PROPOSAL TUGAS AKHIR

APLIKASI STATISTICAL LEARNING UNTUK MENENTUKAN HUBUNGAN PARAMETER ELECTROSPINNING DENGAN SERAT NANO POLIETILEN TEREFTALAT

Disusun untuk memenuhi Tugas Akhir A

Dosen Pembimbing: Prof. Yusril Yusuf, S.Si., M.Si., M.Eng., D.Eng.



Disusun oleh : Muhammad Kevin Alrahmanto (19/445592/PA/19416)

DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN
ALAM
UNIVERSITAS GADJAH MADA
2023

LEMBAR PENGESAHAN PROPOSAL TUGAS AKHIR

APLIKASI STATISTICAL LEARNING UNTUK MENENTUKAN HUBUNGAN PARAMETER ELECTROSPINNING DENGAN SERAT NANO POLIETILEN TEREFTALAT

Oleh:

Muhammad Kevin Alrahmanto (19/445592/PA/19416)

Disetujui dan disahkan oleh: Dosen Pembimbing

Prof. Yusril Yusuf, S.Si., M.Si., M.Eng., D.Eng. NIP. 19710920 199803 1 002

DAFTAR ISI

JUDUL	j
LEMBAR PENGESAHAN PROPOSAL TUGAS AKHIR	i
DAFTAR ISI	ii
BAB 1. PENDAHULUAN	4
1.1 Latar Belakang	Δ
1.2 Rumusan Masalah	7
1.3 Tujuan Penelitian	7
1.4 Manfaat Penelitian	7
1.5 Tinjauan Pustaka	7
1.5.1 Parameter <i>electrospinning</i>	8
1.5.2 Aplikasi Statistical Learning untuk electrospinning	
1.6 Metodologi Penelitian	10
BAB 2. DASAR TEORI	
2.1 Electrospinning	13
2.1.1 Aparatus electrospinning	13
2.1.2 Proses electrospinning	14
2.2 Komponen Larutan Polimer Polietilen Tereftalat	15
2.2.1 Polietilen Tereftalat	15
2.2.2 Asam Trifluoroasetat (TFA)	15
2.2.3 Diklorometana (DCM)	16
2.3 Regresi Linear dan Regresi Logistik	16
2.3.1 Regresi Linear	17
2.3.2 Diagnostik Regresi Linear	19
2.3.2 Regresi Logistik	20
2.3.4 Regularisasi untuk Model Regresi dengan Eskpansi Polinomial	21
BAB 3. JADWAL KEGIATAN	23
3.1 Jadwal Kegiatan	23
DAFTAR PUSTAKA	2.4

BABI

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Electrospinning (ES) adalah teknik yang dapat menghasilkan serat berskala nano dari larutan polimer dengan karakteristik yang menjanjikan, seperti rasio luas permukaan terhadap volume yang besar, struktur tiga dimensi yang berpori, dan sifat mekanik yang kuat (Xue et al. 2019). Karena karakteristik tersebut, ES telah dipilih oleh banyak peneliti untuk membuat membran yang digunakan dalam berbagai macam aplikasi, seperti filtrasi, biomedis, dan sensor (Haider et al. 2018 & Xue et al., 2019). Proses ES telah dibahas secara rinci dalam berbagai literatur. Secara singkat, proses ES terdiri atas larutan polimer yang disimpan dalam alat pompa yang terhubung ke elektroda jarum. Elektroda jarum dihubungkan dengan tegangan tinggi yang diletakkan pada jarak tertentu dengan elektroda kolektor. Tegangan tinggi menyebabkan aksi timbal balik antara gaya elektrostatik muatanmuatan pada larutan ES dengan gaya tegangan permukaan larutan ES. Hubungan timbal balik tersebut menyebabkan larutan ES membentuk struktur kerucut di ujung jarum yang disebut sebagai kerucut Taylor (Bhardwaj & Kundu, 2010). Kemudian, larutan tersebut terus mengalami pemanjangan hingga akhirnya sampai di elektroda kolektor. Selama pemanjangan tersebut, sebagian pelarut teruapkan sehingga akan dihasilkan serat dalam bentuk padatan.

Karakteristik serat nano seperti rata-rata diameter serat dan bentuk serat yang halus (tanpa struktur manik) merupakan hal yang penting dalam pengaplikasian membran serat nano (Lim *et al.*, 2008). Efek diameter serat nano dan kehalusan serat berkaitan erat dengan kristalinitas, kekuatan sifat mekanis, dan orientasi serat (Afshari & Ojhay, 2016). Beberapa sifat larutan polimer dan parameter proses dapat disesuaikan untuk mengontrol karakteristik serat nano. Parameter ini dapat dibagi menjadi tiga kelompok: parameter larutan polimer

(antara lain konsentrasi, konduktivitas, derajat polimerisasi, jenis pelarut, viskositas); parameter pemrosesan (antara lain nilai tegangan, laju aliran, jarak antara jarum dengan kolektor, bentuk elektroda kolektor); dan parameter lingkungan (antara lain suhu, kelembaban) (Li & Xia, 2004; Haider et al., 2018; Xue et al., 2019; Islam et al., 2019; Ibrahim & Klingner, 2020). Saling ketergantungan dari banyak parameter ES menyebabkan kesulitan dalam memahami hubungan parameter ES dengan serat nano yang dihasilkan. Oleh karena itu, diperlukannya suatu model untuk menjelaskan proses ES. Pendekatan secara teoritis (theorydriven) telah dilaporkan untuk memodelkan proses ES melalui simulasi komputer berdasarkan persamaan-persamaan fisika (Smółka et al., 2017; Guo et al., 2021). Selain itu, pendekatan secara statistik (data-driven) melalui algoritma pembelajaran data juga telah menarik banyak perhatian akhir-akhir ini. Model data-driven tidak menjelaskan persamaan fisika yang menghubungkan parameter ES dengan serat nano yang dihasilkan, melainkan menjelaskan pola data dan signifikansi hubungan antara variabel masukan (variabel bebas) berupa parameter ES dengan variabel keluaran (variabel terikat) berupa karakteristik serat yang dihasilkan.

