

Investigasi Efisiensi Penghambatan Korosi Senyawa Quinoxaline Berbasis Machine Learning

A Study on the Corrosion Inhibition Efficiency of Quinoxaline Compounds Utilizing Machine Learning

Vicenzo Frendyatha Adiprasetya^a, Muhamad Akrom^{a,b,*}, Gustina Alfa Trisnapradika^{a,b}

^aProgram Studi Teknik Informatika, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang, Indonesia

^bResearch Center for Materials Informatics, Fakultas Ilmu Komputer, Universitas Dian Nuswantoro, Semarang, Indonesia

Artikel histori :

Diterima 27 Juni 2023
Diterima dalam revisi 1 Februari 2024
Diterima 21 Februari 2024
Online 22 Maret 2024

ABSTRAK: Korosi memberikan kekhawatiran serius bagi sektor industri dan akademik karena mempunyai dampak negatif yang signifikan terhadap sejumlah bidang, termasuk perekonomian, lingkungan, masyarakat, industri, keamanan, dan keselamatan. Saat ini, banyak peminat topik pengendalian kerusakan bahan berbasis molekul organik. Quinoxaline mempunyai potensi sebagai inhibitor korosi karena tidak beracun, mudah diproduksi, dan efektif dalam berbagai kondisi korosif. Mengeksplorasi kemungkinan kandidat penghambat korosi melalui penelitian eksperimental adalah proses yang memakan waktu dan sumber daya yang intensif. Dengan menggunakan pendekatan machine learning (ML) berdasarkan model quantitative structure-property relationship (QSPR), kami mengevaluasi beragam algoritma linier dan non-linier sebagai model prediktif nilai corrosion inhibition efficiency (CIE) dalam penelitian ini. Kami menemukan bahwa, untuk kumpulan data senyawa quinoxaline, model non-linier Gradient Boosting Regressor (GBR) mengungguli keseluruhan model linier dan non-linier, serta hasil dari literatur dalam hal kinerja prediksi berdasarkan metrik root mean squared error (RMSE), mean squared error (MSE), mean absolute deviation (MAD), mean absolute percentage error (MAPE) dan coefficient of determination (R^2). Secara keseluruhan, penelitian kami memberikan sudut pandang baru tentang kapasitas model ML untuk memperkirakan kemampuan penghambatan korosi pada permukaan besi oleh senyawa organik quinoxaline.

Kata Kunci: korosi; inhibitor; machine learning; quinoxaline.

ABSTRACT: Corrosion represents a formidable challenge for both industrial and academic sectors due to its substantial adverse implications across various domains, encompassing the economy, environment, society, industry, security, and safety. The contemporary focus on material damage control, specifically of organic molecules, underscores the potential utility of quinoxaline as a corrosion inhibitor. This is attributed to its non-toxic nature, facile production, and efficacy under diverse corrosive conditions. Exploring corrosion inhibitor candidates through empirical research constitutes a time-intensive and resource-demanding endeavor. In this study, we employed a machine learning (ML) paradigm founded on the quantitative structure-property relationship (QSPR) model to assess numerous linear and non-linear algorithms as predictive models for corrosion inhibition efficiency (CIE) values. Our investigation revealed that, within the dataset on the quinoxaline compound, the non-linear Gradient Boosting Regressor (GBR) model exhibited superior performance compared to both linear and non-linear models, as well as results documented in existing literature. This superiority was quantitatively measured using the root mean squared error (RMSE) metric, mean squared error (MSE), mean absolute deviation (MAD), mean absolute percentage error (MAPE), and coefficient of determination (R^2). In summary, our research contributes a novel perspective on the efficacy of ML models in estimating the corrosion inhibition capacity of iron surfaces facilitated by the organic compound quinoxaline.

Keywords: corrosion; inhibitor; machine learning; quinoxaline.

