

# Prediction of Corrosion Inhibitor Efficiency Based on Quinoxaline Compounds Using Polynomial Regression

Bastion Jader Rana<sup>1</sup>, Noor Ageng Setiyanto<sup>2\*</sup>, Muhamad Akrom<sup>3\*\*</sup>

<sup>1</sup> Program Studi Teknik Informatika, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang, Indonesia

<sup>2,3</sup> Research Center for Quantum Computing and Materials Informatics, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang, Indonesia

[111202012595@mhs.dinus.ac.id](mailto:111202012595@mhs.dinus.ac.id)<sup>1</sup>, [nasetiyanto@dsn.dinus.ac.id](mailto:nasetiyanto@dsn.dinus.ac.id)<sup>2</sup>, [m.akrom@dsn.dinus.ac.id](mailto:m.akrom@dsn.dinus.ac.id)<sup>3</sup>

## Article Info

### Article history:

Received 2024-12-05

Revised 2025-01-17

Accepted 2025-01-21

### Keyword:

Corrosion inhibitors,  
Quinoxaline,  
Machine Learning,  
Polynomial,  
Gradient Boosting Regressor.

## ABSTRACT

Corrosion is a natural process that leads to material degradation due to environmental factors. It significantly impacts financial and safety aspects, including structural weakening and economic losses in various industries such as oil, gas, and nuclear. Corrosion inhibitors, especially organic compounds like quinoxaline, are widely used to reduce corrosion by forming protective layers on metal surfaces. Quinoxaline compounds, characterized by their heterocyclic structure with nitrogen atoms, demonstrate promising inhibition efficiency in corrosive environments. In this study, machine learning (ML) approaches are utilized to predict the corrosion inhibition efficiency of quinoxaline compounds. Algorithms such as Gradient Boosting Regressor (GBR), Extreme Gradient Boosting Regressor (XGBR), and Automatic Relevance Determination (ARD) regression are compared. The implementation of polynomial functions significantly improves the prediction accuracy of these models. Among them, GBR achieved the best value with MSE, RMSE, MAE, MAPE, and R2 values of 0.0000001, 0.0003229, 0.0000029, 0.0002294, and 0.999999998, respectively. These findings highlight the potential of polynomial-enhanced ML models in accurately predicting corrosion inhibition efficiency. Moreover, the study demonstrates the viability of GBR as a reliable tool for analyzing and optimizing corrosion inhibitors for industrial applications.



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

## I. PENDAHULUAN

Korosi merupakan suatu proses rusaknya material yang disebabkan oleh lingkungan tanpa memerlukan kerusakan material yang terlihat. Hal ini bukan hanya kebalikan dari metalurgi ekstraktif, tetapi juga dapat dianggap sebagai sistem termodinamika lingkungan dan logam yang berusaha mencapai kesetimbangan [1]. Korosi disebabkan oleh reaksi kimia secara langsung atau disebabkan oleh proses elektrokimia yang dapat menurunkan sifat mekanik dari logam. Korosi dapat terjadi pada medium basah maupun medium kering. Pada medium basah yang menyebabkan terjadinya korosi, salah satunya adalah HCL. Sedangkan yang menyebabkan korosi pada medium kering contohnya adalah oksigen atau belerang dioksida [2], [3]. Salah satu contoh korosi kering adalah pada saat Oksigen menutupi permukaan besi maka terjadilah korosi dimulai dengan terjadinya laju

reaksi reduksi oksigen yang sesuai [4]. Faktor-faktor lain yang menyebabkan dan mempercepat korosi adalah kecepatan aliran, Temperatur yang tinggi, pH yang optimal, kadar oksigen yang tinggi, dan kelembaban udara [1].

Dampak yang disebabkan oleh korosi meliputi finansial dan keamanan diantaranya adalah penurunan kekuatan mineral, kebocoran fluida, penurunan nilai, dan penipisan [5]. Dampak-dampak tersebut menyebabkan kerugian ekonomi dan finansial, seperti kerugian finansial pada industri dan gas bumi akibat penurunan kualitas material atau kerugian ekonomi pada industri nuklir akibat berkurangnya masa produktif [6], [7]. Salah satu cara untuk mencegah terjadinya korosi adalah dengan menggunakan inhibitor korosi [5]. Studi eksperimental untuk mengevaluasi banyak kandidat bahan kimia sebagai penghambat korosi memerlukan investasi yang signifikan dalam hal biaya, waktu, dan sumber daya.

