan kecepatan konvergensi dan stabilitas, serta menggunakan fungsi *Mean Squared Error* (MSE) untuk mengukur kesalahan prediksi, serta metrik evaluasi seperti *Mean Absolute Error* (MAE), *Root Mean Squared Error* (RMSE), dan *R-squared*.

Pada model RNN, dilakukan proses *fine-tuning* dengan berbagai konfigurasi *hyperparameter* untuk meningkatkan kinerja model. Proses ini bertujuan untuk

menentukan kombinasi parameter pelatihan yang paling optimal agar model dapat mempelajari pola dalam data secara efisien tanpa mengalami *overfitting* atau *underfitting*. Dalam eksperimen ini, jumlah *epoch* yang diuji adalah 100, 200, 300, 400, dan 500, dengan variasi learning rate sebesar 0,01, 0,001, dan 0,0001. Setiap kombinasi konfigurasi hyperparameter diujikan secara sistematis, dan performanya diukur menggunakan metrik *Mean Absolute Error* (MAE). Hasil evaluasi MAE untuk setiap konfigurasi dapat dilihat pada Tabel IV.2:

Tabel IV.3 Hasil *Mean Absolute Error* (MAE) untuk Konfigurasi Epoch dan Learning Rate pada Pelatihan Model RNN.

<i>Learning Rate</i>	<i>Epoch</i>				
	100	200	300	400	500
0,01	0,0064	0,0056	0,0044	0,0039	0,0025
0,001	0,0096	0,0076	0,0069	0,0051	0,0042
0,0001	0,0072	0,0070	0,0067	0,0059	0,0057

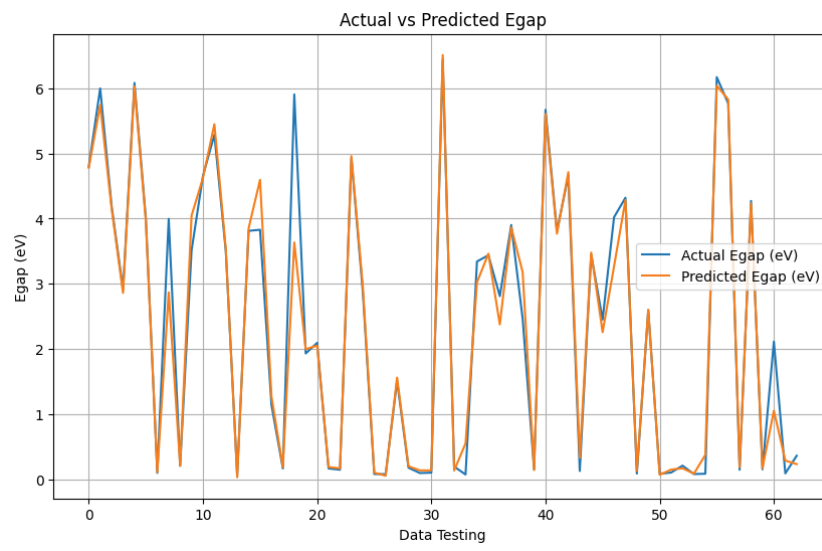
Tabel VI.3 menunjukkan performa model CNN berdasarkan metrik MAE (*Mean Absolute Error*) pada berbagai konfigurasi *learning rate* (0,01, 0,001, dan 0,0001) serta jumlah *epoch* yang diuji (100, 200, 300, 400, dan 500). Pada *learning rate* 0,01, model menunjukkan performa terbaik dengan nilai MAE yang terus menurun di setiap *epoch*, mencapai hasil akhir sebesar 0,0025 pada *epoch* 500. Hal ini menunjukkan bahwa *learning rate* ini memungkinkan model mencapai konvergensi dengan cepat dan efektif. Sementara itu, *learning rate* 0,001 juga menunjukkan tren penurunan MAE secara konsisten, tetapi nilai akhirnya pada *epoch* 500 sebesar 0,0042 masih lebih tinggi dibandingkan konfigurasi 0,01, menandakan bahwa *learning rate* ini membutuhkan lebih banyak iterasi untuk mendekati performa optimal. Sebaliknya, *learning rate* 0,0001 memiliki nilai MAE yang relatif lebih tinggi pada semua *epoch*, dengan nilai akhir sebesar 0,0057 pada *epoch* 500, yang mencerminkan bahwa *learning rate* ini terlalu kecil sehingga memperlambat proses pembelajaran model. Berdasarkan hasil ini, *learning rate* 0,01 terbukti memberikan performa terbaik dalam pelatihan model RNN karena menghasilkan nilai MAE terendah dalam waktu pelatihan yang lebih singkat dibandingkan konfigurasi lainnya.