1. Pendahuluan

Korosi dapat dianggap sebagai kebalikan dari proses

ekstraksi (pemurnian) logam. Logam yang ditemukan secara alami umumnya berada dalam bentuk senyawa, seperti

oksida, sulfida, karbonat, dan silikat. Oleh karena itu, korosi dapat dianggap sebagai suatu proses yang berlawanan dengan pemurnian logam atau ekstraksi, di mana logam kembali berinteraksi dengan lingkungan dan membentuk senyawa-senyawa tersebut (Akrom et al., 2023a; Budi et al., 2023; Sutojo et al., 2023). Dalam konteks korosi, reaksi yang umum terjadi pada sel elektrokimia adalah proses reduksi dan oksidasi (Akrom et al., 2024; Batu et al., 2022). Kerusakan akibat korosi pada bahan menjadi suatu kekhawatiran utama di kalangan industri dan akademisi. Fenomena ini dapat menyebabkan kerugian signifikan dalam berbagai aspek, termasuk pada sektor ekonomi, lingkungan, masyarakat, industri, keamanan, dan keselamatan (Akrom et al., 2023b). Konsekuensi dari korosi memiliki dampak yang signifikan, mencakup peningkatan biaya dalam proses produksi, perawatan, dan perbaikan. Selain itu, efisiensi peralatan dapat menurun, menyebabkan peningkatan biaya operasional dan berpotensi merugikan secara ekonomi (Akrom et al., 2023c; Deyab et al., 2022). Laju korosi dapat diperlambat untuk mencegah kerugian dengan beberapa metode, seperti penggunaan pelapisan pada permukaan logam, penerapan perlindungan katodik, penyimpanan dalam minyak tanah, dan penambahan inhibitor korosi (Budi et al., 2024; Novitaningrum et al., 2023).

Pemanfaatan teknologi inhibitor dalam pengelolaan korosi adalah salah satu metode yang sederhana, efektif, dan efisien secara biaya (Haikal et al., 2023). Keunggulan senyawa inhibitor korosi terletak pada kemampuannya membentuk lapisan pelindung di permukaan logam (Al-Amiery et al., 2023). Lapisan ini berfungsi untuk menghambat perpindahan muatan dan massa, sehingga mampu melindungi logam dari dampak lingkungan yang bersifat korosif. Tingkat efektivitasnya dapat diukur berdasarkan kemampuan ini. Inhibitor korosi adalah substansi kimia yang dicampurkan ke dalam lingkungan yang rentan terhadap korosi dengan tujuan mengurangi laju terjadinya korosi (Maidawati, 2023). Inhibitor dalam bentuk senyawa organik memiliki sifat khas yang memungkinkannya berinteraksi secara efisien dengan permukaan logam yang rentan terhadap korosi. Inhibitor korosi biasanya bekerja dengan membentuk lapisan pelindung pada permukaan logam, menghambat reaksi oksidasi yang menyebabkan korosi (Akrom, 2022). Menggunakan inhibitor adalah salah satu cara yang terkenal dan efektif untuk melindungi dari kerusakan akibat korosi (Budi et al., 2023).

Senyawa quinoxaline adalah jenis senyawa heterosiklik yang terdiri dari cincin benzena dan pirazin (Noor et al., 2016). Quinoxaline telah diperhatikan secara luas dalam konteks inhibitor organik karena kemampuannya untuk menghambat korosi dalam berbagai jenis media (Chauhan et al., 2020; Herowati et al., 2024). Kinerja unggul inhibitor korosi berbasis quinoxaline telah dikaitkan dengan keberadaan gugus fungsi, ikatan konjugasi ganda, dan cincin aromatik dalam struktur molekulnya. Secara umum, para peneliti telah memanfaatkan alat teoritis seperti studi kimia kuantum dan simulasi atom untuk mengidentifikasi sifat elektronik dan struktural yang relevan dengan efektivitas

penghambatan. Selain itu, beberapa penelitian telah menggunakan hasil perhitungan teoritis seperti teori fungsional kerapatan/density functional theory (DFT) dan simulasi molekuler untuk menjelaskan mekanisme inhibisi yang diamati pada senyawa quinoxaline (Quadri et al., 2022). Namun, penelitian eksperimental mengharuskan penggunaan waktu, biaya, dan sumber daya yang signifikan (Akrom et al., 2023d).

