

Utilization of Machine Learning for Predicting Corrosion Inhibition by Quinoxaline Compounds

Muhamad Fadil^{1*}, Muhamad Akrom^{2**}, Wise Herowati^{3**}

* Program Studi Teknik Informatika, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang, Indonesia

** Research Center for Quantum Computing and Materials Informatics, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang, Indonesia

111202012733@mhs.dinus.ac.id¹, m.akrom@dsn.dinus.ac.id², wise@dsn.dinus.ac.id³

Article Info

Article history:

Received 2024-11-14

Revised 2024-11-25

Accepted 2024-12-04

Keyword:

Corrosion,
Inhibitor;
Machine Learning,
Quinoxaline.

ABSTRACT

Corrosion is a significant issue in both industrial and academic sectors, with widespread negative impacts on various aspects, including economics and safety. To address this problem, the use of corrosion inhibitors has proven effective. This study explores the application of Machine Learning (ML) methods based on Quantitative Structure-Properties Relationship (QSPR) to develop a predictive model for the efficiency of quinoxaline compounds as corrosion inhibitors. By conducting a comparative analysis among three algorithms: AdaBoost Regressor (ADB), Gradient Boosting Regressor (GBR), and Extreme Gradient Boosting Regressor (XGBR), and optimizing parameters through hyperparameter tuning using Grid Search and Random Search, this research demonstrates that the XGBR model yields the most superior prediction results. The XGBR optimized with hyperparameter tuning using Grid Search achieved the highest R^2 value of 0.970 and showed the lowest RMSE, MSE, MAD, and MAPE values of 0.368, 0.135, 0.119, and 0.273, respectively, indicating high predictive accuracy. These results are expected to contribute to the development of more effective methods for identifying corrosion inhibitor candidates.



This is an open access article under the [CC-BY-SA](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) license.

I. PENDAHULUAN

Korosi merupakan masalah serius bagi sektor industri dan akademik karena mempunyai dampak negatif yang signifikan pada banyak bidang seperti ekonomi, lingkungan, masyarakat, industri, dan keselamatan [1], [2], [3]. Salah satu cara untuk menghambat laju korosi adalah dengan menggunakan bahan penghambat korosi (inhibitor) [4]. Inhibitor adalah senyawa kimia yang ketika ditambahkan dalam jumlah kecil ke lingkungan korosif (elektrolit), dapat menghambat proses korosi [5]. Studi eksperimental untuk mengevaluasi banyak kandidat bahan kimia sebagai penghambat korosi memerlukan investasi uang, waktu, dan sumber daya yang signifikan [6], [7], [8]. Belakangan ini, metode *Machine Learning* (ML) berbasis *Quantitative Structure-Properties Relationship* (QSPR) menjadi pendekatan yang efektif dan efisien dalam pengembangan serta pencarian kandidat inhibitor korosi. [9], [10]. Karena sifat elektronik dan reaktivitas kimiawi suatu senyawa dapat

dikaitkan secara kuantitatif dengan struktur kimianya, metode QSPR berbasis ML ini dapat digunakan lebih lanjut untuk menyelidiki berbagai kandidat senyawa inhibitor [11], [12], [13].

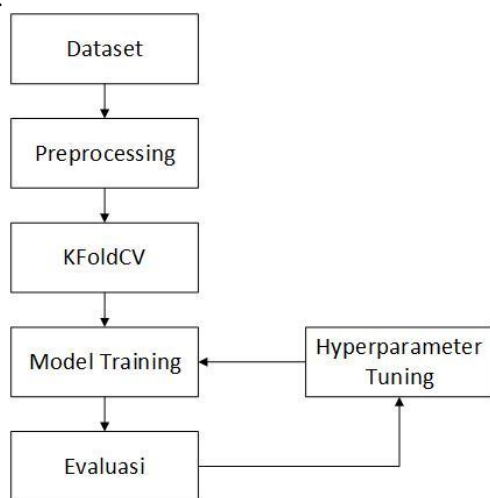
Quadri et al. melakukan penelitian menggunakan model multilinear regression (MLR) dan model artificial neural network (ANN) untuk memprediksi efisiensi dataset senyawa quinoxaline sebagai inhibitor korosi [14]. penelitian tersebut menghasilkan bahwa model ANN memiliki keunggulan dalam memprediksi dibandingkan dengan model MLR. Dengan model ANN menunjukkan hasil evaluasi root mean squared error (RMSE), mean square error (MSE), mean absolute deviation (MAD), mean absolute percentage error (MAPE) dengan nilai masing 5.416, 29.333, 2.381, 5.038. Namun, dengan hasil tersebut tingkat keakuratan model tersebut masih rendah dan masih bisa ditingkatkan lagi. Karena senyawa yang digunakan dalam penelitian tersebut sama, kami berhipotesis bahwa seharusnya ada model