IV.2 Evaluasi Model

Evaluasi model dilakukan setelah proses pelatihan dengan tujuan untuk mengukur performa model pada data baru yang tidak digunakan selama pelatihan, namun memiliki karakteristik yang serupa secara statistik maupun representasi fisik. Langkah ini bertujuan untuk memastikan bahwa model dapat mengenali pola data secara efektif dan memiliki kemampuan generalisasi yang baik. Proses evaluasi diterapkan pada masing-masing model, yaitu ANN, CNN, dan RNN sesuai dengan konfigurasi hyperparameter yang telah ditentukan selama pelatihan.

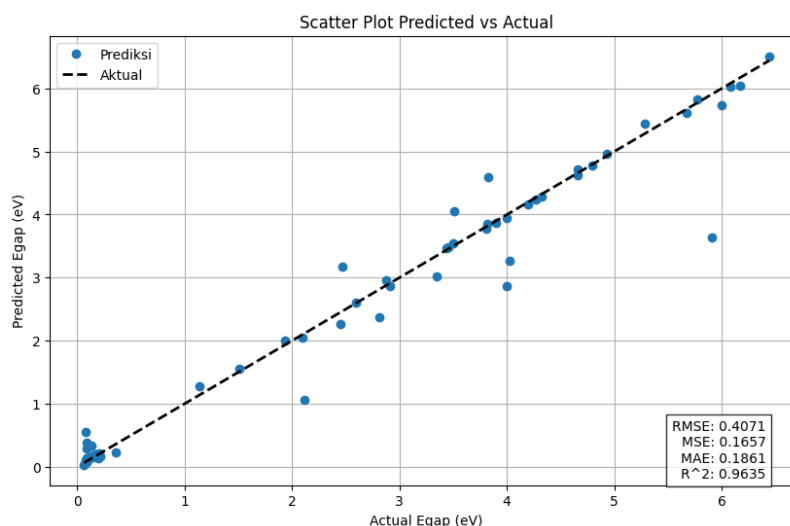
IV.2.1 Evaluasi Model ANN

Dengan menggunakan model ANN yang telah dipilih pada tahap pelatihan, dilakukan pengujian performa menggunakan data tes. Data tes yang diprediksi memiliki karakteristik yang serupa secara statistik maupun representasi fisis dengan data pelatihan. Pengujian ini bertujuan untuk mengevaluasi kemampuan generalisasi model dalam memprediksi data baru yang belum pernah dilihat sebelumnya. Pada pengujian data tes, digunakan konfigurasi hyperparameter terbaik berdasarkan hasil pelatihan, yaitu dengan 500 *epoch* dan *learning rate* sebesar 0,0001. Hasil pengujian menghasilkan nilai metrik evaluasi seperti RMSE (*Root Mean Squared Error*), MSE (*Mean Squared Error*), dan MAE (*Mean Absolute Error*), yang menggambarkan tingkat kesalahan prediksi model terhadap nilai aktual. Selain itu, koefisien determinasi (R^2) juga dihitung untuk mengetahui seberapa besar model mampu menjelaskan variansi dalam data tes.



Gambar IV.1 Hasil *Testing* Perbandingan Nilai HOMO-LUMO gap Aktual dan Prediksi.

Gambar VI.1 menunjukkan evaluasi performa model ANN dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap berdasarkan data uji. Gambar tersebut menggambarkan perbandingan antara nilai HOMO-LUMO gap aktual (*Actual Egap*) dan prediksi model (*Predicted Egap*) pada data uji, di mana sumbu X merepresentasikan indeks data uji, sedangkan sumbu Y menunjukkan nilai HOMO-LUMO gap dalam eV. Garis biru menunjukkan nilai HOMO-LUMO gap aktual, sementara garis oranye menunjukkan prediksi model ANN. Dari grafik ini, terlihat bahwa model mampu mengikuti pola nilai aktual dengan baik, meskipun terdapat beberapa penyimpangan kecil pada beberapa data tertentu, yang menunjukkan bahwa model telah mempelajari pola data tetapi masih ada sedikit deviasi.