Salah satu inovasi paling berhasil pada abad ini adalah teknologi pembelajaran mesin (ML), yang bertujuan untuk mengklasifikasikan, mengelompokkan, dan mengidentifikasi pola pada dataset yang besar maupun dataset yang kecil (Cerezo et al., 2022). Penggunaan Machine Learning (ML) memberikan solusi yang efektif dalam mengevaluasi senyawa penghambat korosi. Meskipun, peningkatan akurasi masih dapat dilakukan dalam evaluasi model-model penghambat korosi saat ini. Penggunaan ML bisa diterapkan untuk menilai kinerja penghambatan korosi suatu senyawa karena terdapat korelasi kuantitatif antara struktur senyawa dengan karakteristik serta aktivitas molekulnya (El Assiri et al., 2020). Sejumlah algoritma lainnya seperti decision trees, gradient boosting machines, deep learning neural networks, Bayesian methods, ensemble methods, dan clustering algorithms juga telah digunakan dan diintegrasikan dalam upaya pengembangan model Machine Learning untuk mengevaluasi kinerja inhibitor (Akrom, et al., 2023e). Quadri et al. (Quadri et al., 2022) memilih Artificial Neural Network (ANN) untuk memodelkan hubungan nonlinier antara variabel kimia yang dipilih dan kinerja penghambatan dari 40 molekul kuinoksalin yang diselidiki, hasilnya menunjukkan bahwa model ANN menghasilkan nilai RMSE, MSE, MAD, dan MAPE masing-masing adalah 5.42, 29.33, 2.38, dan 5.04. Namun, berdasarkan hasil pada metrik yang digunakan, tingkat keakuratan model yang dilaporkan masih cenderung rendah dan berpotensi untuk ditingkatkan.

Tantangan utama dalam pengembangan ML adalah mengembangkan model yang dapat memberikan prediksi yang akurat sehingga hasilnya dapat memberikan informasi yang relevan dan menggambarkan sifat-sifat sebenarnya dari material yang sedang diuji. Oleh karena itu, dalam penelitian ini, kami menguji 10 model ML yang terdiri dari 5 model linear dan 5 model nonlinier untuk melakukan prediksi nilai efisiensi penghambatan korosi/corrosion inhibition efficiency (CIE) dari inhibitor senyawa turunan quinoxaline.

2. Metode Penelitian

Dalam penelitian ini, kami memanfaatkan kumpulan data senyawa quinoxaline yang telah dipublikasikan (Quadri et al., 2022). Kumpulan data terdiri dari 40 molekul quinoxaline yang memiliki sifat-sifat molekuler kuantum sebagai variabel independent (fitur), dan nilai CIE sebagai variabel dependen (target). Sifat-sifat molekuler yang digunakan sebagai fitur antara lain energi total (TE), HOMO, LUMO, energi gap (ΔE), suhu, konsentrasi, momen dipol (μ), potensial ionisasi (IP), afinitas elektron (EA), elektronegativitas (χ), global hardness (η), global softness

(σ), dan fraksi elektron yang ditransfer (ΔN), yang diperoleh dari simulasi DFT (Akrom, 2023f).

Tahapan awal dalam pengembangan model ML adalah tahap preprosesing. Dalam tahap preprosesing, diawali dengan normalisasi data menggunakan teknik MinMax scaling untuk mengurangi sensitivitas terhadap fitur tertentu. Tahap preprosesing selanjutnya adalah melakukan pembagian data dengan teknik k-fold cross-validation (CV). Teknik ini dipilih untuk mengatasi bias dan varian dalam data dengan melatih model secara berulang hingga menemukan kesalahan statistik yang minimal (Akrom et al., 2023c). Penelitian ini menggunakan nilai $k = 10$, ini berarti satu lipatan (fold) digunakan sebagai set pengujian (test), sementara sembilan lipatan lainnya digunakan sebagai set pelatihan (train). Pemilihan nilai k-fold ini bergantung pada karakteristik data yang digunakan, tetapi nilai $k = 5$ atau $k = 10$ sering digunakan secara umum (Akrom, et al., 2023d).

Pada tahap pemodelan, kami membandingkan kinerja prediksi dari 15 model ML yaitu, 6 algoritma linier dan 9 algoritma non-linier. Model linier diimplementasikan menggunakan algoritma multiple linear regression (MLR), ridge, lasso, elasticnet, sgd regressor, dan ransac regressor. Untuk model non-linier yang diuji antara lain gradient boosting regressor (GBR), random forest, k-nearest neighbors, nusvr, decision tree, orthogonal matching pursuit, kernel ridge, partial least square regressor, adaboost, dan bagging.