Model data-driven dapat dilakukan dengan statistical learning. Statistical learning mengacu pada seperangkat alat untuk memahami kumpulan data. Statistical learning merupakan gabungan statistika dengan ilmu komputer, khususnya machine learning. Berbeda dengan kebanyakan algoritma machine learning, statistical learning tidak dipandang sebagai serangkaian mesin kotak hitam yang hanya berfokus pada hasil prediksi. Statistical learning lebih menekankan pada interpretabilitas model dan ketidakpastian hasil. Teknik statistical learning seperti regresi linear telah digunakan untuk memahami proses ES untuk berbagai macam polimer, seperti polisakarida (Kong & Ziegler, 2013), poli(stirena-co-akrilonitril) (Senthil & Anandhan, 2015), dan poli(laktat-co-glikolat) (Abdelhady et al., 2022). Regresi linear mudah diinterpretasi karena modelnya yang bersifat aditif, sehingga mudah untuk memisahkan efek variabel masukan. Regresi linear tidak hanya digunakan untuk model yang linear, tetapi juga

dapat diperluas untuk data yang tidak menunjukkan hubungan linear dengan menambahkan suku polinomial atau suku interaksi sebagai variabel masukan (Kuhn & Johnson, 2019). Teknik *statistical learning* lainnya seperti regresi logistik juga telah dilaporkan untuk memodelkan karakteristik serat nano (Zaman *et al.*, 2021). Secara sederhana, regresi logistik adalah regresi linier tetapi untuk masalah klasifikasi (Bruce *et al.*, 2020). Regresi logistik digunakan ketika variabel keluaran berupa data diskrit tetapi variabel masukan berupa data kontinu.

Pembuatan membran serat nano dengan ES dapat dilakukan untuk kebanyakan polimer sintetik (Esmaeili et al., 2017). Salah satu polimer sintetik yang digunakan sebagai larutan polimer untuk ES adalah polietilena tereftalat (PET). PET adalah polimer poliester dengan sifat tahanan kimia yang baik, yaitu tidak dapat terurai secara hayati dan sulit bereaksi dengan bahan organik. PET juga memiliki sifat mekanik yang unggul dan tahan terhadap berbagai macam kondisi cuaca. Tidak hanya itu, PET sebagai polimer termoplastik mudah didaur ulang. Sifat-sifat tersebut telah menjadikan PET sebagai bahan yang berpotensi untuk membentuk membran serat nano (Esmaeili et al., 2017). Pembuatan membran serat nano dengan bahan polimer PET telah diselidiki oleh banyak peneliti. Banyak dari penelitian menggunakan sistem dua pelarut asam trifluoroasetat (TFA) dan diklorometana (DCM) untuk melarutkan PET. Sistem dua pelarut TFA/DCM dipilih karena dapat melarutkan PET secara sempurna (Veleirinho et al., 2008). Rasio pelarut TFA/DCM yang digunakan sebagai larutan polimer PET memiliki nilai yang berbeda-beda di setiap hasil penelitian. Tidak hanya rasio TFA/DCM, ditemukan juga perbedaan parameter ES yang digunakan dalam banyak penelitian membran serat nano PET. Perbedaan parameter ES di setiap penelitian menyebabkan perbedaan hasil karakteristik serat nano. Oleh karena itu, menentukan hubungan parameter ES dengan hasil serat akhir tidak bisa disimpulkan berdasarkan satu penelitian saja. Untuk mendapatkan simpulan umum hubungan parameter ES dengan hasil serat akhir, maka perlu dilakukan statistical learning dengan menggunakan data yang diperoleh dari setiap hasil penelitian yang

ada. *Statistical learning* yang digunakan dalam penelitian ini adalah regresi linear dan regresi logistik. Regresi linear digunakan untuk menentukan hubungan parameter ES dengan diameter serat dan regresi logistik digunakan untuk menentukan hubungan parameter ES dengan probabilitas kualitas serat.

1.2 Rumusan Masalah

- 1. Bagaimana cara menggunakan *statistical learning* untuk mendapatkan simpulan umum hubungan parameter ES dengan karakteristik serat nano PET berdasarkan data penelitian yang dipublikasi?
- 2. Apa simpulan umum hubungan parameter ES dengan karakteristik serat nano PET berdasarkan data penelitian yang dipublikasi?

1.3 Tujuan Penelitian

- 1. Menggunakan *statistical learning* untuk mendapatkan simpulan umum hubungan parameter ES dengan karakteristik serat nano PET berdasarkan data penelitian yang dipublikasi.
- 2. Menentukan simpulan umum hubungan parameter ES dengan karakteristik serat nano PET berdasarkan data penelitian yang dipublikasi.

1.4 Manfaat Penelitian

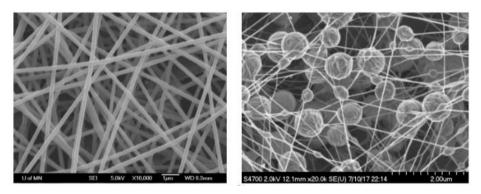
1. Hasil pemodelan *statistical learning* dapat dijadikan acuan untuk penelitian eksperimen ES yang menggunakan PET sebagai larutan polimer, sehingga proses *trial & error* dapat diminimalisir.

1.5 Tinjauan Pustaka

1.5.1 Parameter *Electospinning*

Teknik ES adalah teknik yang tidak sederhana, sejumlah parameter harus dirancang sedemikian rupa agar dihasilkan serat yang halus tanpa struktur manik (Gambar 1). Ada tiga parameter ES yang mempengaruhi kualitas serat nano: parameter larutan, parameter pemrosesan, dan parameter lingkungan. Ibrahim & Klingner (2020), Xue *et al.* (2019), Haider *et al.* (2018), dan Li & Xia (2004), telah mengulas parameter ES yang mempengaruhi kualitas serat yang diringkas

dalam tabel 1.1.



Gambar 1. Serat halus (kiri) dan serat dengan struktur manik (kanan) (Kim *et al.*, 2020).

 Tabel 1.1 Parameter electrospinning.

Parameter	Efek/pengamatan					
Parameter larutan						
Konsentrasi	Konsentrasi yang sangat rendah dapat membentuk struktur manik.					
	Diameter serat berbanding lurus dengan konsentrasi larutan.					
Berat molekul	Berat molekul yang besar menghasilkan serat yang lebih besar.					
	Lebih banyak pembentukan manik-manik pada berat molekul rendah.					
Konduktivitas	Serat yang lebih tipis terbentuk dengan meningkatnya konduktivitas.					
Viskositas	Diameter serat berbanding lurus dengan viskositas.					
Serat halus dihasilkan dengan pelarut yang volatil. Pembentukan jet lebih sulit terjadi untuk pelarut deng didih yang sangat rendah (sangat volatil).						

