

**IMPLEMENTASI ARSITEKTUR RESNET50 UNTUK KLASIFIKASI
HASIL KARAKTERISASI FT-IR PADA SENYAWA ORGANIK**



**JONATHAN CALVIN LIMAWAL
NIM. 2110511058**

**PROGRAM STUDI S1 INFORMATIKA
FAKULTAS ILMU KOMPUTER
UNIVERSITAS PEMBANGUNAN NASIONAL “VETERAN” JAKARTA
2025**

**IMPLEMENTASI ARSITEKTUR RESNET50 UNTUK KLASIFIKASI
HASIL KARAKTERSASI FT-IR PADA SENYAWA ORGANIK**

**JONATHAN CALVIN LIMAWAL
NIM. 2110511058**

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Komputer

**PROGRAM STUDI S1 INFORMATIKA
FAKULTAS ILMU KOMPUTER
UNIVERSITAS PEMBANGUNAN NASIONAL “VETERAN” JAKARTA
2025**

PERNYATAAN ORISINALITAS

Tugas akhir ini adalah hasil karya sendiri dan semua sumber baik yang dikutip maupun yang dirujuk telah saya nyatakan dengan benar.

Nama : Jonathan Calvin Limawal

NIM : 2110511058

Tanggal : 04 Juli 2025

Bilamana di kemudian hari ditemukan ketidaksesuaian dengan pernyataan saya ini, maka saya bersedia dituntut dan diproses sesuai dengan ketentuan yang berlaku

Jakarta, 04 Juli 2025

Yang Menyatakan



Jonathan Calvin Limawal

**PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK
KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai civitas akademika Universitas Pembangunan Nasional Veteran Jakarta, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Jonathan Calvin Limawal
NIM : 2110511058
Fakultas : Ilmu Komputer
Program Studi : S-1 Informatika

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Pembangunan Nasional Veteran Jakarta Hak Bebas Royalti Non eksklusif (*Non - exclusive Royalty Free Right*) atas skripsi saya yang berjudul:

IMPLEMENTASI ARSITEKTUR RESNET50 UNTUK KLASIFIKASI HASIL KARAKTERISASI FT-IR PADA SENYAWA ORGANIK

Dengan Hak Bebas Royalti ini Universitas Pembangunan Nasional Veteran Jakarta berhak menyimpan, mengalih media/memformatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (basis data), merawat dan mempublikasikan skripsi saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis dan sebagai pemilik Hak Cipta. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya

Dibuat di: Jakarta
Pada tanggal: 04 Juli 2025
Yang Menyatakan



Jonathan Calvin Limawal

LEMBAR PERSETUJUAN

Yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Jonathan Calvin Limawal

NIM : 2110511058

Program Studi : S1 Informatika

Judul Skripsi/TA. : Implementasi Arsitektur ResNet50 untuk Klasifikasi Hasil
Karakterisasi FT-IR pada Senyawa Organik

Dinyatakan telah memenuhi syarat dan menyetujui untuk mengikuti ujian sidang Skripsi/Tugas Akhir.

Jakarta, 15 April 2025

Menyetujui,

Dosen Pembimbing I,



Musthofa Galih Pradana, S.Kom., M.Kom.

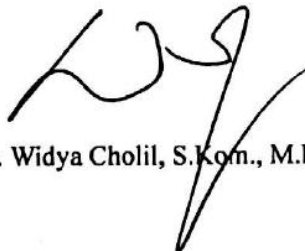
Dosen Pembimbing II,



Nurul Atifah Arifuddin, S.Pd., M.T.

Mengetahui,

Koordinator Program Studi,



Dr. Widya Cholil, S.Kom., M.I.T.

LEMBAR PENGESAHAN

Judul : Implementasi Arsitektur ResNet50 untuk Klasifikasi Hasil
Karakterisasi FT-IR pada Senyawa Organik
Nama : Jonathan Calvin Limawal
NIM : 2110511058
Program Studi : SI Informatika

Disetujui oleh:

Penguji 1:
Prof. Dr. Ir. Supriyanto, ST., M.Sc., IPM.

Penguji 2:
Muhammad Adrezo, S.Kom., M.Sc.

Pembimbing 1:
Musthofa Galih Pradana, S.Kom., M.Kom.

Pembimbing 2:
Nurul Afifah Arifuddin, S.Pd., M.T.