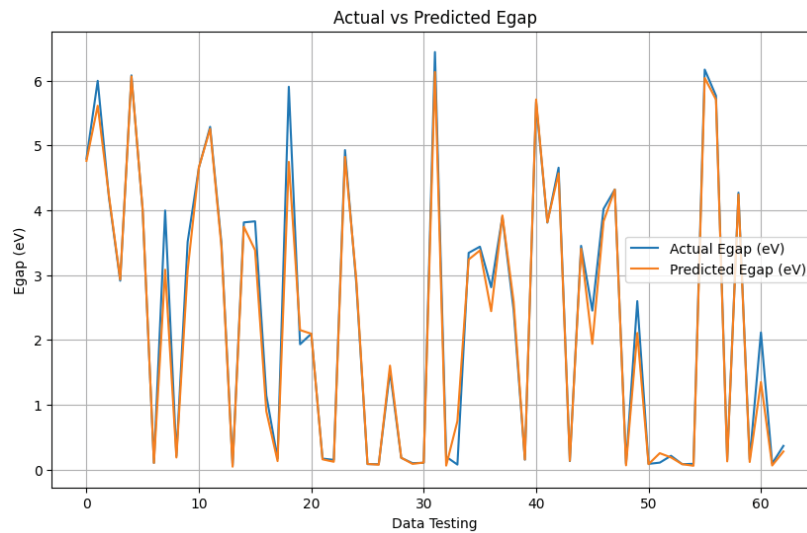
Gambar IV.2 Scatter Plot model ANN

Gambar IV.2 adalah scatter plot yang membandingkan nilai HOMO-LUMO gap aktual (sumbu X) dengan nilai HOMO-LUMO gap prediksi (sumbu Y) untuk semua data uji. Garis hitam putus-putus merepresentasikan garis referensi $y=x$, yang menunjukkan prediksi sempurna. Sebagian besar titik berada sangat dekat dengan garis referensi, menandakan bahwa model ANN memiliki akurasi yang baik dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap. Metrik evaluasi yang ditampilkan dalam gambar ini mendukung analisis tersebut, dengan nilai RMSE (*Root Mean Squared Error*) sebesar 0,4071, MSE (*Mean Squared Error*) sebesar 0,1657, MAE (*Mean Absolute Error*) sebesar 0,1861, dan koefisien determinasi R^2 sebesar 0,9635. Nilai R^2 yang tinggi menunjukkan bahwa model dapat menjelaskan sekitar 96.35% variansi data, yang mencerminkan performa prediksi yang sangat baik.

IV.2.2 Evaluasi Model CNN

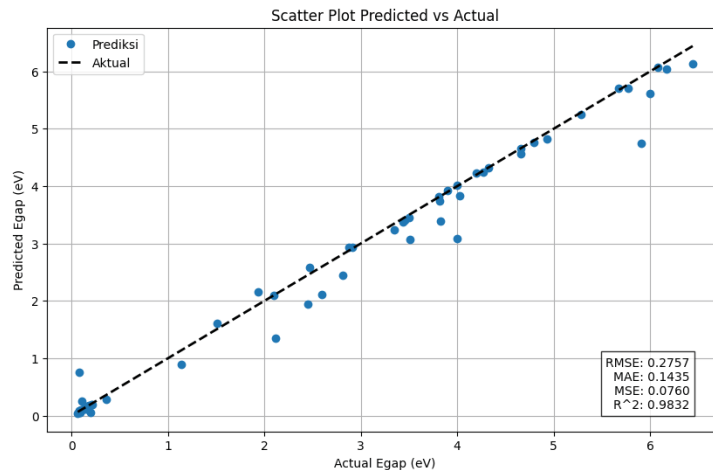
Dengan menggunakan model CNN yang telah dipilih pada tahap pelatihan, dilakukan pengujian performa menggunakan data tes. Data tes yang diprediksi memiliki karakteristik yang serupa secara statistik maupun representasi fisis dengan data pelatihan, sehingga memungkinkan evaluasi kemampuan generalisasi model dalam memprediksi data baru yang belum pernah dilihat sebelumnya. Pada pengujian ini, digunakan konfigurasi hyperparameter terbaik yang diperoleh dari tahap pelatihan, yaitu 500 *epoch* dan *learning rate* sebesar 0,001. Pengujian ini menghasilkan metrik evaluasi seperti RMSE (*Root Mean Squared Error*), MSE

