

Artificial Intelligence Berbasis QSPR Dalam Kajian Inhibitor Korosi

Muhamad Akrom^a, Usman Sudibyo^b, Achmad Wahid Kurniawan^c, Noor Ageng Setiyanto^d, Wise Herowati^e, Ayu Pertiwi^f, Aprilyani Nur Safitri^g, Novianto Hidayat^h, Harun Al Aziesⁱ

^{a,b,c,d,e,f,g,h,i}Universitas Dian Nuswantoro

INFORMASI ARTIKEL

Sejarah Artikel:

Diterima Redaksi: 20 Mei 2023

Revisi Akhir: 24 Juni 2023

Diterbitkan Online: 15 Juli 2023

KATA KUNCI

Artificial intelligence, machine learning, QSPR, inhibitor korosi, baja

KORESPONDENSI

Muhamad Akrom

Program Studi Teknik Informatika, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang 50131, Indonesia

Email: m.akrom@dsn.dinus.ac.id

ABSTRACT

Baja termasuk material yang memiliki ketahanan rendah terhadap serangan korosi Ketika berada pada lingkungan korosif. Inhibitor organik mampu menghambat korosi dengan efisiensi inhibisi yang tinggi. Tinjauan komparatif penting bagi pengembangan metode evaluasi kinerja inhibitor disajikan dalam karya ini. Kami mereview perkembangan artificial intelligence berbasis mesin learning dengan model QSPR dalam kajian penghambatan korosi. Makalah ini menjelaskan bagaimana metode pembelajaran mesin berbasis data dapat menghasilkan model yang menghubungkan sifat-aktivitas molekuler dengan penghambatan korosi oleh inhibitor berbasis bahan alam (green inhibitor). Teknik ini dapat digunakan untuk memprediksi kinerja senyawa yang belum disintesis atau diuji. Keberhasilan model ini memberikan paradigma untuk penemuan senyawa baru yang cepat, penghambat korosi yang efektif untuk berbagai logam dan paduan.

DOI: <https://doi.org/10.46961/jommit.v7i1>

1. PENDAHULUAN

Besi ataupun paduan baja memiliki kualitas mekanis yang baik, tingkat ketersediaan yang tinggi, dan dapat diproduksi dengan mudah dan terjangkau, sehingga banyak digunakan dalam berbagai tujuan, termasuk sektor industri dan manufaktur [1], [2]. Meskipun demikian, ketahanan baja terhadap korosi ketika berada pada lingkungan korosif dianggap rendah [3], [4]. Korosi menyebabkan kerugian yang sangat besar di berbagai sektor, termasuk ekonomi, lingkungan, masyarakat, industri, keamanan, keselamatan, dan lainnya [5], [6]. Biaya global untuk penanganan korosi sekitar 3,4% dari PDB global, atau sekitar US\$ 2,5 triliun per tahun [7]. Biaya tersebut terus meningkat selama beberapa tahun terakhir [8]. Oleh karena itu korosi harus dikendalikan. Teknologi inhibitor masih menjadi salah metode yang tepat untuk menghambat korosi. Sekitar 875 miliar dolar per tahun atau 35% konsumsi biaya dapat dihemat dengan penggunaan inhibitor korosi [9]. Telah dikaji selama bertahun-tahun penggunaan ekstrak tanaman sebagai inhibitor korosi berbasis bahan alam (green inhibitor), sehingga pencarian green inhibitor terus berkembang.

Umumnya, metode seperti analisa gravimetri, polarisasi potensiodinamik, dan spektroskop impedansi elektrokimia digunakan sebagai evaluasi secara eksperimental. Akan tetapi, metode eksperimen ini biasanya mahal, memakan banyak waktu, dan membutuhkan sumber daya yang intensif [10], [11]. Kemajuan teknologi komputasi saat ini dapat dikombinasikan dengan penerapan algoritma mekanika kuantum, sehingga membuka jalan bagi percepatan desain dan pencarian material baru. Bidang kecerdasan buatan memungkinkan proses pembelajaran mesin, termasuk pengelompokan, klasifikasi, dan penciptaan model prediktif, untuk beragam topik yang luas, termasuk bidang korosi. Baru-baru ini, metode pembelajaran mesin (ML) berbasis quantitative structure-properties (QSPR) atau quantitative structure-activity relationship (QSAR) menjadi metode yang efektif dan efisien dalam pengembangan dan penelusuran kandidat inhibitor korosi. Karena sifat-sifat elektronik dan reaktivitas kimiawi dapat dikuantifikasi terhadap struktur kimia senyawa, maka metode QSPR atau QSAR berbasis ML dapat digunakan lebih lanjut dalam menginvestigasi beragam senyawa kandidat inhibitor. Korelasi antara karakteristik struktur molekuler dan sifat kimianya membuat teknik QSPR berbasis ML

menjadi metode yang murah, cepat, dan andal dalam eksplorasi inhibitor baru [12]–[14].