Diketahui oleh:

Koordinator Program Studi:
Dr. Widya Cholil, S.Kom., M.I.T.
NIP. 221112080

Dekan Fakultas Ilmu Komputer:
Prof. Dr. Ir. Supriyanto, ST., M.Sc., IPM.
NIP. 197605082003121002

Tanggal Ujian Tugas Akhir:
10 Juni 2025



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.*

KATA PENGANTAR

Puji syukur kami panjatkan kehadirat Tuhan Yang Maha Esa karena atas rahmat, berkat, serta karunia-Nya saya dapat menyelesaikan skripsi ini. Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Ilmu Komputer pada Program Studi Informatika, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Pembangunan Nasional Veteran Jakarta. Saya menyadari bahwa tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, sulit bagi saya untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, saya mengucapkan terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Ir. Supriyanto, ST., M.Sc., IPM selaku dekan Fakultas Ilmu Komputer Universitas Pembangunan Nasional Veteran Jakarta.
2. Ibu Dr. Widya Cholil, S.Kom., M.I.T., selaku Ketua Program Studi S1 Informatika yang telah memberikan izin untuk menjalankan penelitian ini.
3. Bapak Musthofa Galih Pradana, S.Kom., M.Kom. dan Ibu Nurul Afifah Arifuddin, S.Pd., M.T., selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan saya dalam penyusunan skripsi ini.
4. Orang tua dan keluarga yang telah memberikan dukungan material dan moral.
5. Teman-teman KOBA, yaitu Jelita, Bella, Lyubi, Erika, Fanny, Adit, dan Nadia yang telah membantu dan mendukung penulis dalam suka dan duka selama empat tahun menempuh pendidikan S1 di UPN Veteran Jakarta.
6. Teman-teman seperjuangan lainnya, yaitu Lita, Ilham, Rizki, Irmaya, dan Saripah.

Akhir kata, saya berharap Tuhan Yang Maha Esa berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu

Jakarta, 15 April 2025



Penulis

DAFTAR ISI

PERNYATAAN ORISINALITAS	ii
PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK	iii
KEPENTINGAN AKADEMIS	iii
LEMBAR PERSETUJUAN	iv
LEMBAR PENGESAHAN.....	v
ABSTRAK.....	vi
<i>ABSTRACT</i>	vii
KATA PENGANTAR	viii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR RUMUS	xv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
BAB 1. PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Batasan Masalah.....	2
1.4 Tujuan Penelitian.....	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	3
1.6 Sistematika Penulisan.....	4
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Senyawa Organik.....	6
2.2 FTIR	7
2.3 Chemical Abstract Service (CAS).....	9
2.4 <i>Deep Learning</i>	10
2.5 <i>Convolutional Neural Network (CNN)</i>	11
2.4.1 <i>Convolutional Layer</i>	11
2.4.2 <i>Pooling Layer</i>	12
2.4.3 <i>Activation Function</i>	13
2.4.4 <i>Fully Connected Layer</i>	16
2.6 Praproses Data.....	17
2.6.1 <i>Image Cropping</i>	17
2.6.2 <i>Image Resizing</i>	17

2.6.3	Normalisasi.....	18
2.6.4	<i>Label Encoding</i>	18
2.7	Arsitektur ResNet50	18
2.8	Evaluasi Model Klasifikasi	19
2.9	Penelitian Terdahulu	21
BAB 3.	METODE PENELITIAN	23
3.1	Alur Penelitian.....	23
3.1.1	Identifikasi Masalah	23
3.1.2	Studi Literatur.....	24
3.1.3	Pengumpulan Data.....	24
3.1.4	Praproses Data	24
3.1.5	Pembagian Data.....	24
3.1.6	Pembuatan dan Pelatihan Model	25
3.1.7	Pengujian dan Evaluasi Model	25
3.2	Perangkat Penelitian	25
BAB 4.	HASIL DAN PEMBAHASAN	26
4.1	Pengumpulan Data	26
4.1.1	Pengumpulan <i>Raw Data</i> Senyawa Organik per Gugus Fungsi	27
4.1.2	Ekstrak Data CAS.....	28
4.1.3	Validasi Gugus Fungsi.....	29
4.2	Praproses Data	31
4.2.1	<i>Image Cropping</i>	32
4.2.2	<i>Image Resizing</i>	33
4.2.3	Normalisasi.....	34
4.2.4	<i>Label Encoding</i>	35
4.3	Pembagian Data.....	36
4.4	Pembuatan Model.....	37
4.5	Penentuan Hyperparamater	39
4.6	Pelatihan Model.....	40
4.7	Pengujian dan Evaluasi Model	41
4.7.1	Akurasi dan <i>Loss</i>	41
4.7.2	ROC dan AUC	42
4.7.3	<i>Confusion Matrix</i> dan <i>Classification Report</i>	43
BAB 5.	PENUTUP.....	43
5.1	Kesimpulan.....	43