Tingginya kebutuhan ini menjadi salah satu tantangan utama, sehingga diperlukan pendekatan yang lebih efisien, seperti penggunaan teknik machine learning (ML) dan hubungan kuantitatif struktur-properti (QSPR) untuk menilai efektivitas inhibitor korosi secara lebih cepat dan hemat biaya [8], [9], [10].

Pengertian inhibitor sendiri adalah suatu zat yang mampu menghambat atau memperlambat reaksi kimia. Sedangkan inhibitor korosi adalah suatu zat kimia yang, ketika ditambahkan dalam jumlah sedikit ke dalam lingkungan tertentu, dapat menurunkan laju atau serangan korosi lingkungan terhadap logam [1], [11]. Kuinoksalin merupakan salah satu senyawa inhibitor korosi dan masuk ke dalam kelompok inhibitor organik yang telah dinilai secara luas sifat penghambatnya dalam media korosif yang berbeda [12]. Kuinoksalin adalah molekul heterosiklik yang terdiri dari dua cincin beranggota enam yang menyatu (benzena dan pirazin) dengan dua atom nitrogen imina yang ditempatkan secara simetris di salah satu cincin [13].

Machine Learning (ML) adalah bidang ilmu komputer yang mempelajari algoritma dan teknik untuk mengotomatisasi solusi terhadap masalah kompleks yang sulit diprogram menggunakan metode pemrograman konvensional [14]. Machine Learning sangat berguna untuk pengaplikasian prediksi korosi karena dapat memodelkan data seperti suhu, pH, kondisi visual, dan lain-lain, untuk memprediksi terjadinya retak korosi [15]. Pada penelitian yang dilakukan oleh Quadri et al., metode Multiple Linear Regression (MLR) dan Artificial Neural Network (ANN) diterapkan untuk memprediksi kinerja inhibitor berbasis quinoxaline dalam mencegah korosi. Hasil penelitian menunjukkan bahwa model ANN memiliki kinerja prediksi yang lebih baik dibandingkan MLR. Hal ini terlihat dari evaluasi menggunakan metrik seperti root mean squared error (RMSE), mean square error (MSE), mean absolute deviation (MAD), dan mean absolute percentage error (MAPE), yang masing-masing memiliki nilai 5.416, 29.333, 2.381, dan 5.038. Meskipun model ANN terbukti lebih unggul, hasil tersebut masih dianggap kurang optimal. Oleh karena itu, penelitian ini mengusulkan implementasi pendekatan polinomial pada model Gradient Boosting Regressor (GBR) untuk meningkatkan akurasi prediksi dan performa model [12].

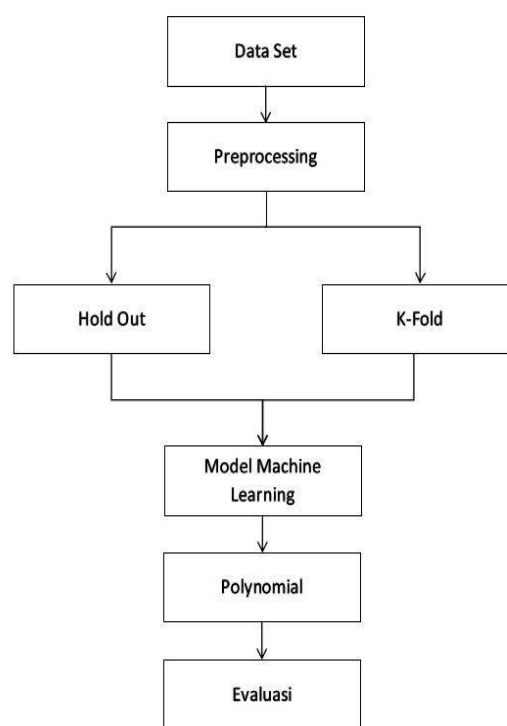
Algoritma Machine Learning seperti Gradient Boosting Regressor (GBR) terbukti mampu secara efektif memodelkan hubungan kompleks antara fitur-fitur dengan target pada dataset korosi [16], [17]. Algoritma GBR mampu menghasilkan nilai yang tinggi dengan nilai coefficient of determination ( $R^2$ ) sebesar 0,999 dan root mean square error (RMSE) sebesar 0,59. Dengan nilai tersebut, GBR lebih unggul jika dibandingkan dengan algoritma k-nearest neighbor KNN dan support vector regression SVR [18].

Implementasi Polynomial terbukti meningkatkan kinerja dari pemodelan algoritma machine learning KNN, SVR, dan RF untuk dataset inhibitor korosi [19]. Dengan demikian, pada penelitian ini pengimplementasian polynomial pada

algoritma GBR dilakukan untuk meningkatkan akurasi dan kinerja, dalam menganalisis inhibitor korosi Kuinoksalin [12]. Gradient Boosting Regressor (GBR) dipilih karena lebih baik dari algoritma lainnya seperti RF, SVR, dan KNN [18], [19].