Beragam algoritma ML seperti genetic algorithm (GA), multiple linear regression (MLR), partial least squares (PLS), ordinary least squares regression (OLS), artificial neural network (ANN), k-nearest neighbors (KNN), adaptive neural fuzzy inference system (ANFIS), random forest (RF), support vector machines (SVM), autoregressive with exogenous inputs (ARX), dan lain-lainnya telah banyak digunakan dan dikombinasikan dalam pengembangan model QSPR untuk mengevaluasi performa inhibitor. Zhao et al. [15] menggunakan teknik nonlinear SVM dari 19 asam amino dan melaporkan nilai RMSE dan R^2 masing-masing adalah 1.48 dan 0,97. Liu et al. [16] menggunakan model SVM dengan 11 deskriptor untuk mengevaluasi 20 turunan benzimidazole, dimana dilaporkan nilai RMSE sekitar 4.45. Studi QSPR lain juga dikembangkan untuk memprediksi senyawa-senyawa turunan piridin dan kuinolin dengan 20 deskriptor kimia kuantum menggunakan kombinasi teknik linier GA-PLS dan non-linier GA-ANN. Model GA-PLS menunjukkan hasil RMSE 14.90, sementara model GA-ANN menunjukkan RMSE sebesar 8.80 [17]. Model linier MLR dan non-linier ANN digunakan untuk mengevaluasi 20 turunan senyawa piridazin dengan 5 deskriptor oleh Quadri et al. [18]. Hasilnya menunjukkan bahwa model ANN memberikan hasil lebih optimal dengan nilai RMSE sebesar 10.56. Dalam studi terpisah, Quadri et al. [19] juga mengembangkan model linier OLS dan non-linier ANN untuk memprediksi 40 senyawa turunan kuinoksalin dengan 5 deskriptor terseleksi. Hasilnya dilaporkan bahwa model non-linier ANN menunjukkan prediksi yang lebih baik dengan nilai RMSE sebesar 5.42. Anadebe et al. [20] melaporkan performa model ANN dan ANFIS Kedua metode non-linier tersebut menghasilkan nilai R^2 dan RMSE sebesar 0.91 dan 4.35 untuk ANN, sementara R^2 dan RMSE untuk ANFIS sebesar 1.37 dan 0.99. Hasil tersebut menunjukkan bahwa model ANFIS lebih baik dari model ANN dalam mengevaluasi 15 molekul obat salbutamol kadaluarsa sebagai inhibitor. Selain itu, laporan terbaru dengan mengembangkan model ARX untuk 250 obat komersial yang digunakan sebagai inhibitor korosi diperoleh nilai RMSE sebesar 7.03 [14].

Karya ini merupakan ikhtisar dan dapat menjadi literatur komparatif penting tentang penerapan ML dalam kajian bidang inhibitor korosi. Fokus utama dari tinjauan ini adalah penggunaan model QSPR/QSAR untuk menginvestigasi sifat penghambatan korosi senyawa organik. Model tersebut dapat digunakan untuk memahami hubungan antara struktur kimia inhibitor dan kemampuannya dalam menghambat korosi, serta memungkinkan untuk mengevaluasi senyawa baru yang belum disintesis atau diuji. Teknik tersebut juga dapat digunakan untuk mendesain inhibitor korosi baru dengan beberapa sifat yang diinginkan.

2. TINJAUAN PUSTAKA

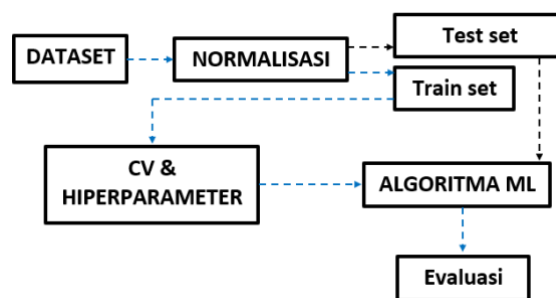
2.1. Dataset, Fitur, dan Target

Pada metode ML, ketersediaan dataset menjadi hal yang sangat mendasar. Dataset berisi tentang informasi fitur sebagai