Dalam mengevaluasi kinerja model prediksi, metrik regresi seperti root mean squared error (RMSE), mean squared error (MSE), mean absolute deviation (MAD), mean absolute percentage error (MAPE), dan coefficient of determination (R^2) digunakan. Model yang paling baik adalah yang memiliki nilai MSE, RMSE, MAPE, dan MAD yang lebih rendah, serta nilai R^2 mendekati 1 (Akrom et al., 2023d).

3. Hasil dan Pembahasan

Dalam Tabel 1, disajikan model terbaik dari masing-masing jenis algoritma yang diuji. MLR menjadi model linier terbaik, sementara pada model non-linier, GBR menjadi yang paling unggul.

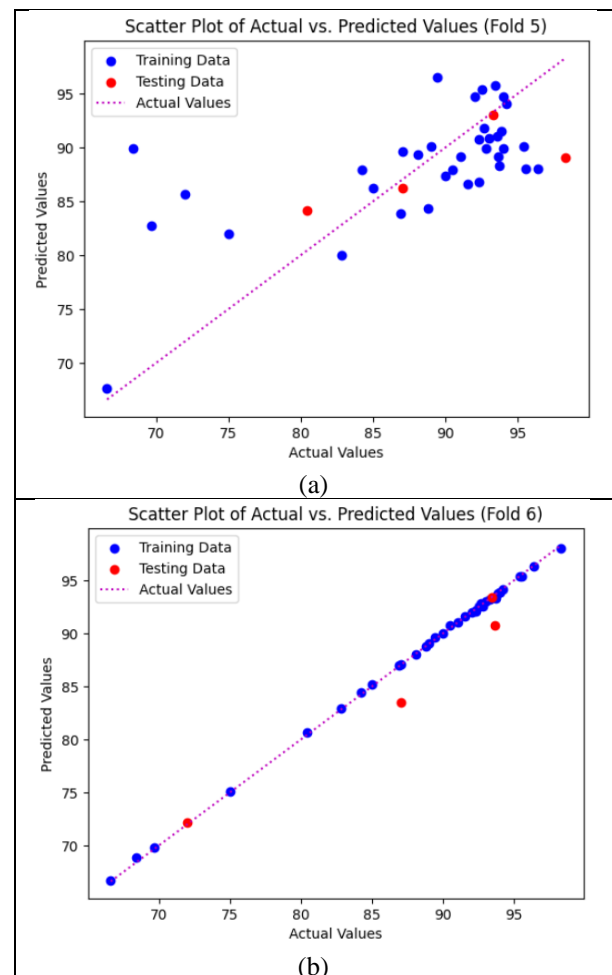
Tabel 1. Performa model MLR dan GBR

Performa	Model	
	MLR	GBR
R^2	0.4400	0.9329
MAD	3.5062	1.6476
RMSE	5.2126	2.2744
MAPE	3.8048	1.8448
MSE	25.2131	1.6476

Berdasarkan metrik evaluasi kinerja model pada Tabel 1, model non-linier GBR menunjukkan kinerja prediksi yang

lebih unggul dibandingkan dengan model MLR. Hal ini terlihat dari nilai-nilai metrik evaluasi seperti R^2 , MAD, MSE, MAPE, dan RMSE. Model GBR menghasilkan nilai R^2 sebesar 0.9329, MAD sebesar 1.6476, MSE sebesar 1.6476, MAPE sebesar 1.8448, dan RMSE sebesar 2.2744, sementara model MLR menghasilkan nilai R^2 sebesar 0.4400, MAD sebesar 3.5062, MSE sebesar 25.2131, MAPE sebesar 3.8048, dan RMSE sebesar 5.2126. Dengan nilai R^2 yang lebih tinggi dan nilai MSE serta RMSE yang lebih rendah, GBR mampu memperlihatkan kemampuan yang lebih baik dalam memahami pola variasi pada dataset, sehingga menghasilkan prediksi yang lebih dekat dengan nilai aktual dengan tingkat akurasi yang tinggi.