spesifik yang dapat diterapkan pada dataset dari penelitian tersebut. Salah satu tantangan utama dalam pendekatan ML adalah mengembangkan model ML yang akurat.

Oleh karena itu, kami melakukan penelitian ini dengan mengembangkan model ML berbasis QSPR dengan menggunakan analisis komparatif antara model adaboost regressor (ADB) [15], gradient boosting regressor (GBR) [16], dan extreme gradient boosting regressor (XGBR)[17] untuk memprediksi efisiensi senyawa quinoxaline sebagai inhibitor korosi. Untuk meningkatkan kinerja model, kami mencari parameter terbaik untuk model dalam melakukan prediksi dengan mengoptimasi menggunakan algoritma hyperparameter tuning Grid searchCV dan Random searchCV untuk mencari parameter model yang terbaik sehingga dapat meningkatkan performa prediksi [18], [19], [20].

II. METODE

Bagan di bawah ini menggambarkan alur pengembangan model machine learning untuk memprediksi sifat molekular senyawa quinoxaline, dimulai dari pengumpulan dataset, preprocessing data untuk mengelola outlier dan normalisasi, validasi menggunakan K-Fold Cross Validation, pemodelan dengan beberapa algoritma, hingga evaluasi dan tuning hyperparameter untuk mencapai akurasi prediksi yang optimal.



Gambar 1. Pengembangan model ML

A. Dataset

Dapat dilihat pada Gambar 1 merupakan alur pengembangan model ML dengan beberapa proses antara lain Dataset yang digunakan dalam penelitian ini berasal dari data eksperimen yang telah dipublikasikan sebelumnya oleh Quadri et. al[14]. Data ini mencakup hasil eksperimen inhibitor berbasis quinoxaline pada medium HCl. Molekul-molekul quinoxaline diuji menggunakan pendekatan teoritis seperti Density Functional Theory (DFT) untuk menghitung deskriptor molekular, dataset yang digunakan pada penelitian ini kami menggunakan data senyawa quinoxaline dari yang telah dipublikasikan. Dataset ini memiliki 40 dengan 13 fitur

sebagai variabel independen atau deskriptor molekular yang bisa dilihat pada tabel 1 serta variabel target yang digunakan adalah inhibitor efficiency (IE) yang mengukur efektivitas molekul dalam menghambat proses korosi

TABEL 1.
SIFAT MOLEKULAR KUANTUM

Deskriptor Molekular	
Con (M)	Kepadatan molekul
T (K)	Temperatur
TE (eV)	Energi total
EHOMO (eV)	Orbital terisi tertinggi
ELUMO (eV)	Orbital kosong terendah
ΔE (eV)	Perbedaan energi
μ	Polaritas molekul
IP	Energi pelepasan elektron
EA	Tarikan elektron
χ	Daya tarik elektron
η	Kestabilan molekul
σ	Kereaktifan molekul
ΔN	Transfer elektron

