



ITS
Institut
Teknologi
Sepuluh Nopember

TUGAS AKHIR - TM184835

**STUDI PENGARUH KOMPOSISI KIMIA TERHADAP
SIFAT PENYIMPANAN HIDROGEN PADA LOGAM
PADUAN AB_2 DENGAN METODE *MACHINE
LEARNING***

MUHAMMAD RIZAL FADILLAH
NRP 02111540000181

Dosen Pembimbing:
Suwarno, ST., M.Sc., Ph.D

DEPARTEMEN TEKNIK MESIN
Fakultas Teknologi Industri dan Rekayasa Sistem
Institut Teknologi Sepuluh Nopember
Surabaya 2020



TUGAS AKHIR – TM184835

**STUDI PENGARUH KOMPOSISI KIMIA TERHADAP
SIFAT PENYIMPANAN HIDROGEN PADA LOGAM
PADUAN AB₂ DENGAN METODE *MACHINE LEARNING***

MUHAMMAD RIZAL FADILLAH
NRP 0211154000181

Dosen Pembimbing:
Suwarno, ST., M.Sc., Ph.D

DEPARTEMEN TEKNIK MESIN
Fakultas Teknologi Industri dan Rekayasa Sistem
Institut Teknologi Sepuluh Nopember
Surabaya 2020



FINAL PROJECT – TM184835

**STUDY OF THE EFFECT OF CHEMICAL COMPOSITION
ON HYDROGEN STORAGE PROPERTIES IN THE AB₂
ALLOY COMPOUND BY MACHINE LEARNING
METHOD**

MUHAMMAD RIZAL FADILLAH
NRP 0211154000181

Advising Lecturer:
Suwarno, ST., M.Sc., Ph.D.

MECHANICAL ENGINEERING DEPARTMENT
Faculty of Industrial Technology and Systems Engineering
Institut Teknologi Sepuluh Nopember
Surabaya 2020

HALAMAN PENGESAHAN

STUDI PENGARUH KOMPOSISI KIMIA TERHADAP SIFAT PENYIMPANAN HIDROGEN PADA LOGAM PADUAN AB₂ DENGAN METODE *MACHINE LEARNING*

TUGAS AKHIR

Diajukan Untuk Memenuhi Salah Satu Syarat
Memperoleh Gelar Sarjana Teknik
Program Studi S-1 Departemen Teknik Mesin
Fakultas Teknologi Industri dan Rekayasa Sistem
Institut Teknologi Sepuluh Nopember

Oleh:



Muhammad Rizal Fadillah

NRP. 02111540000181

Disetujui oleh :

1. Suwarno, ST., M.Sc., Ph.D. .....(Pembimbing)
NIP. 198005202005011003
2. M. Khoirul Effendi, ST., M.Sc Eng., Ph.D .....(Penguji I)
NIP. 198204142010121001
3. Fahmi Mubarak, ST., M.Sc., Ph.D .....(Penguji II)
NIP. 197801152003121002
4. Putu Suwarta, ST., M.Sc .....(Penguji III)
NIP. 198203032009121007

DEPARTEMEN
TEKNIK MESIN
SURABAYA
AGUSTUS, 2020

**STUDI PENGARUH KOMPOSISI KIMIA TERHADAP
SIFAT PENYIMPANAN HIDROGEN PADA LOGAM
PADUAN AB₂ DENGAN METODE *MACHINE LEARNING***

Nama Mahasiswa : Muhammad Rizal Fadillah
NRP : 0211154000181
Departemen : Teknik Mesin FTI-ITS
Dosen Pembimbing : Suwarno, ST., M.Sc., Ph.D

ABSTRAK

Logam paduan AB₂ adalah salah satu logam paduan dari klasifikasi *intermetallic Compound* yang paling banyak diteliti, karena Logam paduan AB₂ memiliki sifat penyerapan hidrogen yang lebih baik dibandingkan dengan kelas lainnya. Sampai saat ini, kemampuan suatu logam untuk menyimpan hidrogen belum dapat digambarkan dengan jelas atau belum adanya suatu hukum yang menjelaskan tentang sifat suatu logam dan faktor apa saja yang mempengaruhinya. Sampai saat ini metode yang digunakan untuk meneliti sifat penyimpanan hidrogen adalah *trial and error*, dimana suatu penelitian akan memakan biaya mulai dari pembelian material, pembuatan *ingots* dan pengujian sifat penyimpanan hidrogen. Maka pada penelitian ini, komposisi kimia unsur logam paduan AB₂ akan diteliti keterkaitannya dengan sifat penyimpanan hydrogen untuk melihat apakah ada keterkaitan antara keduanya.

Data yang digunakan adalah data yang dihimpun oleh Departemen energi Amerika Serikat atau US DOE. Data akan dianalisis dengan model *machine learning* dengan menggunakan metode *supervised*. Variabel *input* atau bebas adalah komposisi unsur kimia berupa Ti, Zr, Sc, Y, Dy, Tm, Ce, Tb, Th, Er, U, Ca, Gd, Ho, Mn, Co, Cr, V, Ni, Al, C, Mg, Fe, Cu, Mo, La, Si, S, Ru, Be Rh, Ge, Li, Pd. Variabel yang digunakan sebagai variabel target

atau terikat adalah presentase massa hidrogen (H % wt) dengan entalpi (ΔH). Data akan dibagi menjadi 3 (data training, data tes dan data validasi) secara acak, data training adalah data yang mengukur keterkaitan antara variabel input dengan output, data validasi adalah data yang digunakan untuk memvalidasi data training, lalu data tes adalah data acuan jika data training telah selesai diolah.

Model terbaik untuk memprediksi H% wt dan ΔH ada pada *random forest*. Pada model *random forest* untuk variabel output H% wt, R^2 Average sebesar 0.6406 dengan MAE 0.208 dan MRE 13.9%. Pada model *random forest* untuk variabel output ΔH R^2 Average sebesar 0.5486 dengan MAE 7.395 dan MRE 21.2%. Unsur Ti, V dan Be secara signifikan akan menaikkan presentase massa hidrogen dari hasil analisa *linear regression* dan *decision tree*. Unsur Th dan Mg secara signifikan akan menaikkan ΔH yang tinggi akan menyebabkan temperatur dan tekanan yang tinggi dimana tidak akan baik untuk penggunaan baterai pada mobil listrik. Fe secara signifikan akan menurunkan ΔH dari hasil analisa *linear regression* dan *decision tree*.

Kata kunci: logam paduan AB₂, machine learning, sifat penyimpanan hidrogen

**STUDY OF THE EFFECT OF CHEMICAL
COMPOSITION ON HYDROGEN STORAGE
PROPERTIES IN THE AB₂ ALLOY COMPOUND BY
MACHINE LEARNING METHOD**

Student Name : Muhammad Rizal Fadillah
Student ID Number : 0211154000181
Department : Mechanical Engineering
Advisory Lecturer : Suwarno, ST., M.Sc., Ph.D

ABSTRACT

AB₂ is one of the most studied alloys from the intermetallic classification because AB₂ has better better hydrogen properties compared to other classes. Until now, the ability of the alloys to store hydrogen has not been clearly defined nor there's a law that explains the ability of the alloy to store hydrogen. Trial and error were used to this date where the trial and error was inefficient ways to analyse the alloy such as purchasing materials, manufacturing ingots and testing the properties of the hydrogen storage. In this study, the chemical composition of the AB₂ will be evaluated in their relation to hydrogen storage properties.

The data from US Department of Energy for hydrogen storage were analyzed through supervised regression machine learning to learn the effect of their chemical composition to their ability to predict output variable hydrogen weight percent and heat formation. For input variable Ti, Zr, Sc, Y, Dy, Tm, Ce, Tb, Th, Er, U, Ca, Gd, Ho, Mn, Co, Cr, V, Ni, Al, C, Mg, Fe, Cu, Mo, La, Si, S, Ru, Be Rh, Ge, Li, Pd. The data were split into three groups (Training data, Validation data and Testing data). Train Data used

for train or build the model, validation data used for validating the model and test data as the new data that was not build the model and will be used for evaluated the model. Three algorithm multivariate linear regression, decision tree regression and random forest regression were used to predict the variable output.

For both hydrogen weight percent and heat of formation, random forest shows the best model for predicting the output variable. For hydrogen weight percent from random forest model R^2 Average score is 0.6406 with 0.208 MAE and 13.9% MRE. For heat of formation from random forest model R^2 Average score is 0.563 with 7.395 MAE and 21.2% MRE. The addition of element Ti, V and Be will increase the hydrogent weight percent that beneficial to the alloy as the goal was to pack hydrogen as much as its possible. The addition of element Th and Mg should be avoided because it will increase the heat of formation. High heat of formation will affect to higher the pressure and temperature and not suitable for stationary application. The addition of element Fe and Mg will decrease the heat of formation of the alloy.

Keywords : AB₂ alloy, machine learning, hydrogen storage properties

KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Allah SWT berkat Rahmat, Hidayah, dan Karunia-nya kepada kita semua sehingga penulis dapat menyelesaikan tugas akhir dengan judul “**STUDI PENGARUH KOMPOSISI KIMIA TERHADAP SIFAT PENYIMPANAN HIDROGEN PADA LOGAM PADUAN AB_2 DENGAN METODE *MACHINE LEARNING***”. Laporan tugas akhir ini disusun sebagai salah satu syarat untuk mengerjakan skripsi pada program Strata-1 di Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Surabaya.

Penulis menyadari dalam penyusunan tugas akhir ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak. Karena itu pada kesempatan ini penulis ingin mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak **Bambang Am Am S. S.** dan ibu **Lia Yuliani** selaku orang tua yang saya cintai atas bimbingan, pengorbanan dan doanya hingga saya dapat menempuh pendidikan hingga tahap sarjana.
2. Bapak **Suwarno, ST., MSc., Ph.D.**, selaku Dosen Pembimbing atas bimbingan, saran, dan motivasi yang diberikan.
3. Bapak **Mohammad Khoirul Effendi S.T., M.Sc.Eng., Ph.D.**, **Fahmi Mubarak S.T., M.Sc., Ph.D.** dan **Putu Suwarta S.T., M.Sc., Ph.D.** selaku dosen penguji atas bimbingan, saran, dan motivasi yang diberikan.
4. Seluruh **karyawan laboratorium metalurgi** atas bantuannya dalam mengerjakan tugas akhir ini.
5. **Azzahra Salma Putri** atas motivasi, semangat, kehadiran, serta doa yang diberikan hingga akhirnya buku tugas akhir ini telah selesai.
6. **Teman-teman seperjuangan republik metalurgi raya** atas dukungan dan hiburannya.
7. Teman-teman **M-58** atas pelajaran hidup dan persaudaraannya hingga saat ini.

8. Teman-teman **M-GAB** atas solidaritas tanpa batas mengejar ketertinggalan tanpa pantang menyerah.
9. Seluruh **civitas akademika Jurusan Teknik Mesin FTI-ITS** yang telah memberikan dukungan moril kepada penulis.
10. Seluruh **guru penulis** yang telah memberikan pelajaran berharga bagi penulis hingga saat ini.

Penulis menyadari tugas akhir ini tidak luput dari berbagai kekurangan. Penulis mengharapkan saran dan kritik demi kesempurnaan dan perbaikannya sehingga akhirnya laporan tugas akhir ini dapat memberikan manfaat bagi bidang pendidikan dan penerapan dilapangan serta dapat dikembangkan lagi lebih lanjut.

Surabaya, Agustus 2020

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN

ABSTRAK	i
ABSTRACT	iii
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xiii
BAB 1	1
PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	2
1.4 Batasan Masalah	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	3
1.6 Sistematika Penulisan	3
BAB 2	5
TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Prinsip Kerja Baterai NiMH	5
2.2 <i>Metal Hydride</i>	6
2.2.1 <i>Intermetallic Compound</i>	8
2.3 <i>Metal Hydride</i>	10
2.4 Keseimbangan Fasa <i>Metal Hydride</i>	11

2.5	<i>Machine Learning</i>	14
2.5.1	Algoritma <i>Supervised Machine Learning</i>	15
2.5.2	<i>Overfitting</i>	19
2.5.3	<i>Feature Scalling</i>	20
2.6	Penelitian Terdahulu	22
BAB 3		25
METODOLOGI PENELITIAN		25
3.1	Diagram Alir Penelitian	25
3.2	Data Set	27
3.2.1	Variabel Bebas Penelitian	27
3.2.2	Variabel Target Penelitian	27
3.2.3	Pembersihan Data	28
3.3	Desain Penelitian	29
3.4	Metode <i>Machine Learning</i>	30
BAB 4		31
HASIL DAN PEMBAHASAN		31
4.1	Dataset	31
4.2	<i>Pre-processing</i> Data	32
4.2.1	Pengecekan <i>Null</i>	32
4.2.2	Uji Multikolinearitas.....	33
4.2.3	Penghapusan Outlier	35
4.2.4	Membagi Data Menjadi <i>Train</i> dan <i>Test</i>	35
4.2.5	<i>Data Scaling</i>	36
4.2.6	Penentuan Panjang <i>Tree</i> untuk Model <i>Decision Tree</i>	38

4.2.7	Penentuan Banyaknya <i>Tree</i> untuk Model <i>Random Forrest</i>	39
4.3	Variasi Percobaan	40
4.3.1	Variasi Data <i>Train</i> dan <i>Set</i>	41
4.3.2	Analisa Hasil Prediksi Model <i>Train/Validation/Test</i> 0.8/0.1/0.1	50
4.3.3	Analisa Nilai Prediksi Model <i>Train/Validation/Test</i> 0.8/0.1/0.1	52
4.4	Pengaruh Unsur Terhadap Variabel Output	60
4.4.1	Analisa Linear Regresi	60
4.4.2	Analisa <i>Dec Tree</i>	74
BAB 5	79
KESIMPULAN DAN SARAN	79
5.1	Kesimpulan.....	79
5.2	Saran.....	79
DAFTAR PUSTAKA	81
LAMPIRAN A	83
LAMPIRAN B	91
BIODATA PENULIS	101

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Rangkaian Baterai NiMH.....	5
Gambar 2.2	Ikatan Hidrogen pada <i>Metal Hydride</i>	7
Gambar 2.3	(a) Kubik C15 dan (b) Heksagonal (C14) Struktur <i>Laves Phase</i>	11
Gambar 2.4	Penempatan Atom Hidrogen pada : fase α (a), $\alpha \rightarrow \beta$ (b), dan β (c).....	13
Gambar 2.5	<i>Pressure–Concentration–Temperature (PCT)</i> <i>Curves</i> pada Temperatur yang Berbeda ($T_3 > T_2 >$ T_1) di Kiri dan Plot Van Hoff di Kanan	14
Gambar 2.6	Metode <i>Machine Learning</i>	14
Gambar 2.7	Grafik pada Regresi Linier	16
Gambar 2.8	Skema Alur <i>Decision Tree</i>	17
Gambar 2.9	Model <i>Random Forrest Regression</i>	18
Gambar 2.10	Ilustrasi Model <i>Overfitting</i> , garis biru model <i>polynomial</i> , garis hitam linear regresi	19
Gambar 2.11	<i>Data Scalling</i> (a) Ilustrasi <i>Data Scalling</i> (b) Metode <i>Scalling</i>	21
Gambar 2.12	Hasil <i>Data Scalling</i> Menggunakan Metode Standarisasi.....	22
Gambar 3.1	Diagram Alir Percobaan.....	27
Gambar 3.2	Desain Penelitian.....	29
Gambar 4.1	<i>Chart</i> Unsur Paduan pada 409 Logam Paduan	31
Gambar 4.2	Pengecekan <i>Null</i> pada Dataset.....	33
Gambar 4.3	Heatmap Uji Multikolinearitas	34
Gambar 4.4	Penghapusan Outlier	35
Gambar 4.5	Split Dataset	35
Gambar 4.6	Scaler (a) Menginput Data Scaling, (b) Data Train yang Belum di Scaling, (c) Data Describe, (c) Hasil Data Scalling	37
Gambar 4.7	Pemilihan Panjng <i>Tree</i> (a) Presentase Massa Hidrogen (b) ΔH	38

Gambar 4.8 Contoh Pemilihan Banyaknya Tree pada model 0.9/0.1 (a) H%wt (b) ΔH	39
Gambar 4.9 Grafik R^2 <i>train</i> , R^2 <i>test</i> dan R^2 <i>average</i> model H%wt	46
Gambar 4.10 Grafik R^2 <i>train</i> , R^2 <i>test</i> dan R^2 <i>average</i> model ΔH	48
Gambar 4.11 Fluktuasi Nilai Presentase Massa Hidrogen vs Nilai Prediksi	55
Gambar 4.12 Fluktuasi Nilai ΔH vs Nilai Prediksi	59
Gambar 4.13 <i>Chart</i> Visualisasi Nilai r dari Tiap Unsur kepada Presentase Massa Hidrogen	65
Gambar 4.14 <i>Chart</i> Visualisasi Nilai r dari Tiap Unsur terhadap ΔH	72
Gambar 4.15 Visualisasi <i>Decision Tree</i> Presentase Massa Hidrogen (4 Level)	74
Gambar 4.16 Visualisasi <i>Decision Tree</i> ΔH (4 Level)	76

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Klasifikasi Hidrida Logam berdasarkan Tipe Logam dan Elektronegativitas (EN).....	8
Tabel 2.2 Klasifikasi <i>Intermetallic Compound</i>	9
Tabel 2.3 Tipe Paduan dengan Propertinya	10
Tabel 2.3 Contoh Variabel Input <i>Scaling</i> pada Buah	22
Tabel 3.1 Raw Data	29
Tabel 3.2 Data Penelitian.....	29
Tabel 3.3 Jadwal Kegiatan Penelitian	30
Tabel 4.1 Variasi Fitur Awal Menggunakan <i>Multivariate Linear Regression</i>	40
Tabel 4.2 Analisa Presentase Massa Hidrogen pada <i>train/test</i> 0.7/0.3.....	40
Tabel 4.3 Analisa Presentase Massa Hidrogen pada <i>Train/Test</i> 0.8/0.2.....	41
Tabel 4.4 Analisa Presentase Massa Hidrogen pada <i>Train/Test</i> 0.9/0.1.....	42
Tabel 4.5 Analisa ΔH pada <i>train/test</i> 0.7/0.3	42
Tabel 4.6 Analisa ΔH pada <i>train/test</i> 0.8/0.2	43
Tabel 4.7 Analisa ΔH pada <i>train/test</i> 0.9/0.1	44
Tabel 4.8 H% wt pada Model <i>Train/Validation/Test</i> 0.8/0.1/0.1	50
Tabel 4.9 Analisa ΔH pada model <i>train/validation/test</i> 0.8/0.1/0.1	51
Tabel 4.10 Hasil Prediksi Presentase Massa Hidrogen	52
Tabel 4.11 Hasil Prediksi ΔH	56
Tabel 4.12 Hasil Klasifikasi <i>Linear Regression</i> Unsur Paduan Terhadap Presentase Massa Hidrogen	60
Tabel 4.13 Ranking Nilai r dari Tiap Unsur terhadap Presentase Massa Hidrogen	65
Tabel 4.14 Hasil Klasifikasi <i>Linear Regression</i> Unsur Paduan terhadap ΔH	67
Tabel 4.15 Ranking Nilai r dari Tiap Unsur terhadap ΔH	73

Tabel 4.16 Ranking 10 Besar <i>Feature Importance</i> Presentase Massa Hidrogen	75
Tabel 4.17 Ranking 10 besar <i>feature importance</i> ΔH	76

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Krisis minyak pada tahun 1973 mendorong penelitian tentang mobil listrik sebagai alternatif kendaraan. Alasan lainnya mengapa mobil listrik dikembangkan adalah karena mobil komersial berbahan bakar bensin menghasilkan emisi yang buruk bagi lingkungan. Sumber energi dari mobil listrik berasal dari baterai, baterai adalah sebuah sel listrik dimana didalamnya berlangsung proses elektrokimia yang *reversible* (dapat berkebalikan). Yang dimaksud dengan reaksi elektrokimia *reversibel* adalah didalam baterai dapat berlangsung proses pengubahan kimia menjadi tenaga listrik (proses pengosongan) dan sebaliknya dari tenaga listrik menjadi tenaga kimia (proses pengisian).

Pada kendaraan listrik, terdapat tiga jenis baterai yang umum digunakan, yaitu *lithium-ion*, *lead acid* dan *nickel-metal hydride*. Ketiganya memiliki kelebihan dan kekurangan, pada baterai *Li-ion* memiliki masa yang ringan namun memiliki energi spesifik yang besar. Sayangnya pada baterai *Li-ion* memiliki isu ekonomis yang kurang baik terhadap tiga pilihan yang ada, harga dari *Li-ion* bisa mencapai tiga kali lipat dari NiMH dan *lead acid*. Baterai *lead acid* memiliki harga yang paling ekonomis dibanding ketiganya, namun ada beberapa isu seperti lingkungan karena baterai tersebut mengandung timbal yang berbahaya bagi lingkungan, dan juga perbandingan harga dengan energi spesifik yang dihasilkan tidak sebanding dengan baterai NiMH. (Thowil Afif and Ayu Putri Pratiwi, 2015) Maka penelitian ini akan membahas lebih lanjut tentang baterai NiMH.

Metal Hydride adalah senyawa dari ikatan logam dengan hidrogen. Salah satu klasifikasi dari *Metal Hydride* adalah senyawa AB_2 yang merupakan salah satu kandidat potensial sebagai material penyerap hidrogen untuk aplikasi pada kendaraan listrik.

Secara teoritis AB_2 memiliki sifat-sifat yang dibutuhkan untuk penerapan pada kendaraan bermotor, seperti kemampuan menyerap hidrogen dalam jumlah yang cukup tinggi (~3.0 wt%), temperatur operasi pada suhu ruang, ketahanan terhadap korosi, serta kinetik absorpsi/desorpsi hidrogen yang cukup tinggi.

Umumnya penelitian tentang pengaruh komposisi kimia terhadap sifat penyimpanan hidrogen menggunakan metode *trial and error* dimana komposisi kimia logam paduan AB_2 akan divariasikan lalu diteliti sifat penyimpanan hidrogennya. Metode *trial and error* membutuhkan biaya dari mulai pembelian bahan baku, pembuatan *ingot* dan pengujian untuk mengkarakterisasi sifat penyimpanan hidrogen. Sampai dengan 2020 terdapat lebih dari seribu komposisi kimia logam paduan AB_2 yang telah diteliti dengan berbagai variasi, namun belum ditemukannya suatu hukum pasti yang menghubungkan antara komposisi penyusun logam paduan AB_2 dengan sifat atau kemampuannya dalam menyimpan hidrogen. Maka pada tugas akhir ini akan dilakukannya penelitian dengan metode *machine learning* untuk mencari keterkaitan variabel atau variasi tertentu dari komposisi kimia terhadap sifat penyimpanan hidrogen logam paduan AB_2 .

1.2 Rumusan Masalah

Adapun permasalahan yang akan dibahas dalam penelitian ini adalah:

1. Bagaimana mengganti metode *trial and error* yang kurang efektif dengan memprediksi variabel output menggunakan metode *multivariate linear regression*, *decision tree regression* dan *random forest regression*?
2. Bagaimana pengaruh dari elemen tertentu secara individu terhadap sifat penyimpanan hidrogen pada logam paduan AB_2 ?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Memprediksi variabel output berupa presentase berat hidrogen dan ΔH menggunakan metode *multivariate*

linear regression, decision tree regression dan random forest regression.

2. Untuk mengetahui seberapa besar pengaruh elemen tertentu secara individu terhadap sifat penyimpanan hidrogen logam paduan AB_2 .

1.4 Batasan Masalah

Untuk dapat menyelesaikan permasalahan yang muncul dalam penelitian ini dan mencapai tujuan yang diinginkan, maka diperlukan batasan masalah dalam penelitian ini, antara lain:

1. Variabel input atau bebas berupa unsur komposisi kimia. Variabel output atau terikat berupa presentase berat hidrogen (H % wt) dan *heat formation* dari hidrogen (ΔH_H).
2. Dataset yang digunakan menggunakan data base yang dihimpun oleh US D.O.E sampai dengan tahun 2002.
3. Pengujian hasil prediksi model dilakukan terhadap data tes, dimana data tes tidak akan ikut membangun sebuah model dan perannya sebagai data baru yang akan mengevaluasi model yang telah dibangun.

1.5 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan manfaat baik untuk berbagai kalangan. Adapun manfaat yang bisa diberikan yaitu sebagai berikut:

1. Mendapatkan gambaran atau pandangan mengenai pengaruh komposisi kimia unsur paduan dengan sifat hidrogen.
2. Penelitian ini diharapkan memberikan manfaat dan menambah wawasan bagi peneliti.

1.6 Sistematika Penulisan

Sistematika penulisan laporan penelitian Tugas Akhir dibagi dalam beberapa bab sebagai berikut:

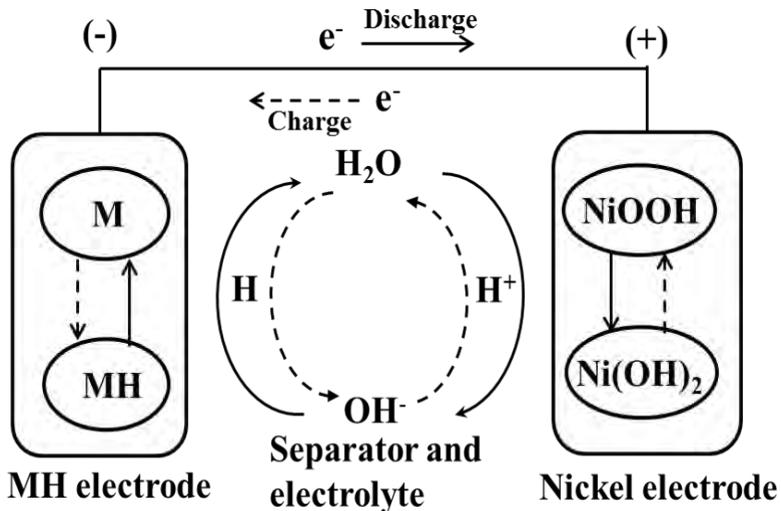
- 1. Bab I Pendahuluan**
Bab ini berisi tentang latar belakang, perumusan masalah, batasan masalah, tujuan, manfaat serta sistematika penulisan penelitian tugas akhir.
- 2. Bab II Tinjauan Pustaka**
Bab ini meliputi teori penunjang berisi semua hal yang menunjang dalam melakukan analisa hasil tugas akhir.
- 3. Bab III Metodologi Penelitian**
Bab ini berisi uraian – uraian urutan proses pengerjaan tugas akhir ini dari awal sampai akhir.
- 4. Bab IV Analisa Data dan Pembahasan**
Pada bab ini akan dijelaskan analisa hasil-hasil yang diperoleh selama pengujian dilakukan, pembahasan mengenai hubungan antara hasil pengujian dengan teori yang telah ada, dan berbagai macam analisa penunjang lain yang diperlukan.
- 5. Bab V Penutup**
Bab penutup ini terdiri dari kesimpulan dan saran untuk pengembangan eksperimen dalam penelitian selanjutnya.

BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Prinsip Kerja Baterai NiMH

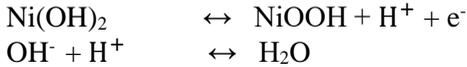
Rangkaian baterai Ni-MH terdiri dari dua komponen utama yaitu *metal hydride* (MH) sebagai elektroda negatif (anoda) dan nikel sebagai elektroda positif (katoda). Diantaranya ada separator dan larutan elektrolit alkali (biasanya KOH) yang berperan untuk memberikan konduktivitas ionik antara kedua elektroda. Panah putus-putus menunjukkan reaksi pengisian (*charging*) sedangkan panah padat menunjukkan reaksi pada saat pemakaian. Selama pengisian, nikel hidroksida dalam elektroda positif dioksidasi menjadi nikel oksihidroksida (persamaan 1.3) sedangkan air dalam elektrolit direduksi menjadi atom hidrogen yang akan diserap oleh elektroda positif sehingga membentuk *metal hydride* (1.4).



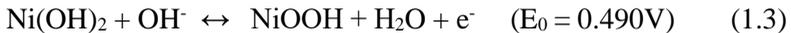
Gambar 2.1 Rangkaian Baterai NiMH

Reaksi dari baterai NiMH dapat dituliskan sebagai berikut :

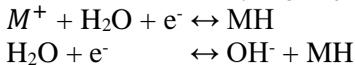
Pada Katoda , reaksi yang terjadi adalah:



Sehingga menjadi :



Pada Anoda, reaksi yang terjadi adalah :



Sehingga Menjadi :



Reaksi keseluruhan:

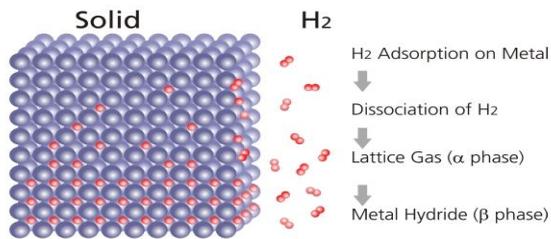


Tegangan (*Voltage*) bergantung pada nilai dari beda potensial antara kedua elektroda (E_0). Pada NiMH menunjukan bahwa tegangan yang dihasilkan berkisar diantara 1.3V. Meskipun tegangan baterai NiMH tergolong lebih rendah dibanding baterai Li-ion 3V umumnya digunakan , namun keuntungannya adalah nilai potensial dari Ni(OH)₂ lebih rendah dari H₂ O sehingga elektrolit berbasis air dapat digunakan. (“Development of metal hydride surface structures for high power NiMH batteries by Yang Shen” n.d.)

2.2 *Metal Hydride*

Hidrogen adalah unsur kimia yang paling ringan, membentuk senyawa/ikatan (hidrida) dengan semua unsur kecuali

inert gas. Berdasarkan definisi hidrida logam adalah produk dari reaksi kimia antara hidrogen dengan logam. Ketika bereaksi dengan logam untuk membentuk ikatan, hidrogen memiliki beberapa pilihan yaitu dengan cara menerima satu elektron (*ionic hydride*), pemakaian bersama (*covalent hydride*), atau hidrogen dapat menempati celah kosong pada logam (*metallic hydride*). (Young, 2018)



Gambar 2.2 Ikatan Hidrogen pada *Metal Hydride*

Hidrida logam mampu menyimpan hidrogen didalam logam. Tidak hanya menyimpan, hibrida logam dapat melepas dan menerima hidrogen yang pada prosesnya berguna dalam proses reaksi redoks pada baterai. Difusi hidrogen pada logam memperkenalkan karakteristik dari tekanan-konsentrasi-temperatur (PCT) isotherm. Pendekatan termodinamik dari PCT adalah kunci untuk memahami kegunaan hidrida logam untuk penggunaannya sebagai media penyimpanan hidrogen. Keelektronegatifan juga berperan untuk menentukan jenis ikatan pada *metal hydride*, dimana jika angka EN semakin besar maka kecenderungan suatu metal tersebut untuk menerima elektron dari hidrogen akan semakin besar. Keelektronegatifan yang kecil menunjukkan kecenderungan logam tersebut telah stabil dan akan

sulit menerima atau melepas elektron yang diberikan oleh hidrogen. (Marakatti and Peter, 2018)

Tabel 2.1 Klasifikasi Hidrida Logam berdasarkan Tipe Logam dan Elektronegativitas (EN)

<i>Metal type</i>	<i>Nature of chemical bond</i>	<i>General appearance</i>	<i>Example</i>	<i>Hydrogen dissociation temperature (K)</i>	<i>Heat of formation (kJ mol⁻¹ H₂⁻¹)</i>
<i>Element</i>					
EN<1.0	Ionic	White solid	NaH	693	-113.0
EN 1.1-1.3	Partial ionic, partial metallic	White solid	MgH ₂	550	-74.5
EN 1.3-1.6	Metallic	Metal	VH	Room temperature	-33.5
EN~1.6	Partial metallic, partial covalent	Colorless solid	AlH ₃	400	-11.3
EN>1.6	Covalent	Gas or liquid	GeH ₄	488	-45.3
Intermetallic compound	Metallic	Metal powder	LaNi ₅ H ₆	Room temperature	-30.1
Solid solution	Metallic	Metal powder	(TiCrV)H ₂	Room temperature	39
Complex metal hydride	Partial ionic, partial metallic	White solid	LiBH ₄	643	-95.4

2.2.1 Intermetallic Compound

Intermetalik (IM) adalah salah satu klasifikasi dari *metallic hydride*, dapat diekspresikan sebagai A_xB_y yang berasal dari 2 jenis logam A dan B dimana x dan y adalah bilangan bulat kecil. Logam A adalah logam yang bersifat elektropositif yang biasanya tersusun dari elemen langka seperti Zr dan Ti. Logam B bersifat elektronegatif yang biasanya tersusun dari paduan banyak atom logam seperti Al, Fe, V, Ni, dan Mn. Senyawa intermetalik diklasifikasikan berdasarkan struktur kristalnya, seperti A₂B₂ membentuk *laves phase*, AB₅ membentuk *Body Centered Cubic*, seperti pada table dibawah ini. Klasifikasi lanjut pada *intermetallic*

compound adalah berdasarkan struktur kristal yang terbentuk dari perbandingan A_xB_y . (Züttel, 2003)

Tabel 2.2 Klasifikasi *Intermetallic Compound*

<i>Stoichiometry</i>	<i>AVAILABLE crystal structural</i>	<i>A site element</i>	<i>B site element</i>	<i>Typical hydrogen storage (wt.%)</i>
A ₂ B	Hexagonal	Mg	Ni, Cu	Up to 3.6%
AB	Body-centered cubic	Ti	Cr, Fe, Ni, Mn, V	Up to 3.5%
AB ₂	C14, C15, C36	Ti, Zr, Hf	V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn	Up to 3.0%
AB ₃	Hexagonal	Ca, Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm	Ni, Co, Mn, Al, Fe, Cu	Up to 1.8%
AB ₅	CaCu ₅	Ca, Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm	Ni, Co, Mn, Al, Fe, Cu	Up to 1.4%

Paduan AB₅ dan AB₂ adalah paduan yang tergolong stabil dan umum digunakan dalam pembuatan NiMH baterai karena beberapa faktor seperti tekanan kerja dan temperatur kerja sesuai dengan yang dibutuhkan. Namun untuk memaksimalkan potensi dari kedua jenis paduan tersebut, banyak faktor yang harus diteliti dan dipertimbangkan seperti *self-discharge*, *cycle stability* dan *cost reduction*. Pada Paduan AB₅ misalnya, ada kekurangan utama seperti yang ada pada tabel, yaitu pada AB₅ akan ter-degradasi pada temperatur diatas -350 K. Pada paduan AB₂ ada masalah dimana harga material V murni sangat mahal. (Young, 2018)

Tabel 2.3 Tipe Paduan dengan Propertinya

Table 1: Key Properties of Metal Hydrides Suitable for Gas-Phase Applications.

Alloy Type	Crystal Structure Type	Hydride Phase	Maximum H Capacity (wt%)	Reversible H Capacity (wt%)	P_{des}^a at 298 K (bar)	T (K) for 1.013 bar P_{des}	$-\Delta H_{plateau}^b$ (kJ/mol H ₂)	Comments
A	A3 (hP2)	MgH ₂	7.66	<7.0	$\sim 10^{-6}$	552	74.5	Ni improves kinetics
A	A2 (cI2)	VH ₂	3.81	1.9	2.1	285	40.1	Two plateaus, difficult to activate
A ₂ B	C ₂ (hP18)	Mg ₂ NiH ₄	3.59	3.3	$\sim 10^{-6}$	528	64.5	Not metallic, very slow kinetics for T < 500 K
AB	B2 (cP2)	TiFeH ₂	1.89	1.5	4.1	265	28.1	Two plateaus, hard to activate
AB	Bf (cC8)	ZrNiH ₃	1.96	1.1	$\sim 5 \times 10^{-6}$	573	68.6	Two plateaus, fast kinetics
AB ₂	C14 (hP12)	TiMn _{1.4} V _{0.62} H _{3.4}	2.15	1.1	3.6	268	28.6	V makes it more expensive
AB ₂	C14 (hP12)	ZrMn ₂ H _{3.6}	1.77	0.9	0.001	440	53.2	Powder is highly pyrophoric
AB ₂	D _{2d} (hP6)	LaNi ₄ H _{6.5}	1.49	1.28	1.8	285	30.8	Fast kinetics, but degrades for T > -350 K
AB ₂	D _{2d} (hP6)	LaNi ₄ Sn _{0.2} H _{6.0}	1.40	1.24	0.5	312	32.8	Slow degradation for T < 550 K

Note: After Reference 6.

^a P_{des} is the average desorption pressure.

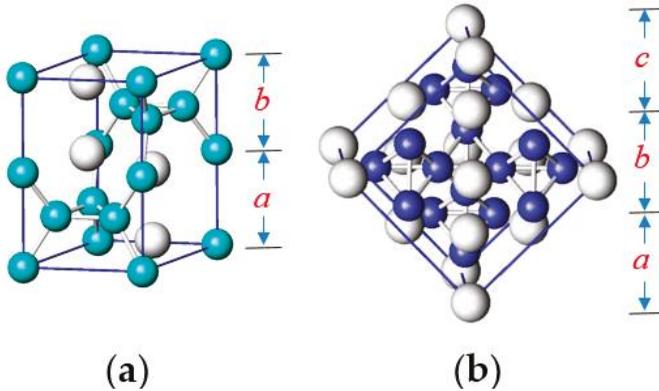
^b $\Delta H_{plateau}$ is the enthalpy of the plateau region of the hydride PCT isotherms (negative quantity for exothermic reactions).

2.3 Metal Hydride

Unsur pembentuk logam AB₂ adalah dimana unsur A berasal dari grup 4 (Ti, Zr), sedangkan elemen B dapat berasal dari logam transisi maupun non transisi dengan preferensi V, Cr, Mn, dan Fe. Logam paduan AB₂ memiliki kompatibilitas elemen penyusun yang lebih banyak dibandingkan klasifikasi logam paduan AB yang lainnya karena kelarutan elemennya yang baik dengan satu sama lain. Kompatibilitas elemen ini yang menyebabkan sifat dari Logam paduan AB₂ menjadi kandidat utama untuk memenuhi berbagai aplikasi permintaan kebutuhan, khususnya untuk menjadi elektroda negatif dari baterai NiMH.

AB₂ akan membentuk 2 struktur dimana kubik C15 atau struktur hexagonal C14. AB₂ akan membentuk 2 struktur dimana kubik C15 atau struktur hexagonal C14. C14 memiliki urutan penyusunan *a-b-a-b* (Gambar a); C15 memiliki urutan penyusunan *a-b-c-a-b-c*. logam paduan AB₂ memiliki kemampuan dalam

menyimpan hidrogen baik. Logam paduan AB_2 terdiri dari *A-site* dan *B-site* dimana *A-site* atom lebih besar daripada *B-site* atom dengan ratio RA/RB sebesar 1.225, tapi cenderung mengecil ketika elektronegativitas dari *B-site* atom meningkat dikarenakan transfer elektron. (*Nickel Metal Hydride Batteries 2017, 2018*)



Gambar 2.3 (a) Kubik C15 dan (b) Heksagonal (C14) Struktur Laves Phase

2.4 Kesetimbangan Fasa *Metal Hydride*

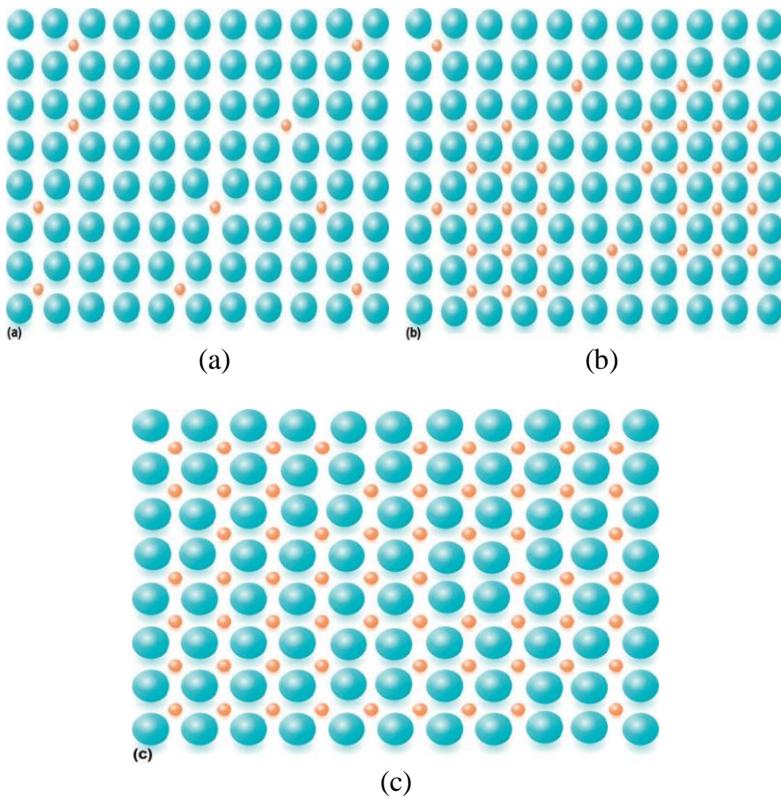
Kesetimbangan reaksi absorption dan desorption dapat digambarkan/dikarakterisasikan melalui diagram PCT yang mengacu pada korelasi antara hidrogen pada tekanan tertentu (P), konsentrasi hidrogen dalam fase padat (C) dan temperatur (T). Pada gambar (2.1) sumbu x dan y mewakili konsentrasi hidrogen dalam fase padat (C) dan tekanan hidrogen (P). Logam hidrida menyerap hidrogen dalam 3 langkah proses α , $\alpha \rightarrow \beta$ dan β . Fase pertama adalah α , dimana H_2 memisahkan diri dipermukaan logam menjadi H^+ dan mulai memasuki *bulk* dan mulai membentuk *solid solution*. Pada *host lattice* biasanya atom H terletak pada *tetrahedron* yang dibentuk oleh empat atom logam atau *octahedron* yang dikelilingi enam atom metal. Secara umum, ini akan menyebabkan ekspansi volum dari *unit cell* sekitar 2 hingga 3\AA^3 per atom H. Ketika konsentrasi hidrogen meningkat, fase β mulai terbentuk. Masuk pada masa transisi $\alpha \rightarrow \beta$ ditandai dengan adanya

dataran/*plateu* pada grafik yang dianggap sebagai kapasitas penyimpanan hidrogen yang *reversible*. Pada fase β , penyerapan hidrogen lebih lanjut hanya dapat disertai dengan peningkatan tekanan secara signifikan. Logaritma dari dataran tekanan dapat diplot dengan $1/T$ sebagai garis lurus sesuai persamaan Van Hoff:

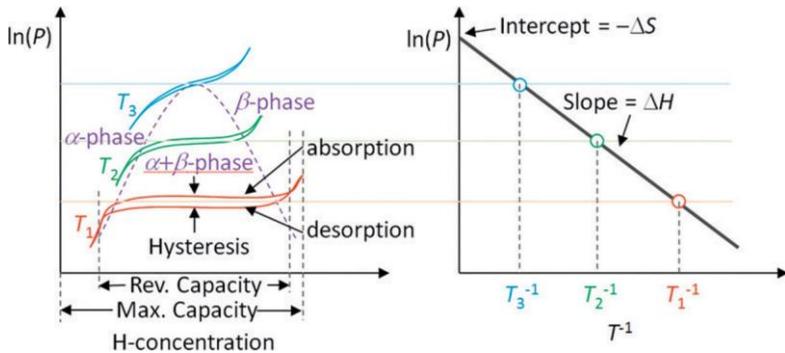
$$\ln P = \frac{-\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R} \quad (1.1)$$

Dimana R adalah konstanta gas, T adalah temperature, ΔH dan ΔS adalah entalpi dan entropi dari formasi hidrida. Besarnya entalpi dan entropi bisa ditarik garis lurus dari nilai tengah dataran tekanan hidrida, yang penting sekali untuk menentukan kestabilan untuk penyimpanan hidrogen. (“Development of metal hydride surface structures for high power NiMH batteries by Yang Shen” n.d.)

Histeresis adalah fenomena dimana nilai dari properti fisik ada yang tertinggal/*lags*, histeresis pada *absorption/desorption* adalah fenomena yang sering ditemui dalam sistem logam hidrida. Histeresis erat kaitannya dengan ekspansi volum selama pembentukan hidrida logam, nilainya mencapai 25-30%. Ekspansi nukleus dari hidrida tersebut menyebabkan munculnya tegangan didalam matrix paduan. Seiring bertambahnya temperatur maka histeresis yang ada akan semakin kecil. Pengurangan histeresis terjadi karena dua faktor, yaitu karena mobilitas dari *lattice* meningkat seiring bertambahnya temperatur dan volume yang bertambah akan lebih kecil selama masa transisi $\alpha \rightarrow \beta$. Kemudian pada temperatur kritikal, histeresis tidak akan muncul. Temperatur kritikal adalah suhu diatas dua sisi wilayah α dan β , pada keadaan tersebut dimana ketika α akan langsung berubah menjadi β . (Volodin et al., 2019)

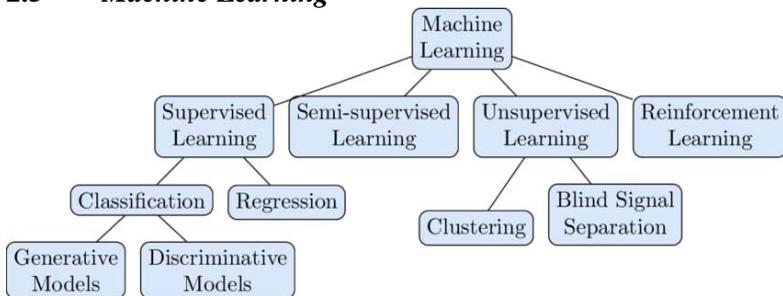


Gambar 2.4 Penempatan Atom Hidrogen pada : fase α (a), $\alpha \rightarrow \beta$ (b), dan β (c)



Gambar 2.5 Pressure–Concentration–Temperature (PCT) Curves pada Temperatur yang Berbeda ($T_3 > T_2 > T_1$) di Kiri dan Plot Van Hoff di Kanan.

2.5 Machine Learning



Gambar 2.6 Metode Machine Learning

Algoritma *Machine learning* bertujuan untuk menemukan pola atau *pattern* dari suatu set data kepada suatu output. *Machine learning* secara umum diklasifikasikan menjadi tiga kategori yaitu *supervised learning*, *unsupervised learning* dan *reinforcement learning*. *Supervised Learning* adalah tipe *learning* di mana variable input dan variable output sudah teridentifikasi, dan menggunakan satu algoritma atau lebih untuk mempelajari fungsi pemetaan dari input ke output. *Tujuannya* adalah untuk

memperkirakan fungsi pemetaannya, sehingga ketika memiliki input baru, output dari input baru tersebut dapat diprediksi. *unsupervised learning* adalah tipe *learning* dimana data yang tersedia hanya data atau variabel *input* tidak ada data atau variabel *output*. Tujuan dari *unsupervised learning* adalah untuk memodelkan struktur dasar atau distribusi dalam data dengan tujuan untuk mempelajari data lebih jauh lagi, dengan kata lain, adalah menyimpulkan fungsi yang mendeskripsikan atau menjelaskan data. Sedangkan *reinforcement learning* adalah proses analisa masalah untuk menemukan suatu hasil yang paling optimal.

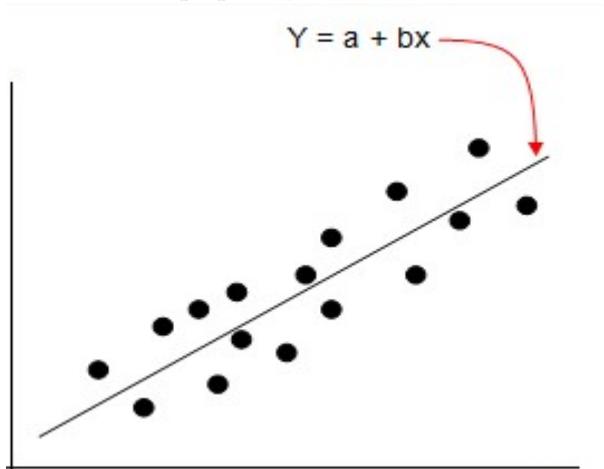
Penelitian ini akan menggunakan metode *supervised machine learning* dimana algoritma *machine learning* yang dapat menerapkan informasi yang telah ada pada data dengan memberikan label tertentu, misalnya data yang telah diklasifikasikan sebelumnya (terarah). Untuk memilih metode klasifikasi atau regresi akan mengacu kepada tipe variabel output penelitian, dimana tipe variabel output untuk klasifikasi merupakan kelas atau diskrit (yes or no). Regresi memiliki variabel output yang angka atau *continuous* (1.45, 1.55, 1.65, dst). Pada penelitian ini digunakan regresi karena variabel outputnya berupa angka atau *continuous*.

2.5.1 Algoritma Supervised Machine Learning

Algoritma adalah tatacara langkah demi langkah dalam penyelesaian masalah dalam masa yang terhingga atau dibatasi, atau bisa dikatakan bahwa algoritma adalah proses penalaran dari satu atau lebih pernyataan umum (premis) untuk mencari suatu kesimpulan tertentu. Banyak metode yang digunakan dalam *machine learning*. Berikut adalah beberapa contoh metode yang sering digunakan dalam *material science* :

a) Linier Regression

Analisis regresi mempelajari bentuk hubungan antara satu atau lebih variabel bebas (X) dengan satu variabel terikat (Y). Dimana akan ditetapkan suatu hubungan antara variabel bebas dan terikat dengan melakukan fitting ke suatu garis lurus. Didefinisikan oleh suatu persamaan linear $Y=a+bX$, dimana Y merupakan variabel terikat, b adalah gradien, X adalah variabel bebas, dan a adalah perpotongan.

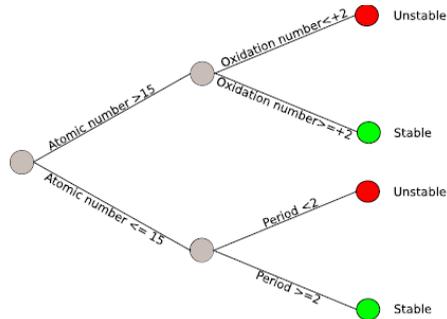


Gambar 2.7 Grafik pada Regresi Linier

Multiple regression merupakan sebuah teknik untuk menganalisa hubungan antara dependent variabel y dan satu atau lebih independent variabel x_1, x_2, \dots, x_k . Tujuan dari multiple linear regression adalah untuk menghasilkan prediksi (prediction) nilai dari suatu variabel dependen berdasarkan nilai-nilai variabel independen. analisis regresi adalah untuk mengidentifikasi sebuah fungsi yang menjelaskan sedekat mungkin hubungan antara variabel dependent sehingga dapat diprediksi dengan menggunakan rentang nilai variabel independent.

b) *Decision Tree Regression*

Decision tree membagi data menjadi himpunan bagian berdasarkan variabel bebas. Decision trees adalah jenis diagram alir yang membantu dalam proses pengambilan keputusan. Hal ini dilakukan berdasarkan variabel bebas yang paling signifikan untuk membuat grup-grup yang berbeda.



Gambar 2.8 Skema Alur *Decision Tree*

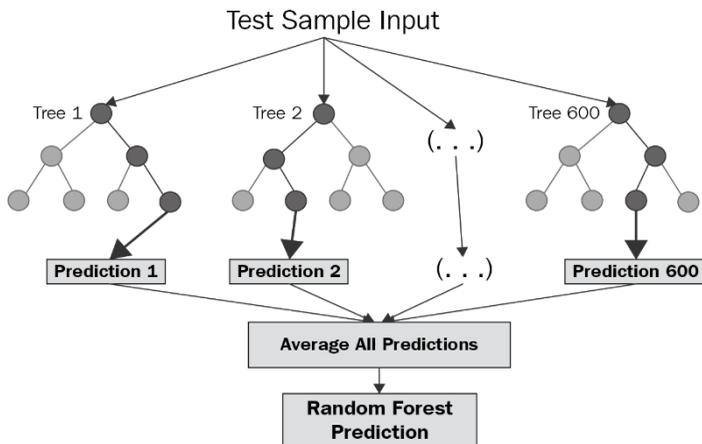
Pada umumnya, metode decision tree memiliki karakteristik yang cepat dan sederhana untuk di-*training* selain itu decision tree juga cocok untuk dataset yang berukuran besar. Decision tree mampu membreak down proses pengambilan keputusan yang kompleks menjadi lebih simpel sehingga pengambil keputusan akan dapat menginterpretasikan solusi dari permasalahan dengan lebih baik.

Decision tree juga disebut sebagai diagram alir yang berbentuk seperti struktur pohon yang mana setiap internal node menyatakan pengujian terhadap suatu atribut, setiap cabang menyatakan output dari pengujian tersebut dan node daun (leaf node) menyatakan distribusi kelas. Node yang paling atas disebut node akar (root node). Jalir pengujian data adalah pertama, semua data harus melalui root node dan terakhir adalah melalui leaf node yang akan menyimpulkan prediksi kelas bagi data tersebut. Atribut data harus berupa data

kategorik, bila kontinu maka atribut harus didiskretisasi terlebih dahulu.

c) *Random Forrest Regression*

Random Forest diawali dengan teknik dasar data mining yaitu decision tree. Pada decision tree input dimasukan pada bagian atas (root) kemudian turun kebagian bawah (leaf) untuk menentukan data tersebut termasuk kelas apa. Random forest adalah pengklasifikasi yang terdiri dari kumpulan pengklasifikasi pohon terstruktur dimana masing-masing pohon melemparkan unit suara untuk kelas paling populer di input x . Dengan kata lain Random Forest terdiri dari sekumpulan decision tree (pohon keputusan), dimana kumpulan decision tree tersebut digunakan untuk mengklasifikasi data ke suatu kelas.