variabel independen dan target sebagai variabel dependen. Pada kajian QSPR berbasis ML untuk bidang inhibitor korosi, umumnya fitur yang digunakan adalah deskriptor kimia kuantum yang merupakan sifat dan aktivitas molekuler inhibitor, sedangkan targetnya adalah performa penghambatan korosi (efisiensi inhibisi) dari inhibitor. Berbagai deskriptor kimia kuantum dari senyawa inhibitor digunakan untuk membangun model QSPR yang tervalidasi secara statistik untuk dipertimbangkan, dianalisis, dan dimodelkan dalam memandu desain penghambatan korosi berbasis ML. Deskriptor kimia kuantum dari inhibitor merupakan faktor kunci dalam penghambatan korosi. Penghambatan korosi sangat bergantung pada reaktivitas kimiawi dari molekul inhibitor yang direpresentasikan dalam beragam deskriptor kimia kuantum [17], [18], [21]. Deskriptor kimia kuantum yang umumnya digunakan sebagai fitur dalam dataset untuk mengevaluasi korelasi terhadap efisiensi inhibisi korosi diantaranya energi HOMO, energi LUMO, energi gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), global hardness (η), global softness (σ), elektronegativitas (χ), momen dipol (μ), elektrofilitas (ω), fraksi elektron yang ditransfer (ΔN), energi total (TE), dan lain-lainnya. Deskriptor diatas dapat dihitung melalui metode teori fungsional kerapatan dan juga teori Koopman. Deskriptor lain yang juga dapat digunakan adalah konsentrasi inhibitor, suhu, polarisabilitas, dan lain-lainnya yang diperoleh melalui eksperimental.

3. KONSEP PERANCANGAN

Model ML dapat dibangun menggunakan beragam algoritma, misalnya ANN, KNN, RF, SVR, dan lain-lain. Model yang telah dibangun dapat digunakan untuk mengevaluasi korelasi fitur dan target dari suatu dataset, sebagaimana ilustrasi pada Gambar 1. Umumnya, dataset akan dibagi menjadi data pelatihan (train set) dan data pengujian (test set). Pada tahap preprocessing, dapat dilakukan proses normalisasi pada train set maupun test set untuk menghindari masalah sensitifitas fitur tertentu terhadap target. Beberapa teknik normalisasi yang dapat digunakan diantaranya standar sacler, min-max scaler, dan robust scaler [22].



Gambar 1. Ilustrasi model ML

Untuk menentukan stabilitas model dari algoritma ML, dapat diterapkan teknik cross-validation (CV) melalui pelatihan berulang (iterasi) hingga tercapai nilai kesalahan statistik minimum. Beberapa Teknik CV yang biasa digunakan antara lain hold-out, k-fold, stratified k-fold, leave-one-out, dan leave-p-out [23], [24]. Metode hiperparameter juga umum diterapkan untuk

mencari parameter yang sesuai dengan karakteristik model yang digunakan sehingga mendapatkan akurasi prediksi yang tinggi. Pendekatan ini adalah yang paling mudah untuk menemukan parameter ideal model karena mengevaluasi setiap kemungkinan kombinasi dalam ruang parameter diskrit yang disediakan. Beberapa teknik yang digunakan antara lain grid, random, dan bayesian-search [25], [26].

Metrik yang kuat seperti koefisien determinasi (R^2) dan root mean square error (RMSE) digunakan untuk menilai kinerja model. R^2 menunjukkan kecocokan algoritma ML yang digunakan untuk mengevaluasi dataset. RMSE menghitung selisih antara nilai aktual dan nilai prediksi. Model prediksi yang baik ditunjukkan oleh nilai RMSE yang rendah dan R^2 yang mendekati 1. Metrik kesalahan statistik ini digunakan untuk menilai keakuratan model, dimana kesalahan statistik yang lebih rendah menunjukkan prediktabilitas model yang lebih baik [18], [27].

4. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1. Green Inhibitor Korosi

Investigasi inhibitor korosi berbasis ekstrak bahan alam (green inhibitor) terus berkembang karena bersifat ramah lingkungan, renewable, biodegradable, tidak menimbulkan polutan, tidak beracun, mudah diproduksi, murah, dan memiliki efisiensi anti korosi yang tinggi [28], [29]. Green inhibitor yang dalam struktur senyawanya mengandung cincin aromatik dan gugus heteroatom (seperti O, N, S, P) dianggap sebagai inhibitor yang efektif dan efisien [30]–[32].

Tabel 1. Contoh performa green inhibitor

Inhibitor	Efisiensi inhibisi (%)	Ref.
Artichoke	98.7	[33]
Chamomile flower	97.0	[34]
Pineapple stem	95.5	[35]
Thymus vulgaris	95.0	[36]
Primula vulgaris	94.4	[37]
Juglans regia	94.2	[38]
Cassia occidentalis	93.0	[39]
Mangifera indica	92.2	[40]

Efisiensi penghambatan (inhibisi) merupakan tingkat penurunan aktivitas korosi akibat performa inhibitor dalam melindungi logam. Berikut ini disajikan contoh hasil studi tentang performa beberapa green inhibitor pada baja dalam medium asam berdasarkan efisiensi inhibisinya pada Tabel 1. Dapat dilihat bahwa secara umum inhibitor berbasis bahan alam memiliki performa yang sangat baik untuk digunakan sebagai penghambat korosi pada baja, hingga pada rentang 92 – 98%.