Korelasi antar fitur molekular memainkan peran penting dalam menentukan efektivitas inhibitor korosi. Sebagai contoh, energi HOMO dan LUMO berperan penting dalam mengukur kemampuan molekul untuk mendonasikan atau menerima elektron. Hal ini sejalan dengan mekanisme adsorpsi pada permukaan logam, di mana molekul inhibitor berinteraksi melalui orbital molekularnya dengan logam. Sebuah energi gap (ΔE) yang kecil menunjukkan stabilitas molekul yang lebih rendah tetapi reaktivitas yang lebih tinggi, yang sering kali berkontribusi pada peningkatan efisiensi inhibisi korosi. Polaritas molekul (momen dipol, μ) memengaruhi kemampuan molekul untuk berorientasi pada permukaan logam yang bermuatan, meningkatkan interaksi elektrostatis dan adsorpsi. Elektronegativitas (χ) serta parameter kestabilan dan keraktifan (η dan σ) mencerminkan sifat reaktivitas elektron dalam molekul. Semakin besar elektron yang dapat ditransfer ke permukaan logam, semakin baik efektivitas inhibitor korosi [21].

B. Preprocessing

Proses preprocessing pada Gambar 1 dimulai dengan mengidentifikasi dan menangani outlier dataset menggunakan metode Interquartile Range (IQR)[22]. Langkah ini dilakukan untuk memastikan bahwa nilai ekstrem yang dapat mempengaruhi hasil analisis dan model prediksi dihilangkan atau ditangani dengan tepat. Setelah tahap ini, langkah selanjutnya adalah melakukan normalisasi data menggunakan *Robust Scaler*. Metode ini dipilih karena *Robust Scaler* mampu mengurangi sensitivitas terhadap outlier dengan melakukan transformasi data berdasarkan kuartil. Dengan demikian, data yang dinormalisasi akan memiliki skala yang konsisten dan representatif, sehingga meningkatkan performa model yang akan diterapkan selanjutnya. Proses ini bertujuan untuk memastikan bahwa setiap fitur berkontribusi secara adil

dalam analisis tanpa terpengaruh oleh nilai-nilai ekstrem yang mungkin ada dalam dataset.[23], [24].

C. KFold Cross Validation

Dalam Gambar 1 juga kami juga menggunakan teknik k-fold cross-validation untuk mengevaluasi kinerja model. Proses ini membagi dataset menjadi k subset (atau lipatan), di mana setiap subset secara bergantian berfungsi sebagai data pengujian, sementara k-1 subset lainnya digunakan untuk pelatihan model. Dengan cara ini, k-fold cross-validation memungkinkan penilaian yang lebih andal terhadap generalisasi model, mengurangi kemungkinan bias yang mungkin muncul akibat pemisahan data yang tidak merata. Selain itu, teknik ini membantu dalam memanfaatkan seluruh dataset untuk pelatihan dan pengujian, sehingga hasil evaluasi model menjadi lebih akurat dan representatif.[25], [26]. Pada penelitian ini kami menggunakan beberapa nilai k yaitu 3, 5, 7, 10, tapi kami menemukan nilai yang terbaik ada pada nilai k = 7. pemilihan nilai k juga bergantung pada karakteristik data yang akan digunakan [27], [28].

D. Modelling, Evaluasi, dan Hyperparameter

Setelah preprocessing data akan masuk tahap pemodelan, dapat dilihat pada Gambar 1. Kami menggunakan komparasi antara tiga algoritma yaitu ADB, GBR, XGBR. Ketiga model tersebut kemudian diuji kemampuannya untuk melatih data training kemudian memprediksi target. Pada tahap evaluasi model, kami menggunakan beberapa matrik regresi seperti coefficient of determination (R^2), RMSE, MSE, MAPE, MAD [29]. RMSE adalah metrik yang mengukur akar dari rata-rata kuadrat kesalahan antara nilai prediksi dan nilai aktual, dengan nilai yang lebih rendah menunjukkan akurasi model yang lebih tinggi. menghitung rata-rata kesalahan kuadrat, yang lebih sensitif terhadap outlier dan sering digunakan dalam regresi untuk meminimalkan kesalahan prediksi. MAPE menunjukkan rata-rata kesalahan absolut dalam bentuk persentase, yang berguna untuk interpretasi langsung namun kurang efektif jika ada nilai aktual mendekati nol. MAD menghitung rata-rata deviasi absolut tanpa kuadrat, sehingga lebih tahan terhadap outlier, memberikan gambaran sederhana tentang kesalahan prediksi dalam satuan data asli. R^2 mengukur sejauh mana model menjelaskan variasi data aktual, dengan nilai mendekati 1 yang menunjukkan model dengan kemampuan prediktif yang lebih baik.[30]. Kami juga melakukan hyperparameter tuning dengan mencari semua kemungkinan kombinasi dari tiga parameter pada masing-masing model di rentang pencarian yang telah ditentukan. Setelah itu, dilakukan pencarian kombinasi parameter dengan metode Grid search dan Random search yang menghasilkan model paling optimal berdasarkan rata-rata nilai uji validitas terbaik.