Tegangan	Tegangan permukaan yang rendah menghasilkan serat				
permukaan	yang halus dan seragam pada medan listrik yang rendah.				
	Parameter pemrosesan				
Tegangan yang diberikan	Umumnya diameter serat berkurang dengan meningkatnya tegangan yang diberikan.				
Jarak jarum dengan kolektor	Jarak yang terlalu jauh atau terlalu dekat akan menghasilkan struktur manik.				
Laju aliran	Laju aliran yang sangat tinggi menghasilkan struktur manik sedangkan laju aliran yang sangat rendah tidak dapat menghasilkan serat secara kontinyu. Laju aliran pada umumnya di bawah 1 mL/jam.				
Kolektor	Ketebalan membran serat yang lebih seragam dapat diperoleh dengan menggunakan drum berputar.				
	Parameter lingkungan				
Kelembaban	Kelembaban tinggi dapat meningkatkan porositas serat.				
	kelembaban tinggi menurunkan laju penguapan yang mengarah pada pembentukan struktur serat yang tidak seragam.				
Suhu	Peningkatan suhu menyebabkan penurunan diameter serat.				

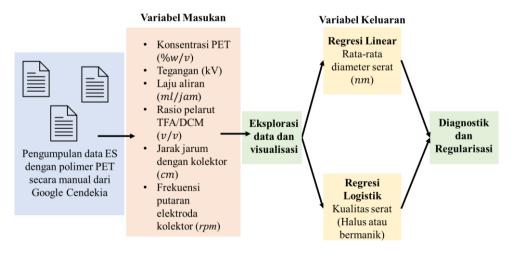
1.5.2 Aplikasi Statistical Learning untuk Electrospinning

Statistical learning memerlukan variabel masukan dan variabel keluaran untuk mempelajari data. Berikut di bawah ini adalah Tabel (1.2) yang menyajikan variabel masukan dan variabel keluaran yang telah dipilih oleh beberapa peneliti untuk mempelajari hubungan parameter ES dengan karakteristik serat nano.

Tabel 1.2. Variabel masukan dan variabel kelauran untuk electrospinning

Polimer	Variabel Masukan	Variabel Keluaran	Sumber	
poli(laktat-co- glikolat)	Konsentrasi, tegangan, jarak jarum dengan kolektor, sudut antara jarum dengan kolektor	Rata-rata diameter serat	Abdelhady <i>et al.</i> , 2022	
Campuran PET /Polivinilpirolidon	Konsentrasi, tegangan, jarak jarum dengan kolektor, berat molekul, dan laju aliran		Salehi Shahrabi <i>et al.</i> , 2018	
Polisakarida	Konsentrasi, tegangan, jarak jarum dengan kolektor, dan laju aliran	Rata-rata diameter serat	Kong & Ziegler, 2013	
poli(stirena-co- akrilonitril)			Senthil & Anandhan, 2015	
Konsentrasi, tegangan, Asam Polilaktat laju aliran, dan kelembaban		Rata-rata diameter serat	Patra et al., 2010	

1.6 Metodologi Penelitian



Gambar 2. Alur metodologi penelitian.

Diagram metodologi penelitian ditampilkan pada Gambar 2. Tahap pertama penelitian adalah pengumpulan data. Data yang digunakan dalam penelitian diambil secara manual dari berbagai literatur yang tersedia di Google Cendekia. Literatur dipilih secara terbatas untuk penelitian ES yang menggunakan PET sebagai larutan polimer. Apabila ditemukan literatur yang menggunakan PET sebagai bahan komposit atau campuran polimer, maka data yang dipilih adalah data yang hanya menggunakan PET sebagai larutan polimer.

Nilai parameter ES dan karakteristik serat yang tertera pada literatur diambil dari teks, tabel, atau gambar kemudian dikumpulkan dalam bentuk tabel di Excel. Tidak semua data digunakan untuk analisis *statistical learning* karena ditemukan perbedaan satuan konsentrasi PET dalam larutan polimer. Dipilih data yang hanya menggunakan satuan konsentrasi PET dalam %w/v karena jumlahnya yang lebih banyak dibandingkan dengan data yang menggunakan satuan konsentrasi PET dalam %w/w. Data dengan satuan konsentrasi %w/w yang ditemukan pada beberapa literatur tidak bisa digunakan karena memerlukan data massa jenis larutan untuk dikonversi ke satuan %w/v.

Setelah penyeleksian data, dipilih enam variabel masukan dan dua variabel keluaran. Variabel masukan yang digunakan terdiri atas C untuk konsentrasi PET (%w/v), V untuk tegangan (kV), F untuk laju aliran (ml/jam), R untuk rasio pelarut TFA/DCM (v/v), L untuk jarak jarum dengan kolektor (cm), dan ω untuk frekuensi putaran elektroda kolektor (rpm). Variabel keluaran yang dipilih adalah D untuk diameter serat nano (nm) dan Q untuk kualitas serat (bermanik atau halus). Selanjutnya, kumpulan data yang diambil dari berbagai macam literatur dipastikan memiliki satuan yang sama dengan satuan yang telah ditetapkan untuk setiap variabel masukan dan variabel keluaran.

Setelah data disiapkan, dilakukan pengembangan skrip Python di Jupyter Notebook untuk dua tahapan pembelajaran data, yaitu tahap eksplorasi data dan tahap *statsitical learning*. Digunakan *library* Pandas, MatPlotLib, dan Seaborn untuk eksplorasi data yang mencakup statistika deskriptif sederhana, seperti ukuran

pemusatan data (rata-rata, median), ukuran penyebaran data (simpangan baku, persentil), dan visualisasi data.