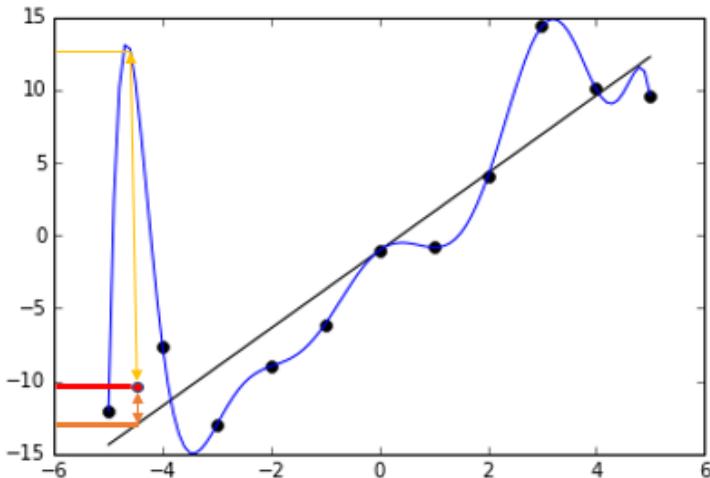
Gambar 2.9 Model *Random Forrest Regression*

Decision Tree akan menggunakan information gain dan gini index untuk perhitungan dalam menentukan root node dan rule. Sama halnya dengan Random Forest yang akan menggunakan information gain dan gini index untuk

perhitungan dalam membangun tree, hanya saja Random Forest akan membangun lebih dari satu tree. Masing-masing tree dibangun menggunakan set data dengan atribut yang diambil secara acak dari data training. Dengan kata lain setiap tree akan bergantung pada nilai dari sampel vektor yang independen dengan distribusi yang sama pada setiap tree.

2.5.2 *Overfitting*

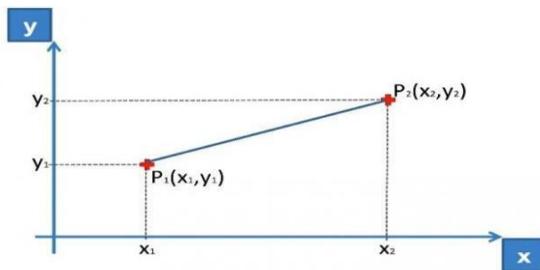
Overfitting adalah suatu keadaan dimana data yang digunakan untuk pelatihan itu adalah yang "terbaik". Sehingga apabila dilakukan tes dengan menggunakan data yang berbeda dapat mengurangi akurasi (hasil yang dibuat tidak sesuai yang diharapkan). Overfitting dapat terjadi ketika beberapa batasan didasarkan pada sifat khusus yang tidak membuat perbedaan pada data. Overfitting adalah suatu kondisi dimana model, dibangun dengan memperhitungkan seluruh ciri yang ada, termasuk noise.



Gambar 2.10 Ilustrasi Model *Overfitting*, garis biru model *polynomial*, garis hitam linear regresi

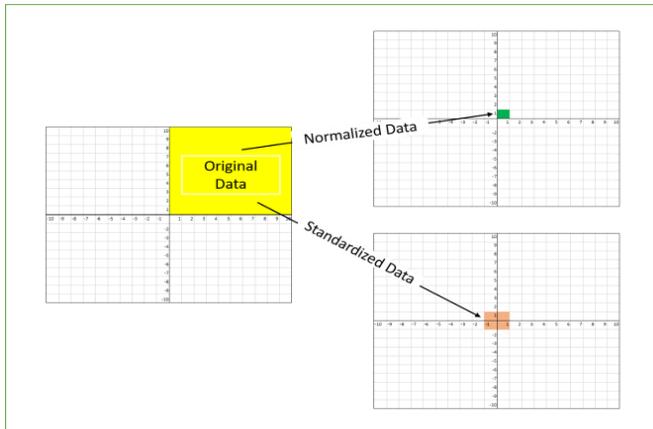
Overfitting diilustrasikan jika suatu model akan mengikuti semua pola yang terjadi pada suatu data ditandai dengan garis biru pada gambar 2.9. Secara kasat mata model polynomial yang digambarkan oleh garis biru mampu dengan sempurna mengikuti seluruh data, sedangkan garis linear regresi sederhana terlihat tidak mampu mengikuti titik persebaran data. Pada kasus ini polynomial dikatakan model yang baik karena kemampuannya “fit” pada seluruh data, namun ketika data baru titik merah dimasukkan, maka model polynomial akan membaca nilai yprediksi sebesar 13, sedangkan pada linear regression -13, dimana nilai y-real adalah -10. Ketika memperhitungkan nilai y-real dengan y-prediksi, maka dapat dilihat bahwa sebenarnya model linear regresi akan lebih baik untuk memprediksi dikarenakan error yang dihasilkan oleh linear regresi lebih kecil dibandingkan model polynomial, meskipun model polynomial dapat fit pada seluruh data yang ada. Hal ini disebabkan karena model polynomial berusaha mengikuti seluruh data dengan sempurna, sehingga tidak mengeneralisasikan seluruh data yang ada, maka dapat dikatakan model polynomial terjadi *overfitting*. *Overfitting* ditandai dengan besarnya nilai R^2 train, namun R^2 test dan validasi nya buruk, error yang dihasilkanpun besar.

2.5.3 Feature Scaling



$$\text{Euclidean Distance between } P_1 \text{ and } P_2 = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$$

(a)



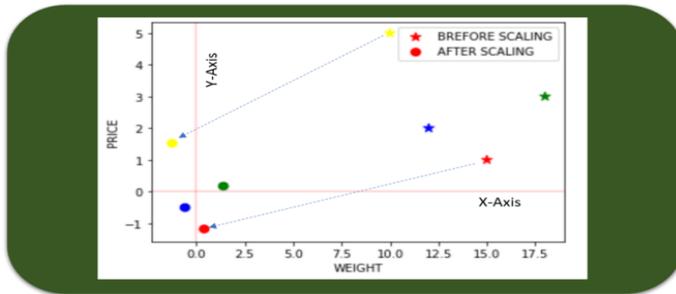
(b)

Gambar 2.11 Data Scaling (a) Ilustrasi Data Scaling (b) Metode Scaling

Euclidean distance secara umum adalah perhitungan yang digunakan untuk penarikan garis. Jarak euclidean adalah jarak antara dua titik yang merupakan hasil dari akar dari penjumlahan selisih kuadrat keduanya. Ilustrasi mudahnya dapat dilihat melalui gambar 2.11. Jika diambil akar dari X (berat) dan Y (harga) dengan referensi tabel 2.4, maka sudah jelas koordinat Y (harga) dianggap lebih tidak penting untuk diperhitungkan karena kecil dibandingkan berat. Sehingga koordinat X (berat) dengan rentang nilai 10-20 akan mendominasi, yang nantinya membuat model *machine learning* kita menjadi tidak optimal. Oleh karena itu perlu proses yang disebut dengan *feature scaling* yaitu dengan mentransformasikan kolom 'berat' dan 'harga' menjadi nilai dengan rentang dari -1 sampai 1 melalui aritmatika standardisasi atau normalisasi. Gambar 2.12 merupakan hasil dari *feature scaling* menggunakan metode standarisasi.

Tabel 2.4 Contoh Variabel Input *Scalling* pada Buah

Nama Buah	Berat (gram)	Harga (\$)
Orange	15	1
Apel	18	2
Pisang	12	3
Anggur	10	5

**Gambar 2.12 Hasil Data *Scalling* Menggunakan Metode Standarisasi**

2.6 Penelitian Terdahulu

Rahmana et. al. pada jurnal *Machine Learning based prediction of metal hydride for hydrogen storage, part I : Prediction of hydrogen weight percent* meneliti seluruh klasifikasi logam paduan A_XB_Y dengan variabel input klasifikasi material, temperatur, tekanan, komposisi kimia dan *Heat formation* dan variabel output berupa presentase massa hidrogen. Data yang digunakan adalah data yang dihimpun oleh US DOE. Pada penelitian ini digunakan analisa menggunakan *supervised machine learning* dengan metode *linear regression*, *neural network*, *Bayesian linear regression*, dan *boosted decision tree* untuk memprediksi presentase massa hidrogen (H % wt), lalu membandingkan ke-empat metode tersebut. Model terbaik pada penelitian ini adalah *Bossted Decision Tree*. (Rahnama et al., 2019)

Hattrick-Simpers et al. pada jurnal *simple constrained machine learning model for predicting high-pressure-hydrogen-compressor materials* meneliti seluruh klasifikasi logam penyimpanan hidrogen dengan variabel input berupa tekanan dan temperature dan variabel output berupa *heat of formation*. Data yang digunakan adalah data yang dihimpun oleh US DOE. Pada jurnal ini, digunakan analisa menggunakan *supervised machine learning* dengan algoritma *random forrest* dan *neural network* untuk memprediksi *heat of formation* (ΔH). Model terbaik pada penelitian ini adalah *random forest*. (Hattrick-Simpers et al., 2018)

Ding et al. pada jurnal *predicting the hydrogen release of LiBH₄* meneliti klasifikasi logam paduan *LiBH₄* dan menggunakan H%wt sebagai variabel output dan menggunakan rasio molar, *heating rate*, *tekanan*, penggunaan katalis (klasifikasi), lama waktu pelepasan hidrogen. Data yang digunakan adalah penelitian dari tahun 2003 sampai 2018 pada klasifikasi logam *LiBH₄*. Algoritma yang digunakan adalah *decision tree*, *random forest*, *ensemble of ensemble (EoE)*, *bagging*, dll. Penelitian tersebut meneliti pengaruh individu tiap variabel input dengan analisa *spearman* dan *decision tree*. Model terbaik pada penelitian itu adalah EoE. (Ding et al., 2020)

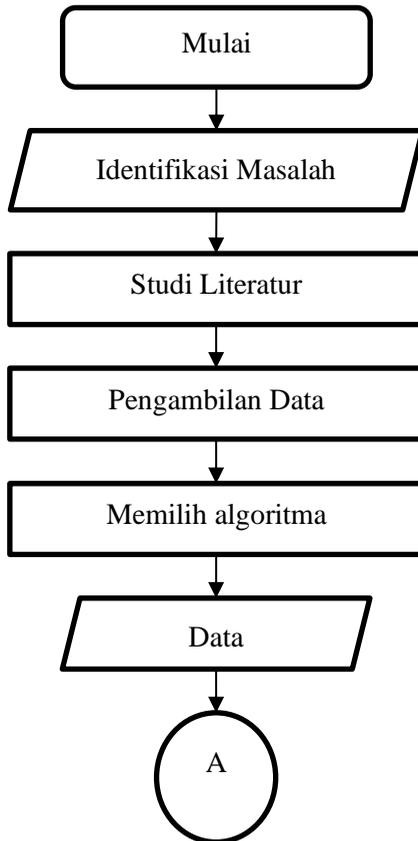
Perbedaan penelitian ini dengan penelitian terdahulu ada pada variabel input dan variabel ouput dimana pada penelitian ini variabel input yang digunakan adalah komposisi kimia dan variabel outputnya berupa *hidrogent weight percent* dan *heat of formation*. Pada penelitian ini digunakan tiga algoritma pembanding *multivariate linear regression*, *decision tree regression* dan *random forest regression*.

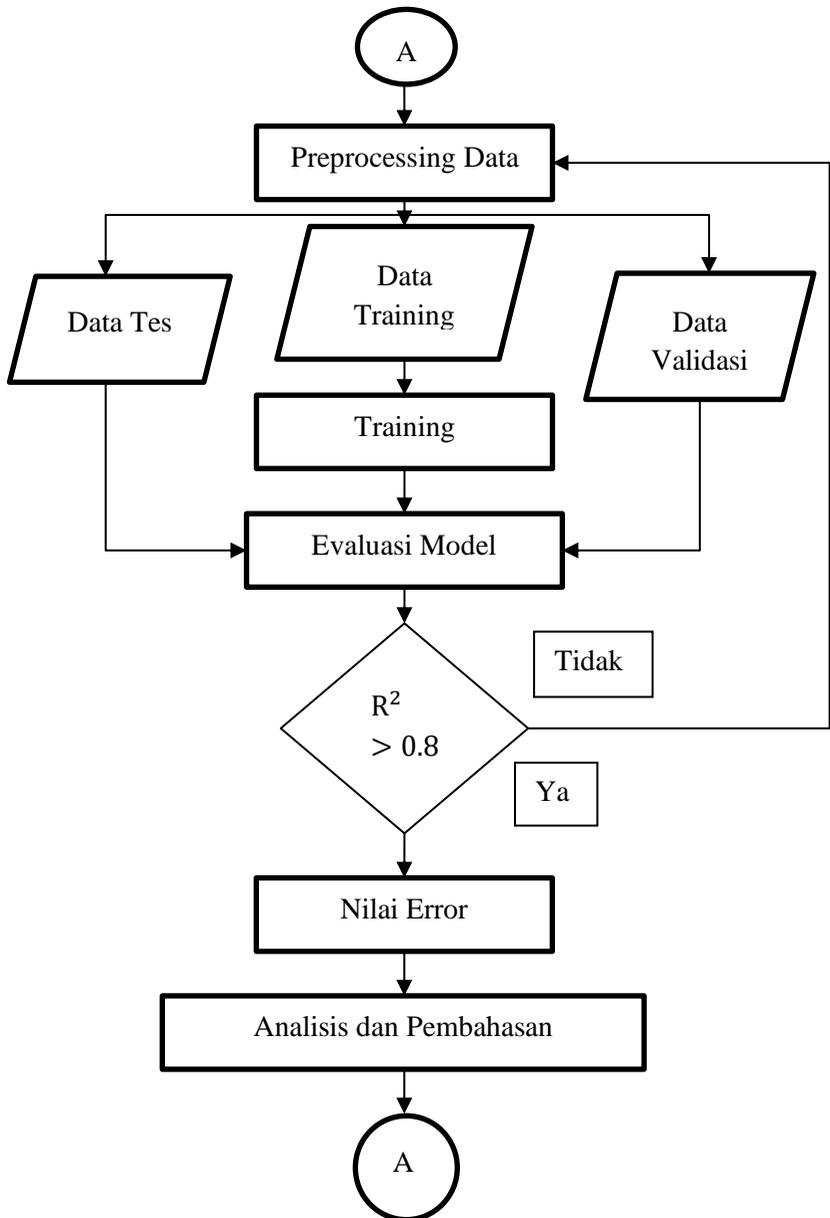
(halaman ini sengaja dikosongkan)

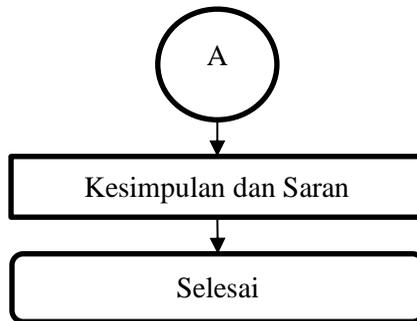
BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Diagram Alir Penelitian

Pada penelitian ini dilakukan langkah-langkah sebagai berikut:







Gambar 3.1 Diagram Alir Percobaan

3.2 Data Set

Data yang digunakan pada penelitian ini adalah data dari penelitian terdahulu sampai dengan tahun 2002. Data ini dihimpun oleh U.S. DOE atau *Department of Energy* Amerika Serikat. Dimana variabel yang tersedia pada data ini adalah *composition formula*, *temperature*, *pressure*, *heat formation* dan *hydrogen percentage weight*. Data yang tersedia sebanyak 625 unsur paduan yang kemudian harus dibersihkan agar data dapat diolah. Setelah dibersihkan, terdapat 409 data yang diolah untuk penelitian tugas akhir ini. Pembersihan dilakukan pada data yang tidak mencantumkan presentase kandungan hidrogen dan enthalpy pembentukan.

3.2.1 Variabel Bebas Penelitian

Pada penelitian ini variabel yang digunakan sebagai variabel *input* atau bebas adalah komposisi unsur kimia berupa nomor mol dari Ti, Zr, Sc, Y, Dy, Tm, Ce, Tb, Th, Er, U, Ca, Gd, Ho, Mn, Co, Cr, V, Ni, Al, C, Mg, Fe, Cu, Mo, La, Si, S, Ru, Be Rh, Ge, Li dan Pd.

3.2.2 Variabel Target Penelitian

Variabel yang digunakan sebagai variabel target atau terikat adalah presentase massa hidrogen ($H \% wt$) dengan entalphi (ΔH). Variabel target $H \% wt$ dengan ΔH tersedia pada data yang

dihimpun oleh US DOE. Untuk ΔH yang tidak tersedia pada tabel, maka dihitung dengan rumus $\ln(P_H) = \Delta H/RT - \Delta S/R$, dimana nilai P (tekanan) dan T (temperatur) tersedia pada data dengan nilai R (konstanta gas) sebesar 8.3144 KJ/(molH₂K) dan ΔS diasumsikan sebesar 110 KJ/(molH₂K). Setelah diolah terdapat 409 varian komposisi kimia .

3.2.3 Pembersihan Data

Pembersihan data dilakukan agar data dapat diolah dengan mengacu pada variabel input dan variabel output. Dimana variabel terikat dan variabel bebas harus diserupakan agar dapat diolah. Pada tabel 3.1 dimana data yang belum diolah diambil untuk dibersihkan. Lalu pada tabel 3.2 yaitu dimana hasil dari pembersihan pada tabel 3.1. Pada tabel 3.1 komposisi kimia nomor 1 tidak akan masuk pada set data penelitian, karena tidak tertera ΔH , T dan P pun tidak tertera sehingga data tidak bisa diasumsikan. Pada unsur kimia paduan nomor 2 yang tertera pada tabel 3.1 akan masuk pada set data penelitian, meskipun ΔH tidak tertera, namun ΔH dapat diasumsikan lalu menjadi nomor urut 1 pada tabel 3.2 . Pada unsur kimia paduan nomor 3 yang tertera pada tabel 3.1 akan masuk pada data set penelitian, namun ada variasi unsur kimia dengan memberikan $x=0-0.15$ maka akan dibagi menjadi 2 unsur kimia yang tertera pada tabel 3.2 (nomor 2 dan 3) dengan ΔH yang diasumsikan. Pada unsur kimia paduan nomor 3 yang tertera pada tabel 3.1 akan masuk pada data set penelitian karena variabel terikatnya H % wt dan ΔH sudah tertera pada tabel tersebut. Data set lengkap akan dilampirkan pada lampiran penelitian ini.

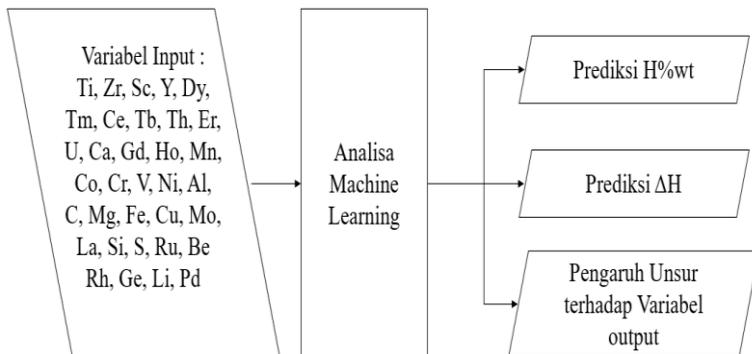
Tabel 3.1 Raw Data

No	Composition Formula	H % wt	ΔH	T (°C)	P (atm)	Author Year	Reference Number	Comment1
1	{Sc.4Y.4Ti.2}Co2	1.4				Burnasheva, 1981	64	
2	{Ti.75Zr.25}1.05Mn.8Cr1.05V.05Cu.1	1.8		30	3	Park, 2001	1280	
3	{Ti.75Zr.25}1+xMn.8Cr1.2	1.85		30	1.5 - 6	Park, 2001	1280	x=0-0.15
4	{Ti.8Zr.2}1+xMn.8Cr1.2	1.8		30	9-Mar	Park, 2001	1280	x=0-0.15
5	Ca.25Mg.75Ni2	1.2				Oesterreicher, 1980	43	
6	Ca.5Mg.5Ni2	1.7				Oesterreicher, 1980	43	
7	CaAl1.8B.2 (M)	0.7		40	3	Tanaka, 1995	416	
8	CaAl2	0.6				Beck, 1962	45	
9	CaAl2	2.1				Shaltiel, 1978	66	
10	CaMg2	5.4				Shaltiel, 1978	66	
11	CaNi2	2.1	85	25	0.05	Oesterreicher, 1980	43	

Tabel 3.2 Data Penelitian

No	Composition Formula	Ti	Zr	Ca	Mn	Co	Cr	V	Ni	Cu	H % wt	ΔH	T (°C)	T(K)	P	Author Year	Reference
1	{Ti.75Zr.25}1.05Mn.8Cr1.05V.05Cu.1	0.7875	0.26	0	0.8	1.05	0	0.05	0	0.1	1.8	36.098	30	303	3	Park, 2001	1280
2	{Ti.75Zr.25}1Mn.8Cr1.2	0.75	0.25	0	0.8	0	1.2	0	0	0.185	34.351	30	303	303	1.5	Park, 2001	1280
3	{Ti.75Zr.25}1.15Mn.8Cr1.2	0.8625	0.29	0	0.8	0	1.2	0	0	0.185	37.844	30	303	303	6	Park, 2001	1280
4	{Ti.8Zr.2}1Mn.8Cr1.2	0.8	0.2	0	0.8	0	1.2	0	0	0.18	36.098	30	303	303	3	Park, 2001	1280
5	{Ti.8Zr.2}1.15Mn.8Cr1.2	0.92	0.23	0	0.8	0	1.2	0	0	0.18	38.865	30	303	303	9	Park, 2001	1280
6	CaNi2	0	0	1	0	0	0	0	2	0.21	85	25	298	0.05		Oesterreicher, 1980	43

3.3 Desain Penelitian

**Gambar 3.2 Desain Penelitian**

3.4 Metode *Machine Learning*

Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah *supervised machine learning*. Karena output-nya berupa *numeric* maka digunakan metode regresi. Algoritma yang dipilih pada metode regresi ini berupa *multivariate linear regression*, *decision tree* dan *random forest*. Algoritma *decision tree* dipilih karena jika *multivariate linear regression* gagal untuk memprediksi karena tidak adanya hubungan *linear* antara variabel bebas dan terikat. *Random forest* dipilih karena pada model *decision tree* sering terjadi *overfitting* sehingga menyebabkan model kurang efektif dalam memprediksi.

Penelitian pengaruh unsur secara individu dilakukan dengan cara *linear regresi* dan *decision tree*. *Random forest* akan sulit diinterpretasikan secara gambaran model tidak tersedia karena gabungan dari puluhan tree berbeda dengan *decision tree* dan *linear regresi* dimana model bisa diteliti karena penggambaran model bisa dilakukan. maka dari itu saran rekomendasi untuk unsur yang menaikkan atau menurunkan hanya diambil 2-3 dari nilai R (dari hasil analisa *linear regression*) dan MSE Decrease (dari hasil analisa *dec tree*) yang terbaik.

data yang dilakukan didapatkan sebanyak 409 data dengan komposisi kimia yang berbeda-beda. Gambar 4.1 menjelaskan berapa banyak suatu unsur masuk menjadi komposisi kimia suatu paduan tanpa melihat berapa kadar dari unsur tersebut. *Chart* menunjukkan bahwa unsur Zr, Ti, Mn, Cr, Fe, V dan Ni adalah unsur yang paling sering divariasikan dalam penelitian terdahulu.

4.2 *Pre-processing Data*

Pada penelitian ini telah dilakukan pengolahan data awal sebagai berikut :

4.2.1 *Pengecekan Null*

Pengecekan null dilakukan kepada seluruh data, dimana pengecekan null dilakukan untuk memastikan apakah ada nilai null diseluruh kolom variabel yang ada menggunakan fungsi "`isnull().any()`". Null dikategorikan sebagai nilai yang tidak terisi atau kosong. Nilai null ini akan menyebabkan *error* pada proses fitting data dilakukan. Outputnya berupa keterangan *true or false* dimana ketika *true* maka pada data variabel tersebut terdapat *null*. Sebaliknya jika *false* maka pada data tersebut tidak ada null.

Dapat disimpulkan bahwa

```

1 #Check for nulls
2 display(data.isnull().any())

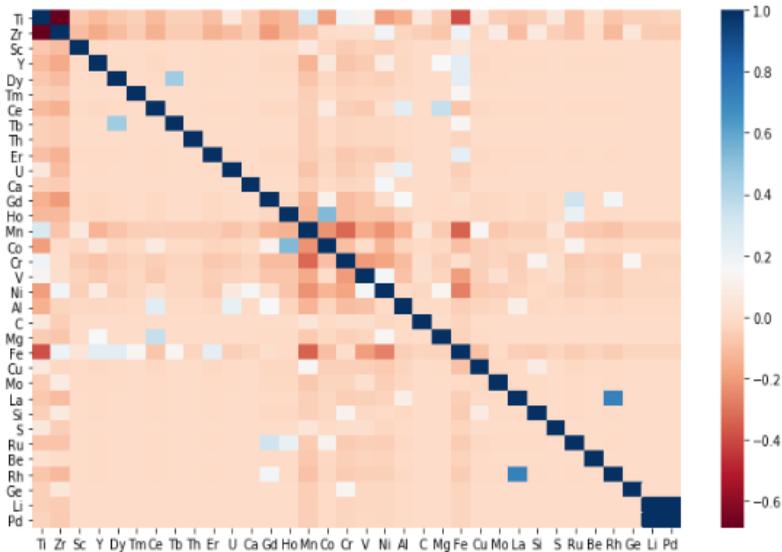
Ti      False
Zr      False
Sc      False
Y       False
Dy      False
Tm      False
Ce      False
Tb      False
Th      False
Er      False
U       False
Ca      False
Gd      False
Ho      False
Mn      False
Co      False
Cr      False
V       False
Ni      False
Al      False
C       False
Mg      False
Fe      False
Cu      False
Mo      False
La      False
Si      False
S       False
Ru      False
Be      False
Rh      False
Ge      False
Li      False
Pd      False
B       False
A       False
B/A     False
e/a     False
H % wt  False
OH      False
dtype: bool

```

Gambar 4.2 Pengecekan Null pada Dataset

4.2.2 Uji Multikolinearitas

Uji multikolinearitas dilakukan guna menganalisa apakah ada korelasi variabel input terhadap variabel input yang ada, karena jika ada akan menyebabkan redundansi yang akan mengakibatkan variabel yang tidak signifikan secara statistic. Matriks korelasi digunakan untuk menguji apakah ada korelasi antara variabel input. Matriks ini berupa tabel angka yang cukup sulit untuk dilihat satu persatu, maka untuk mempermudah mendeteksi nilai korelasi, maka dibuat heatmap pada tabel korelasi tersebut. Syarat nilai multikolinear ini adalah jika nilai korelasi $r > 0.8$ atau $r < -0.8$.



Gambar 4.3 Heatmap Uji Multikolinieritas

Pada heatmap nilai r yang bernilai positif ditunjukkan dengan warna biru, sedangkan yang bernilai negatif berwarna merah. Lalu semakin besar atau semakin kecil nilai r ditandai dengan warna biru dan merah yang menggelap. Pada heatmap, terdapat 2 kemungkinan terjadinya multikolinier, yaitu unsur Ti terhadap Zr dan Li terhadap Pd, namun nilai r pada Ti dan Zr hanya sebesar -0.688 maka nilai tersebut belum dapat dikatakan sebagai multikolinier. Pada unsur Li dan Pd terdapat multikolinier dengan nilai r sebesar 0.998 . Maka perlu diselidiki apakah variabel tersebut harus dimasukkan dalam data atau harus dikeluarkan.

