

Pencarian Bahan Magnet Kuat Dua Dimensi menggunakan *Support Vector Machine*

Muchamad Fajar Alif¹, Nurul Ikhsan²

^{1,2}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

¹muchamadfajaralif@students.telkomuniversity.ac.id, ²ikhsan@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Penemuan dan desain material baru merupakan tujuan utama dari ilmu material. Masih tingginya jumlah data material yang perlu di analisis untuk mencari bahan baru menjadi tantangan di bidang ini karena sangat memakan waktu dan sumber daya komputasi jika semua kemungkinan struktur dari banyak kombinasi material dihitung dengan menggunakan metode yang presisi, seperti *Density Functional Theory* (DFT). Menghadapi tantangan tersebut, dibutuhkan suatu sistem yang dapat menganalisis banyaknya kombinasi struktur material dengan kinerja cepat namun tetap mempertahankan presisi dari perhitungan. Disinilah *materials informatics* hadir untuk mengakselerasi proses pencarian bahan unggul yang baru, *material informatics* merupakan suatu bidang keilmuan baru yang bertujuan untuk memanfaatkan ilmu informatika dalam metode komputasi yang umum digunakan khususnya pada ilmu material. Pada penelitian ini, 198 kombinasi bahan magnet dua dimensi struktur $A_2B_2X_6$ akan diklasifikasikan menggunakan *support vector machine* (SVM). Dengan menerapkan seleksi fitur, model klasifikasi SVM yang dibangun dapat menghasilkan nilai akurasi dan *f1-score* sekitar 97%.

Kata kunci : material science, density functional theory, material informatics, machine learning, support vector machine

Abstract

The discovery and design of new materials is the main goal of material science. The large amount of material data that needs to be analyzed to find new materials is a grand challenge in this field because it is taking very high computational time and resources if we calculate all of the possible structure from many material combinations using precision methods, such as *Density Functional Theory* (DFT). Facing these challenges, we need a system that can analyze the combination of material structures with fast performance but still maintain the precision of calculation. This is where *materials informatics* is present to accelerate the search for new superior material, *material informatics* is a new scientific field which aims to utilize information in the computational methods commonly used in scientific material. In this research, 198 combinations of two-dimensional magnetic materials of $A_2B_2X_6$ structure will be classified using *support vector machine* (SVM). By applying feature selection, the SVM classification model that is built can produce an accuracy and an *f1-score* of around 97%.

Keywords: material science, density functional theory, material informatics, machine learning, support vector machine

1. Pendahuluan

Latar Belakang

Pencarian bahan alternatif untuk magnet kuat menggunakan simulasi komputer berbasis *Density Functional Theory* (DFT) sudah sangat populer digunakan, metode ini dikenal akurat memprediksi karakter suatu bahan tanpa perlu informasi semi-empiris dari percobaan. Keberhasilan DFT dalam memprediksi suatu bahan diiringi dengan meningkatnya kemampuan komputasi beberapa dekade terakhir telah meningkatkan kuantitas dan kompleksitas data hasil eksperimen yang disediakan. Sejumlah besar data yang dihasilkan ini perlu disimpan dan ditafsirkan guna mendukung penelitian dalam ilmu material. Namun, salah satu keterbatasan yang dimiliki DFT adalah harus mempertimbangkan interaksi dari banyak elektron dan elektron-inti dalam suatu bahan. Karena keterbatasan ini, DFT akan memakan banyak waktu, dan sumber daya sehingga diperlukan sistem yang dapat mengakselerasi proses pencarian bahan.

Untuk dapat menghasilkan wawasan dari basis data material yang sudah tersedia sebagai acuan informasi, para peneliti ilmu material mulai menerapkan pendekatan baru yang dapat digunakan untuk menganalisa data secara otomatis dan berkecepatan tinggi. Terinspirasi dari *data science*, untuk menghadapi tantangan ini, peneliti ilmu material telah berusaha memanfaatkan pembelajaran mesin serta kecerdasan buatan dengan cara mengenali pola, dan korelasi yang terdapat pada data yang tersedia. Hal ini dapat dilakukan untuk membentuk dasar untuk memahami perilaku material serta memprediksi bahan unggul. Pembelajaran mesin dapat mengidentifikasi hubungan dalam data yang kompleks, bahkan untuk data berdimensi tinggi, sehingga waktu untuk menganalisa material dapat dipangkas dengan sangat signifikan [1] dibanding dengan menggunakan DFT. Penelitian yang