Setelah data dieksplorasi, skala data ditransformasi terlebih dahulu sebelum dilakukan analisis *statistical learning*. Data ditransformasi dengan metode standarisasi yang mengubah skala data menjadi nilai yang memiliki rata rata = 0 dan simpangan baku = 1. Prosedur transformasi data dilakukan untuk memetakan semua data ke skala yang sama sehingga model *statsitical learning* dapat mendeteksi hubungan antar variabel secara adil (Wang *et al.*, 2020). Setelah data ditransformasi, diimplementasikan dua teknik *Statistical learning*, yaitu regresi linear dan regresi logistik, dengan menggunakan *library* Scikit-Learn dan Statsmodels. Hasil dari model regresi linear dan regresi logistik selanjutnya didiagnosis untuk memastikan keakuratan model. Selanjutnya, dilakukan regresi lanjutan dengan regularisasi Ridge dan Lasso untuk model regresi dengan ekspansi polinomial dan penambahan suku interaksi. Akhirnya, hasil pemodelan regresi, diagnostik, dan regularisasi akan dibandingkan dengan referensi.

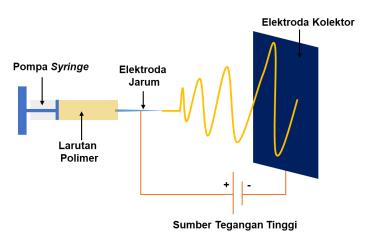
BAB II DASAR TEORI

2.1 Electrospinning

Salah satu teknologi untuk menghasilkan serat nano adalah ES. ES dapat menghasilkan serat dengan diameter mulai dari skala μm hingga nm. Istilah 'electrospinning' merupakan gabungan dari istilah 'electrostratic' dan 'spinning'. Istilah 'electrostratic' merujuk pada gaya elektrostatik yang terjadi pada muatanmuatan larutan ES ketika dikenakan medan listrik. Istilah 'spinning' merujuk pada pemintalan larutan menjadi struktur serat akibat sifat viskoelastiknya.

2.1.1 Aparatus Electrospinning

Aparatus ES secara umum terdiri atas tiga komponen utama: sumber tegangan tinggi, pompa *syringe*, dan kolektor. Ilustrasi aparatus ES ditunjukkan pada Gambar 3.



Gambar 3. Aparatus *Electrospinning*.

Seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2, salah satu elektroda (elektroda negatif) sumber tegangan tinggi dipasang ke kolektor sementara elektroda lainnya (elektroda positif) terhubung ke jarum di pompa *syringe* yang berisikan larutan ES. Sumber tegangan tinggi ini biasanya menghasilkan tegangan antara 1-30 kV. Secara umum, tegangan yang sering digunakan adalah tegangan DC.

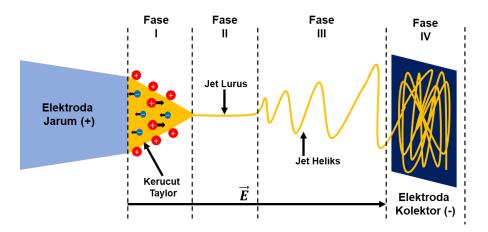
Pompa *syringe* merupakan tempat untuk menampung larutan ES (biasanya larutan polimer) yang di dalamnya terpasang jarum elektroda. Pompa *syringe* dapat

diposisikan secara vertikal maupun horizontal terhadap arah medan gravitasi bumi.

Elektroda kolektor digunakan untuk menampung serat. Elektroda kolektor terbuat dari logam dan biasanya dilapisi aluminium *foil* untuk memudahkan pengambilan serat. Elektroda kolektor yang sering digunakan adalah elektroda statis dengan permukaannya yang datar. Untuk produksi serat tertentu (misalnya serat sejajar), kolektor dinamis drum putar digunakan sebagai pengganti elektroda statis.

2.1.2 Proses Electrospinning

Proses ES terdiri atas empat fase: fase pertama adalah pembentukan kerucut Taylor, fase kedua adalah pembentukan jet lurus, fase ketiga adalah pembentukan jet heliks, dan fase terakhir adalah pengumpulan serat nano dalam wujud padatan. Ditampilkan Gambar 4 di bawah ini untuk skema pembentukan serat nano dengan metode ES.



Gambar 4. Proses ES untuk menghasilkan serat nano.

Fase pertama terjadi ketika larutan ES diterapkan sumber tegangan tinggi. Tetesan larutan di ujung elektroda jarum yang tertahan oleh gaya tegangan permukaan mendapat gaya tolakan akibat gaya elektrostatik. Gaya elektrostatik ini menyebabkan akumulasi muatan di ujung tetes larutan yang melawan gaya tegangan permukaan. Akumulasi muatan tadi terus berlanjut sehingga menyebabkan perubahan bentuk tetesan di ujung jarum yang semula berbentuk setengah bola menjadi berbentuk kerucut (kerucut Taylor). Seiring berlanjutnya waktu, tegangan permukaan larutan tidak bisa menahan lebih lama lagi tolakan dari gaya elektrostatik. Hal itu menyebabkan pembentukan jet (larutan polimer

bermuatan) yang terpental dari ujung kerucut Taylor. Jet mula-mula mempertahankan stabilitasnya hingga beberapa sentimeter (Fase II). Kemudian, Jet terus mengalami tarikan ke arah kolektor karena gaya dari medan listrik eksternal. Hal itu mengakibatkan penipisan jet di udara karena peregangan dan penguapan pelarut. Ketika diameter jet menjadi semakin kecil, jet menjadi tidak stabil dan memutar seperti struktur heliks (Fase III) (Haider *et al.*,2018). Jet yang tidak stabil menyebabkan jet tunggal terbagi menjadi banyak jet kecil sebelum mencapai kolektor. Jet-jet kecil menghasilkan serat sangat tipis yang terdistribusi secara acak di kolektor (Fase IV).