Hal ini disebabkan oleh unsur paduan nomor 319 dimana LiPd_2 hanya merepresentatifkan tabel Li secara tunggal, yaitu dimana pada kolom Li hanya terdapat satu nilai, begitu juga pada

kolom Pd, maka matriks multikolinear ini menganggap unsur Li dan Pd sebagai suatu multikolinear. Maka logam paduan nomor 319 dihapuskan.

4.2.3 Penghapusan Outlier

Outlier secara umum diartikan sebagai nilai yang jauh dari rentang nilai normalnya. Outlier dapat berdampak pada model dimana model bisa saja mengartikan atau menarik kesimpulan yang salah karena adanya outlier. Outlier dideteksi berdasarkan nilai Z yaitu dimana Ketika nilai $Z > 3$ atau $Z < -3$ dari standar deviasi maka nilai itu akan dianggap sebagai outlier. Outlier yang terdeteksi sebanyak 102 baris, dimana baris ini nantinya akan dihapus. Sehingga, data yang di proses ini menjadi sebanyak 307 data.

```

1 #summary data
2 desc_data = data.describe()
3
4 #add boundary
5 desc_data.loc['+3_std'] = desc_data.loc['mean'] + (desc_data.loc['std']*3)
6 desc_data.loc['-3_std'] = desc_data.loc['mean'] - (desc_data.loc['std']*3)
7
8 desc_data
9
10

```

```

1 #filter outlier
2 removed_outlier_data = data[np.abs(stats.zscore(data)>3).all(axis=1)]
3
4 #what rows were removed, buang outlier 102 data dibuang
5 data.index.difference(removed_outlier_data.index)

```

```

Int64Index([ 5,  6,  7,  8,  9, 10, 11, 12, 13, 14,
            ...,
            336, 354, 356, 357, 362, 363, 372, 377, 378, 379],
            dtype='int64', length=102)

```

Gambar 4.4 Penghapusan Outlier

4.2.4 Membagi Data Menjadi *Train* dan *Test*

Pembagian data umumnya tidak ada ketentuan baku bagaimana memilih dan menentukan porsi *train*, *test* dan *validation*. Data akan secara acak dipilih dan dibagi kedalam tiga kategori data tersebut. Pada penelitian ini, digunakan porsi data tes sebesar 30% dan *train* 70%.

```

1 #split data, memisahkan antara data train and test
2
3 # test set (30%)
4 x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(features, labels, test_size=0.10, random_state=2)
5

```

Gambar 4.5 Split Dataset

4.2.5 Data Scaling

Fitur *data scaling* digunakan untuk menstandarkan variabel input dari dataset agar berada direntang yang ditentukan sehingga tidak ada variabel input yang mendominasi variabel input lainnya. Pada penelitian ini digunakan proses data scaling dengan metode standarisasi.

```

1 # Scale the data, membuat data menjadi skala -1 s.d 1
2 scaler = StandardScaler().fit(x_train)
3 scaler_mean, scaler_scale = scaler.mean_, scaler.scale_
4 x_train_scaled = scaler.transform(x_train)
5 x_test_scaled = scaler.transform(x_test)
6 x_validation_scaled = scaler.transform(x_validation)

```

(a)

1	x_train																				
	Ti	Zr	Sc	Y	Dy	Tm	Ce	Tb	Th	Er	...	Cu	Mo	La	Si	S	Ru	Be	Rh	Ge	Pd
13	0.00	0.00	0	0	1.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
372	1.00	0.00	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
102	0.00	1.00	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
120	0.50	0.50	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
336	0.90	0.20	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
...
360	0.75	0.25	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
385	1.00	0.00	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
197	0.00	1.00	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
174	0.00	1.00	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0
122	0.50	0.50	0	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0	0.0	0.0

(b)

```

1 desc_train = x_train.describe()
2 desc_train

```

	Ti	Zr	Sc	Y	Dy	Tm	Ce	Tb	Th	Er	...	Cu	Mo
count	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	367.000000	...	367.000000	367.000000
mean	0.358358	0.538617	0.00545	0.016349	0.007439	0.002725	0.012262	0.000736	0.002725	0.013624	...	0.010128	0.016757
std	0.419207	0.430314	0.07372	0.128986	0.082855	0.052200	0.105515	0.014094	0.052200	0.116082	...	0.067036	0.136200
min	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	...	0.000000	0.000000
25%	0.000000	0.050000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	...	0.000000	0.000000
50%	0.100000	0.500000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	...	0.000000	0.000000
75%	0.800000	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	...	0.000000	0.000000
max	2.000000	2.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	0.270000	1.000000	1.000000	...	0.800000	2.000000

8 rows x 33 columns

(c)

```

1 x_train_scaled
2 xtrain_scaled = pd.DataFrame(x_train_scaled)
3 xtrain_to_csv(r'D:\xtrain_scaled.csv')

```

```

array([[ -0.85601572,  -1.25339367,  -0.07402332,  ...,  -0.0995311 ,
        -0.05227084,  -0.05227084],
       [  1.53269886,  -1.25339367,  -0.07402332,  ...,  -0.0995311 ,
        -0.05227084,  -0.05227084],
       [ -0.85601572,   1.07366486,  -0.07402332,  ...,  -0.0995311 ,
        -0.05227084,  -0.05227084],
       ...,
       [ -0.85601572,   1.07366486,  -0.07402332,  ...,  -0.0995311 ,
        -0.05227084,  -0.05227084],
       [ -0.85601572,   1.07366486,  -0.07402332,  ...,  -0.0995311 ,
        -0.05227084,  -0.05227084],
       [  0.33834157,  -0.08986441,  -0.07402332,  ...,  -0.0995311 ,
        -0.05227084,  -0.05227084]])

```

(d)

Gambar 4.6 Scaler (a) Menginput Data Scaling, (b) Data Train yang Belum di Scaling, (c) Data Describe, (c) Hasil Data Scaling

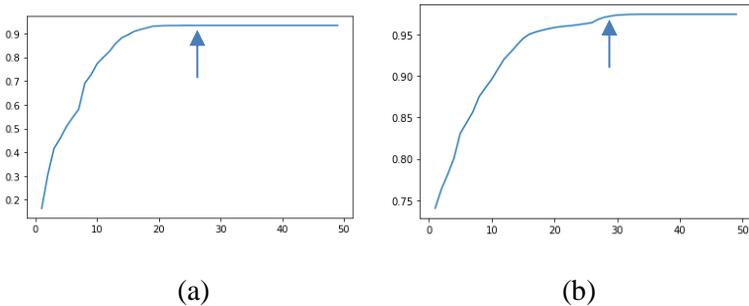
Pada gambar 4.6 (b) dengan mengambil contoh lima data pada kolom variabel Ti, didapatkan data train semula sebesar 0, 1, 0, 0.5, 0.9. Pada gambar 4.6 (d) hasil data scaling menunjukkan untuk kelima data tersebut menjadi sebesar -0.856, 1.532, -0.856, 0.338, 1.293. Data scaling akan menskalakan suatu variabel berdasarkan nilai rata-rata (mean) dengan standar deviasi pada kolom variabel tersebut. Pada gambar 4.6 (c) dapat dilihat mean sebesar 0.3583 dan standar deviasi sebesar 0.4192. contoh hasil perhitungan akan diberikan sebagai berikut:

$$X_{Scaled} = \frac{X - mean}{Std.Deviation}$$

1. $X_{Scaled} = \frac{0-0.358}{0.419} = -0.85$
2. $X_{Scaled} = \frac{1-0.358}{0.419} = -1.53$
3. $X_{Scaled} = \frac{0-0.358}{0.419} = -0.85$
4. $X_{Scaled} = \frac{0.5-0.358}{0.419} = 0.33$
5. $X_{Scaled} = \frac{0.9-0.358}{0.419} = 1.29$

4.2.6 Penentuan Panjang *Tree* untuk Model *Decision Tree*

Pada grafik ini, nilai R^2 akan diujikan pada setiap level tree yang berbeda, penentuan panjang tree dilakukan agar mendapatkan nilai R^2 yang optimal dari setiap model. Penentuan panjang tree dilakukan terhadap kedua model untuk H%wt dan ΔH . Untuk H% wt kedalaman tree sebesar 26 level, sedangkan untuk ΔH kedalaman sebesar 28 level.



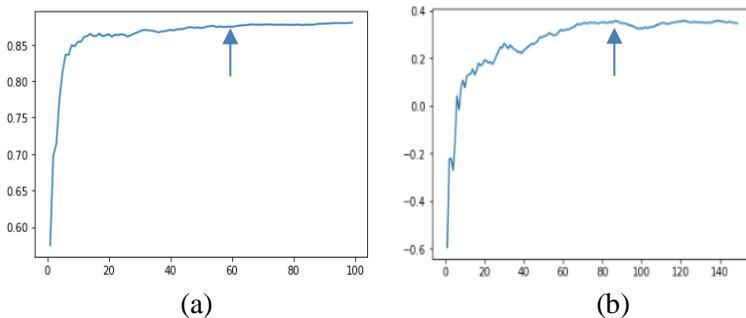
Gambar 4.7 Pemilihan Panjang *Tree* (a) Presentase Massa Hidrogen (b) ΔH

Pada gambar 4.7 sumbu y adalah R^2 train dan sumbu x adalah kedalaman tree. Pada penelitian ini tree akan meng-klasifikasikan seluruh variabel input, kedalaman tree maksimal pada model

H%wt (a) dicapai ketika panjang tree sebanyak 26 level, pada kedalaman 26 level maka tree regressor tidak akan bertambah karena pada seluruh variabel input sudah di-klasifikasikan dan dapat dilihat pada grafiknya bahwa nilai R^2 train pada tree tersebut tidak akan bertambah.

4.2.7 Penentuan Banyaknya Tree untuk Model *Random Forrest*

Pada grafik ini, nilai R^2 akan diujikan pada setiap banyaknya tree yang berbeda, penentuan panjang tree dilakukan agar mendapatkan nilai R^2 yang optimal dari setiap model. Penentuan banyaknya tree dilakukan terhadap kedua model untuk H%wt dan ΔH . Untuk H%wt dipilih sebanyak 62 tree, sedangkan untuk ΔH digunakan 80 Tree.



Gambar 4.8 Contoh Pemilihan Banyaknya Tree pada model 0.9/0.1 (a) H%wt (b) ΔH

Pada gambar 4.8 sumbu y adalah R^2 train dan sumbu x adalah banyaknya tree. Random forest akan merata-ratakan nilai prediksi dari banyaknya sekian banyak tree yang digunakan untuk modelling. Maka dipilihlah pada contoh ΔH sebanyak 80 Tree untuk menghasilkan R^2 train yang maksimal. Berbeda dengan decision tree, grafiknya akan terus menaik dan akan stabil pada tree ke 80, dapat dilihat pada fluktuasi gambar 4.8 (b) dimana nilai

R^2 train mulai stabil, maka dipilihlah banyaknya tree sebanyak 80 agar dihasilkan R^2 train yang maksimal.

4.3 Variasi Percobaan

Variasi percobaan dilakukan untuk mencari kemungkinan hubungan yang terbaik dan mencari algoritma *machine learning* yang digunakan pada percobaan ini. variasi fitur dilakukan untuk mencari keterkaitan antara variabel input (fitur) dan variabel output (label) yang terbaik dari dataset yang ada. Analisa data awal menggunakan analisis multivariate linear regression dengan pembagian data *train/test* 0.7/0.3 secara random dan terpilih sebagai pembanding.

Tabel 4.1 Variasi Fitur Awal Menggunakan *Multivariate Linear Regression*

Variasi Fitur	R^2 H % weight	R^2 ΔH
Seluruh Fitur	0.447	0.49
Fitur Tanpa Outlier	0.45	0.284

Pada Presentase masa hidrogen, dapat dipahami bahwa R^2 dengan outlier dan tanpa outlier tidak membedakan hasil prediksi, diindikasikan dengan nilai R^2 yang tidak jauh berbeda dimana R^2 pada seluruh fitur sebesar 0.447 dengan R^2 tanpa outlier sebesar R^2 0.45 ada selisih nilai sebesar 0.003 namun tidak bisa dikatakan bahwa kemampuan prediksinya menurun. Outlier yang berjumlah 102 (24,9%) dari total 409 data menandakan bahwa jumlah outlier sangat banyak, dimana pada kasus ini outlier tidak memperbaiki model atau ada kemungkinan hubungan linear pada model ΔH .

Pada variasi fitur ini diketahui bahwa fitur tanpa outlier pada ΔH menunjukkan hasil yang buruk, R^2 pada ΔH hanya menunjukkan angka 0.284 yang berarti kemampuan unsur paduan kimia untuk memprediksi nilai ΔH sangat buruk.

4.3.1 Variasi Data *Train* dan *Set*

Variasi data train/test dilakukan guna mengetahui sebagai referensi untuk pembagian data test/train/validation yang optimal.

Tabel 4.2 Analisa Presentase Massa Hidrogen pada *train/test* 0.7/0.3

Pada model presentase massa hidrogen, perbandingan data

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.447	0.931	0.857
R^2 Test	0.419	0.323	0.4738
R^2 Average	0.433	0.627	0.6654

train 70% dan tes sebesar 30%. R^2 train multivariate linear regression menunjukkan angka 0.447 dan test 0.419 hal ini menandakan tidak terjadinya overfitting kepada model linear regression. Pada model decision tree R^2 train terdapat 0.931 dan R^2 tes sebesar 0.323 menandakan overfitting terjadi pada model ini. Pada model random forrest R^2 train terdapat 0.857 dan R^2 tes sebesar 0.4738 menandakan overfitting terjadi pada model ini. Overfitting yang pada model *random forrest* terjadi lebih kecil, ditandai selisih antara R^2 train dan R^2 test model sebesar 0.608 pada decision tree dan 0.3832 pada *random forrest*.

Tabel 4.3 Analisa Presentase Massa Hidrogen pada *Train/Test* 0.8/0.2

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.459	0.895	0.88
R^2 Test	0.516	0.520	0.560
R^2 Average	0.325	0.7065	0.72

Pada model presentase massa hidrogen, perbandingan data train 80% dan tes sebesar 20%. R^2 train multivariate linear

regression menunjukkan angka 0.459 dan test 0.516 hal ini menandakan tidak terjadinya *overfitting* kepada model linear regression. Pada model decision tree R^2 train terdapat 0.895 dan R^2 tes sebesar 0.520 menandakan *overfitting* terjadi pada model ini. Pada model random forrest R^2 train terdapat 0.88 dan R^2 tes sebesar 0.56 menandakan *overfitting* terjadi pada model ini. *Overfitting* yang pada model *random forrest* terjadi lebih kecil, ditandai selisih antara R^2 train dan R^2 test model sebesar 0.32 pada decision tree dan 0.375 pada *random forrest*.

Tabel 4.4 Analisa Presentase Massa Hidrogen pada Train/Test 0.9/0.1

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.495	0.934	0.836
R^2 Test	0.567	0.608	0.795
R^2 Average	0.531	0.771	0.8155

Pada model presentase massa hidrogen, perbandingan data train 90% dan tes sebesar 10%. R^2 train multivariate linear regression menunjukkan angka 0.495 dan test 0.567 hal ini menandakan tidak terjadinya *overfitting* pada model *multivariate linear regression*. Pada model *decision tree* R^2 train sebesar 0.934 dan R^2 tes sebesar 0.608 menandakan *overfitting* terjadi pada model ini karena ada selisih perbedaan nilai 0.326. Pada model *random forrest* R^2 train terdapat 0.836 dan R^2 tes sebesar 0.795 menandakan *overfitting* tidak terjadi pada model ini.

Tabel 4.5 Analisa ΔH pada train/test 0.7/0.3

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.49	0.916	0.826

R^2 Test	0.001	0.07	0.0037
R^2 Average	0.245	0.493	0.414

Berikut adalah perbandingan performa model *machine learning* pada model *heat of formation* atau ΔH pada perbandingan data train 70% dan tes sebesar 30%. R^2 *train multivariate linear regression* menunjukkan angka 0.49 dan test 0.001 hal ini menandakan *overfitting* yang sangat besar kepada model linear regression. Pada model decision tree R^2 train terdapat 0.916 dan R^2 tes sebesar 0.07 menandakan *overfitting* yang terjadi pada model ini sangat besar. Pada model random forrest R^2 train terdapat 0.826 dan R^2 tes sebesar 0.0037 menandakan *overfitting* terjadi pada model ini sangat besar. *Overfitting* yang terjadi pada ketiga model sangat besar pada *multivariate linear regression*, *decision tree* dan *random forrest* selisih antara R^2 train dan R^2 test model sebesar 0.489 untuk *multivariate linear regression*, 0.846 untuk *decision tree* dan 0.8223 pada *random forrest*.

Tabel 4.6 Analisa ΔH pada *train/test* 0.8/0.2

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.86	0.98	0.928
R^2 Test	0.2325	-0.393	-0.0825
R^2 Average	0.546	0.2535	0.422

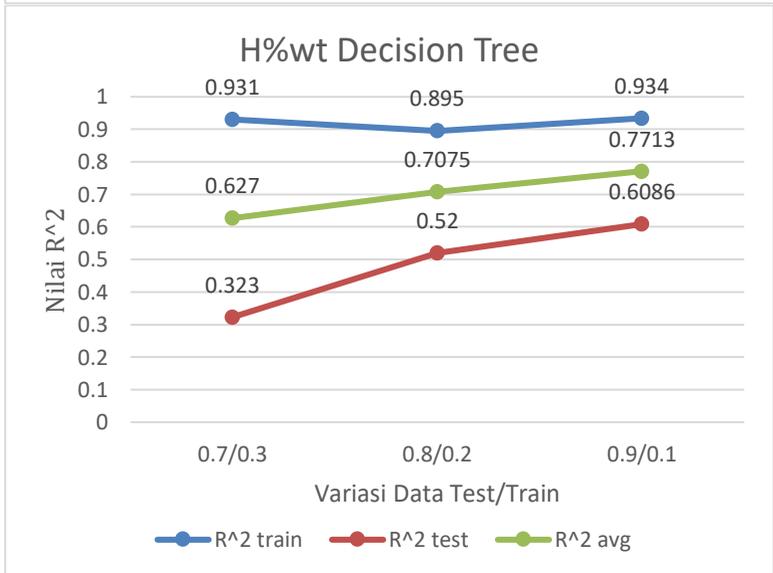
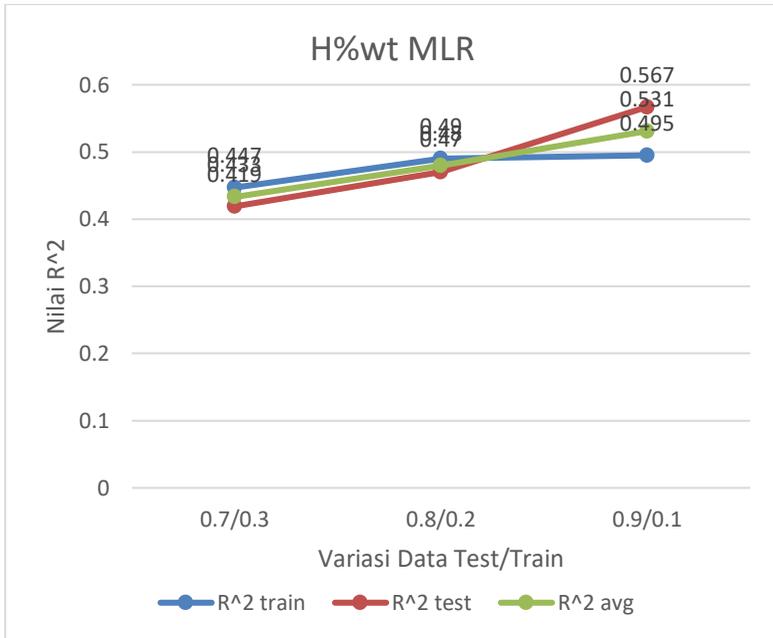
Berikut adalah perbandingan performa model *machine learning* pada model *heat of formation* atau ΔH pada perbandingan data train 80% dan tes sebesar 20%. R^2 *train multivariate linear regression* menunjukkan angka 0.86 dan test -0.393 hal ini menandakan *overfitting* yang sangat besar kepada model linear regression. Pada model decision tree R^2 train terdapat 0.928 dan R^2 tes sebesar -0.0825 menandakan *overfitting* yang terjadi pada model ini sangat besar. Pada model *linear regression* terdapat

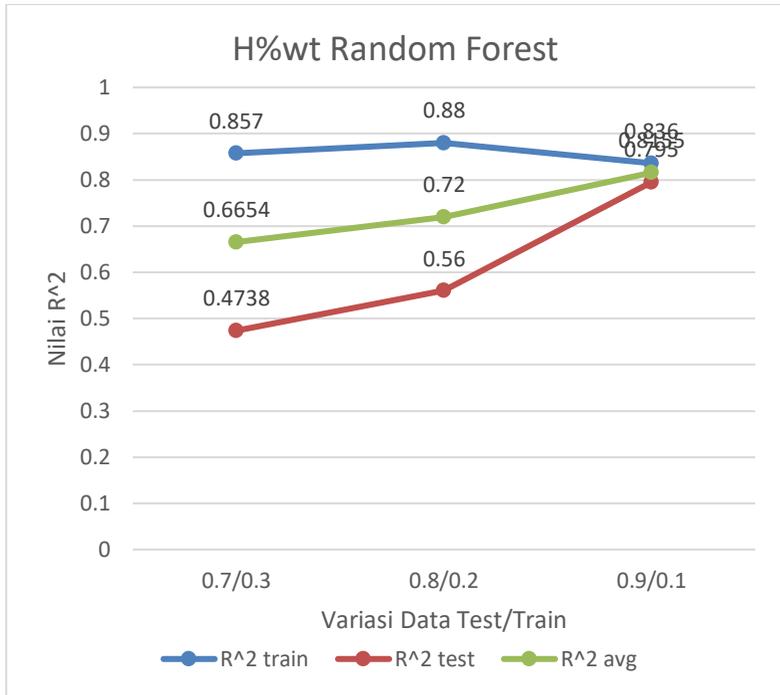
selisih R^2 *train* dan R^2 *test* 0.6275 menunjukkan bahwa pada model ini terjadi *overfitting* yang sangat besar. Pada model *decision tree* dan *random forest* meskipun R^2 *train* menunjukkan angka sebesar 0.98 dan 0.928 model dikatakan gagal memprediksi nilai ΔH dikarenakan nilai R^2 *test* yang begitu buruk ditandai dengan nilai negatif.

Tabel 4.7 Analisa ΔH pada *train/test* 0.9/0.1

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.846	0.97	0.903
R^2 Test	0.415	-0.1468	0.3177
R^2 Average	0.6305	0.412	0.6103

Berikut adalah perbandingan performa model *machine learning* pada model *heat of formation* atau ΔH pada perbandingan data *train* 90% dan tes sebesar 10%. R^2 *train multivariate linear regression* menunjukkan angka 0.86 dan test 0.415 hal ini menandakan *overfitting* yang cukup besar kepada model linear regression. Pada model *decision tree* R^2 *train* terdapat 0.97 dan R^2 *test* sebesar -0.1468 menandakan *overfitting* yang terjadi pada model ini sangat besar. Pada model *random forrest* R^2 *train* terdapat 0.903 dan R^2 *test* sebesar 0.3177 menandakan *overfitting* terjadi pada model ini sangat besar. Pada *multivariate linear regression* selisih nilai R^2 *train* dan R^2 *test* tergolong sangat kecil yaitu 0.431, lalu pada model *decision tree* sebesar R^2 bernilai negatif dan pada model *random forest* sebesar 0.621.



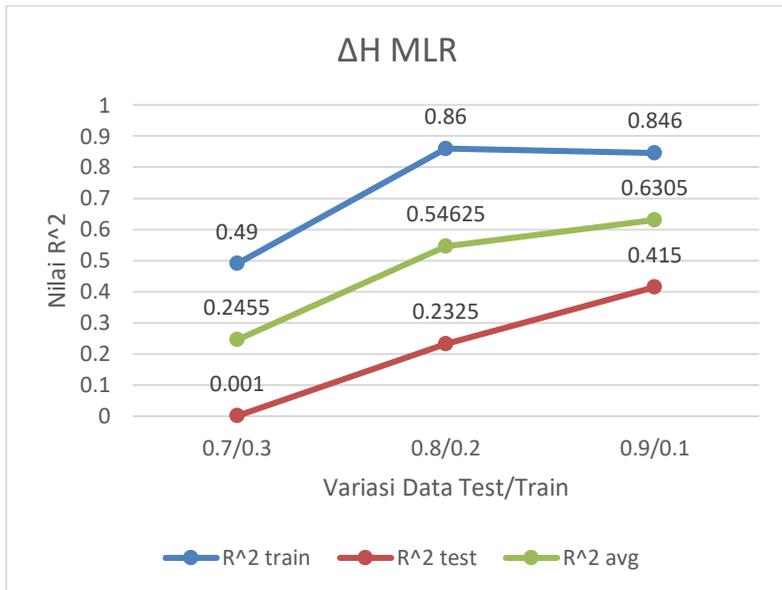


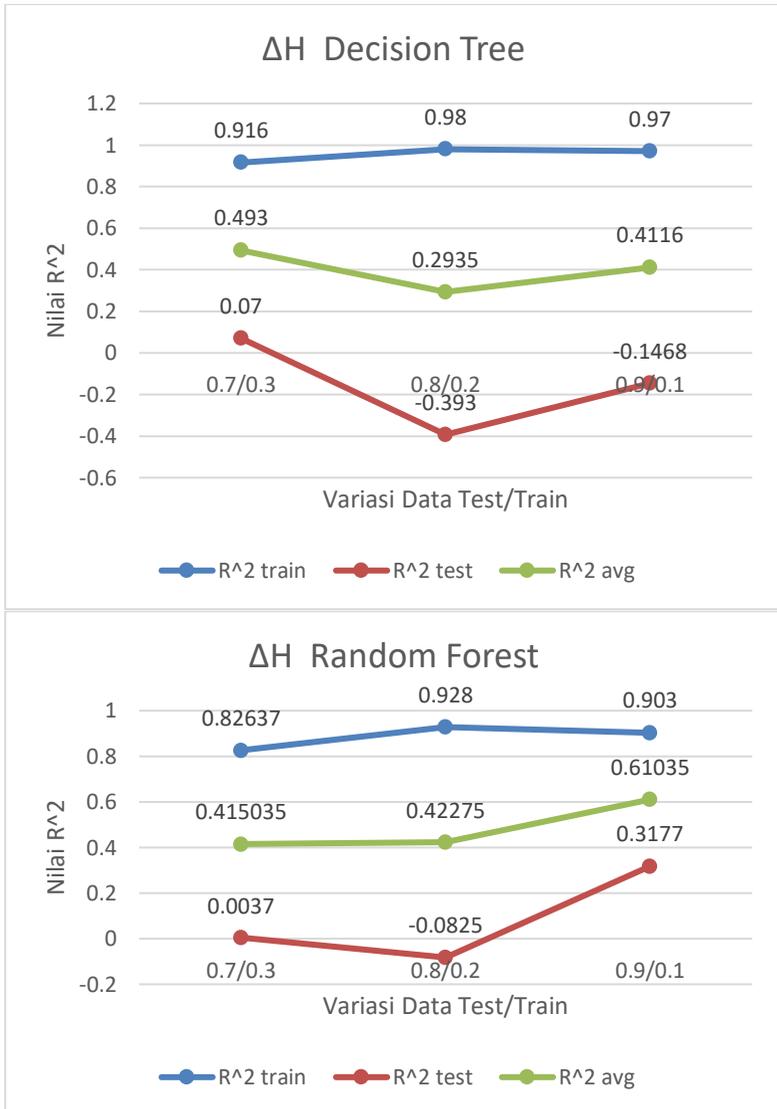
Gambar 4.9 Grafik R² train, R² test dan R² average model H%wt

Pada gambar grafik menandakan bahwa untuk presentase hidrogen dalam paduan pada model *multivariate linear regression* tidak terjadi *overfitting* pada presentase *train/test* 0.7/0.3, 0.8/0.2 dan 0.9/0.1 sehingga kemampuan prediksi untuk model *linear regression* yang terbaik sebesar 0.501 pada model *train/test* 0.9/0.1. Pada *decision tree* *overfitting* terjadi pada model 0.7/0.3 lalu membaik pada model 0.9/0.1 ditandai dengan *overfitting* yang terjadi sangat kecil, pada model 0.9/0.1 menunjukkan bahwa nilai R² rata-rata sebesar 0.771 menandakan bahwa kemampuan prediksi *decision tree* sangat baik dengan *overfitting* yang terjadi sangat kecil. Pada *random forest* *overfitting* terjadi pada model 0.7/0.3

lalu terus membaik pada model 0.9/0.1 ditandai dengan *overfitting* yang terjadi sangat kecil, pada model 0.9/0.1 R^2 rata-rata sebesar 0.8155 menandakan kemampuan prediksi *random forest* yang sangat baik dengan *overfitting* yang terjadi sangatlah kecil.