Pada kajian inhibitor korosi berbasis ML, performa inhibisi korosi berkaitan dengan sifat-aktivitas molekuler senyawan

inhibitor yang diwakili oleh descriptor kimia kuantum, sebagaimana disebutkan pada bagian sebelumnya. HOMO (highest occupied molecular orbital) adalah orbital molekul tertinggi yang berisi elektron, sedangkan LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) merupakan orbital terendah yang tidak berisi elektron. HOMO menggambarkan kemampuan molekul inhibitor sebagai pendonor elektron, sedangkan LUMO merupakan sifat molekul inhibitor sebagai akseptor elektron. Perpindahan elektron dapat dipelajari melalui kondisi orbital HOMO-LUMO berdasarkan nilai energinya. Molekul inhibitor tidak hanya bersifat sebagai pendonor elektron ke permukaan logam, namun juga bersifat sebagai akseptor elektron dari permukaan logam. Energi gap (ΔE_{gap}) merupakan perbedaan energi antara LUMO dan HOMO, yang mana menunjukkan tingkat kemampuan berikatan molekul inhibitor pada permukaan logam. Potensial ionisasi (I) dan afinitas elektron (A) juga menjelaskan tingkat reaktivitas molekul inhibitor. Elektronegativitas (χ) berkaitan dengan kemampuan molekul inhibitor untuk menarik elektron sehingga tercapai kesetimbangan elektron. Global hardness (η) menunjukkan ketahanan suatu molekul untuk mentransfer muatan, sementara global softness (σ) menunjukkan kapasitas suatu molekul untuk menerima muatan. Momen dipol (μ) molekul menggambarkan tentang kemampuan (dipol ikatan) molekul berinteraksi dengan dipol permukaan logam. Ini berkaitan dengan area kontak antara molekul inhibitor dengan permukaan logam yang mengarah pada kemampuan penghambatan korosi yang lebih baik [41]–[43].

Polarisabilitas (δ) molekul mempertimbangkan distribusi kerapatan elektron di sekitar molekul. Elektrofilitas (ω) juga menggambarkan kemampuan suatu molekul untuk menyerap elektron. Ketika molekul inhibitor dan permukaan logam berinteraksi, maka akan terjadi aliran elektron dari molekul inhibitor ke atom permukaan logam (ΔN). Perpindahan elektron terjadi karena perbedaan nilai elektronegativitas antara molekul inhibitor dengan permukaan logam. Elektron akan berpindah dari molekul inhibitor (elektronegativitas rendah) menuju permukaan logam (elektronegativitas tinggi) hingga potensial kimianya setimbang. Energi total berkaitan dengan kemampuan molekul inhibitor untuk teradsorpsi pada permukaan logam. Kapasitas donor elektron (ω^-) menjelaskan kecenderungan molekul untuk mendonorkan muatan, sedangkan kapasitas penerima elektron (ω^+) menjelaskan kecenderungan molekul untuk menerima muatan. Analisis terhadap muatan yang berinteraksi dapat melalui penggunaan analisis populasi Orbital Ikatan Alami (NBO). Ini dapat menunjukkan nilai kenegatifan muatan atom. Selain itu, juga dapat dianalisa muatan atom positif yang menjadi pusat akseptor elektron dari permukaan logam. Secara umum mekanisme penghambatan korosi berkaitan dengan interaksi antara molekul inhibitor dengan permukaan logam. Inhibitor korosi dapat teradsorpsi pada permukaan logam melalui kemisorpsi ataupun fisisorpsi. Oleh karena itu, energi adsorpsi (ΔE_{ads}) termasuk deskriptor molekuler yang penting. Hidrofobisitas ($\log P$) berkaitan dengan kemampuan molekul untuk membentuk lapisan teradsorpsi melalui mekanisme hidrofobik untuk menghambat korosi. Luas permukaan van der Waals (VSA) dan volume van der Waals (VV), serta luas

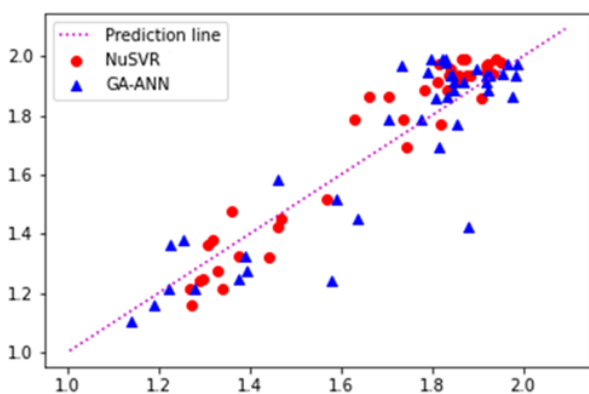
permukaan yang dapat diakses pelarut (SASA) dipertimbangkan untuk mengukur kemampuan molekul untuk mencegah akses agen korosif ke permukaan logam [17], [44], [45].