2.2 Komponen Larutan Polimer Polietilen Tereftalat

2.2.1 Polietilen tereftalat

Polietilen tereftalat (PET) merupakan polimer termoplastik dari kelompok poliester. PET disintesis dari etilen glikol dan asam tereftalat. PET memiliki suhu transisi gelas 70°C dan titik leleh 255°C (Jog, 1995). Gambar 5 menunjukkan struktur kimia dari PET. PET memiliki struktur rantai yang besar yang disebabkan oleh gugus fenil. Gugus fenil pada PET menghambat rotasi monomer dan menyebabkan kekakuan rantai yang tinggi. Selain itu, keberadaan gugus fungsional polar meningkatkan gaya van der Waals antar monomer yang meningkatkan sifat kekakuan bahan. Kemudian, gugus etilen pendek (-CH₂-CH₂-) dalam molekul PET mengurangi sifat fleksibilitas bahan (Coleman & Painter, 1998).

$$\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O - (CH_2)_2 \end{array}$$

Gambar 5. Struktur kimia monomer PET (-O-CO-C₆H₄-CO-O-CH₂-CH₂)_n

2.2.2 Asam Trifluoroasetat (TFA)

Asam Trifluoroasetat (TFA) adalah senyawa organofluorin (mengandung ikatan karbon-fluorin) dengan rumus kimia C₂HF₃O₂ (Gambar 6). TFA adalah senyawa asam yang kuat karena adanya tiga atom fluor yang sangat elektronegatif. Asam trifluoroasetat (TFA) adalah asam organik kuat yang biasanya digunakan sebagai pelarut (Siegemund *et al.*, 2000). Dibandingkan dengan air sebagai pelarut, asam trifluoroasetat memiliki kelarutan yang lebih baik untuk senyawa organik.

Gambar 6. Struktur kimia TFA (C₂HF₃O₂)

2.2.3 Diklorometana (DCM)

Diklorometana (DCM) atau yang biasa disebut sebagai metilena klorida adalah hidrokarbon terklorinasi cair yang mudah menguap (sangat volatil). Rumus kimia DCM adalah CH₂Cl₂ (Gambar 7). DCM memiliki kelarutan yang tinggi, titik didih yang rendah, dan toksisitas yang relatif rendah menjadikannya pelarut yang paling sering digunakan dalam sintesis organik (Marcus, 1998).

Gambar 7. Struktur kimia DCM (CH₂Cl₂).

2.3 Regresi Linear dan Regresi Logistik

Regresi linear dan regresi logistik memerlukan variabel masukan dan variabel keluaran. Dalam subbab ini akan disampaikan sekilas konsep regresi linear dan regresi logistik yang dirangkum dari Hastie *et al.* (2009) dan Suzuki (2021).

Digunakan notasi matematika untuk merepresentasikan data. Misalkan n adalah jumlah observasi data dan p adalah jumlah variabel masukan. Titik data x_{ij} adalah nilai untuk observasi ke-i dan variabel masukan ke-p, dengan i=1,2,...,n dan j=1,2,...,p. Ditulis \mathbf{X} sebagai matriks $n\times(p+1)$ dengan elemen x_{ij} dan kolom tambahan yang semua elemennya bernilai 1 (kolom tambahan digunakan untuk regresi sebagai parameter intersep), maka

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ 1 & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nn} \end{bmatrix}. \tag{1}$$

Selanjutnya, ditulis $x_1, x_2, ..., x_n$ dengan setiap $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{ip})^T$ adalah

vektor dengan panjang p dan $\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}, ..., \mathbf{x_p}$ dengan setiap $\mathbf{x_j} = (x_{1j}, x_{2j}, ..., x_{nj})^T$ adalah vektor dengan panjang n. Kemudian, ditulis $\mathbf{y} = (y_1, y_2, ..., y_n)$ sebagai vektor dengan elemen y_i yang merupakan nilai observasi variabel keluaran. Maka dapat dinyatakan bahwa data terdiri dari $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n)\}$.

2.3.1 Regresi Linear

Misalkan $X = (X_1, X_2, ..., X_p)^T$ adalah vektor variabel masukan untuk menentukan variabel keluaran Y. Suatu model yang mengasumsikan adanya hubungan linear antara X dan Y dapat ditulis sebagai

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j \tag{2}$$

dengan β_0 adalah intersep atau konstanta dan β_j adalah parameter atau koefisien. Nilai koefisien $\beta = (\beta_0, \beta_1, ..., \beta_J)^T$ dapat diestimasi berdasarkan observasi data dengan meminimalkan jumlah sisa kuadrat (RSS). RSS mengukur jumlah galat yang tersisa antara data sebenarnya dan data yang diestimasi oleh model. RSS ditulis sebagai

$$RSS(\beta) = (y - X\beta)^{T}(y - X\beta).$$
(3)

Nilai estimasi β (ditulis $\hat{\beta}$) yang meminimalkan persamaan di atas adalah

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \tag{4}$$

Model linear diasumsikan memiliki galat acak ε. Galat acak disebabkan karena model tidak bisa menjelaskan semua observasi data secara sempurna. Model linear bisa saja mengandung kesalahan pengukuran data atau hubungan antar variabel yang tidak diketahui. Maka model regresi linear dapat ditulis sebagai

$$y = X\beta + \varepsilon, \tag{5}$$

dengan setiap elemen $\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..., \varepsilon_n$ di vektor ε adalah saling bebas dan mengikuti distribusi Gaussian dengan rata-rata nol dan varians σ^2 . Itu artinya, γ yang diperoleh dari hasil perkalian γ dengan koefisien γ lalu ditambah γ berfluktuasi karena galat acak. Untuk kebanyakan kasus, nilai γ tidak diketahui, tetapi dapat diestimasi dengan

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{RSS}{(n-p-1)}}.$$
(6)

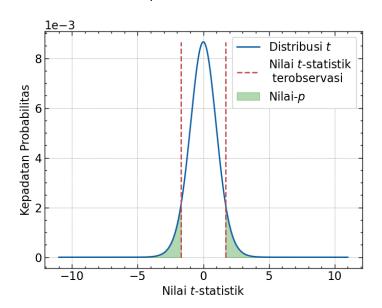
Selanjutnya, nilai $\hat{\sigma}$ dapat digunakan untuk menghitung selang kepercayaan $\hat{\beta}$ yang ditentukan sebagai

$$\hat{\beta}_k \pm t_{\alpha/2}^{n-p-1} \hat{\sigma} \sqrt{C_{k+1,k+1}},\tag{7}$$

untuk k=0,1,...,p dengan $t_{\alpha/2}^{n-p-1}$ adalah nilai t-statistik yang memiliki n-p-1 derajat kebebasan dan $\alpha\%$ tingkat signifikansi, dan $C_{k+1,k+1}$ adalah elemen diagonal ke-k+1 matriks $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$.