III. HASIL DAN PEMBAHASAN

Berikut adalah tabel hasil matrik evaluasi pada masing-masing model yang digunakan pada penelitian ini, disajikan pada Tabel 2.

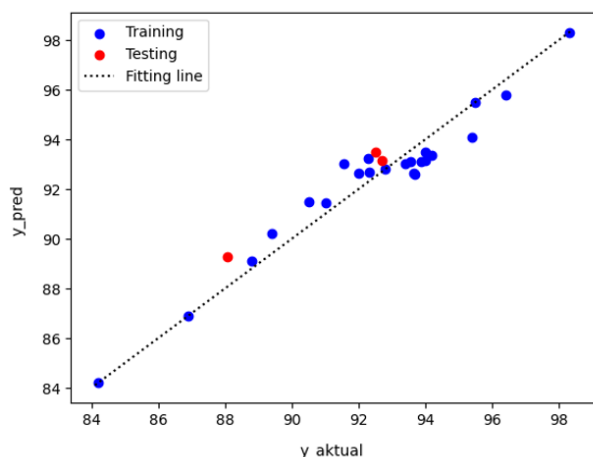
TABEL 2
PERFORMA PREDIKSI MODEL

Matrik Evaluasi	Model			Model + Hyperparameter		
	ADB	GBR	XGBR	ADB	GBR	XGBR
R^2	0.741	0.539	0.958	0.807	0.802	0.970
RMSE	1.083	1.447	0.434	0.936	0.948	0.368
MSE	1.173	2.094	0.189	0.876	0.899	0.135
MAD	0.944	1.632	0.122	1.002	0.506	0.119
MAPE	1.023	1.541	0.343	0.973	0.848	0.273

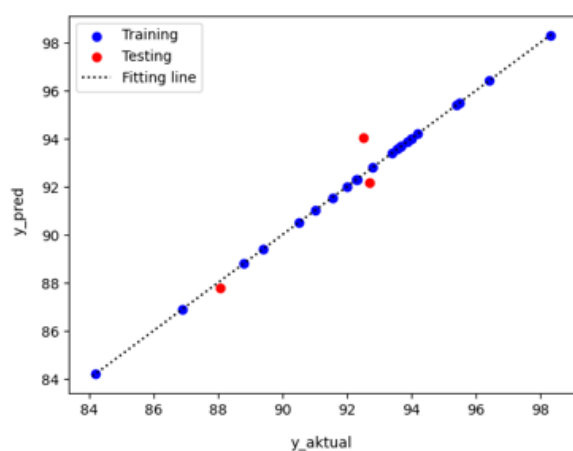
Berdasarkan pada matrik evaluasi pada Tabel 2. Model Extreme Gradient Boosting Regressor (XGBR) menunjukkan performa prediksi yang lebih baik dibandingkan dengan ADB dan GBR karena beberapa keunggulannya. Secara komputasi, XGBR lebih efisien karena mengintegrasikan teknik pengurangan bias dan variasi melalui regularisasi, yang tidak dimiliki oleh AdaBoost. Selain itu, XGBR memanfaatkan proses pembelajaran paralel, yang memberikan efisiensi lebih tinggi dibandingkan GBR. Selain itu, algoritma ini lebih fleksibel dalam memilih fungsi loss, yang membuatnya lebih andal dalam menangani nilai ekstrem atau outlier pada dataset.