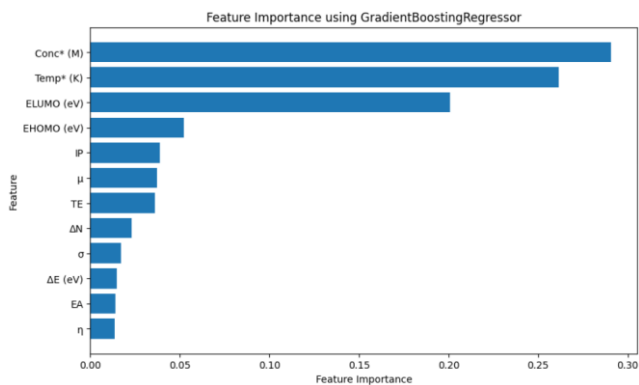
Secara keseluruhan, GBR tampil sebagai prediktor terbaik dari seluruh model yang dievaluasi untuk memprediksi nilai CIE senyawa quinoxaline.



Gambar 1. Sebaran data poin dari model (a) MLR dan (b) GBR

Visualisasi distribusi data poin prediksi untuk masing-masing model ditampilkan dalam Gambar 1. Plot ini memberikan wawasan tentang seberapa akurat model-model tersebut. Dari Gambar 1, teramati bahwa sebaran data poin prediksi dari model GBR cenderung lebih dekat dengan garis prediksi (fitting line) dibandingkan dengan model

MLR. Sebaliknya, sebaran data poin dari model MLR cenderung lebih bervariasi dan jauh dari garis prediksi. Ini menunjukkan bahwa model non-linier GBR memiliki kemampuan prediksi yang lebih baik daripada model linier MLR untuk dataset quinoxaline yang digunakan. Dengan demikian, hasil ini mengindikasikan bahwa model GBR mampu menghasilkan prediksi yang lebih mendekati nilai sebenarnya dibandingkan model MLR.



Gambar 2. Fitur penting model GBR

Pemilihan GBR sebagai model superior didukung oleh analisis fitur penting, yang mengevaluasi tingkat signifikansi setiap fitur terhadap kinerja algoritma. Gambar 2 menampilkan plot fitur penting yang membantu dalam memahami kontribusi setiap fitur terhadap kinerja model dalam memprediksi variabel target, yaitu CIE. Meskipun semua fitur memiliki pengaruh terhadap kinerja model dalam memprediksi variabel target, terdapat tiga fitur yang paling berpengaruh, yaitu konsentrasi inhibitor, suhu, dan energi LUMO. Hal ini menunjukkan bahwa fitur-fitur tersebut memiliki peran yang kuat dalam memengaruhi prediksi dari model tersebut. Model GBR diperkuat oleh kemampuannya untuk mengidentifikasi pola-pola yang kompleks dalam data, yang mungkin tidak dapat ditangani oleh model MLR. Oleh karena itu, model GBR lebih dipilih untuk memprediksi efisiensi penghambat korosi senyawa quinoxaline daripada model MLR.

Secara keseluruhan, model GBR menunjukkan tingkat akurasi yang lebih tinggi dalam memprediksi nilai CIE senyawa quinoxaline dibandingkan dengan MLR. Disamping itu, berdasarkan metrik evaluasi RMSE, model GBR juga menunjukkan superioritasnya dibandingkan dengan model Artificial Neural Network (ANN) dari penelitian serupa (Quadri et al., 2022). Model GBR menunjukkan RMSE sebesar 2.274, sedangkan ANN memiliki RMSE sebesar 5.416. Dengan RMSE yang lebih rendah, model GBR menunjukkan tingkat akurasi yang lebih tinggi.

4. Kesimpulan

Kami menyarankan peningkatan metode ML berbasis QSPR untuk mengevaluasi kemampuan prediktif model linier dan non-linier dalam memprediksi efektivitas penghambatan korosi besi oleh senyawa quinoxaline. Model non-linier GBR merupakan model yang paling prediktif dari seluruh model yang diuji berdasarkan metrik R^2 , RMSE, MSE,

MAD, dan MAPE. Selain itu, jika dibandingkan dengan model dari karya sebelumnya, model tersebut juga tangguh. Secara keseluruhan, penelitian kami memberikan sudut pandang baru tentang kapasitas model ML untuk memperkirakan penghambatan korosi pada permukaan besi oleh senyawa organik quinoxaline. Model kami masih dapat disempurnakan pada penelitian selanjutnya untuk meningkatkan akurasi prediksi, misalnya fungsi polinomial dan/atau sampel virtual dapat digunakan.