(*Mean Squared Error*), dan MAE (*Mean Absolute Error*), yang menggambarkan tingkat kesalahan prediksi model terhadap nilai aktual. Selain itu, koefisien determinasi (R^2) juga dihitung untuk mengukur seberapa besar model mampu menjelaskan variansi dalam data tes. Hasil ini memberikan gambaran menyeluruh tentang performa model CNN dalam tugas prediksi dan tingkat akurasinya.



Gambar IV.3 Hasil *Testing* Perbandingan Nilai HOMO-LUMO gap Aktual dan Prediksi.

Gambar IV.3 mengevaluasi performa model dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap berdasarkan data uji menggunakan CNN. Gambar tersebut menunjukkan perbandingan antara nilai HOMO-LUMO gap aktual (digambarkan oleh garis biru) dan HOMO-LUMO gap prediksi (digambarkan oleh garis oranye). Sumbu X merepresentasikan indeks data uji, sementara sumbu Y menunjukkan nilai HOMO-LUMO gap dalam satuan eV. Garis prediksi secara umum mengikuti pola garis aktual dengan cukup baik, menandakan bahwa model dapat memprediksi nilai HOMO-LUMO gap dengan tingkat akurasi yang tinggi. Meskipun terdapat sedikit deviasi pada beberapa titik, terutama pada data dengan fluktuasi tinggi, kesesuaian antara kedua garis menunjukkan performa prediksi yang konsisten.



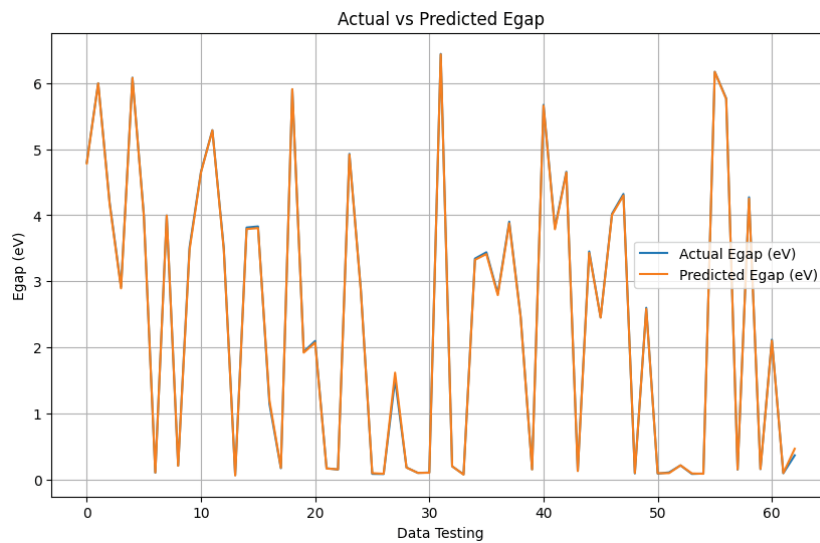
Gambar IV.4 *Scatter Plot* model CNN

Gambar IV.4 adalah scatter plot yang membandingkan nilai HOMO-LUMO gap aktual (sumbu X) dengan nilai HOMO-LUMO gap prediksi (sumbu Y). Garis hitam putus-putus $y=x$ merepresentasikan prediksi sempurna, di mana prediksi identik dengan nilai aktual. Sebagian besar titik biru berada dekat dengan garis referensi ini, menunjukkan tingkat akurasi prediksi yang tinggi. Metrik evaluasi yang ditampilkan, seperti RMSE sebesar 0,2757, MSE sebesar 0,0760, MAE sebesar 0,1435, dan nilai R^2 sebesar 0,9832, mengindikasikan bahwa model dapat menjelaskan sekitar 98.32% variansi data uji dengan tingkat kesalahan yang rendah. Secara keseluruhan, kedua gambar ini menunjukkan bahwa model memiliki kemampuan generalisasi yang sangat baik dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap, dengan akurasi yang tinggi dan kesalahan prediksi yang minimal.