Hasil evaluasi menunjukkan bahwa model XGBR memberikan performa prediksi terbaik, terutama setelah dilakukan optimasi hyperparameter menggunakan Grid Search. Nilai evaluasi yang diperoleh untuk XGBR dengan optimasi meliputi R^2 sebesar 0.970, RMSE sebesar 0.368, MSE sebesar 0.135, MAD sebesar 0.119, dan MAPE sebesar 0.273. Nilai-nilai ini jauh lebih baik dibandingkan dengan model ADB dan GBR. Sebagai perbandingan, model ADB hanya mencapai R^2 sebesar 0.741 dan RMSE sebesar 1.083, sementara Gradient Boosting menunjukkan R^2 sebesar 0.539 dan RMSE sebesar 1.447. Dengan hasil tersebut, XGBR membuktikan kemampuannya sebagai model yang unggul dalam memprediksi efisiensi inhibitor korosi.

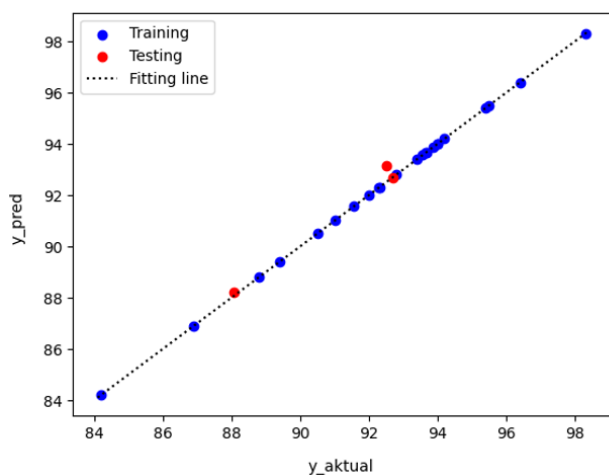
Berikut merupakan plot distribusi dari hasil prediksi menggunakan algoritma ADB, GBR, XGBR dengan hyperparameter tuning.



Gambar 2. Sebaran data poin dari model ADB



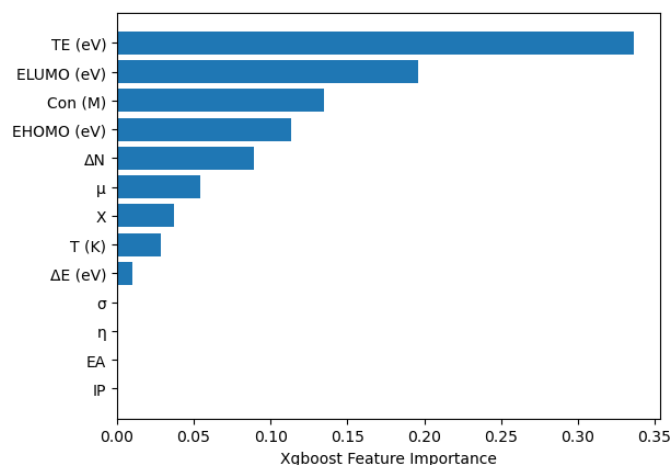
Gambar 3. Sebaran data poin dari model GBR



Gambar 4. Sebaran data poin dari model XGBR

Visualisasi pada gambar di atas menampilkan distribusi data prediksi pada masing-masing model. Plot ini menunjukkan seberapa akurat dari model yang digunakan dalam melakukan prediksi. Dapat dilihat pada Gambar 2

bahwa model ADB terjadi variasi sebaran data yang tidak mendekati garis prediksi. Pada model GBR yang ditunjukkan Gambar 3, data pelatihan terlihat data cenderung dekat dengan garis data aktual tetapi pada data pengujian terlihat bahwa data kurang mendekati garis prediksi. Sedangkan sebaran data untuk model XGBR pada Gambar 4 paling mendekati garis prediksi. Hal ini menunjukkan pada kasus ini model XGBR memiliki kemampuan prediksi yang lebih unggul dengan mampu menghasilkan nilai prediksi yang mendekati nilai aktualnya.