Untuk menguji signifikansi hubungan antara setiap parameter $\hat{\beta}_k$ dengan variabel keluaran, maka dapat dilakukan uji nilai-p terhadap nilai t-statistik. Nilai-p di sini adalah probabilitas untuk memperoleh nilai yang sama atau lebih besar dari nilai t-statistik terobservasi. Nilai-p dihitung dengan mengintegrasikan distribusi-t dengan n-p-1 derajat kebebasan dari $-\infty$ sampai -|t| dan |t| sampai ∞ (Gambar 8). Nilai |t| untuk uji nilai-p dihitung sebagai

$$|t| = \frac{\hat{\beta}_k - 0}{\hat{\sigma}_{\sqrt{C_{k+1}}}}.$$
(8)



Gambar 8. Visualiasi nilai-p dari distribusi-t.

Nilai-p menguji probabilitas setiap parameter $\hat{\beta}_k$ bernilai nol. Semakin kecil nilai-

p, maka semakin kecil probabilitas mendapatkan suatu model dengan parameter $\hat{\beta}_k$ yang bernilai nol. Oleh karena itu, nilai-p yang kecil adalah petunjuk yang mengindikasikan adanya hubungan antara $\hat{\beta}_k$ dan variabel keluaran.

2.3.2 Diagnostik Regresi Linear

Diagnostik suatu model adalah bagian yang penting dalam proses pemodelan data. Diagnostik untuk model regresi linear digunakan untuk menilai model terhadap asumsinya dan menyelidiki setiap observasi yang tidak terwakili oleh model. Diagnostik ini mencakup berbagai macam penilaian secara grafis dan numerik yang dirangkum sebagai berikut:

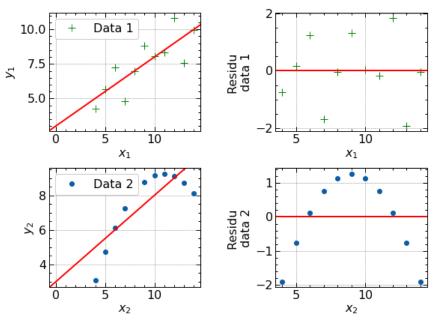
1. R^2

 R^2 menunjukkan persentase varians dalam variabel keluaran Y yang dijelaskan oleh model dengan variabel masukan X_j . Untuk kumpulan data yang sama, nilai R^2 yang lebih tinggi menunjukkan selisih yang lebih kecil antara data sebenarnya dan data yang diestimasi oleh model. R^2 adalah diagnostik secara numerik yang dihitung sebagai

$$R^{2} = 1 - \frac{RSS}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \bar{y})^{2}}.$$
(9)

2. Plot residu

 R^2 adalah penilaian numerik yang tampak sederhana untuk mengukur kesesuaian model regresi dengan kumpulan data sebenarnya. Namun, R^2 tidak menceritakan keseluruhan asumsi model regresi linear. Untuk mendapatkan gambaran lengkapnya, perlu digunakan plot residu. Plot residu adalah penilaian grafis yang berguna untuk mengidentifikasi hubungan yang tidak linear pada model regresi. Untuk regresi linier, plot residu terdiri dari grafik residual $\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ vs x_i . Model yang linear adalah model yang memiliki pola residual di sekitar 0 seperti pada Gambar 9 (atas). Plot residual juga dapat memeriksa varians residual yang tidak konstan (heteroskedastisitas).



Gambar 9. Plot residu.

3. Outlier dan leverage tinggi

Leverage tinggi adalah observasi x_i yang tidak biasa. Data yang memiliki leverage tinggi dapat mengubah model regresi. Nilai leverage (h_i) untuk setiap data adalah H_{ii} yang merupakan elemen diagonal ke-i matriks $\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})\mathbf{X}^T$. Selanjutnya, nilai h_i dapat digunakan untuk menghitung studentized residual (t_i)

$$t_i = \frac{\varepsilon_i}{\hat{\sigma}\sqrt{1 - h_i}}. (10)$$

Jika x_i memiliki nilai $|t_i|$ yang lebih besar dari 3, maka dapat disebut sebagai outlier. Outlier dan leverage dapat dilihat lebih lanjut dengan menghitung jarak Cook (D_i)

$$D_i = \frac{\varepsilon_i^2 (n-p)}{p \cdot RSS} \left[\frac{h_i}{(1-h_i)^2} \right]. \tag{11}$$

Jarak Cook pada dasarnya mengukur seberapa besar perubahan nilai y ketika x_i dihilangkan. Setiap x_i dengan jarak Cook yang besar perlu diperiksa lebih lanjut.

2.3.3 Regresi Logistik

Regresi logistik memodelkan probabilitas Y berdasarkan X. Untuk

memastikan probabilitas tetap di [0, 1], regresi logistik menggunakan fungsi logistik

$$f(x) = \frac{e^x}{1 + e^x}. (12)$$

Estimasi probabilitas $\hat{p}(X)$ berdasarka fungsi logistik adalah

$$\hat{p}(X) = \frac{e^{\beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j}}.$$
(13)

Diubah persamaan di atas melalui serangkaian operasi matematik sehingga didapatkan persamaan yang linear sebagai

$$\log\left(\frac{\hat{p}(X)}{1-\hat{p}(X)}\right) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j. \tag{13}$$

Ruas kiri persamaan di atas dikenal sebagai Logit. Koefisien estimasi $\hat{\beta}$ dihitung dengan metode kemungkinan maksimum yang tujuannya menemukan nilai β yang memaksimalkan fungsi kemungkinan (l). Fungsi kemungkinan untuk regresi logistik adalah

$$l(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \{ y_i \beta^T x'_i - \log \left(1 + e^{\beta^T x'_i} \right) \}, \tag{14}$$

dengan vektor x_i' mengandung suku konstan 1 untuk pengali β_0 .

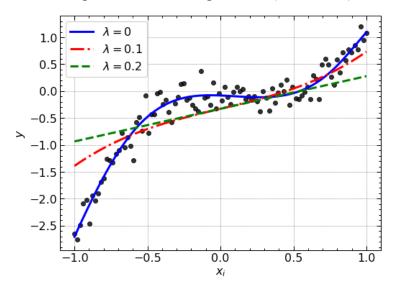
Selanjutnya, z-statistik digunakan untuk menguji signifikansi hubungan antara setiap parameter $\hat{\beta}_k$ untuk k=0,1,...,p dengan variabel keluaran dalam bentuk Logit. Nilai z-statistik mengukur probabilitas setiap parameter $\hat{\beta}_k=0$. Mirip dengan t-statistik, z-statistik juga dapat digunakan untuk menentukan nilai-p, yang pada akhirnya dapat menentukan apakah $\hat{\beta}_k$ bernilai nol atau tidak.

