

Perbandingan Algoritma Multilinear Regression dan Decision Tree Regressor dalam Memprediksi Efisiensi Penghambatan Korosi Piridazin

Fachriansyah Muhammad Haikal¹, Muhamad Akrom^{1,2,*}, Gustina Alfa Trisnapradika^{1,2}

¹ Program Studi Teknik Informatika, Universitas Dian Nuswantoro, Indonesia

² Research Center for Materials Informatics, Universitas Dian Nuswantoro, Indonesia

* Correspondence: m.akrom@dsn.dinus.ac.id

Copyright: © 2023 by the authors

Received: 3 Oktober 2023 | Revised: 13 Oktober 2023 | Accepted: 2 November 2023 | Published: 20 Desember 2023

Abstrak

Korosi merupakan salah satu masalah utama di berbagai industri, yang menyebabkan peningkatan biaya produksi, pengeluaran perawatan, dan penurunan efisiensi peralatan. Inhibitor, khususnya senyawa organik, telah menjadi solusi yang semakin diperhatikan untuk mengurangi korosi secara efektif dan ramah lingkungan. Penelitian ini bertujuan membandingkan algoritma linier berbasis *multilinear regression* (MLR) dan nonlinier berbasis *decision tree regressor* (DTR) untuk studi kasus prediksi nilai efisiensi penghambatan korosi/*corrosion inhibition efficiency* (CIE) dari senyawa turunan piridazin sebagai inhibitor korosi. Penelitian ini merupakan kajian teoritis berbasis data dengan pendekatan *machine learning* (ML). Dalam penelitian ini, kami menggunakan dataset senyawa pyridazine dari literatur yang terpublikasi yang terdiri dari 20 senyawa piridazin dengan sifat-sifat molekuler sebagai fitur (variabel independen) dan nilai CIE sebagai target (variabel dependen). Analisis yang dilakukan terdiri dari analisis kinerja model prediksi dan analisis fitur penting yang mendukung kinerja model. Hasil penelitian menunjukkan bahwa model nonlinier berbasis DTR memiliki kinerja yang lebih baik dibandingkan model linier berbasis MLR berdasarkan metrik evaluasi dan plot distribusi data prediksi. Kami juga mendapatkan bahwa sifat molekuler fraksi elektron yang ditransfer (ΔN) dan afinitas elektron (A) berturut-turut muncul sebagai fitur yang paling bertanggungjawab terhadap kinerja prediksi model DTR. Kami menyimpulkan bahwa algoritma nonlinier berbasis DTR dapat digunakan sebagai model prediktif yang akurat dan handal untuk memprediksi kemampuan penghambatan korosi untuk senyawa turunan piridazin baru yang potensial.

Kata kunci: korosi; piridazin; ml; mlr; dtr

Abstract

Corrosion is one of the main problems in various industries, causing increased production costs, maintenance expenses, and decreased equipment efficiency. Inhibitors, especially organic compounds, have become an increasingly sought-after solution to reduce corrosion in an effective and environmentally friendly manner. This research aims to compare linear algorithms based on multilinear regression (MLR) and nonlinear algorithms based on decision tree regressor (DTR) for a case study of predicting corrosion inhibition efficiency (CIE) values of pyridazine derivative compounds as corrosion inhibitors. This research is a data-based theoretical study using a machine learning (ML) approach. In this study, we used a dataset of pyridazine compounds from published literature consisting of 20 pyridazine compounds with molecular properties as features (independent variables) and CIE values as targets (dependent variables). The analysis consists of analyzing the prediction model's performance and important features that support model performance. The research results show that the DTR-based nonlinear model has better performance than the MLR-based linear model based on evaluation metrics and prediction data distribution plots. We also find that the molecular properties fraction of electron transferred (ΔN) and electron affinity (A) respectively emerge as the features most responsible for the prediction performance of the DTR model. We conclude that the DTR-based



nonlinear algorithm can be used as an accurate and reliable predictive model to predict the corrosion inhibition ability for potential new pyridazine derivative compounds.