4.2. Performa Model Prediksi

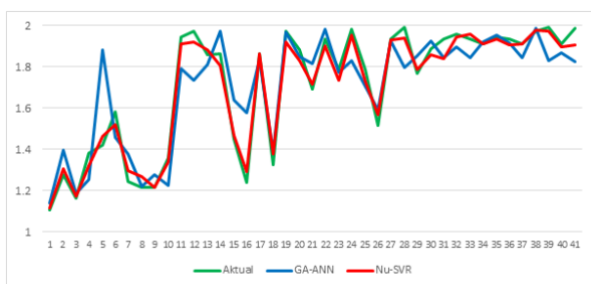
Berikut adalah contoh hasil prediksi efisiensi inhibisi dari dataset 41 inhibitor berbasis piridin-kuinolin dengan menggunakan 20 deskriptor kimia kuantum. Hasil kinerja model prediksi dari 2 algoritma (NuSVR dan GA-ANN) disajikan pada Tabel 2. Dan ilustrasi sebaran data prediksi terhadap data actual disajikan pada Gambar 2. Pada Gambar 3, disajikan plot dari nilai logaritmik efisiensi inhibisi antara nilai actual terhadap nilai hasil prediksi model GA-ANN dan Nu-SVR.

Tabel 2. Hasil evaluasi model Nu-SVR dan GA-ANN

Model	RMSE (%)	R ²
GA-ANN	14.98	0.80
Nu-SVR	12.22	0.87



Gambar 2. Sebaran data prediksi vs data actual



Gambar 3. Plot nilai log IE antara nilai actual vs nilai prediksi model

Dapat dilihat pada Tabel 2 bahwa performa model prediksi dari NuSVR lebih baik dibandingkan GA-ANN berdasarkan nilai RMSE dan R². Hal tersebut juga didukung oleh visualisasi data pada Gambar 2, dimana sebaran titik data model Nu-SVR (berwarna merah) relatif lebih dekat ke garis prediksi dibandingkan dengan model GA-ANN (berwarna biru). Hal tersebut karena karakteristik kernel yang terdapat pada Nu-SVR mampu memetakan pola data nonlinier pada ruang berdimensi lebih tinggi, sehingga membentuk pola data baru yang relatif lebih linier dari pola data sebelumnya [29,30-nusvr], menyebabkan model Nu-SVR memiliki kinerja yang unggul daripada model GA-ANN untuk kumpulan data ini. Dari Gambar

3, dapat dilihat bahwa hasil plot menunjukkan model Nu-SVR memiliki pola yang relative lebih mirip dengan pola data actual dibanding model GA-ANN. Ini menunjukkan bahwa nilai prediksi model Nu-SVR lebih mendekati nilai actual dibanding nilai prediksi model GA-ANN. Hal ini mempertegas bahwa model Nu-SVR menunjukkan performa model prediksi yang lebih baik dibanding GA-ANN.

5. KESIMPULAN DAN SARAN

Karya ini menunjukkan penggunaan kecerdasan buatan dalam memprediksi kemampuan penghambatan korosi oleh inhibitor menggunakan metodologi pembelajaran mesin. Pendekatan mesin learning untuk mengevaluasi kinerja senyawa inhibitor organik sebagai penghambat korosi dapat dikembangkan melalui teknik QSPR/QSAR berdasarkan sifat dan aktivitas molekuler senyawa inhibitor. Hasil prediksi nilai efisiensi inhibisi korosi melalui pendekatan mesin learning dapat sesuai dengan hasil metode eksperimen. Pengembangan dalam model mesin learning akan mengarah pada peningkatan besar-besaran dalam kemampuan dan keandalan metode untuk desain inhibitor korosi organik di masa mendatang. Untuk itu, kami menyarankan agar teknik ini dijadikan sebagai tahap awal screening sejumlah besar inhibitor potensial sehingga mempercepat penemuan inhibitor baru dan untuk mendesain inhibitor dengan beberapa sifat yang diinginkan, sebelum sintesis secara eksperimental.

DAFTAR PUSTAKA.

