

ABSTRAK

Salah satu tantangan utama dalam penemuan atau sintesis senyawa organik bahan alam terletak pada proses karakterisasi senyawanya. Hingga saat ini, interpretasi hasil karakterisasi, seperti spektrum FTIR, masih sangat bergantung pada analisis manual, sehingga rentan terhadap kesalahan manusia. Penelitian ini bertujuan untuk membangun model *deep learning* berbasis arsitektur ResNet50 yang dapat digunakan untuk mengklasifikasikan gugus fungsi senyawa organik berdasarkan hasil karakterisasi FTIR. Data spektrum FTIR yang digunakan dalam penelitian ini dikumpulkan dari situs Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) menggunakan teknik *web scraping*. Dari hasil penelitian, model yang dikembangkan menunjukkan performa yang baik dengan rata-rata akurasi uji sebesar 90,59%, rata-rata nilai presisi sebesar 0,8877, rata-rata nilai *recall* sebesar 0,9025, dan rata-rata *F1-score* sebesar 0,8943. Selain itu, model ResNet50 yang dibangun mencatat akurasi validasi sebesar 92,54%. Meskipun menggunakan dataset yang berbeda, nilai ini berada di atas akurasi 83,67% yang dilaporkan oleh Enders *et al.* dengan arsitektur InceptionV3 untuk enam gugus fungsi. Perbandingan ini bersifat indikatif dan menunjukkan potensi arsitektur ResNet50 dalam tugas klasifikasi serupa.

Kata kunci: Spektrum FTIR, ResNet50, Klasifikasi Gugus Fungsi, Senyawa Organik.

ABSTRACT

One of the main challenges in the discovery or synthesis of natural organic compounds lies in the characterization process. To this day, the interpretation of characterization results—such as FTIR spectra—still heavily relies on manual analysis, making it prone to human error. This study aims to develop a deep learning model based on the ResNet50 architecture to classify functional groups of organic compounds using FTIR characterization data. The FTIR spectral data used in this research were collected from the Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) using web scraping techniques. The results show that the developed model performs well, achieving an average test accuracy of 90.59%, with a precision of 0.8877, recall of 0.9025, and F1-score of 0.8943. Additionally, the ResNet50-based model achieved a validation accuracy of 92.54%. Although the dataset used differs, this result exceeds the 83.67% validation accuracy reported by Enders et al., who employed the InceptionV3 architecture to classify six functional groups. This comparison is indicative and highlights the potential of the ResNet50 architecture for similar classification tasks.

Keywords: *FTIR Spectrum, ResNet50, Functional Group Classification, Organic Compound Characterization.*