Gambar 5. Fitur penting pada model XGBR

Fitur penting adalah fitur yang ada pada dataset yang paling berpengaruh untuk performa dan kestabilan algoritma [31], [32]. Model XGBR dipilih juga berdasarkan investigasi fitur penting yang ada pada Gambar 5 yang mengukur fitur mana saja yang paling berpengaruh terhadap performa algoritma. Gambar 5 menunjukkan fitur TE (eV) merupakan fitur yang paling penting yang memengaruhi algoritma. walaupun semua fitur tetap memiliki pengaruh terhadap performa algoritma.

V. KESIMPULAN

Secara keseluruhan kami mengusulkan model ML berbasis QSPR yang paling unggul berdasarkan nilai R^2 , RMSE, MSE, MAD, dan MAPE. Model XGBR dengan hyperparameter tuning menjadi yang paling unggul dari model lainnya. Hasil penelitian ini memiliki implikasi praktis yang signifikan. Dengan kemampuan prediksi model XGBR yang unggul, proses identifikasi senyawa inhibitor korosi dapat dilakukan lebih efisien, mengurangi biaya dan waktu eksperimen laboratorium. Model ini dapat digunakan sebagai alat screening awal untuk memilih senyawa kandidat yang paling potensial, yang kemudian dapat diuji lebih lanjut di laboratorium. Penelitian ini memberikan pandangan berbeda tentang pemanfaatan ML dalam memprediksi penghambatan korosi oleh senyawa quinoxaline. kami menyarankan untuk meningkatkan kinerja model ML berbasis QSPR untuk meningkatkan akurasi prediksinya misal dengan penambahan fungsi polynomial atau virtual sample.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] T. Sutojo, S. Rustad, M. Akrom, A. Syukur, G. F. Shidik, and H. K. Dipojono, "A machine learning approach for corrosion small datasets," *Npj Mater Degrad*, vol. 7, no. 1, Dec. 2023, doi: 10.1038/s41529-023-00336-7.
- [2] M. Akrom *et al.*, "DFT and microkinetic investigation of oxygen reduction reaction on corrosion inhibition mechanism of iron surface by Syzygium Aromaticum extract," *Appl Surf Sci*, vol. 615, Apr. 2023, doi: 10.1016/j.apsusc.2022.156319.
- [3] S. Budi *et al.*, "Implementation of Polynomial Functions to Improve the Accuracy of Machine Learning Models in Predicting the Corrosion Inhibition Efficiency of Pyridine-Quinoline Compounds as Corrosion Inhibitors," *KnE Engineering*, Mar. 2024, doi: 10.18502/keg.v6i1.15351.
- [4] M. Akrom, "Seminar Nasional Sains Dan Teknik Fst Undana (Sainstek) Ekstrak Bahan Alam Sebagai Inhibitor Hijau Pada Korosi Baja Natural Products as a Green Inhibitor of Corrosion on Steel."
- [5] M. Akrom, "Investigasi Ekstrak Bahan Alam Sebagai Inhibitor Korosi Hijau Pada Baja Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan," 2021, doi: 10.46984/sebatik.v00i0.0000.
- [6] M. Akrom, S. Rustad, A. G. Saputro, A. Ramelan, F. Fathurrahman, and H. K. Dipojono, "A combination of machine learning model and density functional theory method to predict corrosion inhibition performance of new diazine derivative compounds," *Mater Today Commun*, vol. 35, Jun. 2023, doi: 10.1016/j.mtcomm.2023.106402.
- [7] M. Akrom, "Experimental Investigation Of Natural Plant Extracts As A Green Corrosion Inhibitor In Steel (Investigasi Eksperimental Ekstrak Tanaman Alam Sebagai Inhibitor Korosi Pada Baja)," *Journal Renewable Energy & Mechanics*, no. 01, 2022, doi: 10.25299/rem.2022.vol5(01).8887.