IV.2.3 Evaluasi Model RNN

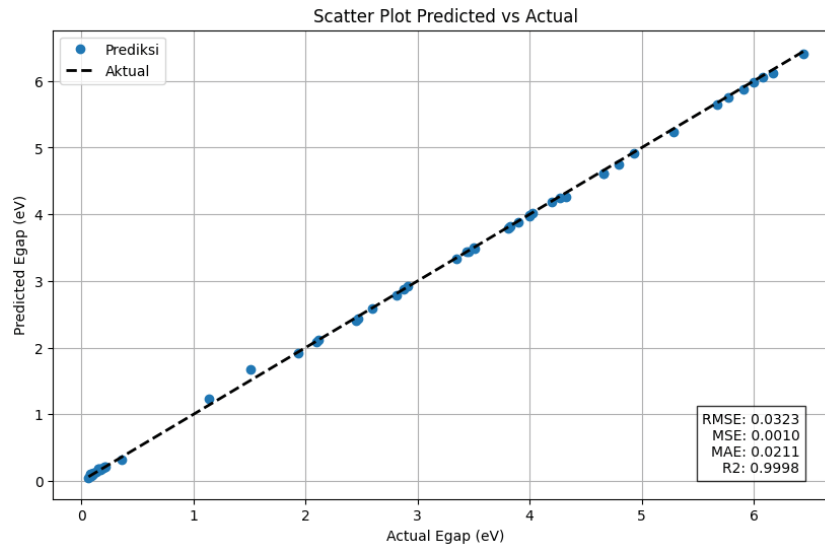
Dengan menggunakan model RNN yang telah dipilih pada tahap pelatihan, dilakukan pengujian performa menggunakan data tes. Data tes yang diprediksi memiliki karakteristik yang serupa secara statistik maupun representasi fisis dengan data pelatihan, sehingga memungkinkan evaluasi kemampuan generalisasi model dalam memprediksi data baru yang belum pernah dilihat sebelumnya. Pada pengujian ini, digunakan konfigurasi *hyperparameter* terbaik yang diperoleh dari tahap pelatihan, yaitu 500 *epoch* dan *learning rate* sebesar 0,01. Pengujian ini menghasilkan metrik evaluasi seperti RMSE (*Root Mean Squared Error*), MSE (*Mean Squared Error*), dan MAE (*Mean Absolute Error*), yang menggambarkan

tingkat kesalahan prediksi model terhadap nilai aktual. Selain itu, koefisien determinasi (R^2) juga dihitung untuk mengukur seberapa besar model mampu menjelaskan variansi dalam data tes. Hasil ini memberikan gambaran menyeluruh tentang performa model RNN dalam tugas prediksi, menunjukkan tingkat akurasi yang tinggi dengan kesalahan prediksi yang minimal, serta kemampuan model untuk mempelajari pola data sekuensial dengan baik.



Gambar IV.5 Hasil *Testing* Perbandingan Nilai HOMO-LUMO gap Aktual dan Prediksi.

Gambar IV.5 menunjukkan evaluasi performa model dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap berdasarkan data uji. Gambar tersebut adalah plot garis yang membandingkan nilai HOMO-LUMO gap aktual (digambarkan dengan garis biru) dan nilai HOMO-LUMO gap prediksi (digambarkan dengan garis oranye). Sumbu X menunjukkan indeks data uji, sementara sumbu Y menunjukkan nilai HOMO-LUMO gap dalam satuan eV. Dari plot ini, terlihat bahwa nilai prediksi model sangat sesuai dengan nilai aktual, ditunjukkan oleh garis biru dan oranye yang hampir seluruhnya tumpang tindih. Hal ini menandakan bahwa model memiliki akurasi tinggi dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap.



Gambar IV.6 *Scatter Plot* model RNN.