## II. METODE

Diagram di bawah merupakan Alur Kerja (Work Flow) dari pengambilan dataset preprocessing, validasi menggunakan Hold Out Cross Validation dan K-Fold Cross Validation, pemodelan dengan beberapa algoritma Machine Learning, implementasi polinomial, hingga evaluasi untuk mendapatkan hasil akurasi prediksi yang optimal.



Gambar 1. Work Flow

### A. Dataset

Pada Gambar 1 tahapan penelitian yang dimulai dengan pengumpulan data. Dataset pada penelitian ini menggunakan data yang berisi 40 senyawa kuinoksalin dari jurnal berjudul "Computational insights into quinoxaline-based corrosion inhibitors of steel in HCl: Quantum chemical analysis and QSPR-ANN studies" oleh Quadri et al [12] yang telah dipublikasikan. Dataset tersebut memiliki 13 deskriptor molekular sebagai fitur atau variable independen yang bisa dilihat pada Tabel 1 serta Inhibitor Efficiency(IE) sebagai variable dependen atau target yang menjadi fokus utama prediksi.

TABLE 1.  
DESKRIPTOR MOLEKULAR

Deskriptor	
Con (M)	kepadatan molekul
T (K)	Temperatur
TE (eV)	energi total
EHOMO (eV)	Orbital terisi tertinggi
ELUMO (eV)	Orbital kosong terendah
$\Delta E$ (eV)	Perbedaan energi
$\mu$	Polaritas molekul
IP	Energi pelepasan elektron
EA	Tarikan elektron
X	daya tarik elektron
$\eta$	Kestabilan molekul
$\sigma$	Kereaktifan molekul
$\Delta N$	transfer elektron

### B. Preprocessing

Pada Gambar 1, setelah melakukan pengumpulan dataset dilakukan preprocessing. Preprocessing data dilakukan agar menghindari sensitifitas data pada fitur tertentu. Tahap preprocessing pada penelitian ini adalah dengan melakukan normalisasi data set. Tujuan dari normalisasi data adalah untuk membuat semua nilai data berada dalam skala yang sama. Teknik normalisasi yang dilakukan pada penelitian ini adalah MinMaxScaler [20], [21].

### C. Cross Validation

Pada Gambar 1 dilakukan dua Cross-validation yaitu Hold Out dan K-fold. Cross-validation adalah metode untuk memilih model berdasarkan kemampuan prediksinya. Dalam metode ini data dibagi menjadi dua bagian, bagian pertama adalah data training untuk membangun model, sedangkan bagian kedua adalah data testing untuk mengevaluasi kemampuan prediksi model tersebut [22]. Cross-Validation bisa digunakan untuk menyetel hiperparameter model statistik dan Machine Learning, mencegah overfitting, membandingkan algoritma pembelajaran, dan memperkirakan kesalahan generalisasi model prediktif. Teknik yang dipilih sebagai model Cross Validation adalah K-Fold dan Hold Out [23]. K-Fold CV adalah metode di mana kumpulan data dibagi menjadi K bagian atau lipatan, di mana setiap lipatan secara bergantian digunakan sebagai set pengujian/testing pada suatu waktu. Nilai k yang digunakan pada penelitian ini adalah 3, 5, 7, dan 10 [24]. Holdout validation adalah metode yang membagi data menjadi dua set terpisah, yaitu data training dan data testing. Proporsi pembagian tidak baku, namun umumnya 30% digunakan untuk training dan 70% digunakan untuk testing. Sedangkan pembagian pada Hold Out Validation pada penelitian ini adalah 10:90, 20:80, 30:70, dan 40:60 [25].

### D. Model Machine Learning

Tahap selanjutnya pada Gambar 1 adalah pemodelan machine learning. Machine Learning(ML) adalah salah satu cabang Kecerdasan Buatan, khususnya studi tentang bagaimana komputer dapat belajar dari data untuk menjadi

lebih cerdas. Setelah mencoba berbagai model machine learning seperti Bayesian Ridge, Random Forest Regressor, Lasso, NuSVR, Decision Tree Regressor, KNN, dan model lainnya, model machine learning yang dikomparasikan pada penelitian ini adalah GBR, XGBR, dan ARD. Karena ketiga model tersebut memiliki hasil kinerja terbaik dibandingkan model yang lainnya [26], [27]. Gradient Boosting Classifier adalah metode supervised learning berbasis decision tree yang bekerja dengan meminimalkan fungsi kerugian melalui penyesuaian bertahap [28]. XGBoost adalah sistem pembelajaran mesin berbasis tree boosting yang dirancang untuk efisiensi, skalabilitas, dan menghasilkan performa mutakhir dalam berbagai tantangan data mining [29]. Automatic Relevance Determination (ARD) Regression adalah metode regresi berbasis probabilistik yang menentukan relevansi input dengan membobotnya [30].