- [8] M. Akrom, W. Aji, E. Prabowo, and K. Kunci, "Investigation of Natural Product Extracts as Green Corrosion Inhibitors on Steels and Alloys: Experimental and Theoretical Approach." [Online]. Available: <http://esec.upnvjt.com/>
- [9] M. Akrom, T. Sutojo, A. Pertiwi, S. Rustad, and H. K. Dipojono, "Investigation of Best QSPR-Based Machine Learning Model to Predict Corrosion Inhibition Performance of Pyridine-Quinoline Compounds," in *Journal of Physics: Conference Series*, Institute of Physics, 2023, doi: 10.1088/1742-6596/2673/1/012014.
- [10] A. Nur, A. Thohari, A. Karima, K. Santoso, and R. Rahmawati, "Crack Detection in Building Through Deep Learning Feature Extraction and Machine Learning Approach," 2024. [Online]. Available: <http://jurnal.polibatam.ac.id/index.php/JAIC>
- [11] R. I. D. Putra, A. L. Maulana, and A. G. Saputro, "Study on building machine learning model to predict biodegradable-ready materials," in *AIP Conference Proceedings*, American Institute of Physics Inc., Mar. 2019, doi: 10.1063/1.5095351.
- [12] M. Akrom, S. Rustad, and H. K. Dipojono, "A machine learning approach to predict the efficiency of corrosion inhibition by natural product-based organic inhibitors," *Phys Scr*, vol. 99, no. 3, Mar. 2024, doi: 10.1088/1402-4896/ad28a9.
- [13] M. Akrom, S. Rustad, and H. K. Dipojono, "A machine learning approach to predict the efficiency of corrosion inhibition by natural product-based organic inhibitors," *Phys Scr*, vol. 99, no. 3, Mar. 2024, doi: 10.1088/1402-4896/ad28a9.
- [14] T. W. Quadri *et al.*, "Computational insights into quinoxaline-based corrosion inhibitors of steel in HCl: Quantum chemical analysis and QSPR-ANN studies," *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 15, no. 7, Jul. 2022, doi: 10.1016/j.arabjc.2022.103870.
- [15] M. Kemampuan Penghambatan Korosi oleh Senyawa Benzimidazole, C. Adryan Putra Sumarjono, M. Akrom, and G. Alfa Trisnapradika, "Perbandingan Model Machine Learning Terbaik untuk Comparison of the Best Machine Learning Model to Predict Corrosion Inhibition Capability of Benzimidazole Compounds," 2023.
- [16] N. V. Putranto, M. Akrom, G. A. Trinapradika, and A. History, "Jurnal Teknologi dan Manajemen Informatika Implementasi Fungsi Polinomial pada Algoritma Gradient Boosting Regressor: Studi Regresi pada Dataset Obat-Obatan Kadaluarasa sebagai Material Antikorosi Article Info ABSTRACT," vol. 9, no. 2, pp. 172–182, 2023, [Online]. Available: <http://http://jurnal.unmer.ac.id/index.php/jtmi>
- [17] T. Chen and C. Guestrin, "XGBoost: A scalable tree boosting system," in *Proceedings of the ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, Association for Computing Machinery, Aug. 2016, pp. 785–794, doi: 10.1145/2939672.2939785.
- [18] M. Akrom, S. Rustad, and H. Kresno Dipojono, "Prediction of Anti-Corrosion performance of new triazole derivatives via Machine learning," *Comput Theor Chem*, vol. 1236, Jun. 2024, doi: 10.1016/j.comptc.2024.114599.
- [19] M. Fajri and A. Primajaya, "Komparasi Teknik Hyperparameter Optimization pada SVM untuk Permasalahan Klasifikasi dengan Menggunakan Grid Search dan Random Search," 2023. [Online]. Available: <http://jurnal.polibatam.ac.id/index.php/JAIC>