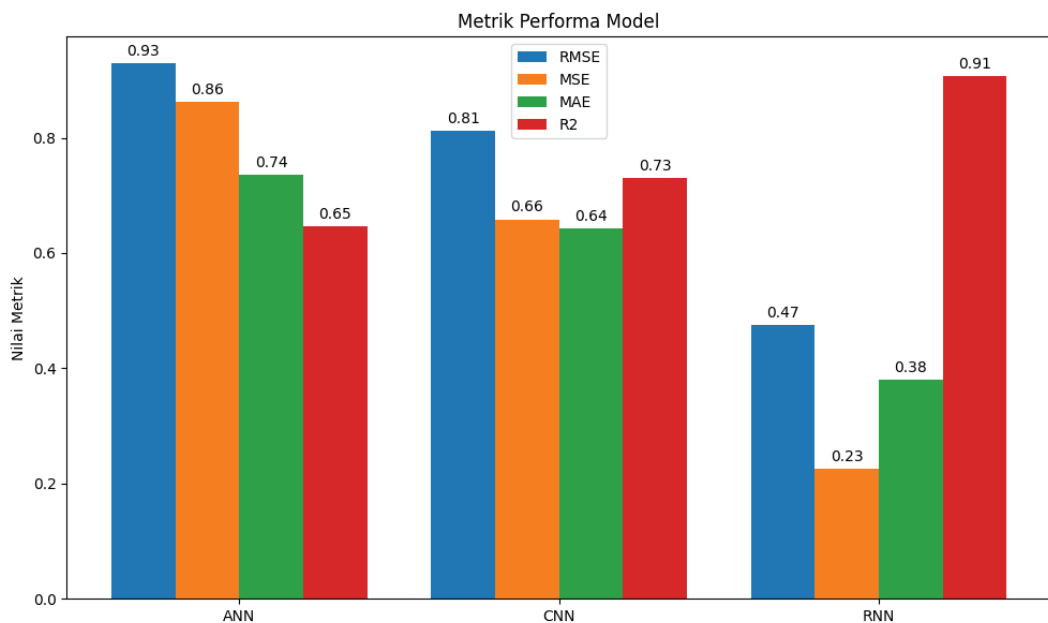
Gambar IV.6 adalah scatter plot yang membandingkan nilai HOMO-LUMO gap aktual (sumbu X) dengan nilai HOMO-LUMO gap prediksi (sumbu Y). Garis hitam putus-putus ($y=x$) merepresentasikan prediksi sempurna, di mana nilai prediksi sama dengan nilai aktual. Titik-titik biru dalam plot hampir semuanya berada di garis tersebut, yang menunjukkan tingkat akurasi prediksi model yang sangat tinggi. Metrik evaluasi mendukung hasil ini, dengan RMSE (*Root Mean Squared Error*) sebesar 0,0239, MSE (*Mean Squared Error*) sebesar 0,0006, dan MAE (*Mean Absolute Error*) sebesar 0,0147, yang semuanya menunjukkan tingkat kesalahan prediksi yang sangat kecil. Selain itu, nilai R^2 sebesar 0,9999 mengindikasikan bahwa model dapat menjelaskan hampir 100% variansi dalam data uji.

Secara keseluruhan, kedua gambar ini menunjukkan bahwa model memiliki performa yang sangat baik dalam memprediksi nilai HOMO-LUMO gap, dengan kesalahan prediksi yang hampir tidak signifikan dan akurasi yang baik. Hal ini menegaskan bahwa model dapat diandalkan untuk tugas prediksi serupa.

IV.3 Prediksi Nilai Deskriptor Kuantum pada nanocage $B_{36}N_{36}$

Setelah dilakukan *training* dan *testing* pada dataset nanocage $B_{12}N_{12}$ dan $B_{24}N_{24}$, model yang telah dilatih digunakan untuk memprediksi nilai deskriptor kuantum,

yaitu HOMO-LUMO gap pada *nanocage* B₃₆N₃₆. Dalam pendekatan ini, data terkait *nanocage* B₃₆N₃₆ tidak dimasukkan ke dalam dataset pelatihan. Sebaliknya, prediksi dilakukan berdasarkan pola yang telah dipelajari oleh model dari dataset B₁₂N₁₂ dan B₂₄N₂₄, yang memiliki hubungan fisis dan statistik yang relevan dengan B₃₆N₃₆. Hasil prediksi HOMO-LUMO gap untuk *nanocage* B₃₆N₃₆ dihitung menggunakan RMSE (*Root Mean Squared Error*), MSE (*Mean Squared Error*), MAE (*Mean Absolute Error*) dan R² sebagai metrik evaluasi.