Daftar Pustaka

- Akrom, M. (2022). Investigation Of Natural Extracts As Green Corrosion Inhibitors In Steel Using Density Functional Theory. *Jurnal Teori dan Aplikasi Fisika*, 10(1), 89-102.
- Akrom, M., Rustad, S., & Dipojono, H. K. (2024). A machine learning approach to predict the efficiency of corrosion inhibition by natural product-based organic inhibitors. *Physica Scripta*, 99(3), pg. 036006. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad28a9>
- Akrom, M., Rustad, S., & Kresno Dipojono, H. (2023a). Machine learning investigation to predict corrosion inhibition capacity of new amino acid compounds as corrosion inhibitors. *Results in Chemistry*, 6, <https://doi.org/10.1016/J.RECHEM.2023.101126>
- Akrom, M., Rustad, S., Saputro, A. G., & Dipojono, H. K. (2023b). Data-driven investigation to model the corrosion inhibition efficiency of Pyrimidine-Pyrazole hybrid corrosion inhibitors. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1229, <https://doi.org/10.1016/J.COMPTC.2023.114307>
- Akrom, M., Rustad, S., Saputro, A. G., Ramelan, A., Fathurrahman, F., & Dipojono, H. K. (2023c). A combination of machine learning model and density functional theory method to predict corrosion inhibition performance of new diazine derivative compounds. *Materials Today Communications*, 35, <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106402>
- Akrom, M., Saputro, A. G., Maulana, A. L., Ramelan, A., Nuruddin, A., Rustad, S., & Dipojono, H. K. (2023d). DFT and microkinetic investigation of oxygen reduction reaction on corrosion inhibition mechanism of iron surface by Syzygium Aromaticum extract. *Applied Surface Science*, 615, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.156319>
- Akrom, M., Sudibyo, U., Kurniawan, A. W., Setiyanto, N. A., Herowati, W., Pertiwi, A., Safitri, A. N., Hidayat, N., Al Azies, H., & Nuswantoro, U. D. (2023e). Artificial Intelligence Berbasis QSPR Dalam Kajian Inhibitor Korosi. *Jurnal Multimedia Dan IT*, 7(1), 15–20. <https://doi.org/10.46961/jommit.v7i1>
- Akrom, M., Sutojo, T., Pertiwi, A., Rustad, S., & Kresno Dipojono, H. (2023f). Investigation of Best QSPR-Based Machine Learning Model to Predict Corrosion Inhibition Performance of Pyridine-Quinoline Compounds. *Journal of Physics: Conference Series*, 2673(1), <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2673/1/012014>