### E. Implementasi Polynomial

Setelah pemodelan machine learning dilakukan implementasi polynomial, dapat dilihat pada Gambar 1. Polynomial adalah regresi berbentuk kurva, sedangkan regresi itu sendiri adalah tingkat pengaruh variable independen terhadap variable dependen [31]. Pengertian lain dari Polynomial adalah bentuk matematika yang melibatkan satu variable dengan pangkat bilangan bulat positif [32]. Pada penelitian berjudul "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", polynomial terbukti efektif meningkatkan kinerja prediksi dari algoritma machine learning, oleh karena itu pada penelitian ini dilakukan implementasi polynomial [19].

### F. Evaluasi

Tahap terakhir pada Gambar 1 adalah tahap evaluasi. Pada tahap ini, kinerja model machine learning dievaluasi menggunakan berbagai metrik seperti Mean Squared Error (MSE), Root Mean Squared Error (RMSE), Mean Absolute Deviation (MAD), Mean Absolute Percentage Error (MAPE), dan koefisien determinasi ( $R^2$ ). Koefisien determinasi ( $R^2$ ) digunakan untuk menilai kesesuaian model, dimana nilai  $R^2$  yang mendekati 1 menunjukkan bahwa model memiliki kemampuan prediksi yang baik. Selain itu, RMSE digunakan untuk menghitung perbedaan antara nilai aktual dan nilai prediksi, dengan nilai RMSE yang lebih rendah menunjukkan kesalahan prediksi yang lebih kecil, sehingga model lebih akurat dan dapat diandalkan. Sedangkan MAD menggambarkan rata-rata penyimpangan absolut dari data aktual terhadap prediksi, yang membantu dalam memahami tingkat kesalahan tanpa mempertimbangkan tanda negatif. MAPE, di sisi lain, menyajikan persentase rata-rata kesalahan prediksi relatif terhadap nilai aktual, yang mempermudah interpretasi kesalahan dalam bentuk proporsi. Evaluasi ini penting untuk memastikan model dapat digunakan secara efektif dalam skenario nyata, terutama dalam analisis data dengan kompleksitas tinggi [8], [12].

**III. HASIL DAN PEMBAHASAN**

Kinerja dari model machine learning berdasarkan metrik evaluasi MSE, RMSE, MAPE, MAD, dan R2 dari masing-masing model yang digunakan pada penelitian ini disajikan pada Tabel 2.

TABLE 2.  
PERBANDINGAN NILAI METRIK MODEL

Metrik	Model		
	GBR	XGBR	ARD
MSE	2.29E+01	2.63E+01	6.09E+01
RMSE	4.79E+00	5.12E+00	7.80E+00
MAPE	4.41E-02	4.94E-02	8.45E-02
MAD	4.39E+00	4.40E+00	7.51E+00
R <sup>2</sup>	4.39E-01	03.56E-01	-4.88E-01

Berdasarkan pada metrik evaluasi pada Tabel 2. Model GBR adalah model yang lebih unggul dalam memprediksi dataset Quinoxalin dibandingkan 2 model lainnya. Dengan nilai R2 tertinggi yaitu 0.439 dan nilai MSE, RMSE, MAPE, dan MAD berturut-turut 22.929, 4.788, 0.0441, dan 4.39. Dengan nilai tersebut memperlihatkan bahwa GBR memiliki kemampuan prediksi yang lebih baik dari XGBR dan ARD.

Setelah membandingkan berbagai model machine learning dilakukan implementasi polynomial pada masing-masing model. Kinerja dari model machine learning setelah menggunakan polinomial dapat dilihat pada Tabel 3.