Gambar IV.7 Hasil Prediksi Nilai Deskriptor Kuantum pada *nanocage* B₃₆N₃₆

Berdasarkan hasil prediksi nilai deskriptor kuantum pada *nanocage* B₃₆N₃₆ menggunakan tiga model pembelajaran mesin, yaitu ANN, CNN, dan RNN, diperoleh nilai metrik evaluasi seperti RMSE (*Root Mean Squared Error*), MSE (*Mean Squared Error*), MAE (*Mean Absolute Error*) dan R² untuk mengukur performa masing-masing model. Hasil prediksi ini bertujuan untuk mengevaluasi kemampuan model dalam mempelajari pola data dari *nanocage* B₁₂N₁₂ dan B₂₄N₂₄, serta menggeneralisasikannya untuk memprediksi nilai HOMO-LUMO gap pada *nanocage* B₃₆N₃₆, yang tidak dimasukkan ke dalam dataset pelatihan.

Penelitian ini menunjukkan bahwa algoritma machine learning, yaitu ANN, CNN, dan RNN dapat memprediksi nilai HOMO-LUMO gap secara akurat berdasarkan

representasi SMILES. Hal ini sejalan dengan temuan dalam penelitian yang dilakukan oleh Pinheiro dkk., (2020) yang menunjukkan bahwa representasi SMILES dapat digunakan sebagai input untuk memprediksi berbagai sifat molekuler, termasuk celah energi antara *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO) dan *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO).

Dalam penelitian oleh Pinheiro dkk., (2020) model *machine learning* memanfaatkan fitur yang diekstraksi dari SMILES untuk memprediksi sifat fisika-kimia, seperti energi atomisasi, momen dipol, dan celah energi HOMO-LUMO, tanpa memerlukan koordinat atomik. Representasi SMILES terbukti cukup informatif untuk menggambarkan struktur molekul melalui notasi sederhana, memungkinkan pengurangan biaya komputasi sambil mempertahankan keakuratan prediksi.

Dengan cara yang serupa, penelitian ini memperluas penerapan SMILES untuk tugas prediksi nilai HOMO-LUMO gap menggunakan algoritma ANN, CNN, dan RNN. Temuan ini mendukung kesimpulan bahwa representasi molekuler berbasis teks seperti SMILES dapat menjadi alat yang efektif dalam penelitian berbasis *machine learning* di bidang kimia komputasi, khususnya untuk mempelajari sifat elektronik molekul. Temuan ini dan penelitian Pinheiro dkk., (2020) menunjukkan bahwa representasi SMILES memberikan potensi besar untuk pengembangan model prediktif berbasis data, yang tidak hanya efisien tetapi juga relevan dalam eksplorasi sifat molekul baru.

Penelitian ini menunjukkan bahwa RNN memberikan performa terbaik dalam memprediksi deskriptor kuantum HOMO-LUMO gap, khususnya pada *nanocage* kompleks seperti $B_{36}N_{36}$. Dengan nilai RMSE sebesar 0,4746, nilai MSE sebesar 0,2252, nilai MAE sebesar 0,3801 dan nilai R^2 sebesar 0,9075. Dari nilai-nilai tersebut, RNN terbukti mampu menangkap pola hubungan non-linear yang kompleks antara fitur struktural dan sifat elektronik molekul. Keunggulan ini sejalan dengan penelitian sebelumnya oleh Fedorov & Gryn'ova, (2023), yang menemukan bahwa RNN unggul dalam memprediksi potensi redoks molekul

organik dengan menggunakan representasi berbasis SMILES. Penelitian tersebut menunjukkan bahwa model RNN secara konsisten mengungguli model lainnya terutama pada dataset molekul dengan variasi struktural yang tinggi.