2.3.4 Regularisasi untuk Model Regresi dengan Ekspansi Polinomial

Model regresi linear umum pada persamaan (2) dengan variabel masukan $X = (X_1, X_2, ..., X_p)^T$ diasumsikan memiliki hubungan yang linear. Namun dalam beberapa kasus, hubungan variabel masukan dan variabel keluaran adalah tidak linear. Dalam hal ini X dapat diekspansikan menjadi bentuk yang tak linear dengan

ekspansi polinomial (misalnya: $X_2 = {X_1}^2$) atau menambahkan variabel interaksi (misalnya: $X_3 = X_1 X_2$). Ekspansi polinomial dapat digunakan baik untuk model regresi linier maupun regresi logistik. Ekspansi polinomial memungkinkan model menangkap hubungan yang lebih kompleks antara variabel masukan dan variabel keluaran. Namun, menambahkan terlalu banyak variabel polinomial dapat menyebabkan *overfitting*, terutama ketika derajat polinomialnya terlalu tinggi. *Overfitting* terjadi ketika model terlalu kompleks dan menangkap *noise* dalam data, sehingga model tidak dapat menggeneralisasi hubungan yang sebenarnya. Untuk mengatasi masalah ini, teknik regularisasi dapat digunakan untuk membatasi kompleksitas model dan mencegah *overfitting*. Regresi Ridge dan regresi Lasso adalah dua teknik regularisasi populer yang dapat diterapkan.

Model regresi Ridge dan regresi Lasso menambahkan suku penalti ke fungsi RSS(β) untuk model regresi linear dan $l(\beta)$ untuk model regresi logistik. Regresi Ridge adalah regresi dengan suku penalti $\lambda \beta^T \beta$ yang dapat menyusutkan koefisien menuju nol, tetapi tidak memaksanya menjadi nol. Regresi Ridge memiliki efek mengurangi besarnya koefisien dan menyederhanakan model. Sementara itu, Regresi Lasso menambahkan suku penalti $\lambda |\beta|$ yang tidak hanya mengecilkan koefisien menuju nol, tetapi juga memaksa beberapa koefisien menjadi nol. Regresi Lasso memiliki efek menghilangkan sepenuhnya beberapa variabel dari model dan melakukan penyeleksian variabel. Nilai λ pada suku penalti adalah parameter yang dapat diatur untuk mengontrol kekuatan regularisasi (Gambar 10).



Gambar 10. Variasi nilai λ untuk regularisasi regresi Lasso.

BAB IIIIII JADWAL KEGIATAN

3.1 Jadwal Kegiatan

Tabel 3.1. Jadwal kegiatan

No	Jenis Kegiatan	Bulan							
		1			2				
		1	2	3	4	1	2	3	4
1	Pengumpulan data (Proses pengumpulan data dapat dilihat di tautan berikut: Data PET)								
2	Pengembangan skrip Python menggunakan library yang telah ditentukan								
3	Analisis hasil statistical learning (Hasil sementara dapat dilihat di tautan berikut: Hasil Sementara)								
4	Penulisan naskah								

DAFTAR PUSTAKA

- Abbasi, A., & Shakeri, A. (2018). Effect of the flame-retardant 3-hydroxyphenylphosphinyl-propanoic acid on the mechanical, thermal, and flammability properties of poly(ethylene terephthalate) nanofiber mats. *High Performance Polymers*, 31(8), 919–927. https://doi.org/10.1177/0954008318805530
- Afshari, M., & Ojha, S. (2016). *Electrospun Nanofibers (Woodhead Publishing Series in Textiles)* (1st ed.). Woodhead Publishing.
- Bruce, P., Bruce, A., & Gedeck, P. (2020). *Practical Statistics for Data Scientists:* 50+ Essential Concepts Using R and Python (2nd ed.). O'Reilly Media.
- Coleman, M. M., & Painter, P. C. (1998). Fundamentals of Polymer Science: An Introductory Text, Second Edition. CRC Press.
- Guo, Y., Wang, X., Shen, Y., Dong, K., Shen, L., & Alzalab, A. a. A. (2021). Research progress, models and simulation of electrospinning technology: a review. *Journal of Materials Science*, *57*(1), 58–104. https://doi.org/10.1007/s10853-021-06575-w
- Hadjizadeh, A., Ajji, A., & Bureau, M. N. (2011). Nano/micro electro-spun polyethylene terephthalate fibrous mat preparation and characterization. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, *4*(3), 340–351. https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2010.10.014
- Haider, A., Haider, S., & Kang, I. K. (2018). A comprehensive review summarizing the effect of electrospinning parameters and potential applications of nanofibers in biomedical and biotechnology. *Arabian Journal of Chemistry*, 11(8), 1165–1188. https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2015.11.015
- Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction, Second Edition*. Springer Science & Business Media.
- Ibrahim, H. M., & Klingner, A. (2020). A review on electrospun polymeric nanofibers: Production parameters and potential applications. *Polymer Testing*, *90*, 106647. https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2020.106647
- Jalali, S., Montazer, M., & Mahmoudi Rad, M. (2021). Biologically active PET/polysaccharide-based nanofibers post-treated with selenium/Tragacanth Gum nanobiocomposites. *Carbohydrate Polymers*, 251, 117125. https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.117125
- Jalali, S., Montazer, M., & Malek, R. M. A. (2018). A Novel Semi-bionanofibers through Introducing Tragacanth Gum into PET Attaining Rapid Wetting and Degradation. *Fibers and Polymers*, *19*(10), 2088–2096. https://doi.org/10.1007/s12221-018-8276-y
- Javazmi, L., Ravandi, S. a. H., & Ghareaghaji, A. A. (2014). Fabrication and characterization of PET nanofiber hollow yarn. *Fibers and Polymers*, *15*(5), 954–960. https://doi.org/10.1007/s12221-014-0954-9
- Jog, J. P. (1995). Crystallization of Polyethyleneterephthalate. *Journal of Macromolecular Science*, *Part A*, *35*(3), 531–553. https://doi.org/10.1080/15321799508014598