- [1] D. I. Njoku, Y. Li, H. Lgaz, and E. E. Oguzie, "Dispersive adsorption of Xylopiya aethiopica constituents on carbon steel in acid-chloride medium: A combined experimental and theoretical approach," *J Mol Liq*, vol. 249, pp. 371–388, Jan. 2018, doi: 10.1016/j.molliq.2017.11.051.
- [2] R. Hsissou *et al.*, "Evaluation of corrosion inhibition performance of phosphorus polymer for carbon steel in [1 M] HCl: Computational studies (DFT, MC and MD simulations)," *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 9, no. 3, pp. 2691–2703, 2020, doi: 10.1016/j.jmrt.2020.01.002.
- [3] E. Gutiérrez, J. A. Rodríguez, J. Cruz-Borbolla, J. G. Alvarado-Rodríguez, and P. Thangarasu, "Development of a predictive model for corrosion inhibition of carbon steel by imidazole and benzimidazole derivatives," *Corros Sci*, vol. 108, pp. 23–35, Jul. 2016, doi: 10.1016/j.corsci.2016.02.036.
- [4] I. Ichchou, L. Larabi, H. Rouabhi, Y. Harek, and A. Fellah, "Electrochemical evaluation and DFT calculations of aromatic sulfonohydrazides as corrosion inhibitors for XC38 carbon steel in acidic media," *J Mol Struct*, vol. 1198, Dec. 2019, doi: 10.1016/j.molstruc.2019.126898.
- [5] D. K. Verma, "Density Functional Theory (DFT) as a Powerful Tool for Designing Corrosion Inhibitors in Aqueous Phase," in *Advanced Engineering Testing*, InTech, 2018. doi: 10.5772/intechopen.78333.
- [6] A. Sedik *et al.*, "Dardagan Fruit extract as eco-friendly corrosion inhibitor for mild steel in 1 M HCl: Electrochemical and surface morphological studies," *J*