TABLE 3.  
PERBANDINGAN METRIK MODEL+POLYNOMIAL

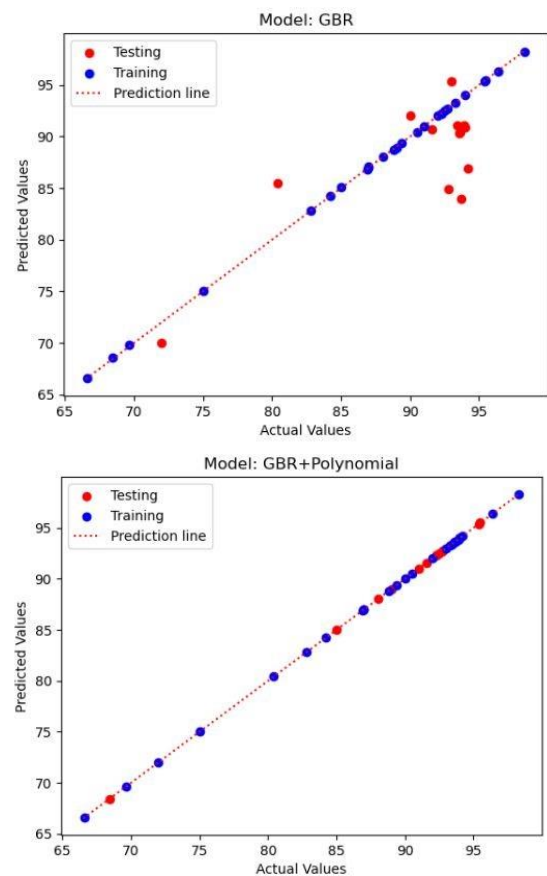
Metrik	Model+Polynomial		
	GBR	XGBR	ARD
MSE	1.04E-07	3.23E-07	3.48E+01
RMSE	3.23E-04	5.68E-04	5.89E+00
MAPE	2.95E-06	4.46E-06	4.34E-02
MAD	2.29E-04	1.92E-04	2.75E+00
R <sup>2</sup>	9.99E-01	9.99E-01	2.33E-01

Setelah dilakukan polynomial nilai dari masing-masing metrik pada setiap model meningkat secara drastis. Bahkan ARD yang memiliki nilai R2 minus pada awalnya meningkat menjadi 0.23. Setelah dilakukan polynomial hasil evaluasi yang lebih unggul tetap GBR dengan nilai masing-masing metrik MSE, RMSE, MAPE, MAD, dan R2 secara berurutan 0.0000001, 0.0003229, 0.0000029, 0.0002294, dan 0.999999998. Pengimplementasian polynomial pada model machine learning menunjukkan hasil yang positif dengan meningkatnya nilai R2 pada setiap model. Nilai dari metrik MSE, RMSE, MAPE, dan MAD juga meningkat terlihat dari hasil yang mendekati 0. Akan tetapi performa dari GBR masih menjadi yang terbaik diantara model lainnya.

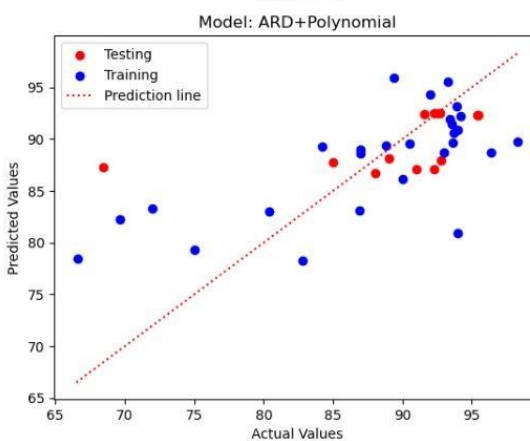
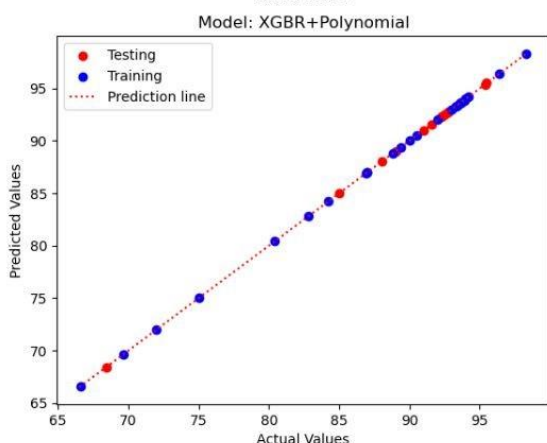
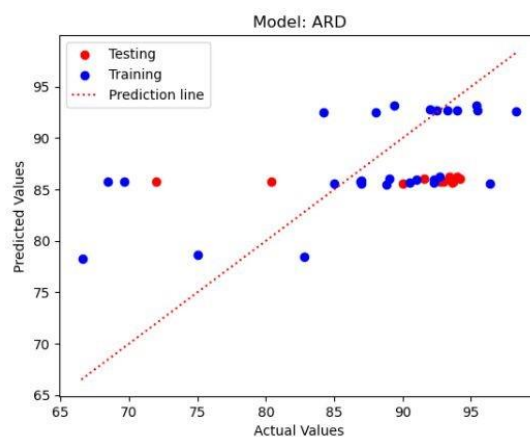
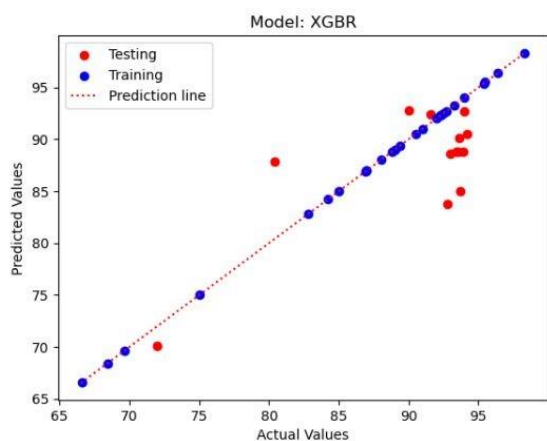
Hasil yang begitu baik dapat tercapai karena beberapa faktor. Pertama, dataset yang terdiri dari 40 data memungkinkan model untuk mempelajari hubungan antara fitur dan target secara menyeluruh. Ukuran dataset yang kecil membuat model lebih mudah mencapai hasil evaluasi yang