- Kayaci, F., Aytac, Z., & Uyar, T. (2013). Surface modification of electrospun polyester nanofibers with cyclodextrin polymer for the removal of phenanthrene from aqueous solution. *Journal of Hazardous Materials*, 261, 286–294. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2013.07.041
- Kayaci, F., & Uyar, T. (2014). Electrospun polyester/cyclodextrin nanofibers for entrapment of volatile organic compounds. *Polymer Engineering &Amp; Science*, *54*(12), 2970–2978. https://doi.org/10.1002/pen.23858
- Khorram, M., Mousavi, A., & Mehranbod, N. (2017). Chromium removal using adsorptive membranes composed of electrospun plasma-treated functionalized polyethylene terephthalate (PET) with chitosan. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 5(3), 2366–2377. https://doi.org/10.1016/j.jece.2017.04.010
- Kim, S. C., Kang, S., Lee, H., Kwak, D. B., Ou, Q., Pei, C., & Pui, D. Y. (2020). Nanofiber Filter Performance Improvement: Nanofiber Layer Uniformity and Branched Nanofiber. *Aerosol and Air Quality Research*, 20(1), 80–88. https://doi.org/10.4209/aaqr.2019.07.0343
- Kong, L., & Ziegler, G. R. (2013). Quantitative relationship between electrospinning parameters and starch fiber diameter. *Carbohydrate Polymers*, 92(2), 1416–1422. https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2012.09.026
- Kuhn, M., & Johnson, K. (2019). Feature Engineering and Selection: A Practical Approach for Predictive Models (Chapman & Hall/CRC Data Science Series) (1st ed.). Chapman and Hall/CRC.
- Li, D., & Xia, Y. (2004). Electrospinning of Nanofibers: Reinventing the Wheel? *Advanced Materials*, 16(14), 1151–1170. https://doi.org/10.1002/adma.200400719
- Lim, C., Jankovic, J., & Ng, S. Y. (2008). Effects of crystalline morphology on the tensile properties of electrospun polymer nanofibers. *Applied Physics Letters*, 92(14), 141908. https://doi.org/10.1063/1.2857478
- Lin, Y., Gaebler, J., Reiter, F., Tan, T. R., Bowler, R. P., Sørensen, A. S., Leibfried, D., & Wineland, D. J. (2013). Dissipative production of a maximally entangled steady state of two quantum bits. *Nature*, *504*(7480), 415–418. https://doi.org/10.1038/nature12801
- Mahdavi, H., & Moslehi, M. (2016). A new thin film composite nanofiltration membrane based on PET nanofiber support and polyamide top layer: preparation and characterization. *Journal of Polymer Research*, 23(12). https://doi.org/10.1007/s10965-016-1157-4
- Marcus, Y. (1998). The Properties of Solvents. John Wiley & Sons.
- Patra, S. N., Lin, R. J. T., & Bhattacharyya, D. (2010). Regression analysis of manufacturing electrospun nonwoven nanotextiles. *Journal of Materials Science*, 45(14), 3938–3946. https://doi.org/10.1007/s10853-010-4459-7
- Pérez, C. F., Paredes, J. G., Valencia, R. X., Vaca, W. H., & Vásquez, E. P. (2018). Logistic regression model for the grooving process of hybrid polyester resin composite materials reinforced with natural fibers and fiberglass. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 446, 012003. https://doi.org/10.1088/1757-899x/446/1/012003
- Salehi Shahrabi, S., Barzin, J., & Shokrollahi, P. (2018). Statistical approach to estimate fiber diameter of PET/PVP blend electrospun using Taguchi

- method and fitting regression model. *Materials Research Express*, 6(2), 025306. https://doi.org/10.1088/2053-1591/aaeaf6
- Siegemund, G., Schwertfeger, W. D., Feiring, A. E., Smart, B. E., Behr, F. E., Vogel, H., & McKusick, B. C. (2000). Fluorine Compounds, Organic. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. https://doi.org/10.1002/14356007.a11_349
- Smółka, K., Firych-Nowacka, A., & Lefik, M. (2017). Three-dimensional computer models of electrospinning systems. *Open Physics*, *15*(1), 777–789. https://doi.org/10.1515/phys-2017-0091
- Suzuki, J. (2021). Statistical Learning with Math and Python: 100 Exercises for Building Logic. Springer Nature.
- Topuz, F., Oldal, D. G., & Szekely, G. (2022). Valorization of Polyethylene Terephthalate (PET) Plastic Wastes as Nanofibrous Membranes for Oil Removal: Sustainable Solution for Plastic Waste and Oil Pollution. *Industrial &Amp; Engineering Chemistry Research*, 61(25), 9077–9086. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c01431
- Veleirinho, B., Rei, M. F., & Lopes-DA-Silva, J. A. (2008). Solvent and concentration effects on the properties of electrospun poly(ethylene terephthalate) nanofiber mats. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 46(5), 460–471. https://doi.org/10.1002/polb.21380
- Wang, A. C., Murdock, R. J., Kauwe, S. K., Oliynyk, A. O., Gurlo, A., Brgoch, J., Persson, K. A., & Sparks, T. D. (2020). Machine Learning for Materials Scientists: An Introductory Guide Towards Best Practices. *ChemRxiv*. https://doi.org/10.26434/chemrxiv.12249752.v1
- Xue, J., Wu, T., Dai, Y., & Xia, Y. (2019). Electrospinning and Electrospun Nanofibers: Methods, Materials, and Applications. *Chemical Reviews*, 119(8), 5298–5415. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00593
- Zaman, M. H., Sooriyaarachchi, D., Zhou, Y., Tan, G. Z., & Du, D. (2021). Modeling the density gradient of 3D nanofiber scaffolds fabricated by divergence electrospinning. *Advances in Manufacturing*. https://doi.org/10.1007/s40436-020-00307-0
- Zou, N., Zhang, C., Wang, Y., & Zhang, L. (2021). Recognition and Diagnosis Method of Accelerated Aging of Lithium-Ion Battery Based on Logistic Regression. World Electric Vehicle Journal, 12(3), 143. https://doi.org/10.3390/wevj12030143