Kemampuan model *multivariate linear regression* dengan nilai R^2 rata-rata sebesar 0.531 menandakan, kurangnya kemampuan prediksi model tersebut. Pada *decision tree* dan *random forest* meskipun kemampuan prediksi dari data *train decision tree* lebih baik, namun dapat disimpulkan bahwa model *random forest* adalah model yang terbaik untuk memprediksi nilai presentase massa hidrogen karena dapat disimpulkan bahwa tidak terjadi *overfitting* pada model tersebut.





Gambar 4.10 Grafik R² train, R² test dan R² average model ΔH

Pada gambar grafik menandakan bahwa untuk *heat of formation* atau ΔH pada model *multivariate linear regression* terjadi *overfitting* yang sangat buruk, namun pada presentase *train/test* 0.8/0.2 dan 0.9/0.1 *overfitting* yang terjadi sangatlah kecil sehingga kemampuan prediksi untuk model *linear regression* yang terbaik sebesar R^2 0.846 pada model *train/test* 0.9/0.1. Pada *decision tree overfitting* terjadi pada model 0.7/0.3 lalu memburuk pada model 0.8/0.2 ditandai dengan R^2 *test* yang negatif, pada model 0.9/0.1 menunjukkan bahwa nilai R^2 rata-rata sebesar 0.412 menandakan bahwa kemampuan prediksi *decision tree* buruk dengan *overfitting* tetap terjadi dan tetap negatif. Pada *random forest overfitting* terjadi pada model 0.7/0.3 lalu terus membaik pada model 0.9/0.1 ditandai dengan *overfitting* yang terjadi sangat kecil, pada model 0.9/0.1 R^2 rata-rata sebesar 0.6103 menandakan kemampuan prediksi *random forest* yang sangat baik dengan *overfitting* yang mengecil.

Kemampuan model *multivariate linear regression* ditandai dengan nilai R^2 rata-rata sebesar 0.63 menandakan, baik hubungan *linear* antara komposisi kimia dengan *heat of formation* atau ΔH . Pada *decision tree* meskipun nilai R^2 lebih baik dari pada *random forest*, keduanya terjadi *overfitting* namun model *random forest* lebih baik untuk memprediksi nilai *heat of formation* atau ΔH dibandingkan dengan *decision tree*.

Secara keseluruhan, model akan membaik jika data *train* yang digunakan proporsinya ditambahkan, maka akan dilakukan analisa dengan menambahkan data validasi pada sub-bab 4.3.2. Batas proporsi suatu penelitian dibatasi dengan pada 10% dikarenakan tidak ditemukannya penelitian dengan data proporsi <10% kecuali jika dataset yang digunakan memiliki ribuan data sehingga data test akan cukup banyak untuk mengevaluasi model yang ada.

4.3.2 Analisa Hasil Prediksi Model *Train/Validation/Test* 0.8/0.1/0.1

Dari hasil analisa data train/test didapatkan bahwa model terbaik didapatkan dengan menggunakan data train yang besar dan data test yang sekecil mungkin dengan menimbang nilai R^2 average. Maka pada sub-bab ini akan diteliti dengan data train sebesar 80% , validasi 10% dan test 10%. Pemilihan tersebut dikarenakan proporsi data train dan validation sekurangnya tidak boleh kurang dari 10% dari jumlah total data, maka dipilih data train sebesar 80%.

Tabel 4.8 H%wt pada Model *Train/Validation/Test* 0.8/0.1/0.1

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.49	0.8931	0.8735
R^2 Validation	-6.1e+23	-0.2173	0.3434
R^2 Test	0.5487	0.6298	0.705
R^2 Average	0.3462	0.4356	0.6406
MAE	0.2877	0.4261	0.208
MRE	19.22%	28.47%	13.9%

Berikut adalah perbandingan performa tiga algoritma *multivariate linear regression*, *decision tree* dan *random forest*. Pada model *multivariate linear regression* R^2 validasi menunjukkan overfitting ditandai dengan R^2 validasi yang minus. Pada model *decision tree* R^2 validasi menunjukkan overfitting ditandai dengan R^2 validasi yang minus. Pada model *random forest* R^2 validasi menunjukkan overfitting ditandai dengan R^2 validasi sebesar 0.3434. Pada random forest, overfitting yang terjadi tidak terlalu besar dibandingkan model yang lainnya, model random forest pun menunjukkan nilai R^2 rata-rata sebesar 0.6406 hal ini pun menunjukkan bahwa model terbaik untuk memprediksi presentase massa hidrogen adalah *random forest* dibuktikan dengan MAE

sebesar 0.208 dan MRE 13.9% yang lebih kecil dibandingkan dengan model yang lainnya.

Tabel 4.9 Analisa ΔH pada model train/validation/test 0.8/0.1/0.1

Metric	Linear Regression	Dec Tree	Random Forrest
R^2 Train	0.893	0.974	0.89006
R^2 Validation	-2.002e+23	0.2476	0.3923
R^2 Test	0.43	0.419	0.4135
R^2 Average	0.421	0.5468	0.563
MAE	9.649	7.466	7.395
MRE	27%	21.4%	21.2%

Berikut adalah perbandingan performa tiga algoritma *multivariate linear regression*, *decision tree* dan *random forest*. Pada model *multivariate linear regression* R^2 validasi menunjukkan overfitting ditandai dengan R^2 validasi yang minus. Pada model *decision tree* R^2 validasi menunjukkan overfitting ditandai dengan R^2 validasi sebesar 0.2476. Pada model *random forest* R^2 validasi menunjukkan overfitting ditandai dengan R^2 validasi sebesar 0.3923. Pada random forest, overfitting yang terjadi tidak terlalu besar dibandingkan model yang lainnya, model random forest pun menunjukkan nilai R^2 rata-rata sebesar 0.54862 hal ini pun menunjukkan bahwa model terbaik untuk memprediksi presentase massa hidrogen adalah *random forest* dibuktikan dengan MAE sebesar 0.208 dan MRE 13.9% yang lebih kecil dibandingkan dengan model yang lainnya. Meskipun R^2 Average dari model *decision tree* dan *random forest* tidak begitu jauh, namun R^2 Validation mengindikasikan bahwa model *decision tree* mengalami overfitting yang lebih buruk dibandingkan dengan model *random forest*.

Pada model *multivariate linear regression*, H%wt dan ΔH menunjukkan hubungan *linear* yang buruk ditandai dengan

R^2 Average sebesar 0.346 untuk H%wt dan R^2 Average sebesar 0.421.

Model terbaik untuk memprediksi H%wt dan ΔH ada pada *random forest*. Pada model H%wt R^2 Average sebesar 0.6406 dengan MAE 0.208 dan MRE 13.9%. Pada model ΔH R^2 Average sebesar 0.5486 dengan MAE 7.395 dan MRE 21.2%. Meskipun R^2 Average pada proporsi data train/test 0.9/0.1 memiliki nilai yang lebih tinggi pada H%wt 0.8155 dibandingkan dengan proporsi data train/validasi/test 0.8/0.1/0.1 yang sebesar 0.6404, namun model *machine learning* harus dievaluasi dengan data validasi. Maka dapat disimpulkan bahwa model 0.8/0.1/0.1 dengan data validasi akan lebih kredibel.

4.3.3 Analisa Nilai Prediksi Model *Train/Validation/Test* 0.8/0.1/0.1

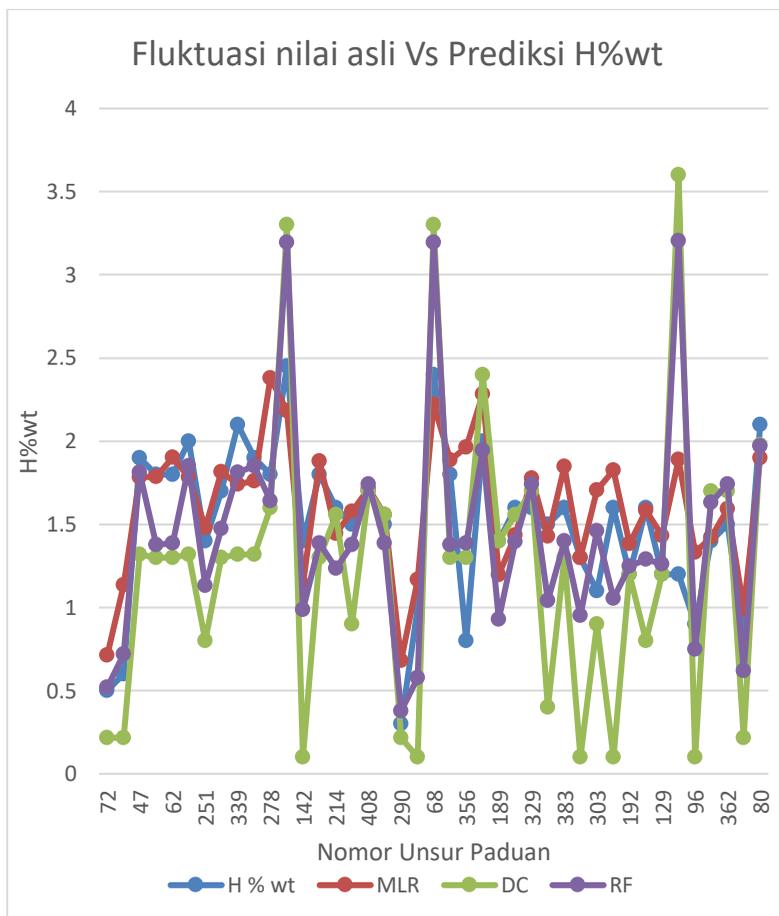
Data tes sebanyak 41 (10%) dari total data diamati nilainya terhadap nilai sebenarnya.

Tabel 4.10 Hasil Prediksi Presentase Massa Hidrogen

Paduan	Nilai Asli H % wt	Hasil Prediksi MLR	Hasil Prediksi DC	Hasil Prediksi RF
72	0.5	0.711643	0.216667	0.520566
6	0.6	1.134473	0.216667	0.720513
47	1.9	1.784125	1.32	1.81129
361	1.8	1.786676	1.3	1.375925
62	1.8	1.902671	1.3	1.387619

344	2	1.782735	1.32	1.85
251	1.4	1.47959	0.8	1.130374
349	1.7	1.814613	1.3	1.472873
339	2.1	1.742511	1.32	1.81129
55	1.9	1.758927	1.32	1.85
278	1.8	2.379701	1.6	1.641935
406	2.45	2.183739	3.3	3.195161
142	1.4	1.139116	0.1	0.985484
61	1.8	1.878055	1.3	1.387619
214	1.6	1.443315	1.557195	1.23575
300	1.5	1.57717	0.9	1.377639
408	1.7	1.715966	1.7	1.740783
11	1.5	1.558597	1.557195	1.386022
290	0.3	0.680678	0.216667	0.377515
172	1	1.166518	0.1	0.575864
68	2.4	2.221201	3.3	3.195161
70	1.8	1.886173	1.3	1.375925
356	0.8	1.964294	1.3	1.387619

14	2	2.283786	2.4	1.94444
189	1.4	1.196443	1.4	0.927477
263	1.6	1.436279	1.557195	1.39629
329	1.6	1.776807	1.7	1.742396
256	1.5	1.426859	0.4	1.042957
383	1.6	1.845952	1.3	1.400253
138	1.3	1.300134	0.1	0.952639
303	1.1	1.704512	0.9	1.46129
159	1.6	1.823713	0.1	1.054252
192	1.2	1.383358	1.2	1.246774
24	1.6	1.584147	0.8	1.290061
129	1.2	1.431853	1.2	1.262366
124	1.2	1.888799	3.6	3.204032
96	0.9	1.331397	0.1	0.747773
321	1.4	1.42278	1.7	1.631263
362	1.5	1.594313	1.7	1.740783
305	0.8	0.990122	0.216667	0.618147
80	2.1	1.898024	1.975	1.970288



Gambar 4.11 Fluktuasi Nilai Presentase Massa Hidrogen vs Nilai Prediksi

Dapat diamati bahwa secara keseluruhan, pada ketiga model telah dapat mengikuti fluktuasi dari nilai asli presentase massa hidrogen, namun pada model *decision tree* dan *multivariate linear regression* seringkali terjadi *error* dapat dilihat dari

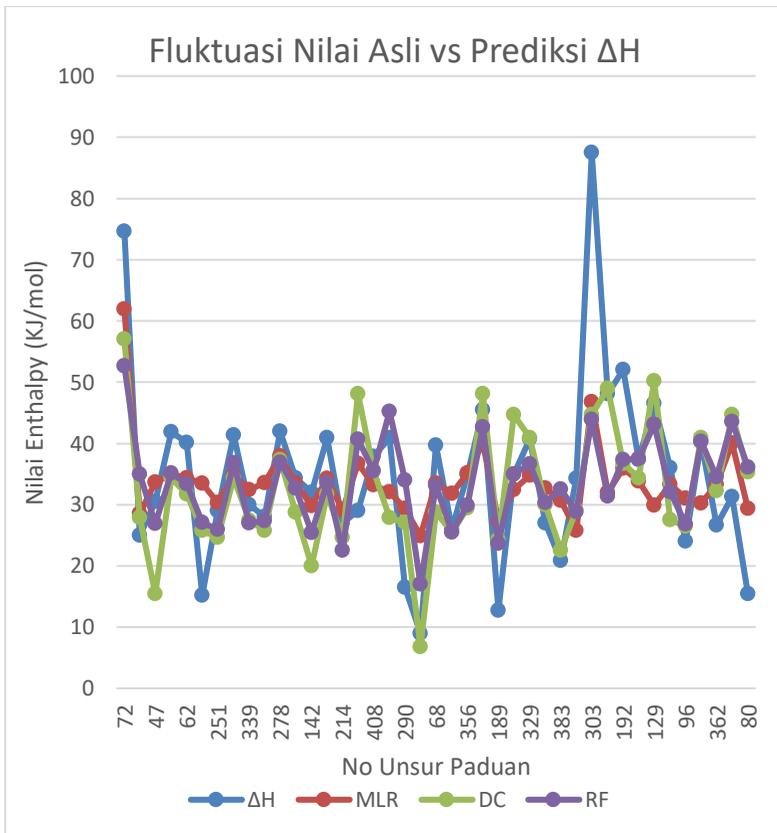
lingkaran merah. Hal ini mengklarifikasi bahwa model *random forrest* adalah model yang terbaik dalam memprediksi presentase massa hidrogen, terlihat bahwa lingkaran biru sebagai penanda kesalahan random forrest hanya ada satu. Namun secara keseluruhan, ketiga model sudah baik dalam mengikuti fluktuasi nilai asli dari presentase massa hidrogen.

Tabel 4.11 Hasil Prediksi ΔH

Paduan	Nilai Asli ΔH	Nilai Prediksi MLR	Nilai Prediksi DC	Nilai Prediksi RF
72	74.6	61.90983	57.01042	52.66044
6	25.01711	28.57336	27.86578	34.99823
47	30.5	33.66437	15.4	26.90122
361	41.89849	34.96264	34.35145	35.15623
62	40.16709	34.35017	31.70173	33.39305
344	15.2	33.4567	25.7517	27.09077
251	29	30.35111	24.66667	25.9509
349	41.33633	34.85871	34.35145	36.76864
339	30	32.42256	27.45	26.99532
55	28.05253	33.60755	25.7517	27.38342
278	42	37.95153	37.29613	36.89181

406	34.38999	33.49332	28.79229	32.6971
142	32	29.83756	20	25.46152
61	40.95986	34.30245	31.70173	33.53316
214	27	29.0831	24.66667	22.53251
300	29	36.69668	48.10064	40.62179
408	37.83935	33.24487	35.60716	35.52656
11	40.9411	32.11917	27.86578	45.21902
290	16.45319	29.33967	27.07488	33.97007
172	9	24.92397	6.8	16.97674
68	39.70672	33.45755	28.79229	33.11397
70	26	31.85017	25.5	25.52387
356	34.90633	35.12748	29.41255	29.88683
14	45.42997	40.03336	48.10064	42.67427
189	12.7	27.28707	24.3	23.63917
263	35	32.41406	44.69689	35.00836
329	40.75536	34.75096	40.93923	36.64602
256	26.967	32.73212	29.95636	30.30538
383	20.9	30.6751	22.51209	32.52117

138	34.26586	25.76029	29.1	28.8112
303	87.5	46.75241	44.66897	43.86544
159	48.1	31.96926	48.96776	31.34627
192	52.02997	35.92429	36.7	37.30047
24	37.28901	33.79684	34.35145	37.49086
129	46.5	29.91141	50.2	43.13885
124	36	33.32125	27.52916	32.10906
96	24	31.01486	26.46667	26.84306
321	40.32336	30.21656	40.93923	40.34577
362	26.62061	33.26236	32.22998	34.49449
305	31.27105	40.04936	44.66897	43.52947
80	15.40186	29.36602	35.3389	36.10335



Gambar 4.12 Fluktuasi Nilai ΔH vs Nilai Prediksi

Dapat diamati bahwa secara keseluruhan, pada ketiga model telah dapat mengikuti fluktuasi dari nilai asli ΔH . namun pada model *decision tree* dan *random forest* seringkali terjadi *error* dapat dilihat dari lingkaran *orange*. Hal ini mengklarifikasi bahwa model *multivariate linear regression* adalah model yang terbaik dalam memprediksi presentase massa hidrogen, terlihat bahwa lingkaran biru sebagai penanda kesalahan *multivariate linear* hanya ada satu. Namun secara keseluruhan, ketiga model sudah

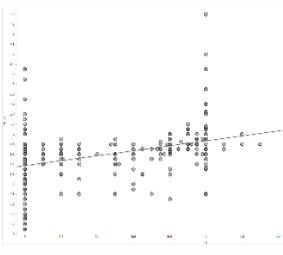
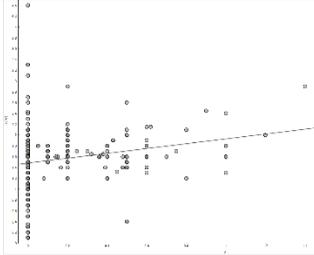
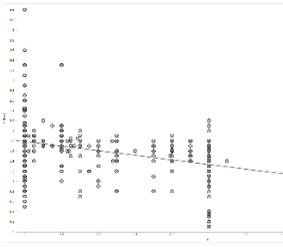
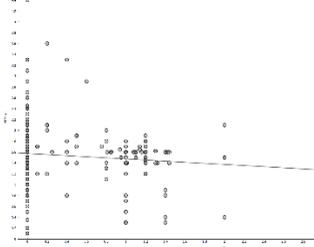
baik dalam mengikuti fluktuasi nilai asli dari presentase massa hidrogen.

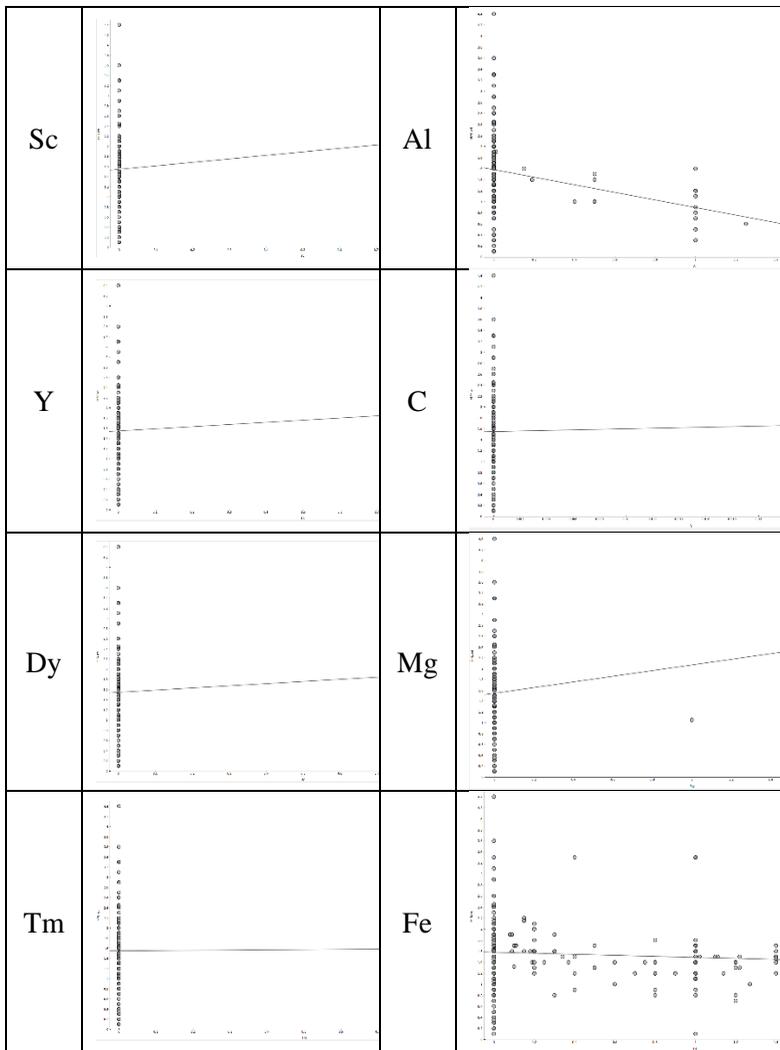
4.4 Pengaruh Unsur Terhadap Variabel Output

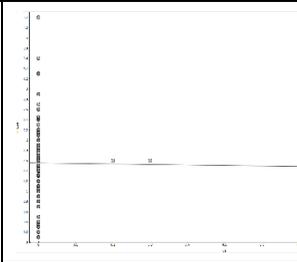
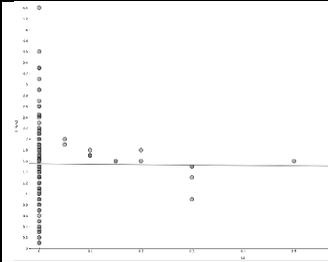
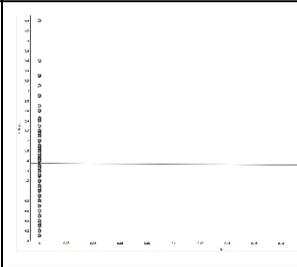
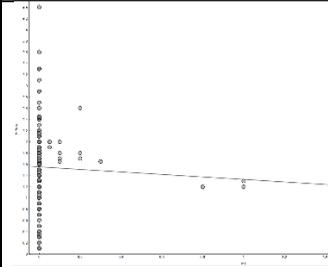
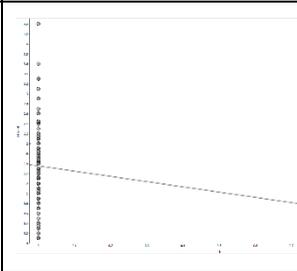
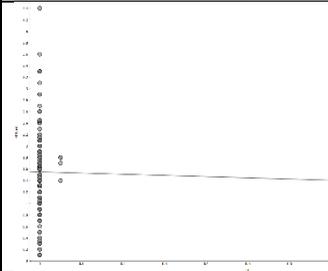
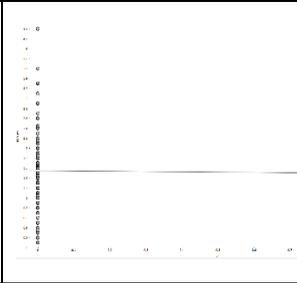
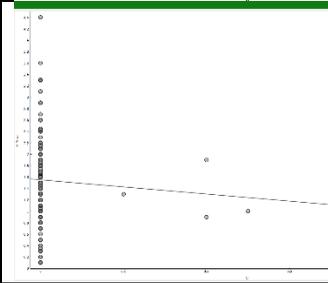
Pengaruh komposisi kimia terhadap presentase massa hidrogen dan *heat of formation* atau ΔH akan diteliti dengan metode *linear regression* dan *decision tree*.