sangat baik, terutama setelah implementasi polynomial yang memperkaya representasi fitur. Lalu, proses normalisasi menggunakan MinMaxScaler memastikan bahwa semua fitur berada dalam skala yang sama. Selain itu, metode evaluasi yang digunakan, seperti Hold-Out Validation dengan pembagian data 70:30 dan K-Fold Cross Validation, memastikan bahwa model diuji secara konsisten terhadap data uji.

Berikut adalah Tabel 4 perbandingan scatter plot/diagram tebar dari hasil prediksi yang dihasilkan algoritma GBR, XGBR, dan ARD sebelum dan setelah implementasi polynomial.



Gambar 2. Perbandingan Scatter Plot Gradient Boosting Regressor



Gambar 3. Extreme Gradient Boosting Regressor

Gambar 4. Automatic Relevance Determination

Pada gambar 2-4 perbandingan scatter plot sebelum penerapan polynomial menunjukkan hubungan data yang kurang terstruktur, dengan penyebaran yang tampak acak dan pola yang sulit diidentifikasi. Setelah polynomial diterapkan, scatter plot menunjukkan pola hubungan data yang lebih jelas.

Hal ini dapat terlihat pada scatter plot GBR dan XGBR, pada awalnya titik-titik merah (data testing) jauh dari garis prediksi. Namun setelah implementasi polynomial dapat terlihat semua titik merah pada scatter plot GBR dan XGBR menyentuh garis prediksi. Pada scatter plot ARD juga terjadi perubahan yang positif, pada awalnya tidak ada titik merah (data testing) yang menyentuh garis ataupun mendekati garis prediksi. Akan tetapi setelah implementasi polynomial dapat terlihat ada beberapa titik merah (data testing) yang menyentuh garis prediksi.

#### IV. KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian ini, untuk memprediksi efisiensi penghambatan korosi oleh senyawa kuinoksalin, diusulkan untuk menggunakan model machine learning (ML) berbasis Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR). Model Gradient Boosting Regressor (GBR) terbukti lebih unggul dibandingkan model Extreme Gradient Boosting Regressor (XGBR) dan Automatic Relevance Determination (ARD).

Model GBR memberikan nilai metrik terbaik, yaitu Root Mean Squared Error (RMSE) sebesar 0.0003229, Mean Squared Error (MSE) sebesar 0.0000001, Mean Absolute Percentage Error (MAPE) sebesar 0.0000029, Mean Absolute Deviation (MAD) sebesar 0.0002294, dan koefisien determinasi ( $R^2$ ) sebesar 0.99999998, yang menunjukkan akurasi prediksi yang hampir sempurna. Walaupun hasil akurasi prediksi hampir sempurna, keterbatasan utama dari penelitian ini adalah penggunaan dataset kuinoksalin yang relatif kecil, sehingga kemampuan generalisasi model terhadap dataset lain dengan ukuran lebih besar masih perlu divalidasi.