- Taiwan Inst Chem Eng*, vol. 107, pp. 189–200, Feb. 2020, doi: 10.1016/j.jtice.2019.12.006.
- [7] M. C. Groenenboom *et al.*, “Doped Amorphous Ti Oxides to Deoptimize Oxygen Reduction Reaction Catalysis,” *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 121, no. 31, pp. 16825–16830, Aug. 2017, doi: 10.1021/acs.jpcc.7b04210.
- [8] H. DorMohammadi, Q. Pang, L. Árnadóttir, and O. Burkan Isgor, “Atomistic simulation of initial stages of iron corrosion in pure water using reactive molecular dynamics,” *Comput Mater Sci*, vol. 145, pp. 126–133, Apr. 2018, doi: 10.1016/j.commatsci.2017.12.044.
- [9] S. Marzorati, L. Verotta, and S. P. Trasatti, “Green corrosion inhibitors from natural sources and biomass wastes,” *Molecules*, vol. 24, no. 1, 2019, doi: 10.3390/molecules24010048.
- [10] M. A. Quraishi, D. S. Chauhan, and V. S. Saji, “Heterocyclic biomolecules as green corrosion inhibitors,” *Journal of Molecular Liquids*, vol. 341. Elsevier B.V., Nov. 01, 2021. doi: 10.1016/j.molliq.2021.117265.
- [11] R. Singh, D. Prasad, Z. Safi, N. Wazzan, and L. Guo, “De-scaling, experimental, DFT, and MD-simulation studies of unwanted growing plant as natural corrosion inhibitor for SS-410 in acid medium,” *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*, vol. 649, Sep. 2022, doi: 10.1016/j.colsurfa.2022.129333.
- [12] M. E. Belghiti *et al.*, “Performance of triazole derivatives as potential corrosion in-hibitors for mild steel in a strong phosphoric acid medium: Combining experimental and computational (DFT, MDs & QSAR) approaches,” *J Mol Struct*, vol. 1256, May 2022, doi: 10.1016/j.molstruc.2022.132515.
- [13] T. L. P. Galvão, G. Novell-Leruth, A. Kuznetsova, J. Tedim, and J. R. B. Gomes, “Elucidating Structure-Property Relationships in Aluminum Alloy Corrosion Inhibitors by Machine Learning,” *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 124, no. 10, pp. 5624–5635, Mar. 2020, doi: 10.1021/acs.jpcc.9b09538.
- [14] C. Beltran-Perez *et al.*, “A General Use QSAR-ARX Model to Predict the Corrosion Inhibition Efficiency of Drugs in Terms of Quantum Mechanical Descriptors and Experimental Comparison for Lidocaine,” *Int J Mol Sci*, vol. 23, no. 9, May 2022, doi: 10.3390/ijms23095086.
- [15] H. Zhao, X. Zhang, L. Ji, H. Hu, and Q. Li, “Quantitative structure-activity relationship model for amino acids as corrosion inhibitors based on the support vector machine and molecular design,” *Corros Sci*, vol. 83, pp. 261–271, 2014, doi: 10.1016/j.corsci.2014.02.023.
- [16] Y. Liu *et al.*, “A Machine Learning-Based QSAR Model for Benzimidazole Derivatives as Corrosion Inhibitors by Incorporating Comprehensive Feature Selection,” *Interdiscip Sci*, vol. 11, no. 4, pp. 738–747, Dec. 2019, doi: 10.1007/s12539-019-00346-7.
- [17] C. T. Ser, P. Žuvela, and M. W. Wong, “Prediction of corrosion inhibition efficiency of pyridines and quinolines on an iron surface using machine learning-powered quantitative structure-property relationships,” *Appl Surf Sci*, vol. 512, May 2020, doi: 10.1016/j.apsusc.2020.145612.
- [18] T. W. Quadri *et al.*, “Development of QSAR-based (MLR/ANN) predictive models for effective design of pyridazine corrosion inhibitors,” *Mater Today Commun*, vol. 30, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.mtcomm.2022.103163.
- [19] 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.
- [20] V. C. Anadebe *et al.*, “Multidimensional insight into the corrosion inhibition of salbutamol drug molecule on mild steel in oilfield acidizing fluid: Experimental and computer aided modeling approach,” *J Mol Liq*, vol. 349, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.molliq.2022.118482.
- [21] 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.
- [22] M. Ahsan, M. Mahmud, P. Saha, K. Gupta, and Z. Siddique, “Effect of Data Scaling Methods on Machine Learning Algorithms and Model Performance,” *Technologies (Basel)*, vol. 9, no. 3, p. 52, Jul. 2021, doi: 10.3390/technologies9030052.
- [23] T. T. Wong and P. Y. Yeh, “Reliable Accuracy Estimates from k-Fold Cross Validation,” *IEEE Trans Knowl Data Eng*, vol. 32, no. 8, pp. 1586–1594, Aug. 2020, doi: 10.1109/TKDE.2019.2912815.
- [24] X. Yuan, Z. Ge, and Z. Song, “Soft sensor model development in multiphase/multimode processes based on Gaussian mixture regression,” *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 138, pp. 97–109, Nov. 2014, doi: 10.1016/j.chemolab.2014.07.013.
- [25] L. Yang and A. Shami, “On hyperparameter optimization of machine learning algorithms: Theory and practice,” *Neurocomputing*, vol. 415, pp. 295–316, Nov. 2020, doi: 10.1016/j.neucom.2020.07.061.
- [26] Z. M. Alhakeem, Y. M. Jebur, S. N. Henedy, H. Imran, L. F. A. Bernardo, and H. M. Hussein, “Prediction of Ecofriendly Concrete Compressive Strength Using Gradient Boosting Regression Tree Combined with GridSearchCV Hyperparameter-Optimization Techniques,” *Materials*, vol. 15, no. 21, Nov. 2022, doi: 10.3390/ma15217432.
- [27] F. Pedregosa FABIANPEDREGOSA *et al.*, “Scikit-learn: Machine Learning in Python Gaël Varoquaux Bertrand Thirion Vincent Dubourg Alexandre Passos PEDREGOSA, VAROQUAUX, GRAMFORT ET AL. Matthieu Perrot,” 2011. [Online]. Available: <http://scikit-learn.sourceforge.net>.
- [28] L. T. Popoola, “Organic green corrosion inhibitors (OGCIs): A critical review,” *Corrosion Reviews*, vol. 37, no. 2. De Gruyter, pp. 71–102, Apr. 01, 2019. doi: 10.1515/correv-2018-0058.