Kesamaan antara penelitian ini dan penelitian sebelumnya terletak pada penggunaan representasi SMILES, yang memungkinkan RNN memanfaatkan sifat sekuensial molekul untuk membangun hubungan prediktif yang lebih dalam. Dalam kedua studi, RNN menghasilkan akurasi yang lebih baik dibandingkan model lain, dengan efisiensi tinggi dalam memproses dataset besar tanpa memerlukan perhitungan berbasis teori kuantum tradisional seperti DFT. Namun, terdapat perbedaan dalam fokus penelitian yaitu penelitian ini berfokus pada *nanocage* boron nitrida ($B_{12}N_{12}$, $B_{24}N_{24}$, dan $B_{36}N_{36}$) untuk memprediksi HOMO-LUMO gap, sedangkan Fedorov dan Gryn'ova mempelajari molekul organik redoks aktif dengan potensi aplikasi pada baterai dan katalis. Selain itu, penelitian sebelumnya mempertimbangkan efek pelarut untuk meningkatkan akurasi prediksi, sedangkan penelitian ini mengandalkan pola hubungan struktural dan elektronik tanpa memasukkan faktor lingkungan.

Selain RNN, penelitian ini juga menunjukkan bahwa CNN memberikan performa sangat baik dalam memprediksi HOMO-LUMO gap pada *nanocage* boron nitrida. CNN mampu menghasilkan nilai nilai RMSE sebesar 0,8115, nilai MSE sebesar 0,6585, nilai MAE sebesar 0,6428 dan nilai R^2 sebesar 0,7296 yang menunjukkan kemampuannya dalam menangkap hubungan struktural-elektronik yang kompleks. Hasil ini konsisten dengan penelitian oleh (Peng dkk., 2022) yang menemukan bahwa CNN unggul dalam memprediksi energi orbital HOMO dan LUMO pada molekul penerima non-fullerene (*Non-Fullerene Acceptors, NFAs*) untuk aplikasi sel surya organik. Keduanya memanfaatkan arsitektur CNN untuk ekstraksi fitur dari representasi berbasis string SMILES dan menerapkan mekanisme atensi untuk menganalisis kontribusi fragmen molekul terhadap sifat kuantum.

Namun, penelitian ini dan penelitian oleh penelitian sebelumnya memiliki perbedaan. Penelitian ini lebih berorientasi pada material berbasis boron nitrida

dengan pola geometris yang teratur, sedangkan penelitian Peng dan Zhao berfokus pada molekul organik kompleks untuk aplikasi energi terbarukan. Selain itu, penelitian sebelumnya menemukan bahwa representasi SMILES kurang akurat untuk molekul dengan sistem konjugasi terdelokalisasi, di mana representasi grafis molekul memberikan hasil yang lebih baik. Penelitian ini tidak menghadapi keterbatasan tersebut karena struktur nanocage memiliki geometri yang lebih sederhana.

Di sisi lain, penelitian ini menunjukkan bahwa ANN memberikan performa terendah dalam memprediksi HOMO-LUMO gap dibandingkan dengan model lainnya. ANN menghasilkan nilai RMSE sebesar 0,9289, nilai MSE sebesar 0,829, nilai MAE sebesar 0,7356, dan nilai R^2 sebesar 0,64577, terutama ketika diterapkan pada dataset nanocage kompleks seperti $B_{36}N_{36}$. Hal ini mencerminkan keterbatasan ANN dalam menangkap pola hubungan yang kompleks pada dataset dengan fitur terbatas atau variasi struktural yang tinggi. Hasil ini sejalan dengan penelitian Zheng dkk., (2023), yang juga menemukan bahwa ANN menunjukkan kinerja suboptimal pada dataset dengan fitur terbatas, terutama pada molekul open-shell. Kedua penelitian ini menunjukkan bahwa ANN memerlukan data yang lebih besar dan representasi fitur yang lebih kaya untuk meningkatkan akurasi prediksi.

Penelitian ini menegaskan bahwa RNN dan CNN adalah model yang unggul untuk memprediksi sifat kuantum molekul kompleks, sedangkan ANN menunjukkan performa yang lebih rendah. Dengan integrasi teknik interpretasi fitur seperti SHAP dan representasi grafis yang lebih kaya, kinerja model dapat ditingkatkan untuk memenuhi kebutuhan prediksi yang lebih kompleks. Langkah lanjutan juga dapat mencakup penggabungan metode ANN dengan CNN atau RNN untuk memperbaiki kekurangan dan meningkatkan akurasi pada dataset yang lebih kompleks.