Implementasi polynomial dalam penelitian ini terbukti secara signifikan meningkatkan kinerja model ML, terutama dalam meningkatkan akurasi dan kemampuan prediksi. Selain itu, hasil evaluasi menunjukkan bahwa algoritma GBR yang dikombinasikan dengan fitur polynomial memiliki potensi besar untuk diterapkan dalam analisis efisiensi inhibitor korosi berbasis kuinoksalin dalam berbagai aplikasi industri. Penelitian ini juga membuka peluang pengembangan model serupa dengan dataset dan algoritma yang lebih kompleks untuk memperluas analisis pada senyawa lain.

## DAFTAR PUSTAKA

- [1] B. Utomo, "Jenis Korosi Dan Penanggulangannya," *DOAJ (DOAJ: Directory of Open Access Journals)*, vol. 6, no. 2, 2009.
- [2] Indra Surya Dalimunthe, "Kimia Dari Inhibitor Korosi," *e-USU Repository*, 2004, Accessed: Nov. 15, 2024. [Online]. Available: <http://repository.usu.ac.id/bitstream/123456789/1345/1/tkimia-indra3.pdf>
- [3] F. M. I. and J. P. U. M. Sugeng, "Analisis Perbedaan Laju Korosi Hasil Pengujian Weight Loss Dan Polarisasi Pada Pipa Dengan Pengujian Korosi Standar ASTM G59 dan ASTM G31," Mar. 2022, Accessed: Nov. 15, 2024. [Online]. Available: <https://jurnal.undira.ac.id/jurnaltera/article/view/148>
- [4] 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, p. 156319, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.156319>.
- [5] M. Fajar Sidiq, "Analisa Korosi Dan Pengendaliannya," *Jurnal Foundry*, Apr. 2013.
- [6] B. Nuswantoro, "Analisis Remaining Life Dan Program Inspeksi Dengan Pendekatan Risk Management Pada Pipa Penyalar Gas," *Prosiding Sains Nasional dan Teknologi*, vol. 1, Aug. 2018, doi: [10.36499/psnst.v1i1.2313](https://doi.org/10.36499/psnst.v1i1.2313).
- [7] Soedyartomo Soentono, "Korosi di Industri Nuklir," *Widyanuklida*, vol. 2, Jan. 1998, Accessed: Nov. 20, 2024. [Online]. Available: <http://jurnal.batan.go.id/index.php/widyanuklida/article/download/1974/1869>
- [8] 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, p. 114307, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114307>.
- [9] M. Akrom, "Investigation Of Natural Extracts As Green Corrosion Inhibitors In Steel Using Density Functional Theory," *Jurnal Teori dan Aplikasi Fisika*, vol. 10, no. 1, pp. 89–102, Jan. 2022, [Online]. Available: <https://jtaf.fmipa.unila.ac.id/index.php/jtaf/article/view/289>
- [10] 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, p. 106402, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106402>.
- [11] B. S. H. F. and Y. T. Gogot Haryono, "Ekstrak Bahan Alam sebagai Inhibitor Korosi," Jan. 2010, [Online]. Available: [www.chem-is-try.org](http://www.chem-is-try.org)
- [12] 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, p. 103870, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2022.103870>.
- [13] D. Gedefaw, M. Prosa, M. Bolognesi, M. Seri, and M. R. Andersson, "Recent Development of Quinoxaline Based Polymers/Small Molecules for Organic Photovoltaics," *Adv Energy Mater*, vol. 7, no. 21, p. 1700575, Nov. 2017, doi: <https://doi.org/10.1002/aenm.201700575>.
- [14] G. Rebal, A. Ravi, and S. Churiwala, "Machine Learning Definition and Basics," in *An Introduction to Machine Learning*, G. Rebal, A. Ravi, and S. Churiwala, Eds., Cham: Springer International Publishing, 2019, pp. 1–17. doi: [10.1007/978-3-030-15729-6\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-15729-6_1).
- [15] A. H. Alamri, "Application of machine learning to stress corrosion cracking risk assessment," *Egyptian Journal of Petroleum*, vol. 31, no. 4, pp. 11–21, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2022.09.001>.
- [16] L. Yan, Y. Diao, Z. Lang, and K. Gao, "Corrosion rate prediction and influencing factors evaluation of low-alloy steels in marine atmosphere using machine learning approach," *Sci Technol Adv Mater*, vol. 21, no. 1, pp. 359–370, Jan. 2020, doi: [10.1080/14686996.2020.1746196](https://doi.org/10.1080/14686996.2020.1746196).