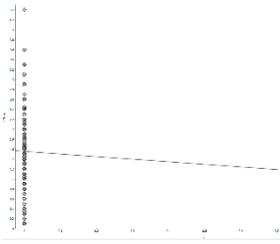
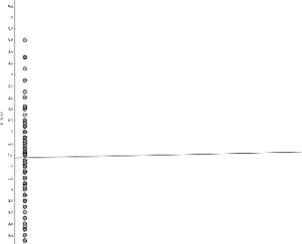
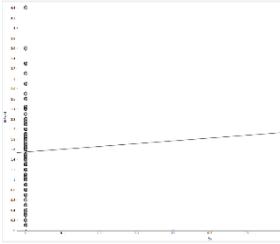
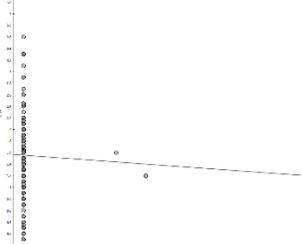
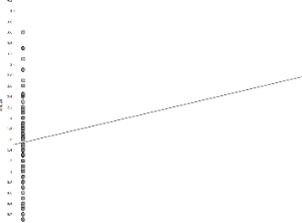
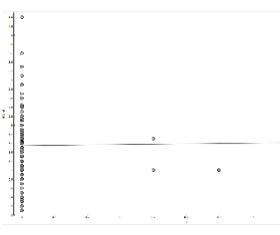
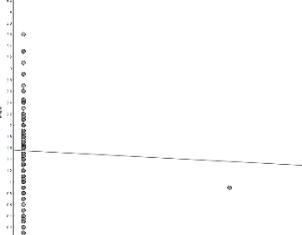
4.4.1 Analisa Linear Regresi

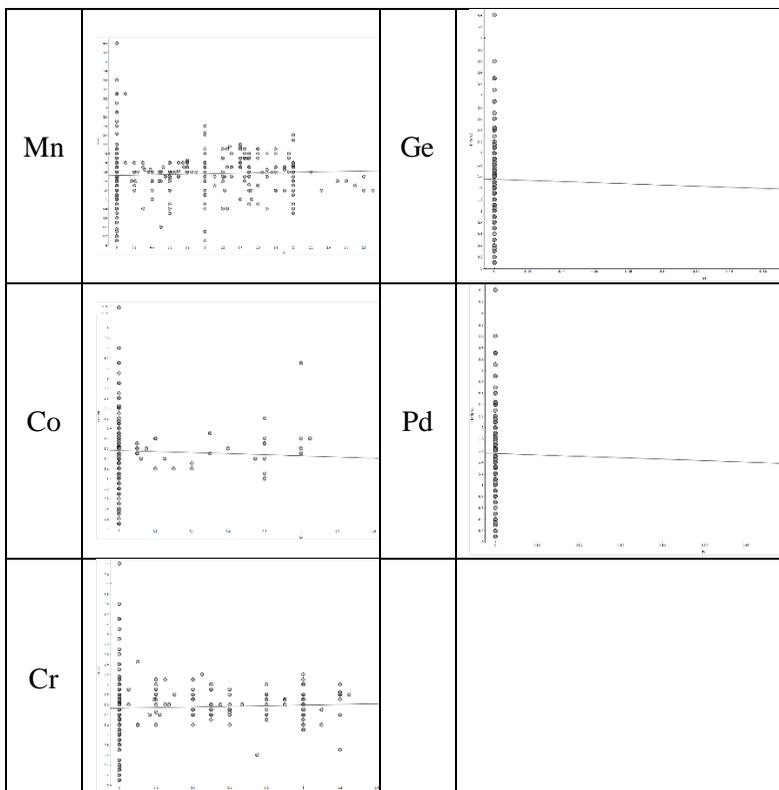
Tabel 4.12 Hasil Klasifikasi *Linear Regression* Unsur Paduan Terhadap Presentase Massa Hidrogen

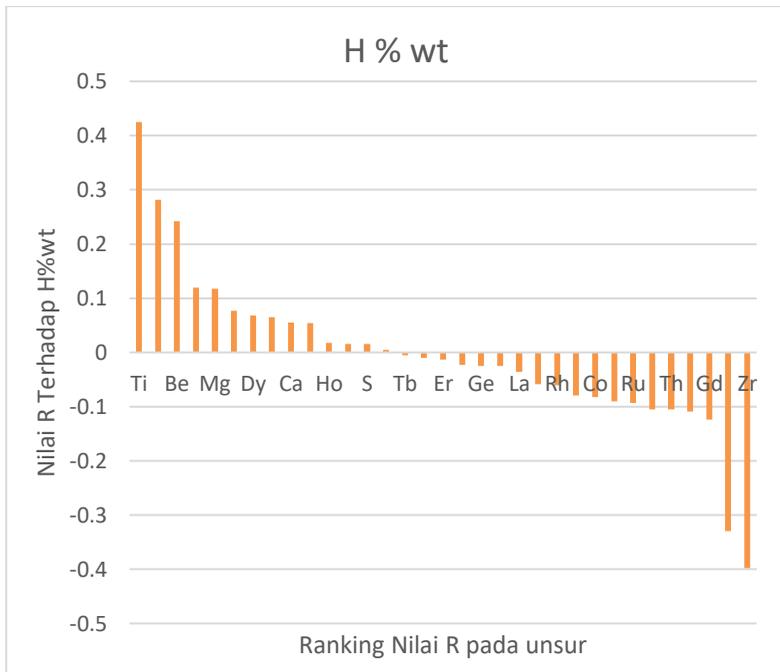
Unsur	Regresi	Unsur	Regresi
Ti		V	
Zr		Ni	



<p>Ce</p> 		<p>Cu</p> 
<p>Tb</p> 		<p>Mo</p> 
<p>Th</p> 		<p>La</p> 
<p>Er</p> 		<p>Si</p> 

U		S	
Ca		Ru	
Gd		Be	
Ho		Rh	





Gambar 4.13 *Chart* Visualisasi Nilai r dari Tiap Unsur kepada Presentase Massa Hidrogen

Tabel 4.13 Ranking Nilai r dari Tiap Unsur terhadap Presentase Massa Hidrogen

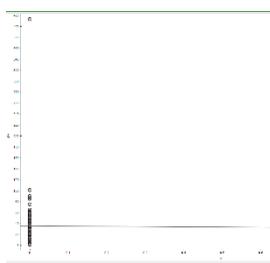
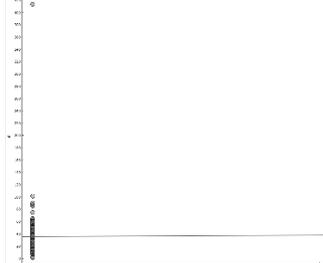
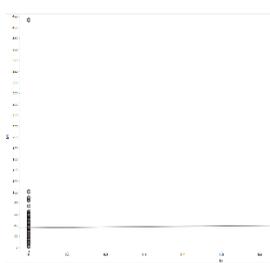
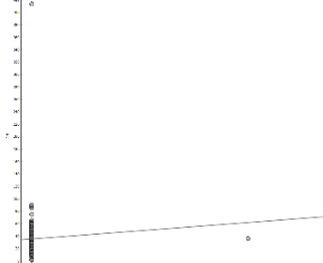
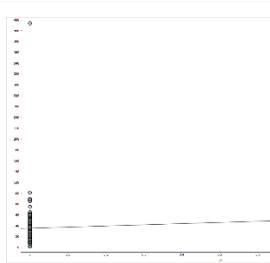
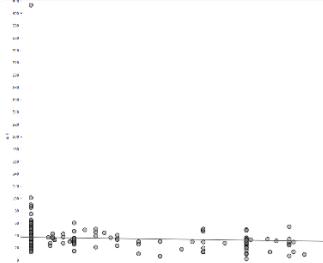
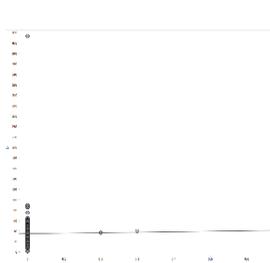
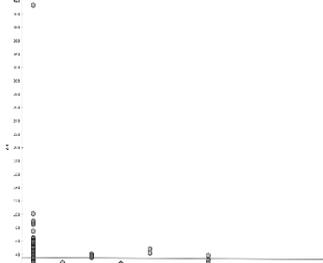
Unsur A	Nilai r	Unsur B	Nilai r
Ti	0.424	V	0.281
Sc	0.119	Be	0.242449
Y	0.076	Mg	0.117296
Dy	0.067601	Cr	0.064623
Ca	0.055465	Mn	0.054001
Ho	0.017548	C	0.0152
Tb	-0.00493	S	0.0152
Er	-0.01334	Cu	-0.01055

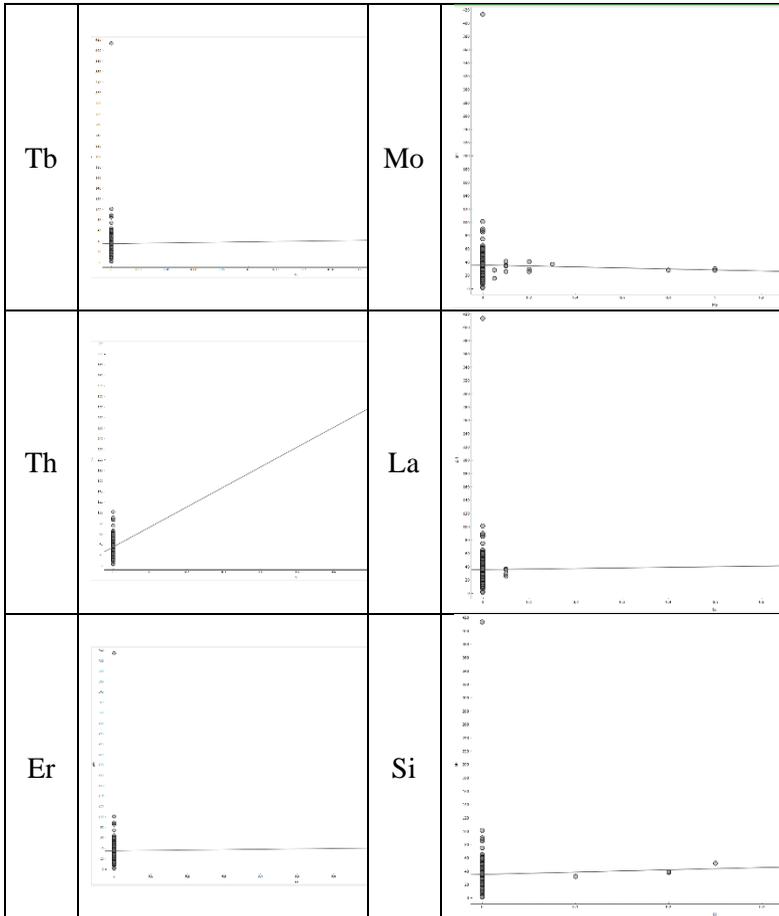
Ce	-0.02328	Ge	-0.02506
U	-0.09013	Pd	-0.02506
Th	-0.10559	La	-0.03618
Gd	-0.12412	Mo	-0.05855
Zr	-0.398	Rh	-0.06048
		Co	-0.08287
		Ru	-0.09344
		Ni	-0.1048
		Fe	-0.10927
		Al	-0.33

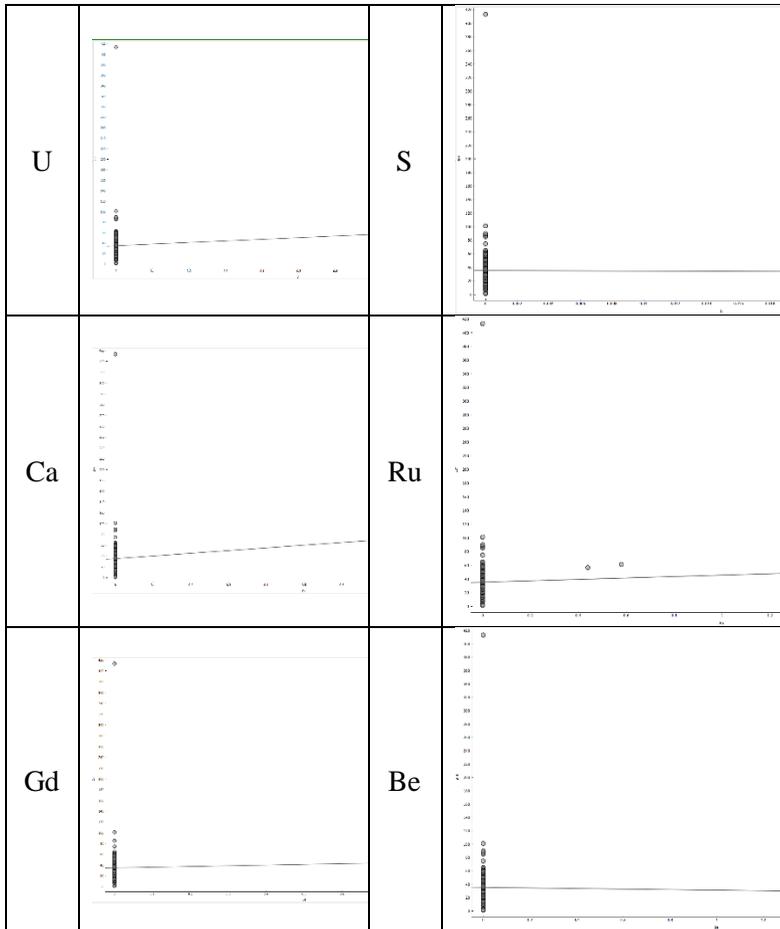
Pada tabel nilai korelasi diatas jika bertujuan untuk mendapatkan presentase massa hidrogen yang tertinggi, maka unsur Ti ($r=0.424$) sebagai elemen penyusun A dari AB_2 menjadi kandidat yang sangat baik untuk meningkatkan presentase massa hidrogen dalam paduan. Pada elemen penyusun B unsur V ($r = 0.281$) dan Be ($r = 0.2424$) dapat dipilih sebagai unsur yang akan dipasangkan dengan Ti karena memiliki nilai korelasi yang cukup tinggi. Logam paduan $TiV_{1.4}Ni_{1.6}$, $TiV_{1.6}Ni_{1.4}$ dan $TiV_{1.8}Ni_{1.2}$ memiliki presentase massa hidrogen sebesar 2.9%, 3.3% dan 3.6%, mendukung hasil dari *multivariate linear regression* pada unsur yang berpengaruh pada presentase massa hidrogen dimana rata-rata presentase massa hidrogen dari keseluruhan 409 paduan hanya sebesar 1.54%. Hal ini diperkuat jika ditinjau dari Zr ($r = -0.398$) dan Al ($r = -0.33$) sebagai unsur paduan yang memiliki nilai korelasi yang paling buruk di-elemen penyusun A untuk Zr dan B untuk Al memiliki presentase massa hidrogen sebesar 0.2%.

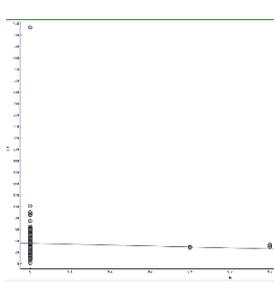
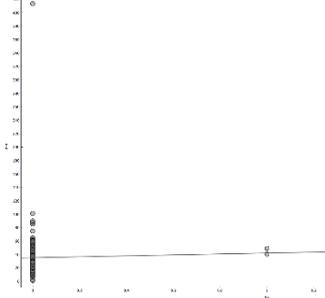
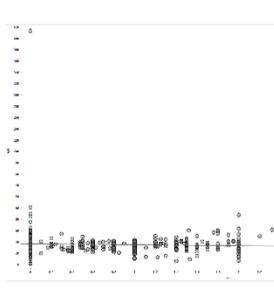
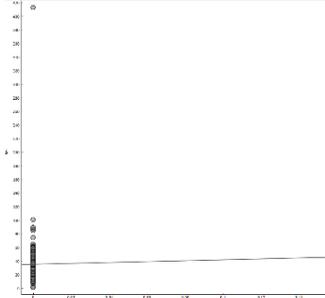
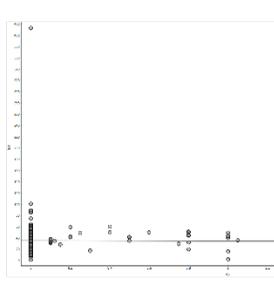
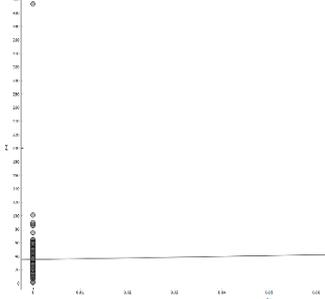
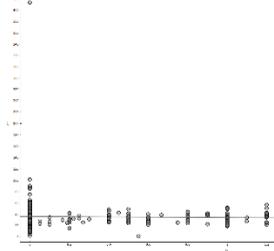
Tabel 4.14 Hasil Klasifikasi *Linear Regression* Unsur Paduan terhadap ΔH

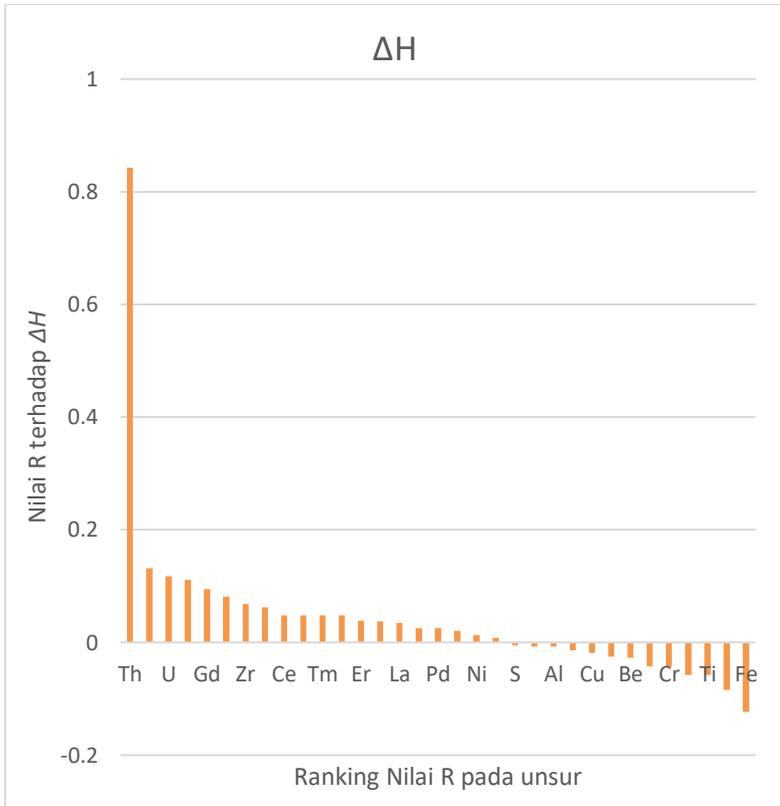
Unsur	Regresi	Unsur	Regresi
Ti		V	
Zr		Ni	
Sc		Al	

<p>Y</p>		<p>C</p>	
<p>Dy</p>		<p>Mg</p>	
<p>Tm</p>		<p>Fe</p>	
<p>Ce</p>		<p>Cu</p>	





Ho		Rh	
Mn		Ge	
Co		Pd	
Cr			



Gambar 4.14 *Chart* Visualisasi Nilai r dari Tiap Unsur terhadap ΔH

Tabel 4.15 Ranking Nilai r dari Tiap Unsur terhadap ΔH

Unsur A	Nilai r	Unsur B	Nilai r
Th	0.842908	Mg	0.131737
U	0.11715	Ru	0.08083
Ca	0.11089	Si	0.047978
Gd	0.094955	Rh	0.047659
Zr	0.068231	Ge	0.037308
Sc	0.061899	La	0.035053
Ce	0.048374	Pd	0.024967
Tm	0.047954	Ni	0.012746
Er	0.038809	C	0.007656
Dy	0.02516	S	-0.0049
Tb	0.020657	V	-0.00695
Y	-0.02488	Al	-0.00751
Ti	-0.05811	Co	-0.01367
Ho	-0.08436	Cu	-0.01848
		Be	-0.02689
		Mn	-0.05771
		Mo	-0.04223
		Cr	-0.04357
		Fe	-0.12359

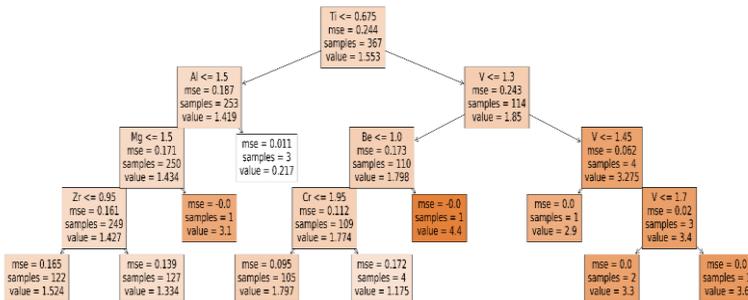
Pada sifat hidrogen ΔH berarti semakin besar energi yang dibutuhkan untuk membentuk 1 mol hidrogen akan semakin buruk sifat tersebut terhadap hasil yang diinginkan. Pada elemen A unsur Th ($r = 0.842$) menunjukkan hasil yang sangat tinggi dalam ΔH dibuktikan dengan unsur paduan $ThZr_2$ dimana ΔH paduan tersebut sebesar 413 (kJ/mol H_2). Pada elemen B unsur Mg ($r = 0.1317$) memiliki korelasi yang kuat terhadap ΔH dimana pada unsur paduan CeMg₂ dengan nilai Mg yang maksimal pada penyusun elemen B memiliki ΔH sebesar 101 (kJ/mol H_2). Nilai korelasi Ho ($r = -0.0843$), Fe ($r = -0.123$), Co ($r = -0.0136$) sebagai ranking terendah dari nilai ΔH terbukti menurunkan pada paduan $Zr_{2.2}Ho_{0.8}CoFe$ dimana nilai ΔH sebesar 2(kJ/mol H_2). Unsur

terbaik dalam menurunkan nilai ΔH ada pada unsur Ho ($r = -0.0843$), Ti ($r = -0.05811$) dan Y ($r = -0.024$) pada elemen penyusun A dan Fe ($r = -0.12359$), Cr ($r = -0.0435$) dan Mo ($r = -0.042$) meskipun nilai korelasinya tidak menunjukkan angka yang cukup besar, namun rekomendasi ini cukup memberikan petunjuk bagi peneliti yang ingin meneliti pada sifat logam paduan AB_2 .

Rekomendasi unsur paduan dari hasil *multivariate linear regression*, dimana pada unsur elemen A adalah Ti, dengan $r_{H\%wt} = 0.424$ dan $r_{\Delta H} = -0.058$ dimana pengaruh unsur Ti akan menaikkan presentase massa hidrogen dan menurunkan ΔH pada logam paduan AB_2 . Pada elemen B, unsur V menjadi kandidat kuat dalam unsur paduan karena memiliki nilai $r_{H\%wt} = 0.281$ dan $r_{\Delta H} = -0.0695$.

4.4.2 Analisa Dec Tree

Pada *decision tree*, interpretasi sebuah *feature importance* sedikit berbeda dengan metode *linear regression* dimana pada *decision tree* akan meninjau nilai *MSE reduction* yaitu seberapa besar suatu satuan unsur tersebut terhadap nilai variabel target dibandingkan dengan rata-rata nilai variabel target. *Decision tree* menyatakan seberapa berpengaruh suatu unsur tersebut jika terjadi penambahan nilainya akan mempengaruhi suatu variabel target tanpa melihat arah pengaruhnya.



Gambar 4.15 Visualisasi Decision Tree Presentase Massa Hidrogen (4 Level)

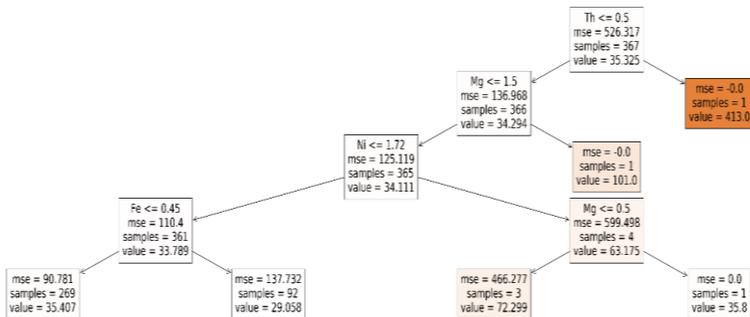
Tabel 4.16 Ranking 10 Besar *Feature Importance* Presentase Massa Hidrogen

Unsur	MSE Decrease	Kadar	Efek pada H% wt
Ti	0.1793	≤ 0.675	Menurunkan
V	0.1386	≤ 1.45	Menurunkan
Co	0.1148	≤ 1.75	Menaikan
Be	0.0907	≤ 1	Menurunkan
Mn	0.0738	≤ 1.75	Menaikan
Al	0.066	≤ 1.5	Menaikan
Cr	0.0612	≤ 1.65	Menurunkan
Ni	0.0608	≤ 0.5	Menaikan
Zr	0.0538	≤ 0.95	Menaikan
Fe	0.00447	≤ 1.9	Menaikan

Berikut adalah tabel pengaruh komposisi kimia terhadap presentase massa hidrogen, dimana ranking 10 besar unsur dicantumkan. Pada unsur Ti dan V dapat dilihat bahwa kedua unsur paduan tersebut menduduki ranking teratas sesuai dengan prediksi *linear regression* dimana pada logam paduan yang memiliki kedua unsur tersebut terindikasi memiliki presentase massa hidrogen yang cukup tinggi. Pada Ti, kadar yang terindikasi menaikan presentase massa hidrogen adalah ketika $Ti > 0.675$. Pada V, kadar yang terindikasi menaikan presentase massa hidrogen adalah ketika $V > 1.3$. Pada *decision tree* untuk Ti dan V mengkonfirmasi bahwa logam paduan $Ti V_{1.4} Ni_{1.6}$, $Ti V_{1.6} Ni_{1.4}$ dan $Ti V_{1.8} Ni_{1.2}$ memiliki presentase massa hidrogen sebesar 2.9%, 3.3% dan 3.6%, mendukung hasil dari *multivariate linear regression* dan juga *decision tree*. Namun ada perbedaan urutan dimana pada hubungan *linear* dimana Ti, V, Be dan Sc menduduki peringkat tertinggi pada hubungan *linear*. Namun pada *decision tree* Be menduduki peringkat 4 sedangkan Sc menduduki peringkat 14 dimana *decision tree* menilai tidak ada efek pengaruh Sc sangatlah kecil.

Tabel 4.17 Ranking 10 besar *feature importance* ΔH

Unsur	MSE Decrease	Kadar	Efek pada ΔH
Th	0.759	≤ 0.5	Menurunkan
Fe	0.0425	≤ 0.425	Menaikan
Mn	0.0411	≤ 1.31	Menaikan
Mg	0.0237	≤ 1.5	Menurunkan
Ni	0.0203	≤ 1.75	Menurunkan
Co	0.0174	≤ 1	Menurunkan
Zr	0.0153	≤ 0.35	Menurunkan
Cr	0.0133	≤ 1.15	Menurunkan
Ru	0.0104	≤ 0.22	Menurunkan
V	0.0095	≤ 0.385	Menurunkan

**Gambar 4.16 Visualisasi *Decision Tree* ΔH (4 Level)**

Ranking paling atas diduduki oleh unsur Th dimana pengaruhnya pada ΔH sangat kuat, maka unsur tersebut dapat dihindari untuk dijadikan komposisi dari logam paduan AB_2 . Kadar batas rekomendasi untuk nilai Th ≤ 0.5 jika ingin menurunkan ΔH pun diketahui, maka jika ingin menghindari suatu

paduan memiliki energi yang besar untuk menyerap hidrogen maka harus mengikuti batas kadar tersebut.

Pada analisa *decision tree* presentase massa hidrogen dan ΔH telah dibuat saran dan rekomendasi kadar unsur paduan yang akan menaikkan atau menurunkan nilai dari variabel output, hal ini berguna untuk peneliti yang ingin mengetahui batas kadar unsur paduan.

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

1. Penambahan data dengan dilakukannya variasi data *test/train* 0.7/0.3, 0.8/0.2, 0.9/0.1 terbukti memperbaiki model pada prediksi presentase massa hidrogen ataupun ΔH pada ketiga algoritma *multivariate linear regression*, *decision tree* dan *random forest* ditinjau dari nilai R^2 rata-rata yang semakin bertambah.
2. Model terbaik untuk memprediksi H%wt dan ΔH ada pada *random forest*. Pada model H%wt R^2 Average sebesar 0.6406 dengan MAE 0.208 dan MRE 13.9%. Pada model ΔH R^2 Average sebesar 0.5486 dengan MAE 7.395 dan MRE 21.2%.
3. Unsur Ti, V dan Be secara signifikan akan menaikkan presentase massa hidrogen dari hasil analisa *linear regression* dan *decision tree*.
4. Unsur Th dan Mg secara signifikan akan menaikkan, Fe secara signifikan akan menurunkan ΔH dari hasil analisa *linear regression* dan *decision tree*.