5.2	Saran	43
DAFTAR PUSTAKA.....		44
DAFTAR RIWAYAT HIDUP		47
LAMPIRAN.....		48

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Penelitian Terdahulu.....	21
-------------------------------------	----

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Kimia dari 15 Jenis Senyawa Organik berdasarkan Gugus Fungsinya...	6
Gambar 2.2 Spektrum FTIR <i>n</i> -Propanol	7
Gambar 2.3 Peran Transformasi Fourier pada instrumen FTIR.....	8
Gambar 2.4 Instrumentasi FTIR.....	9
Gambar 2.5 Ilustrasi Model <i>Deep Learning</i>	10
Gambar 2.6 Model Konseptual CNN.....	11
Gambar 2.7 Contoh Kernel 2 x 2	11
Gambar 2.8 Ilustrasi Operasi Konvolusi	12
Gambar 2.9 Ilustrasi MaxPooling dan AveragePooling	13
Gambar 2.10 Grafik Fungsi Aktivasi Sigmoid.....	14
Gambar 2.11 Grafik Fungsi Aktivasi Tanh.....	14
Gambar 2.12 Grafik Fungsi Aktivasi ReLU.....	15
Gambar 2.13 Grafik Fungsi Aktivasi Leaky ReLU.....	16
Gambar 2.14 Ilustrasi <i>Fully Connected Layer</i>	17
Gambar 2.15 Arsitektur ResNet50	19
Gambar 2.16 <i>Confusion Matrix</i>	19
Gambar 3.1 Diagram Alur Penelitian	23
Gambar 4.1 Situs PubChem	27
Gambar 4.2 <i>Raw Data</i> Senyawa Organik	28
Gambar 4.3 Kode Program untuk Ekstrak CAS dari <i>Raw Data</i> Senyawa Organik.....	28
Gambar 4.4 Kode Program untuk Validasi Gugus Fungsi Aldehid pada Dataset	29
Gambar 4.5 Jumlah Data Citra per Gugus Fungsi	30
Gambar 4.6 Pratinjau Data Citra: (a) Alkohol (b) Eter (c) Aldehid (d) Keton (e) Asam Karboksilat (f) Ester.....	31
Gambar 4.7 Kode Program untuk <i>Image Cropping</i>	32
Gambar 4.8 Pratinjau Data Citra (a) Sebelum <i>Image Cropping</i> (b) Setelah <i>Image Cropping</i> . 33	
Gambar 4.9 Kode Program untuk <i>Image Resizing</i>	34
Gambar 4.10 Pratinjau Data Citra (a) Sebelum <i>Image Resizing</i> (b) Setelah <i>Image Resizing</i> .. 34	
Gambar 4.11 Kode Program untuk Normalisasi	35
Gambar 4.12 Contoh Hasil Normalisasi Piksel pada Citra Pelatihan	35
Gambar 4.13 Kode Program untuk <i>Label Encoding</i>	36
Gambar 4.14 Hasil <i>Label Encoding</i>	36
Gambar 4.16 Kode Program untuk Pembagian Data	37

Gambar 4.17 Hasil Pembagian Data Citra	37
Gambar 4.18 Ringkasan dari Lapisan Model yang Telah Dibuat	38
Gambar 4.19 Ringkasan Arsitektur ResNet50	39
Gambar 4.20 Kode Program untuk Penentuan <i>Hyperparameter</i>	39
Gambar 4.21 Hasil <i>Hyperparameter Tuning</i>	39
Gambar 4.22 Pengaturan <i>Optimizer</i> dan Fungsi <i>Loss</i>	40
Gambar 4.23 Hasil Pelatihan Model <i>Machine Learning</i>	41
Gambar 4.24 Hasil Pelatihan Model <i>Machine Learning</i>	42
Gambar 4.25 Kurva ROC dan Nilai AUC	43
Gambar 4.26 <i>Confusion Matrix</i>	44
Gambar 4.27 <i>Classification Report</i>	44

DAFTAR RUMUS

Rumus 2.1 Transformasi Fourier	8
Rumus 2.2 Fungsi Aktivasi Sigmoid.....	14
Rumus 2.3 Fungsi Aktivasi Tanh	14
Rumus 2.4 Fungsi Aktivasi ReLU.....	15
Rumus 2.5 Fungsi Aktivasi Leaky ReLU.....	16
Rumus 2.6 Normalisasi Citra	18
Rumus 2.7 Akurasi	20
Rumus 2.8 <i>Precision</i>	20
Rumus 2.9 <i>Recall</i>	20
Rumus 2.10 <i>Precision</i>	20

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil Turnitin	48
----------------------------------	----