- [17] Q. Li *et al.*, "Determination of Corrosion Types from Electrochemical Noise by Gradient Boosting Decision Tree Method," *Int J Electrochem Sci*, vol. 14, no. 2, pp. 1516–1528, 2019, doi: <https://doi.org/10.20964/2019.02.72>.
- [18] 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, p. 101126, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.101126>.
- [19] 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](https://doi.org/10.18502/keg.v6i1.15351).
- [20] M. Akrom *et al.*, "Artificial Intelligence Berbasis QSPR Dalam Kajian Inhibitor Korosi," *JoMMiT: Jurnal Multi Media dan IT*, vol. 7, no. 1, pp. 015–020, Jul. 2023, doi: [10.46961/jommit.v7i1.721](https://doi.org/10.46961/jommit.v7i1.721).
- [21] Ahmad Harmain, P. Paiman, H. Kurniawan, K. Kusriani, and Dina Maulina, "Normalisasi Data Untuk Efisiensi K-Means Pada Pengelompokan Wilayah Berpotensi Kebakaran Hutan Dan Lahan Berdasarkan Sebaran Titik Panas," *TEKNIMEDIA: Teknologi Informasi dan Multimedia*, vol. 2, no. 2, pp. 83–89, Jan. 2022, doi: [10.46764/teknimedia.v2i2.49](https://doi.org/10.46764/teknimedia.v2i2.49).
- [22] J. Shao, "Linear Model Selection by Cross-validation," *J Am Stat Assoc*, vol. 88, no. 422, pp. 486–494, Jun. 1993, doi: [10.1080/01621459.1993.10476299](https://doi.org/10.1080/01621459.1993.10476299).
- [23] D. Berrar, "Cross-Validation," 2018. doi: [10.1016/B978-0-12-809633-8.20349-X](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809633-8.20349-X).
- [24] A. Peryanto, A. Yudhana, and R. Umar, "Klasifikasi Citra Menggunakan Convolutional Neural Network dan K Fold Cross Validation," *Journal of Applied Informatics and Computing*, vol. 4, pp. 45–51, May 2020, doi: [10.30871/jaic.v4i1.2017](https://doi.org/10.30871/jaic.v4i1.2017).
- [25] Nurhayati, I. Soekarno, I. K. Hadihardaja, and M. Cahyono, "A study of hold-out and k-fold cross validation for accuracy of groundwater modeling in tidal lowland reclamation using extreme learning machine," in *2014 2nd International Conference on Technology, Informatics, Management, Engineering & Environment*, 2014, pp. 228–233. doi: [10.1109/TIME-E.2014.7011623](https://doi.org/10.1109/TIME-E.2014.7011623).
- [26] T. Wahyono, *Fundamental of Python for Machine Learning: Dasar-Dasar Pemrograman Python untuk Machine Learning dan Kecerdasan Buatan*. 2018.
- [27] B. Siswoyo, "MultiClass Decision Forest Machine Learning Artificial Intelligence," *Journal of Applied Informatics and Computing*, vol. 4, no. 1, Jan. 2020, doi: [10.30871/jaic.v4i1.1155](https://doi.org/10.30871/jaic.v4i1.1155).
- [28] S. P. Nainggolan and A. Sinaga, "Comparative Analysis Of Accuracy Of Random Forest And Gradient Boosting Classifier Algorithm For Diabetes Classification," *Sebatik*, vol. 27, no. 1, pp. 97–102, Jun. 2023, doi: [10.46984/sebatik.v27i1.2157](https://doi.org/10.46984/sebatik.v27i1.2157).
- [29] T. Chen and C. Guestrin, "XGBoost: A Scalable Tree Boosting System," in *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, in KDD '16. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2016, pp. 785–794. doi: [10.1145/2939672.2939785](https://doi.org/10.1145/2939672.2939785).
- [30] T. Van Gestel, J. Suykens, B. De Moor, and J. Vandewalle, *Automatic Relevance Determination for Least Squares Support Vector Machine regression*, vol. 4. 2001. doi: [10.1109/IJCNN.2001.938745](https://doi.org/10.1109/IJCNN.2001.938745).
- [31] I. P. Artaya, S. Soebandhi, A. Alimudin, S. Nilowardono, and M. Kamisutara, *Ekonometrika Pemodelan Analisa Regresi Jenis dan Penerapannya*. Eureka Media Aksara, 2023.
- [32] F. Ayuningsih, S. Malikhah, M. R. Nugroho, W. Winarti, B. Murtiyasa, and S. Sumardi, "Pembelajaran Matematika Polinomial Berbasis STEAM PjBL Menumbuhkan Kreativitas Peserta Didik," *Jurnal Basicedu*, vol. 6, no. 5, pp. 8175–8187, Jun. 2022, doi: [10.31004/basicedu.v6i5.3660](https://doi.org/10.31004/basicedu.v6i5.3660).