- Al-Amiery, A. A., Isahak, W. N. R. W., & Al-Azzawi, W. K. (2023). Corrosion Inhibitors: Natural and Synthetic Organic Inhibitors. *Lubricants*, *11*(4), <https://doi.org/10.3390/lubricants11040174>
- Batu, M. S., Kolo, M. M., & Kono, A. (2022). Pemanfaatan Ekstrak Biji Feun Kase (*Thevetia peruviana*) sebagai Inhibitor Korosi Logam Seng dalam Media HCl. *Jurnal Riset Kimia*, *13*(2), 188–197. <https://doi.org/10.25077/jrk.v13i2.520>
- Budi, S., Akrom, M., Al Azies, H., Sudibyo, U., Sutojo, T., Alfa Trisnapradika, G., Nur Safitri, A., Pertiwi, A., & Rustad, S. (2024). 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*, Jakarta International Conference on Multidisciplinary Studies towards Creative Industries (JICOMS), 78–87. <https://doi.org/10.18502/keg.v6i1.15351>
- Budi, S., Akrom, M., Trisnapradika, G. A., Sutojo, T., Aji, W., & Prabowo, E. (2023). Optimization of Polynomial Functions on the NuSVR Algorithm Based on Machine Learning: Case Studies on Regression Datasets. *Scientific Journal of Informatics*, *10*(2), 151-158. <https://doi.org/10.15294/sji.v10i2.43929>
- Cerezo, M., Verdon, G., Huang, H. Y., Cincio, L., & Coles, P. J. (2022). Challenges and opportunities in quantum machine learning. *Nature Computational Science*, *2*(9), 567–576. <https://doi.org/10.1038/s43588-022-00311-3>
- Chauhan, D. S., Singh, P., & Quraishi, M. A. (2020). Quinoxaline derivatives as efficient corrosion inhibitors: Current status, challenges and future perspectives. *Journal of Molecular Liquids*, *320*, <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114387>
- Deyab, M. A., Mohsen, Q., & Guo, L. (2022). Aesculus hippocastanum seeds extract as eco-friendly corrosion inhibitor for desalination plants: Experimental and theoretical studies. *Journal of Molecular Liquids*, *361*. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2022.119594>
- El Assiri, E. H., Driouch, M., Lazrak, J., Bensouda, Z., Elhaloui, A., Sfaira, M., Saffaj, T., & Taleb, M. (2020). Development and validation of QSPR models for corrosion inhibition of carbon steel by some pyridazine derivatives in acidic medium. *Heliyon*, *6*(10), <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e05067>
- Haikal, F. M., Akrom, M., & Trisnapradika, G. A. (2023). Perbandingan Algoritma Multilinear Regression dan Decision Tree Regressor dalam Memprediksi Efisiensi Penghambatan Korosi Piridazin. *Edumatic: Jurnal Pendidikan Informatika*, *7*(2), 307–315. <https://doi.org/10.29408/edumatic.v7i2.22127>
- Herowati, W., Aji Eko Prabowo, W., Akrom, M., Sutojo, T., Ageng Setiyanto, N., Wahid Kurniawan, A., Nur Hidayat, N., & Rustad, S. (2024). Prediction of Corrosion Inhibition Efficiency Based on Machine Learning for Pyrimidine Compounds: A Comparative Study of Linear and Non-linear Algorithms. *KnE Engineering*, Jakarta International Conference on Multidisciplinary Studies towards Creative Industries (JICOMS), 68–77. <https://doi.org/10.18502/keg.v6i1.15350>
- Maidawati, M. (2023). Studi Eksperimen Dan Komputasi Senyawa Organik Sebagai Inhibitor Korosi : A Review. *Jurnal Penelitian Dan Pengkajian Ilmiah Eksakta*, *2*(2), 148–153. <https://doi.org/10.47233/jppie.v2i2.1030>
- Noor, M., Kasmui, *, & Kusuma, S. (2016). Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antimalaria Senyawa Turunan Quinoxalin. *Jurnal MIPA*, *39*(1), 51–56. <http://journal.unnes.ac.id/nju/index.php/JM>
- Novitaningrum, E., Setiawan, M. A., & Trisnawati, A. (2023). Pengaruh Konsentrasi Ekstrak Etanol dari Daun Sembukan (*Paederia foetida* L) Sebagai Inhibitor Korosi Logam Besi pada Larutan HCl 1M dan Air Laut The Concentration Effect of Sembukan Leaf (*Paederia foetida* L) Extract as Ferrous Metal Corrosion Inhibitor to HCl 1M Solution and Sea Water. *Eksergi*, *20*(3), 191-194.
- Quadri, T. W., Olasunkanmi, L. O., Fayemi, O. E., Lgaz, H., Dagdag, O., Sherif, E. S. M., Alrashdi, A. A., Akpan, E. D., Lee, H. S., & Ebenso, E. E. (2022). Computational insights into quinoxaline-based corrosion inhibitors of steel in HCl: Quantum chemical analysis and QSPR-ANN studies. *Arabian Journal of Chemistry*, *15*(7). <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2022.103870>
- Sutojo, T., Rustad, S., Akrom, M., Syukur, A., Shidik, G. F., & Dipojono, H. K. (2023). A machine learning approach for corrosion small datasets. *Npj Materials Degradation*, *7*(1). <https://doi.org/10.1038/s41529-023-00336-7>
- Obot, I. B. (2015). Density Functional Theory (DFT) as a Powerful Tool for Designing New Organic Corrosion Inhibitors. *Corrosion Science*, *99*, 1-33. <https://doi.org/10.5772/intechopen.78333>