5.2 Saran

1. Diperlukannya *dimention reduction* untuk membuang sebagian feature yang tidak memberi arti kepada variabel output untuk hasil prediksi yang lebih baik.
2. Dilakukannya penambahan data dengan penelitian diatas tahun 2002 agar model presentase massa hidrogen dan ΔH terdefiniskan dengan sempurna.

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

DAFTAR PUSTAKA

- Development of metal hydride surface structures for high power NiMH batteries Also extended cycle-life and lead to more effective recycling methods by Yang Shen (z-lib.org).pdf, n.d.
- Ding, Z., Chen, Z., Ma, T., Lu, C.-T., Ma, W., Shaw, L., 2020. Predicting the hydrogen release ability of LiBH₄-based mixtures by ensemble machine learning. *Energy Storage Materials* 27, 466–477.
<https://doi.org/10.1016/j.ensm.2019.12.010>
- Hattrick-Simpers, J.R., Choudhary, K., Corngale, C., 2018. A simple constrained machine learning model for predicting high-pressure-hydrogen-compressor materials. *Mol. Syst. Des. Eng.* 3, 509–517.
<https://doi.org/10.1039/C8ME00005K>
- Marakatti, V.S., Peter, S.C., 2018. Synthetically tuned electronic and geometrical properties of intermetallic compounds as effective heterogeneous catalysts. *Progress in Solid State Chemistry* 52, 1–30.
<https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2018.09.001>
- Nickel Metal Hydride Batteries 2017, 2018. . MDPI AG - Multidisciplinary Digital Publishing Institute.
- Rahnama, A., Zepon, G., Sridhar, S., 2019. Machine learning based prediction of metal hydrides for hydrogen storage, part I: Prediction of hydrogen weight percent. *International Journal of Hydrogen Energy* 44, 7337–7344.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.261>
- Thowil Afif, M., Ayu Putri Pratiwi, I., 2015. Analisis Perbandingan Baterai Lithium-Ion, Lithium-Polymer, Lead Acid dan Nickel-Metal Hydride pada Penggunaan Mobil Listrik - Review. *JRM* 6, 95–99.
<https://doi.org/10.21776/ub.jrm.2015.006.02.1>

- Volodin, A.A., Denys, R.V., Wan, C., Wijayanti, I.D., Suwarno, Tarasov, B.P., Antonov, V.E., Yartys, V.A., 2019. Study of hydrogen storage and electrochemical properties of AB₂-type Ti_{0.15}Zr_{0.85}La_{0.03}Ni_{1.2}Mn_{0.7}V_{0.12}Fe_{0.12} alloy. *Journal of Alloys and Compounds* 793, 564–575. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.03.134>
- Young, K., 2018. Metal Hydrides ☆, in: *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*. Elsevier, p. B9780124095472058000. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.05894-7>
- Züttel, A., 2003. Materials for hydrogen storage. *Materials Today* 6, 24–33. [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(03\)00922-2](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(03)00922-2)

LAMPIRAN A

Raw Data

Material Class	Composition Formula	Hydrogen Weight Percent	Heat of Formation (kJ/mol H ₂)	Temperature (°C)	Pressure (Atmosphere Absolute)	Author Year	Reference Number	Comment1	Comment2	Comment3
AB2	(Sc ₄ Y ₄ Tl ₂)Co ₂	1.4				Burnasheva, 1981	54			
AB2	(TL ₇ Sz ₂) ₂ 5) + xMn ₈ BCr _{1.05} V _{0.5} Co ₁	1.8		30	3	Park, 2001	1280			
AB2	(TL ₇ Sz ₂) ₂ 5) + xMn ₈ BCr _{1.2}	1.85		30	1.5 - 6	Park, 2001	1280	x=0-0.15		
AB2	(TL ₈ Z ₂) ₁ + xMn ₈ BCr _{1.2}	1.8		30	3 - 9	Park, 2001	1280	x=0-0.15		
AB2	Ca ₂ 5Mg ₇ 5Ni ₂	1.2				Oosterrecher, 1962	43			
AB2	Ca ₂ 5Mg ₅ Ni ₂	1.7				Oosterrecher, 1980	43			
AB2	CaAl _{1.88} .2 (M)	0.7		40	3	Tanaka, 1995	416			
AB2	CaAl ₂	0.6				Beck, 1962	45			
AB2	CaAl ₂	2.1				Shalkal, 1978	56			
AB2	CaMg ₂	5.4				Shalkal, 1978	56			
AB2	CaNi ₂	2.1	85	25	0.05	Oosterrecher, 1980	43			
AB2	Ce(F _{0.1} -Al _x) ₂	0.5				Raj, 1992	1164	x=0.7-0.85		
AB2	Ce(F _{0.1} -Al _x) ₂	1.6				Raj, 1992	1164	x=0-0.1	(amorph)	
AB2	CoAl _{1.25} Co _{0.75}	0.6		21	0.05	Gross, 1996	530			
AB2	CoAl _{1.5} Co _{0.5}	1.1				Jacob, 1981	459			
AB2	CoCo _{1.5} Al _{1.5}	1.8				Jacob, 1981	459			
AB2	CoCo _{1.5} Ni _{0.5}	1.9				Jacob, 1981	459			
AB2	CoCo ₂					Beck, 1962	45			
AB2	CoCo ₂	1.4				Burnasheva, 1977	520			
AB2	CoCo ₂	1.5		50	10 - 5	van Breen, 1980	355			
AB2	CoCo ₂	1.6				Gudotti, 1977	305			
AB2	CoCo ₂	1.6				Jacob, 1981	459			
AB2	CoCoAl	1.6				Jacob, 1981	459			
AB2	CoCoAl					Kist, 1979	515			
AB2	CoFe ₂					Beck, 1962	45			
AB2	CoFe ₂	1.3				Burnasheva, 1977	520			
AB2	CoFe ₂	1.6				Buechow, 1976	585			
AB2	CoMg ₂	3.1	101	216	0.1	Verbitsky, 1969	1155			
AB2	CoMg ₂	3.2				Kist, 1979	515			
AB2	CoMg ₂	3.6				Geigl, 1997	650			
AB2	CoMn _{1.5} Al _{0.5}	0.6		27		Spatz, 1997	823			
AB2	CoMn _{1.5} Al _{0.5} (M)	0.6		27		Spatz, 1997	823			
AB2	CoMn _{1.5} Al _{0.5}	1.3				Gross, 2000	1270			Deuterium
AB2	CoMnAl	0.9		21	0.05	Gross, 1996	530			
AB2	CoMnAl (M)	1.1		27	0.4	Spatz, 1997	824			
AB2	CoNi ₂					Beck, 1962	45			
AB2	CoNi ₂	1.3				Burnasheva, 1977	520			
AB2	CoNi ₂	1.5				Gudotti, 1977	305			
AB2	CoNi ₂	1.5		50	10 - 5	van Breen, 1980	355			
AB2	CoNi ₂ -yAl _y	0.8				Jacob, 1981	459	(y = 0.2-1.6)		
AB2	CoNiAl	0.9				Bobet, 2001	1278			
AB2	CoNiCo	1.6				Jacob, 1981	459			
AB2	CoRu ₂	1.5		200		Shalkal, 1977	34			
AB2	Dy(Mn ₉₉ Fe ₀₁) ₂	1.5				Przewoznik, 1999	1252			
AB2	DyCo ₂	1.2				Cohen, 1980	517			
AB2	DyCo ₂	1.3				Burnasheva, 1977	520			
AB2	DyFe ₂	1.2				Cohen, 1980	517			
AB2	DyFe ₂	1.3				Burnasheva, 1979	519			
AB2	DyFe ₂ (M)	1.5	58	80	0.0001	Korshak, 1980	356			
AB2	DyFe ₂ (M)	2.7		21	0.03	Pourarian, 1980	357			
AB2	DyMn ₂	0				Beck, 1962	45			
AB2	DyMn ₂	1.2				Cohen, 1980	517			
AB2	DyMn ₂	1.7				Przewoznik, 1996	525			
AB2	DyNi ₂	0.7				Cohen, 1980	517			
AB2	DyNi ₂	1.2				Burnasheva, 1979	519			
AB2	DyNiAl					Kolomoets, 1997	651			
AB2	ErCo ₂	1.2				Burnasheva, 1979	519			

AB2	Tl ₇ Si ₂ -27Mn1.25Co ₂ 75Cu ₁	1.7		20	4	Gamo, 1998	856		
AB2	Tl ₇ Si ₂ -25Co ₁ 1.5Ni ₅	1.7		40	0.1	Bouadina, 1998	1249		sloping plateau
AB2	YFe ₂	2				Buschow, 1975	518		
AB2	YFe ₂	2				Buschow, 1976	645		
AB2	YFe ₂	2.1		50	10 - 5	van Esen, 1980	355		
AB2	YFe ₂	2.1				van Mal, 1976	360		
AB2	YFe ₂					Paul-Boncour, 2001	1279		P=10 kbars
AB2	YFe ₂ (M)			200	0.008	Paul-Boncour, 1997	619		
AB2	YFe ₂ (M)	1.7		100	0.01	Paul-Boncour, 1997	648		
AB2	YFe ₂ (M)	2.1		20	0.001	Kerstnad, 1982	61		
AB2	YMo ₂	2.3				Kost, 1979	515		
AB2	YMo ₂	1.7				van Mal, 1976	360		
AB2	YMo ₂	2.1				Przeworsk, 1990	525		
AB2	YMo ₂	2.2				Lafroche, 1998	1243		
AB2	YMo ₂					Buck, 1962	45		
AB2	YMo ₂	1.7				van Esen, 1980	355		
AB2	YMo ₂	1.7	44			van Mal, 1976	360		
AB2	YMo ₂	1.8				Burnashova, 1977	520		
AB2	YMo ₂	1.8				Nakhl, 2001	1277		
AB2	YBaAl	0.7				Kolomoets, 1997	651		
AB2	YBaAl	0.7				Kolomoets, 1997	825		
AB2	YRu ₂	1.1		200		Shakht, 1977	14		
AB2	Zr(B1-yCy) ₂	1.4	30 - 40	50	0.001 - 5	Shakht, 1979	51		(B = Fe, Co, C = V, Cr, Mo), y = 0.25 - 0.75)
AB2	Zr(Co _{1-yAl}) ₂	0.2		20	0.1 - 30	Jacobi, 1978	35		(y = 0-1)
AB2	Zr(Cr _{1-yMo}) ₂	1.4				Bouadina, 2000	1287		y=0-0.5
AB2	Zr(Cr _{1-yMy}) ₂	1.6		23	2	Draemer, 1990	561		(y=0.125-0.5)
AB2	Zr(Cr _{1-yVy}) ₂	1.9				Peresvetov, 1988	557		(y=0.2-0.4)
AB2	Zr(Cr _{1-yCu} - _{5y} Ni _{1-5y}) ₂	1.4				Sandberg, 1995	623		(y=0.6-0.9)
AB2	Zr(Fe ₅₅ Co ₄₅) ₂	1.5		45	0.7	Esayed, 1997	846		
AB2	Zr(Fe ₇₅ Co ₂₅) ₂	1.4	25.6	45	3	Fang, 2000	1283		
AB2	Zr(Fe ₇₅ Co ₂₅) ₂	1.5		45	2	Esayed, 1997	846		
AB2	Zr(Fe _{1-y} Mo _y) ₂	0.1		20	0.1 - 26	Jacobi, 1978	35		(y = 0-1)
AB2	Zr(Fe _{1-y} Cr _y) ₂	1.2		20	0.15 - 3	Iwry, 1986	377		(y = 0.45-0.8)
AB2	Zr(Fe _{1-y} Cr _y) ₂	1.4		30	0.1 - 5	Qian, 1989	376		(y = 0.5-0.8)
AB2	Zr(Fe _{1-y} Ni _y) ₂	0.9	24 - 35	40	0.2 - 20	Suzuki, 1983	30		(y = 0.5-0.8)
AB2	Zr(Fe _{1-y} Ni _y) ₂	1	8.5 - 22	100	0.5 - 60	Shitikov, 1984	552		(y = 0.3-0.9)
AB2	Zr(Mn _{2x} Zn _{2(1-x)}) ₂	1.65		30	0.02 - 0.06	Lee, 2000	1272		y=0.1-0.4
AB2	Zr(Mn ₄ Ni ₆) ₂	1.7		30	0.15	Lee, 2000	1272		
AB2	Zr(Mn _{1-y} Ni _y) ₂	1.6		200	0.6 - 3	Kodama, 1996	594		(y=0-0.2)
AB2	Zr(Mn _{1-y} Ni _y) ₂	1.2		200	5 - 10	Kodama, 1996	594		(y=0-0.2)
AB2	Zr(Ni _{0.4} Zn _{0.2}) ₂	1.6	39.0	30	0.3	Gas, 1995	404		
AB2	Zr(Ni _{0.6} Co _{0.4}) ₂	1.6				Gas, 1996	586		
AB2	Zr(Ni ₂ Mn ₂ Ni ₆ -yCo _y) ₂	1.4		30	0.3 - 2	Gas, 1998	651		x=0-0.5
AB2	Zr(V _{1-x} Cr _x) ₂					Mandelkern, 1981	21		
AB2	Zr ₂ Ni ₈ Co ₈ Fe (M)	3.3	2 - 16	27	9	Kesavan, 1998	826		Sloping plateau
AB2	Zr ₂ Ni ₈ 8Fe ₈ Co ₈ 1.5	1.3	10 - 30	27	4	Kesavan, 2000	1286		
AB2	Zr ₂ STi ₅ Co ₂ Fe	1.8	27	23	4	Yu, 1985	555		
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 4V ₆ Ni ₁₈ Al ₁₅	1.6		30	0.02	Song, 2001	1238		sloping plateau
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 4V ₆ Ni ₁₈ Co ₁₅	1.6		30	0.15	Song, 2001	1238		sloping plateau
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 4V ₆ Ni ₁₈ Co ₁₅	1.6		30	0.07	Song, 2001	1238		sloping plateau
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 4V ₆ Ni ₁₈ Fe ₁₅	1.6		30	0.1	Song, 2001	1238		sloping plateau
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 4V ₆ Ni ₁₈ Mo ₁₅	1.6		30	0.04	Song, 2001	1238		sloping plateau
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 4V ₆ Ni ₁₈ -yFe _y	1.4		30	0.1 - 0.3	Song, 2000	1267		y=0-0.6
AB2	Zr ₂ STi ₅ Mo ₄ 2Fe ₃	1.6		150	3	Suzuki, 1982	25		
AB2	Zr ₂ STi ₅ 35(Mn ₃ V ₁ 4Co ₁ 11Ni ₁ -43)1.76	1.7		30	0.03	Lee, 2000	1272		
AB2	Zr ₂ STi ₅ 35Ni ₁₀ -yMy _y	1.2	36 - 39	40	0.05 - 0.4	Yang, 1995	402		(x = 1.0-1.2, y = 0.2-0.4)
AB2	Zr ₂ Mo ₄ -Co ₂	1	29.3	50	2	Ramsh, 1993	363		
AB2	Zr ₂ Mo ₄ Mo ₂	1.7		23	0.2	Fuji, 1985	55		
AB2	Zr ₂ 7Si ₂ 23Mn ₁ 1Fe ₉			23	0.9	Podziwrat, 1983	28		
AB2	YCo ₂	2		31		van Mal, 1976	360		
AB2	YFe _{1.8} Co _{0.2}	2				Fuji, 1983	59		
AB2	YFe ₂					Buck, 1962	45		
AB2	YFe ₂	1.7				Burnashova, 1977	520		
AB2	YFe ₂	1.8				Fuji, 1983	59		

AB2	Zr ₂ Ti ₂ SbV _{1.7} Fe ₃	1.5					Jacoby, 1981	459		
AB2	Zr ₂ Ti ₂ Zn ₆ 1.16Mn ₆ 3V ₁ 14Fe ₁₈	1.6	29.7	30	5		Mori, 1995	410		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Fe ₈	1.2	46.5	100	0.8		Drasner, 1991	564		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Ni ₈	1.4	37.9	100	1		Drasner, 1991	564		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Y ₅ Si ₄	1		200	1		Drasner, 1993	583	($\gamma=0.25-0.5$)	
AB2	Zr ₂ Co ₂ Si ₄	1.6		180	1		Bousadina, 1996	685		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Si ₄ V ₂	2.2		150	3		Bousadina, 1997	649		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Fe	1.6	36	51	2		Yu, 1985	555		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Fe _{1.2}	1.4	34	120	7		Iwamoto, 1999	1259		carb.
AB2	Zr ₂ Co ₂ Fe _{1.6}	1.2	29.1	30	2.5		Uchida, 1986	370		
AB2	Zr ₂ Co ₂ Fe _{1.6}	1.3		23	2		Wallace, 1985	1168		sloping plateau
AB2	Zr ₂ Co ₂ Fe _{1.8}	1.3	19	23	6		Wallace, 1985	1168		sloping plateau
AB2	Zr ₂ Co ₂ FeCo ₈	1.1	20	0	10		Wallace, 1985	1168		sloping plateau
AB2	Zr ₂ Co ₂ FeCu ₈	1.2	28	23	3		Wallace, 1985	1168		
AB2	Zr ₂ Co ₂ FeMn ₈	1.4	32	23	0.6		Wallace, 1985	1168		sloping plateau
AB2	Zr ₂ Co ₂ FeNi ₈	1.1	21	0	8		Wallace, 1985	1168		sloping plateau
AB2	Zr ₂ Co ₂ Ni	1.3					Vierlein, 2001	1201	at BDC	No plateau
AB2	Zr ₂ Co ₂ Ni	1.4		30	8		Jung, 1998	1244		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.4} Co ₇	1.7	21	23	1		Sanha, 1985	554		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.4} Co _{6.5}			23	0.8		Podzemaitr, 1983	28		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.4} Co _{6.5}	1.45		30	1		Davidson, 2001	1288		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.4} Co _{6.5}	1.5	29.9	20	3		Ivey, 1994	20		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.5} Al ₅	1		20	0.1		Jacoby, 1978	16		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.5} Co	1.5	23	23	1.5		Sanha, 1985	554		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.5} Co ₅	1.4	24.3	50	5.5		Shaltiel, 1977	14		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.5} Co ₅	1.5	25.6	20	5		Ivey, 1994	20		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.5} V ₅	1.6	32.2	50	0.25		Shaltiel, 1977	14		
AB2	Zr ₂ Fe _{1.6} Al ₄	1	36	24	10		Fuji, 1982	22		
AB2	Zr ₂ Fe ₂	0					Podzemaitr, 1978	513		
AB2	Zr ₂ Fe ₂	0.1					Shaltiel, 1977	14		
AB2	Zr ₂ Fe ₂	0.1					Semenenko, 1980	638		
AB2	Zr ₂ Fe ₂	0.15					Pebler, 1967	13		
AB2	Zr ₂ Fe ₂ Cr	1.7	49.4	50	0.1		Shaltiel, 1977	14		
AB2	Zr ₂ Fe ₂ Mn	1.6	31	150	10		Suzuki, 1982	27		
AB2	Zr ₂ Fe ₂ MnCo ₂₅	1.6		45	0.5		Sanha, 1985	554		
AB2	Zr ₂ Fe ₂ MnNi ₄	0.8		23	5		Sanha, 1985	554		
AB2	Zr ₂ Fe ₂ Mo	1.2	29.8	30	0.6		Semenenko, 1980	638		
AB2	Zr ₂ Fe ₂ V	1.6	48.1	50	0.0012		Shaltiel, 1977	14		
AB2	Zr ₂ Mn ₅ V ₅ Ni _{1.4}	1.6		30	0.2		Kim, 1999	1264		Sloping plateau
AB2	Zr ₂ Mn ₆ Ni _{1.4}	0.9		25	3.4		Hsu, 2000	1276		
AB2	Zr ₂ Mn ₆ V ₂ Co ₁ Ni _{1.2}	1.6		40	0.9		Lai, 2000	1271		
AB2	Zr ₂ Mn ₆ V ₂ Co ₁ Ni _{1.2}	1.6		25	0.5		Hsu, 2000	1276		
AB2	Zr ₂ Mn ₆ V ₂ Ni _{1.2}	1.8		25	0.14		Hsu, 2000	1276		
AB2	Zr ₂ Mn ₆ Ni _{1.2}	1.7		25	0.5		Hsu, 2000	1276		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.1} Fe _{1.22}	1.3	29.4	30	2		Uchida, 1986	370		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.1} Fe _{1.22}	1.5	13.3	100	5		Sanha, 1983	23		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.22} Fe _{1.11}	1.5	13	23	1		Sanha, 1983	23		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.22} Fe _{1.14}	1.2	31	40	2		Uchida, 1986	370		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.2} Fe _{0.4}	1.5	33	50	0.4		Shaltiel, 1977	14	(\pm Zr ₂ Fe)	
AB2	Zr ₂ Mn _{1.52} Co ₄ V _{0.08}	1.2		200	8		Yonezu, 1991	563		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.53} Fe _{1.27}	1	9	23	4		Sanha, 1983	23		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.6} Co ₄	1.3		150	3		Yonezu, 1991	563		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.8}	1.2		50	0.06		van Essem, 1980	17		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.8}	1.6	38.8	50	0.1		Luo, 1992	582		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.8} Co _{0.2}	1.2		200	6		Fujitani, 1991	368		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.8} Fe _{0.2}	1.2		200	8		Fujitani, 1991	368		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.8} Ni _{0.2} (M)	1.1		200	6		Fujitani, 1991	368		
AB2	Zr ₂ Mn _{1.8} V _{0.2}	1.3		200	1		Fujitani, 1991	368		
AB2	Zr ₂ Mn ₂		38				Podzemaitr, 1983	28		
AB2	Zr ₂ Mn ₂	0.45					Pebler, 1967	13		
AB2	Zr ₂ Mn ₂	1					Beck, 1962	45		
AB2	Zr ₂ Mn ₂	1.4		150	1		Yonezu, 1991	563		
AB2	Zr ₂ Mn ₂	1.5	36	210	3		Fuji, 1987	389		
AB2	Zr ₂ Mn ₂	1.5					Podzemaitr, 1978	513		

AB2	ZrMn2	1.7	37.4	50		0.01	Luo, 1992	582			
AB2	ZrMn2	1.8	53.2	80		0.03	Shaktel, 1977	14			
AB2	ZrMn2	1.9					Jacob, 1980	65			
AB2	ZrMn2.4	1.6		50		0.7	van Essen, 1980	17			
AB2	ZrMn2.5	1.4	32	50		0.07	Luo, 1992	582			
AB2	ZrMn2.5Fe ₂	1.4	15	100		0.12	Pourarian, 1982	512			
AB2	ZrMn2.7	1.3	33.6	100		3	Uchida, 1986	370			
AB2	ZrMn2.8		29.9	23		0.3	Podzwaizl, 1983	28			
AB2	ZrMn2.8	1.5	18.4	23		0.4	Pourarian, 1981	19			
AB2	ZrMn2.8	1.6		50		2	van Essen, 1980	17			
AB2	ZrMn2.8Fe ₄	1.2	23	100		0.12	Pourarian, 1982	512			
AB2	ZrMn2.8Ni ₄	1.3		23		4	Pourarian, 1984	551			
AB2	ZrMn2Co ₈		20.9	23		4	Podzwaizl, 1983	28			
AB2	ZrMn2Co ₈	0.9	19.3	23		3.5	Pourarian, 1984	551			
AB2	ZrMn2Co ₈		31.6	23		0.06	Podzwaizl, 1983	28			
AB2	ZrMn2Cu ₈	1.4	27	50		0.06	Pourarian, 1984	551			
AB2	ZrMn2Fe ₈		25	23		0.5	Podzwaizl, 1983	28			
AB2	ZrMn2Fe ₈	1.2	29.3	30		2	Uchida, 1986	370			
AB2	ZrMn2Fe ₈	1.4	12.7	23		0.7	Sinha, 1982	509			
AB2	ZrMn2Fe _{1.2}	0.7	6.8	25		3	Sinha, 1982	509			
AB2	ZrMn2Ni ₈		25	23		1.6	Podzwaizl, 1983	28			
AB2	ZrMn2Ni ₈	1.3	18.6	23		3	Pourarian, 1984	551			
AB2	ZrMn2-xVx	1.2		200	1 - 2		Yonozu, 1991	563	(x=0.1-0.2)		
AB2	ZrMn2-yCoy	1.5	35 - 44	50	0.08 - 1		Shaktel, 1977	14	(y = 0.5-1.0)		
AB2	ZrMn3	1.3	29.2	50		0.6	Luo, 1992	582			
AB2	ZrMn3.8	1.2	17	30		0.7	Pourarian, 1981	19			
AB2	ZrMnFe	0.1	20.4				Fukada, 1999	1255		0.4 atm at 0°C	No plateau
AB2	ZrMnFe ₇ Co ₃	1.2	17.6	30		4	Prakash, 2000	1285			Sloping plateau
AB2	ZrMnNi _{1+y}	0.3		30		0.45 - 2.5	Kwon, 2002	1294	y=0-0.4		
AB2	ZrMn2	0.3	38.5				Pablic, 1967	13			
AB2	ZrMn2	0.3					Beck, 1962	45			
AB2	ZrMn2	0.4					Shaktel, 1977	14			
AB2	ZrMn2	0.5					Sarmonenko, 1980	638			
AB2	Zr ₇₉ Fe ₂₁ MnFe _{1.02}	1.5	33	30		1.5	Uchida, 1986	370			
AB2	Zr ₇ Co ₃ Mn ₂ (M)	1.6		100		0.6	Wallace, 1983	528			
AB2	Zr ₇ Li ₃ (Mn ₂ V ₂ Co ₂ Y ₆ Ni ₆ -y) _{1.8}	1.6		30		0.04 - 0.05	Lee, 2000	1272	y=0-0.15		
AB2	Zr ₇ Li ₃ (Co ₃ Mn ₃ V ₄ Ni ₃ O)	1.8		50		0.2	Kim, 1999	1284			Sloping plateau
AB2	Zr ₇ Li ₃ Co ₆ Fe _{1.4}	1.5	22	23		7	Wallace, 1985	1169			
AB2	Zr ₇ Li ₃ Co ₇ Fe	1.7	30	23		0.8	Yu, 1985	555			
AB2	Zr ₇ Li ₃ Mn ₂	1.7		30		0.1	Fuji, 1981	18			
AB2	Zr ₇ Li ₃ Mn ₂ Fe ₈	0.8	14	25		2.6	Sinha, 1982	20			
AB2	Zr ₇ Li ₃ Mn ₂ Fe	1.7	10	23		2	Sinha, 1982	25			
AB2	Zr ₇ Li ₃ Mn ₂ O ₄ Mn ₃ Co ₃	1.7		30		0.1	Liu, 1997	818			
AB2	Zr ₈ Co ₂ Mn ₂	1.6		100		0.25	Wallace, 1983	528			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Co ₂ Fe _{1.4}	1.6	27	23		3	Wallace, 1985	1169			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Co _{1.25} Mn	1.8		65		0.08	Sinha, 1985	554			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Co ₁ Fe _{1+y}	1.2	26 - 29	30		0.4 - 6	Liu, 1990	378	(y = 0-0.4)		
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Co ₂ Co ₈ BV ₂	1.7		150		4	Bouroukima, 1997	649			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Fe ₆ Mn	1.4	30	30		1.6	Park, 1991	562			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Fe ₆ MnCr _{1-y}	1.4	30 - 33	30		0.4 - 1.6	Park, 1991	562	(y=0-1)		
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Mn ₆ Ni _{1.4}	0.8		25		21	Hsu, 2000	1276			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Mn ₆ Fe	1.7	11	23		1	Sinha, 1982	25			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Ni _{1.1+y} Mn ₈ -yV _{1.1}	1.6	29 - 37	30		0.6 - 7	Mori, 1995	410	(y = 0-0.32)		
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Ni _{1.2} V ₂ Co ₂	1.8		67		4	Chen, 1997	820			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Ni _{1.2} V ₂ Mn ₂	1.8		67		1	Chen, 1997	820			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Ni _{1.2} V ₂ Mo ₂	1.8		67		3	Chen, 1997	820			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Ni _{1.2} V ₂ Si ₂	1.9		67		2	Chen, 1997	820			
AB2	Zr ₈ Ti ₂ Ni _{1.3} Mn ₇ -yV _y	1.62	31 - 35	30		1 - 4	Mori, 1995	410	(y = 0-0.2)		
AB2	Zr ₈ V ₂ Mn ₆ Ni _{1.4}	0.2					Hsu, 2000	1276			No plateau
AB2	Zr ₉ Ti ₁ (Mn ₇ V ₅ Ni _{1.2}) _{0.02}	0.7		30		0.1	Kim, 1999	1250	y=0.84-1.0		Sloping plateau
AB2	Zr ₉ Ti ₁ (Mn ₇ V ₅ Ni _{1.2}) _y	1.5		30		0.03 - 0.2	Kim, 1998	1247	y=0.84-1.0		Sloping plateau