- [20] S. Himawan, R. Sohiburoyan, and I. Iryanto, "Hyperparameter Tuning on Graph Neural Network for the Classification of SARS-CoV-2 Inhibitors," JAIC, vol. 7, no. 2, pp. 186–191, Nov. 2023.
- [21] D. S. Chauhan, P. Singh, and M. A. Quraishi, "Quinoxaline derivatives as efficient corrosion inhibitors: Current status, challenges and future perspectives," Dec. 15, 2020, *Elsevier B.V.* doi: 10.1016/j.molliq.2020.114387.
- [22] J. Yang, S. Rahardja, and P. Fränti, "Outlier detection: How to threshold outlier scores?," in *ACM International Conference Proceeding Series*, Association for Computing Machinery, Dec. 2019, doi: 10.1145/3371425.3371427.
- [23] M. Akrom, S. Rustad, and H. Kresno Dipojono, "Machine learning investigation to predict corrosion inhibition capacity of new amino acid compounds as corrosion inhibitors," *Results Chem*, vol. 6, Dec. 2023, doi: 10.1016/j.rechem.2023.101126.
- [24] W. Herowati *et al.*, "Prediction of Corrosion Inhibition Efficiency Based on Machine Learning for Pyrimidine Compounds: A Comparative Study of Linear and Non-linear Algorithms," *KnE Engineering*, Mar. 2024, doi: 10.18502/keg.v6i1.15350.
- [25] M. Akrom *et al.*, "Artificial Intelligence Berbasis QSPR Dalam Kajian Inhibitor Korosi," vol. 07, no. 01, pp. 15–20, [Online]. Available: <https://doi.org/10>
- [26] A. B. Prasetyo and T. G. Laksana, "Optimasi Algoritma K-Nearest Neighbors dengan Teknik Cross Validation Dengan Streamlit (Studi Data: Penyakit Diabetes)," 2022. [Online]. Available: <http://jurnal.polibatam.ac.id/index.php/JAIC>
- [27] S. Budi, M. Akrom, G. A. Trisnapradika, T. Sutojo, and W. A. E. Prabowo, "Optimization of Polynomial Functions on the NuSVR Algorithm Based on Machine Learning: Case Studies on Regression Datasets," *Scientific Journal of Informatics*, vol. 10, no. 2, pp. 151–158, May 2023, doi: 10.15294/sji.v10i2.43929.
- [28] M. Akrom, S. Rustad, and H. K. Dipojono, "Development of quantum machine learning to evaluate the corrosion inhibition capability of pyrimidine compounds," *Mater Today Commun*, vol. 39, Jun. 2024, doi: 10.1016/j.mtcomm.2024.108758.
- [29] M. Akrom, S. Rustad, A. G. Saputro, and H. K. Dipojono, "Data-driven investigation to model the corrosion inhibition efficiency of Pyrimidine-Pyrazole hybrid corrosion inhibitors," *Comput Theor Chem*, vol. 1229, Nov. 2023, doi: 10.1016/j.comptc.2023.114307.
- [30] M. Akrom and T. Sutojo, "Investigasi Model Machine Learning Berbasis QSPR pada Inhibitor Korosi Pirimidin Investigation of QSPR-Based Machine Learning Models in Pyrimidine Corrosion Inhibitors," 2023.
- [31] V. Frendyatha Adiprasetya, M. Akrom, and G. Alfa Trisnapradika, "Investigasi Efisiensi Penghambatan Korosi Senyawa Quinoxaline Berbasis Machine Learning A Study on the Corrosion Inhibition Efficiency of Quinoxaline Compounds Utilizing Machine Learning," 2024.
- [32] F. M. Haikal, M. Akrom, and G. A. Trisnapradika, "Perbandingan Algoritma Multilinear Regression dan Decision Tree Regressor dalam Memprediksi Efisiensi Penghambatan Korosi Piridazin," *Edumatic: Jurnal Pendidikan Informatika*, vol. 7, no. 2, pp. 307–315, Dec. 2023, doi: 10.29408/edumatic.v7i2.22127.