- [29] V. Vorobyova and M. Skiba, "APRICOT POMACE EXTRACT AS A NATURAL CORROSION INHIBITOR OF MILD STEEL CORROSION IN 0.5 M NaCl SOLUTION: A COMBINED EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACH," 2020.
- [30] M. Akrom, "Investigation Of Natural Extracts As Green Corrosion Inhibitors In Steel Using Density Functional Theory," 2022.
- [31] R. S. Oguike, A. M. Kolo, A. M. Shibdawa, and H. A. Gyenna, "Density Functional Theory of Mild Steel Corrosion in Acidic Media Using Dyes as Inhibitor: Adsorption onto Fe(110) from Gas Phase," *ISRN Physical Chemistry*, vol. 2013, pp. 1–9, Apr. 2013, doi: 10.1155/2013/175910.
- [32] C. Verma, E. E. Ebenso, and M. A. Quraishi, "Alkaloids as green and environmental benign corrosion inhibitors: An overview," *International Journal of Corrosion and Scale Inhibition*, vol. 8, no. 3, pp. 512–528, 2019, doi: 10.17675/2305-6894-2019-8-3-3.
- [33] A. Salmasifar, M. Edraki, E. Alibakhshi, B. Ramezanzadeh, and G. Bahlakeh, "Combined electrochemical/surface investigations and computer modeling of the aquatic Artichoke extract molecules corrosion inhibition properties on the mild steel surface immersed in the acidic medium," *J Mol Liq*, vol. 327, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.molliq.2020.114856.
- [34] M. H. Shahini, M. Keramatnia, M. Ramezanzadeh, B. Ramezanzadeh, and G. Bahlakeh, "Combined atomic-scale/DFT-theoretical simulations & electrochemical assessments of the chamomile flower extract as a green corrosion inhibitor for mild steel in HCl solution," *J Mol Liq*, vol. 342, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.molliq.2021.117570.
- [35] M. Mobin, M. Basik, and J. Aslam, "Pineapple stem extract (Bromelain) as an environmental friendly novel corrosion inhibitor for low carbon steel in 1 M HCl," *Measurement (Lond)*, vol. 134, pp. 595–605, Feb. 2019, doi: 10.1016/j.measurement.2018.11.003.
- [36] S. M. Lashgari, G. Bahlakeh, and B. Ramezanzadeh, "Detailed theoretical DFT computation/molecular simulation and electrochemical explorations of Thymus vulgaris leave extract for effective mild-steel corrosion retardation in HCl solution," *J Mol Liq*, vol. 335, Aug. 2021, doi: 10.1016/j.molliq.2021.115897.
- [37] M. T. Majd, S. Asaldoust, G. Bahlakeh, B. Ramezanzadeh, and M. Ramezanzadeh, "Green method of carbon steel effective corrosion mitigation in 1 M HCl medium protected by Primula vulgaris flower aqueous extract via experimental, atomic-level MC/MD simulation and electronic-level DFT theoretical elucidation," *J Mol Liq*, vol. 284, pp. 658–674, Jun. 2019, doi: 10.1016/j.molliq.2019.04.037.
- [38] A. E. A. S. Fouda, S. M. Rashwan, M. M. Kamel, and E. A. Haleem, "Juglans regia extract (JRE) as eco-friendly inhibitor for aluminum metal in hydrochloric acid medium," *Biointerface Res Appl Chem*, vol. 10, no. 5, pp. 6398–6416, Oct. 2020, doi: 10.33263/BRIAC105.63986416.
- [39] C. O. Akalezi, C. K. Enenebaku, and E. E. Oguzie, "Application of aqueous extracts of coffee senna for control of mild steel corrosion in acidic environments," *International Journal of Industrial Chemistry*, vol. 3, no. 1, pp. 1–12, Dec. 2012, doi: 10.1186/2228-5547-3-13.
- [40] K. Karattu Veedu, T. Peringattu Kalarikkal, N. Jayakumar, and N. K. Gopalan, "Anticorrosive Performance of Mangifera indica L. Leaf Extract-Based Hybrid Coating on Steel," *ACS Omega*, vol. 4, no. 6, pp. 10176–10184, Jun. 2019, doi: 10.1021/acsomega.9b00632.
- [41] M. Akrom, "Investigasi DFT pada Ekstrak Tanaman Cengkeh dan Tembakau sebagai Inhibitor Korosi Hijau DFT Investigation of Syzygium Aromaticum and Nicotiana Tabacum Extracts as Corrosion Inhibitor."
- [42] L. G. Marni, E. Emriadi, S. Syukri, and I. Imelda, "Mempelajari inhibisi korosi senyawa khellin dan visnagin pada atom besi menggunakan metode DFT (density functional theory)," *Jurnal Litbang Industri*, vol. 9, no. 2, p. 111, Dec. 2019, doi: 10.24960/jli.v9i2.5403.111-118.
- [43] N. Arrousse *et al.*, "The inhibition behavior of two pyrimidine-pyrazole derivatives against corrosion in hydrochloric solution: Experimental, surface analysis and in silico approach studies," *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 13, no. 7, pp. 5949–5965, Jul. 2020, doi: 10.1016/j.arabjc.2020.04.030.
- [44] D. K. Kozlica, A. Kokalj, and I. Milošev, "Synergistic effect of 2-mercaptobenzimidazole and octylphosphonic acid as corrosion inhibitors for copper and aluminium – An electrochemical, XPS, FTIR and DFT study," *Corros Sci*, vol. 182, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.corsci.2020.109082.
- [45] A. Kokalj, "Corrosion inhibitors: physisorbed or chemisorbed?," *Corros Sci*, vol. 196, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.corsci.2021.109939.