AB2	Zr-9Ti,1Co,55Fe1.45	1.6	1.03	10	2	Park, 2001	1292			
AB2	Zr-9Ti,1Co,1-yFe1+y	1.4	24 - 31	30	0.2 - 4	Lee, 1990	378	(y = 0-0.4)		
AB2	Zr-9Ti,1Co,Cu,8V,2	1.7		150	4	Bousudima, 1997	649			
AB2	Zr-9Ti,1Co,Fe	1.6		30	0.2	Park, 1993	687			
AB2	Zr-9Ti,1Co,Fe,8V,2	1.8		150	2	Bousudima, 1997	649			
AB2	Zr-9Ti,1Co,He	2				Wenters, 2001	1291		at 80C	No plateau
AB2	Zr-9Ti,1Co,He,8V,2	1.8		150	2	Bousudima, 1997	649			
AB2	Zr-9Ti,1Mo,8V,2Co,1Nb1.1	1.6		40	0.5	Liu, 2000	1266			
AB2	Zr-9Ti,1Mo,Fe	1.5		30	0.6	Park, 1993	687			
AB2	Zr-9Ti,1Nb1.1Mo,8V,2Co,1	1.6		40	0.7	Sutka, 1998	861			
AB2	Zr-9Ti,1Nb1.1V,2Mo,8Co,1	1.5		40	0.8	Gao, 1998	855			
AB2	Zr-9Ti,1Nb1.3V,2Mo,8Co,05	1.4		40	1.2	Gao, 1998	855			
AB2	Zr-9Ti,1V,2Mo,8Co,1Nb1.1	1.5		40	4	Sutka, 1999	1263			
AB2	Zr-9Ti,1V,5Nb1.5	1.5		50	0.2	Park, 1993	687			
AB2	Zr1-2xMmxFxFe1.4Co,6	1.35				Davidson, 2001	1288	x=0.05-0.2		No plateau
AB2	Zr1-xMmxFx1.4Co,6	1.4				Davidson, 2001	1288	x=0.05-0.2		No plateau
AB2	Zr1-xTi(xMo,2V,2Ni,6)1.8	1.6		30	0.02 - 0.2	Lee, 2000	1237	x=0-0.6		sloping plateau
AB2	Zr1-xTi(xMo,2V,2Ni,6)1.8	1.6		30	0.02 - 0.2	Lee, 2000	1272	x=0-0.6		sloping plateau
AB2	Zr1-xTi(Ni,6Mn,3V,1Co,05)2	1.2	21.8 - 26.8	40	1 - 15	Du, 2001	1280	x=0-0.5		sloping plateau
AB2	Zr1-xTiCo,8Fe1.2	1.4	26 - 29	30	0.31 - 31.5	Lee, 1990	378	(y = 0-0.2)		
AB2	Zr1-xTiCo,1-yFe1+y	1.4	30 - 36	30	0.2 - 10	Park, 1990	560	(x=0-0.5; y = 0-0.5)		
AB2	Zr1-xTiFe0.5V,5	1.4		50	0.2 - 1	Park, 1992	581	(x=0-0.3)		
AB2	Zr1-xTiMo,7V,5Nb1.2	1.5		30	0.08 - 0.5	Kim, 1998	1247	x=0-0.2		sloping plateau
AB2	Zr1-xTiMoFe	1.1	28 - 34	30	0.4 - 0	Park, 1992	581	(x=0-0.3)		
AB2	Zr1-xTiNi,05Mo,55Co,4V,1	1.5		25	0.1 - 7	Chen, 1998	1248	x=0.1-0.6		
AB2	Zr1-xTiNb1.1Mo,6V,1Fe,2	1.6	26 - 28	30	1.2 - 10	Mont, 1995	410	(x = 0-0.4)		
AB2	Zr1-xTiV,1.2Co,3Nb1.5	1.5	34.5 - 36.9			Lupu, 2000	1275	x=0.25-0.6		No plateau
AB2	ZrAl2	0.35		20	0.1	Jacobi, 1978	16			
AB2	ZrBe2	2.1		22	0.01	Maulland, 1983	362			
AB2	ZrCo1.5Al,5	1		20	0.4	Jacobi, 1978	16			
AB2	ZrCo1.5Mo,5	0.1				Semenenko, 1980	638			
AB2	ZrCo1.5V,5	1.5	34.3	50	1.5	Shahkai, 1977	14			
AB2	ZrCo2					Publer, 1967	13			
AB2	ZrCo2	0.1				Padurets, 1978	513			
AB2	ZrCo2	0.16				Shahkai, 1977	14			
AB2	ZrCoCr	1.6	40.2	50	0.7	Shahkai, 1977	14			
AB2	ZrCoV	1.8	49.4	50	0.0023	Shahkai, 1977	14			
AB2	ZrCoV,2Co,8	1.5		100	2	Soubeyroux, 1999	1261	y=0-1		
AB2	ZrCoV1-yCry	1.1				Soubeyroux, 1999	1261	y=0-1		
AB2	ZrCo,8Fe1.4	1.5	27	23	0.8	Wallace, 1985	1160			
AB2	ZrCo,8Co,8V,4	1.8		130	1	Bousudima, 1996	585			
AB2	ZrCo,1.2Mo,8	1.4	50.2	70	0.75	Bouglhalil, 1993	375	(= Fe1.2 & Fe1.5)		
AB2	ZrCo,1.2Mo,8	2	56.4	70	0.25	Bouglhalil, 1993	375			
AB2	ZrCo,1.75Ge,25	1.3		200	1	Dranes, 1993	583			
AB2	ZrCo,1-yFe1+y	1.3	24 - 29	30	0.4 - 5	Lee, 1990	378	(y = 0.2-0.5)		
AB2	ZrCo,2		36			Padurets, 1983	28			
AB2	ZrCo,2	1.8				Beck, 1962	45			
AB2	ZrCo,2	1.8	42	27	0.003	Publer, 1967	13			
AB2	ZrCo,2	1.8		100	0.3	Petrovskanov, 1985	557			
AB2	ZrCo,2	1.8				Trzeciak, 1956	483			
AB2	ZrCo,2	1.9				Padurets, 1978	513			
AB2	ZrCo,2	1.9				Kohlmann, 1999	1253			
AB2	ZrCo,2	1.9				Indoleva, 2000	1268		Deuterium	
AB2	ZrCo,2	2				Shahkai, 1977	14			
AB2	ZrCo,2	2.1				Jacobi, 1980	65			
AB2	ZrCo,2	2.1				Semenenko, 1980	638			
AB2	ZrCo,2Co,8	1	45.3	100	2	Dranes, 1991	564			
AB2	ZrMo2 (M)	1	22	-78	0.4	Semenko, 1996	1154			
AB2	ZrMoCr	1.3	27.6	25	0.2	Mitschke, 1983	1148			sloping plateau
AB2	ZrNb1.2Co,8	1.6		25	0.4	Sun, 1996	689			

AB2	ZrNi ₂ Co ₈ La _{0.5}	1.7		25	0.2	Sun, 1996	689				
AB2	ZrNi ₂ Mn ₂ Sc ₂ Zr ₁	1.6		70	3	Morawak, 1991	367				
AB2	ZrNi ₂ Mn ₂ Sc ₂	1.45		70	4.5	Morawak, 1991	367				
AB2	ZrNi ₂ 4yMn ₃ 3V ₇	0.6		30		Kim, 1998	857	y=0-0.6			
AB2	ZrNi ₂ 4yMn ₅ 5V ₅	0.4		30	0.3 - 30	Kim, 1998	827	y=0-0.6			
AB2	ZrNi ₂ 4Mn ₅ 5V ₅	1.6		30	0.3	Kim, 1998	827				
AB2	ZrNiAl	0.3		40	0.001	Yoshida, 1995	622				
AB2	ZrTi ₂	2				Skripov, 2000	1274			deuterium	
AB2	ZrV ₂ Mn ₂ Sn _{1.2}	1.6		60	0.1	Lee, 1999	1265				
AB2	ZrV _{1.5} Cr ₂ Ni _{1.5}	1.2	42 - 50			Lupa, 1999	1256	y=0-0.3		No plateau	
AB2	ZrV ₂	2.1				Beck, 1962	45				
AB2	ZrV ₂	2.1				Trzciak, 1956	483				
AB2	ZrV ₂	2.4	155			Hubler, 1967	13				
AB2	ZrV ₂	2.7				Fachista, 1978	513				
AB2	Zr ₂ Ni ₂ Co ₄ Mn ₄	1.4		45	1 - 50	Morawak, 1991	367	(x = 0.8-1.1)			
AB2	Zr ₂ Ti _{1-x} (Fe ₂ Mn _{1-y}) _{1.5}	0.8				Suzuki, 1982	26	(x & y = 0.2-0.8)			
AB2	Zr ₂ Ti _{1-x} Cr ₂	1.3				Jacob, 1980	65	(x = 0-1)			
AB2	Zr ₂ Ti _{1-x} Mn ₂	0.06				Jacob, 1980	65	(x = 0-1)			
AB2	ErCo ₂	1.3				Gualtieri, 1977	50				
AB2	ErFe ₂	1.1				Burnasheva, 1979	519				
AB2	ErFe ₂	1.4				Gualtieri, 1978	516				
AB2	ErFe ₂	1.4				Gualtieri, 1977	50				
AB2	ErFe ₂	1.4		205	1	Shibov, 1981	530				
AB2	ErFe ₂	1.7		24	0.06	Shahikala, 1996	1165			sloping plateau	
AB2	ErFe ₂					Paul-Boncour, 2001	1279			P=10 kbars	
AB2	ErFe ₂ (M)	1.1	56.2	130	0.013	Flanagan, 1987	358				
AB2	ErFe ₂ (M)	1.5	57.9	80	0.001	Kierstead, 1980	356				
AB2	ErFe ₂ -yAl _y	1.2				Gualtieri, 1977	50	(y = 0-0.6)			
AB2	ErFe ₂ -yCo _y	1.3				Gualtieri, 1977	50	(y = 0-2)			
AB2	ErFe ₂ -yMn _y	1.4				Gualtieri, 1977	50	(y = 0-1.4)			
AB2	ErFe ₂ -yMn _y					Sankar, 1977	683	y=0.4-1.0			
AB2	ErFe ₂ -yNi _y	1.3				Gualtieri, 1977	50	(y = 0-1.2)			
AB2	ErMn ₂	1.75		22	0.02	Viccaro, 1980	359	(y = 0-1.2)			
AB2	ErNi ₂	0.9				Gualtieri, 1977	50				
AB2	ErNi ₂	0.9				Ernsken, 1983	385				
AB2	ErNi ₂	1.2				Burnasheva, 1979	519				
AB2	ErNi ₂	1.5				Kost, 1979	515				
AB2	ErNiAl	0.6				Kobemitsu, 1997	651				
AB2	ErNiAl	0.6				Kobemitsu, 1997	625				
AB2	GdCo ₂					Beck, 1962	45				
AB2	GdCo ₂	1				Mashnikov, 1999	1257				
AB2	GdCo ₂	1.4				Burnasheva, 1979	519				
AB2	GdCo ₂	1.4	54			Buschow, 1977	54				
AB2	GdCo ₂	1.5	31			van Mal, 1976	360				
AB2	GdCo ₂	1.6				Shaikol, 1977	34				
AB2	GdCo ₂ (M)	1.5	48	200	2	Shaikol, 1979	361				
AB2	GdFe ₂					Beck, 1962	45				
AB2	GdFe ₂	1.5				Buschow, 1975	518				
AB2	GdFe ₂	1.5	29	292	1	Shaikol, 1979	361				
AB2	GdFe ₂ (M)	1.6		20	0.0001	Kierstead, 1982	61				
AB2	GdFeAl	1.2		27	0.75	Drum, 1984	553				
AB2	GdMn ₂	0				Beck, 1962	45				
AB2	GdMn ₂	1.1	87.5	360	1	Shaikol, 1979	361				
AB2	GdMn ₂	1.6				Pyromonik, 1996	525				
AB2	GdNi ₂	1.3				Burnasheva, 1977	520				
AB2	GdNi ₂	1.4				Malk, 1977	514				
AB2	GdNi ₂	1.5	90	300	1	Shaikol, 1979	361				
AB2	GdNiAl	0.6				Kobemitsu, 1997	651				

AB2	GdNiAl	0.6				Kolomiets, 1997	625		
AB2	GdNiAl	0.8		27	0.5	Drulis, 1984	553		
AB2	GdRh2	0.9	49	142	6	Shabal, 1979	361		
AB2	GdRh2	0.9		100	0.8	Shabal, 1977	34		
AB2	GdRu2	1		200	0.7	Shabal, 1977	34		
AB2	GdRu2	1	60	225	3	Shabal, 1979	361		
AB2	He57Ti43Ni1.7V3	0.8				Ramshorn, 1995	617		
AB2	HfBa2	0.58				Maeland, 1983	362		
AB2	HfCo2	1.2				Mukai, 1999	1230		No plateau
AB2	HfNi2	0.7				Mukai, 1999	1230		No plateau
AB2	HfNi2	0.2				Mukai, 1999	1230		No plateau
AB2	HfTi2	2.1				Kouhamon, 1998	1240		
AB2	HfV2	0.9				Mukai, 1999	1230		No plateau
AB2	HfV2	1				Kamali, 1995	405		
AB2	HfV2	1.1				Beck, 1962	45		
AB2	Hu.8Zr4Co2		30	27	0.06	Ramshorn, 1991	582		
AB2	Hu.8Zr4Co2	1	33	50	0.2	Ramshorn, 1993	363		
AB2	Hu.8Zr4Fe2		16 - 20			Kenavan, 1995	580		
AB2	Hu.8Zr2Co2		13	27	0.06	Ramshorn, 1991	582		
AB2	Hu.8Zr2Co2	1.2	25	50	0.2	Ramshorn, 1993	363		
AB2	Hu.8Zr2Fe2		24			Kenavan, 1996	581		
AB2	HuCo2	1.3				Burnashova, 1979	519		
AB2	HuFe2	1.3				Burnashova, 1979	519		
AB2	HuFe2	1.6				Guzhen, 1976	516		
AB2	HuNi2	1.3				Burnashova, 1979	519		
AB2	HuRu2	1.1		155	1	Shiba, 1981	530		
AB2	La1-xMgxNi2	1.2				Oesterreicher, 1980	364	(x = 0.25-0.67)	
AB2	LaAl2	0.05				Shabal, 1978	66		
AB2	LaCo2	1.5				Burnashova, 1979	519		
AB2	LaMg2	2.1				Shabal, 1978	66		
AB2	LaMg2	3.3				Kost, 1979	515		
AB2	LaMg2	3.6				Geigi, 1997	650		
AB2	LaMnAl (M)	1.2		21	15	Gross, 1996	630		
AB2	LaNi2	1.1				Gudotti, 1977	305		
AB2	LaNi2	1.6				Mikhailova, 1978	535		
AB2	LaNi2	1.7				Oesterreicher, 1980	364		
AB2	LaNi2	1.7				Oesterreicher, 1976	524		
AB2	LaNi2	1.8				Kost, 1979	515		
AB2	LaNi2	1.9	79.5			Maeland, 1976	367		
AB2	LaPr2					Shabal, 1977	34		
AB2	LaRh2	1.4		200	0.7	Shabal, 1977	34		
AB2	LaRh2 (M)	1.4	44.3	244	2	Shabal, 1979	361		
AB2	LaRu2	1.3		200		Shabal, 1977	34		
AB2	LuPd2	0.8	51	300	0.16	Sakamoto, 1995	411		
AB2	LuFv2	1.4				Buschow, 1980	56		
AB2	LuNi2	0.85				Burnashova, 1979	519		
AB2	LuNi2	0.9				Esselen, 1983	385		
AB2	LuNi2	1.4				Buschow, 1980	56		
AB2	LuNiAl	0.4				Kolomiets, 1997	651		
AB2	MgCu2	0				Railly, 1967	87		
AB2	MgNi2	0				Railly, 1968	88		
AB2	MgYNi4	1.05	35.8	40	4	Aono, 2000	1273		
AB2	MnCo2	1.1				Gudotti, 1977	305		
AB2	MnHfAl	1		21	0.05	Gross, 1996	630		
AB2	NbCo2	1.4				Burnashova, 1979	519		
AB2	NbFe2	1.1				Burnashova, 1977	520		
AB2	NbMg2	2.05				Shabal, 1978	66		
AB2	NbNi2	1.3				Burnashova, 1977	520		
AB2	PtCo2	1.5	67	100	0.001	Clinton, 1975	302		
AB2	Ti.95Zr.05Cr1.2Mn.8	1.8		20	45	Hagstrom, 1999	1191		
AB2	Ti.95Zr.05Mn1.45Al.5	1.4		25	21	Bebut, 2000	1239		
AB2	Ti.95Zr.05Mn1.45Cu.5	1.9		25	32	Bebut, 2000	1239		

AB2	Tl.95Zr.05Mn1.45Cr.5	1.9		25	28	Bobet, 2000	1239			
AB2	Tl.95Zr.05Mn1.45Ni.5	1.9		25	36	Bobet, 2000	1239			
AB2	Tl.95Zr.05Mn1.45V.5	2		25	20	Bobet, 2000	1239			
AB2	Tl.95Zr.05Mn1.48V.43Fe.08Al.01	1.9		20	6	Skripnyuk, 1999	1262			
AB2	Tl.95Zr.05Mn1.05	1.9		25	29	Bobet, 2000	1239			
AB2	Tl.95Zr.05Mn2-y	1.6		25	25	Bobet, 2000	1204	y = 0.05-0.35		
AB2	Tl.98Zr.02Mn1.5V.43Fe.09Co.05	1.9	27.4	20	9	Bornauer, 1984	341			
AB2	Tl.98Zr.02V.43Fe.09Co.05Mn1.5	1.6	23.3	20	20	Hahné, 1998	850			
AB2	Tl.9Zr.15Mn1.6Cr.2V.2	2.1	15.4	25	7	Xu, 2001	1290			
AB2	Tl.9Zr.1Cr.1.8	3.4				Viebatsky, 1998	1281		at -77C	No plateau
AB2	Tl.9Zr.1Mn1.4Cr.45Fe.15	2.2		20	60	Viebatsky, 1998	1219		at -78C	
AB2	Tl.9Zr.1Mn1.4Cr.4V.2	1.7		27	6	Monta, 1997	847			
AB2	Tl.9Zr.1Mn1.4Cr.4V.3C.03	1.7		27	10	Monta, 1997	847			
AB2	Tl.9Zr.1Mn1.4Cr.4V.25Co.03	1.7		5	3	Monta, 1997	847			
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.4Cr.4(VFe).2	2.1	25.5	25	3	Xu, 2001	1290	VFe=ferrovanadium		
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.4Cr.4V.2	2.1	26.7	25	1.9	Xu, 2001	1290			
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.4Cr.2(VFe).2	2.1	30	25	7	Xu, 2001	1290	VFe=ferrovanadium		
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.6Mn.2(VFe).2	2	23.2	25	3.6	Xu, 2001	1290	VFe=ferrovanadium		
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.6Mn.2V.2	2.1	31.7	25	2.7	Xu, 2001	1290			
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.8(VFe).2	2	29.1	25	3	Xu, 2001	1290	VFe=ferrovanadium		
AB2	Tl.9Zr.2Mn1.8V.2	2.1	26	25	3	Xu, 2001	1290			
AB2	Tl.9Zr.3Mn1.3Cr.05Mo.05V.2Co.2	2	15.2	20	0.06	Au, 1995	880			
AB2	Tl.85Zr.15MnCr.8V.1Cu.1	1.7		30	13	Liu, 1996	690			
AB2	Tl.6.9+zr.3.1MnCrCoV.1	1.7		30	12 - 24	Liu, 1996	690	x=0-0.15		
AB2	Tl.6.95+zr+xMnCrCoV.1	1.7		30	10 - 24	Liu, 1996	690	x=0.15-0.2		
AB2	Tl.6.9Zr.1Mn1.4Cr.4V.2	1.8		30	13	Liu, 1996	690			
AB2	Tl.6.9Zr.1MnCrCoV.1	1.7	22.5	30	24	Liu, 1996	690			
AB2	Tl.6.9Zr.1MnCr1-yVy	1.8		30	2.7 - 13.6	Liu, 1996	690	y=0.2-0.4		
AB2	Ti1.2Cr1.9Mn1.1	1.8	20.1	-10	19.4	Osami, 1983	40			
AB2	Ti1.2CrMn	2	25.5	-10	5.7	Osami, 1983	40			
AB2	Ti1-xZrxCr2	0.8		20	3 - 40	Machida, 1978	371	(x = 0 - 0.3)		
AB2	Ti1-xZrxCrMn	2		-20	2.5 - 13	Bornauer, 1984	344	(x = 0-0.2)		
AB2	Ti1-xZr+xMn.8Cr1.2	1.8		30	7 - 30	Park, 2001	1280	x=0.1-0.25		
AB2	Ti1-xZr+xMn1.7Co.3	1.5		20	0.1 - 1	Gamo, 1980	31	(x = 0.3-0.5)		
AB2	Ti1-xZr+xMn2-y-zCrCoZr	1.6		30	1 - 30	Morimaki, 1991	386	(x = 0-1, y = 0.5-1, z = 0-0.2)		
AB2	Ti1-xZr+xMnCrCoV.1	1.7		30	10 - 24	Liu, 1996	690	x=0.1-0.15		
AB2	Ti1-xZr+xMnV	1.7		20	2 - 6.5	Gamo, 1980	31	(x = 0-0.2, y = 1.5-1.6)		
AB2	Ti1-xZr+xMn1.9Mn.2Fe.2	1.6		30	0.7 - 2	Gao, 1995	403	(x = 0.2-0.4)		
AB2	Ti1-xZr+xV1.7Fe.3	2.8				Jacob, 1981	459	(x = 0.3-0.5)		
AB2	TiBe2	4.4		22	1	Mueland, 1983	362			
AB2	TiCo2					Shakal, 1978	66			
AB2	TiCr1.2V.8	3.4				Jacob, 1981	459			
AB2	TiCr1.4V.6	2.3				Jacob, 1981	459			
AB2	TiCr1.7Fe.1	3.2				Viebatsky, 1999	1281		at -78C	No plateau
AB2	TiCr1.8		19	0	70	Andreev, 1984	684			
AB2	TiCr1.8	1.9	19.7	-32	20	Bezi, 1999	1258			
AB2	TiCr1.8 (H)	2.43	20.2	-20	40	Johnson, 1978	335			
AB2	TiCr1.8Mo.2	2.6		40	1	Kabutomori, 1995	479			
AB2	TiCr1.8V.2	2.9		40	0.2	Kabutomori, 1995	479			
AB2	TiCr2	0.4				Beck, 1962	45			
AB2	TiCr2	0.8	23	20	40	Machida, 1978	371			
AB2	TiCr2	5.3				Jacob, 1980	35			
AB2	TiCr2	1.3		-16	30	Railly, 1976	490			
AB2	TiCr2	1.8	29.7	40	2	Kabutomori, 1995	479			
AB2	TiCr2	1.8				Padurats, 1982	408			
AB2	TiCrMn		24	0	18	Andreev, 1984	684			
AB2	TiCrMn	1.7		-16	15	Railly, 1976	490			
AB2	TiCrMn	2.1	19.6	40	190	Bezi, 2000	1269		at T=60C	
AB2	TiCrMn.85Fe.3V.15	1.6	20.9	20	6	Hagstrom, 1998	1242			
AB2	TiFe2	0				Semenovko, 1982	532			
AB2	TiMn1.25Co.25	2.1		20	6	Hong, 1991	365			
AB2	TiMn1.28V.6Fe.15	2.15		20	8	Bornauer, 1984	521			
AB2	TiMn1.2Fe.37	1.4		10	9	Gamo, 1980	36			
AB2	TiMn1.2V.8	2.1		50	4.5	Bornauer, 1984	521			
AB2	TiMn1.3Fe.11	1.7	32.7	24	6	Gamo, 1980	36			

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BIODATA PENULIS



Penulis dilahirkan dengan nama Muhammad Rizal Fadillah di Tasikmalaya pada 14 Desember 1996. Penulis merupakan anak ke-tiga dari pasangan suami istri Bambang Am Am S. S. dan Lia Yuliani. Mempunyai saudara laki-laki sebanyak tiga. Penulis gemar bermain *game* dan rutin melakukan olahraga renang.

Penulis telah menempuh pendidikan formal di SD Salman Al-Farisi Bandung, SMP Taruna Bakti Bandung, dan SMA Taruna Bakti Bandung. Setelah lulus SMA pada tahun 2015 penulis melanjutkan pendidikan di Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya dengan NRP 0211154000181.

Selama masa perkuliahan penulis aktif di Himpunan Mahasiswa Mesin sebagai Staff Departemen Kewirausahaan periode 2016/2017 lalu menjadi Kepala Departemen Kewirausahaan periode 2017/2018. Penulis melaksanakan kerja praktek di Pertamina RU IV Balongan pada bulan juni 2019 lalu dilanjutkan magang di PT. McDermott Indonesia pada bulan juli- agustus 2019. Selama kuliah penulis banyak mendalami ilmu tentang metalurgi dan pernah menjadi koordinator praktikum metalurgi. Penulis memiliki sertifikasi CSWIP 3.0 Visual Welding inspector dari TWI.