Keywords: corrosion; pyridazine; ml; mlr; dtr

PENDAHULUAN

Pemicu utama terjadinya korosi antara lain berupa air, kelembaban udara, pemolesan logam yang memberikan tekanan, bahan-bahan asam, minyak, dan beberapa unsur sulfur, amonia, serta gas-gas yang tingkat asamnya tinggi (Fayomi et al., 2019). International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) mendeskripsikan korosi sebagai suatu proses yang tak terhindari di mana material seperti logam, keramik, polimer, dan sejenisnya berinteraksi terhadap lingkungan sekitarnya. Dampaknya, material ini akan terkikis atau larut ke dalam lingkungannya. Dampak korosi cukup signifikan dalam peningkatan biaya produksi, perbaikan, dan perawatan, serta penurunan efisiensi peralatan yang berkontribusi pada pembengkakan biaya (Juanda et al., 2022). Oleh karena itu, diperlukan adanya upaya eksplorasi material yang memiliki ketahanan terhadap korosi dan material anti korosi (inhibitor) yang efisien.

Banyak penelitian terkini berfokus pada inhibitor korosi pada logam industri menggunakan senyawa organik. Kelebihan utamanya adalah ramah lingkungan, biaya yang ekonomis, serta efektivitas yang tinggi dalam menghambat korosi (Hossain et al., 2021). Penggunaan inhibitor merupakan salah satu metode yang populer dan efisien dalam melindungi kerusakan akibat korosi (Verma, 2018). Inhibitor senyawa organik memiliki karakteristik unik yang memungkinkan untuk berinteraksi secara efektif terhadap permukaan logam yang rentan terhadap korosi. Performa penghambatan laju korosi oleh inhibitor organik dapat mencapai 92 hingga 98 persen (Akrom, 2022). Kemampuan untuk membentuk lapisan molekuler yang melindungi permukaan logam dari kontak langsung dengan pemicu korosif merupakan mekanisme utama di balik efektivitas senyawa organik (Budi et al., 2023). Senyawa turunan piridazin menunjukkan potensi yang menarik karena memiliki gugus fungsi yang beragam, termasuk sulfur, nitrogen, dan atom oksigen dalam kerangka struktur molekulnya, yang berpengaruh baik dalam mendukung kemampuan adsorpsi inhibitor dalam permukaan baja (Hameed et al., 2020).

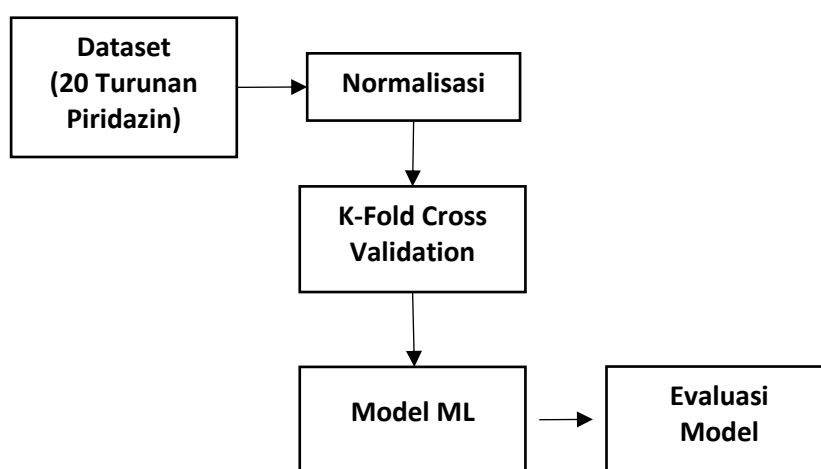
Efektivitas senyawa piridazin sebagai inhibitor korosi telah banyak dikaji secara eksperimental berbasis metode gravimetri, potensiodynamika, dan impedansi spektroskopi (El Hajjaji et al., 2019; Ghazoui et al., 2013; Luo et al., 2021). Akan tetapi, studi eksperimental membutuhkan waktu, biaya, dan sumber daya yang intensif (Akrom & Sutojo, 2023; Ser et al., 2020). Untuk mengatasi permasalahan tersebut, pendekatan *Machine Learning* (ML) menjadi solusi efektif dalam evaluasi senyawa inhibitor korosi. ML dapat digunakan untuk mengevaluasi kinerja penghambatan korosi suatu senyawa karena adanya hubungan kuantitatif antara struktur senyawa dengan sifat-sifat maupun aktivitas molekulernya (El Assiri et al., 2020; Quadri et al., 2022; Sutojo et al., 2023). Quadri et al. (Quadri et al., 2022) membandingkan model *artificial neural network* (ANN) dan *multilinear regression* (MLR) pada senyawa piridazin, hasilnya menunjukkan bahwa model ANN lebih optimal dengan nilai MSE, RMSE, dan MAPE masing-masing adalah 111.5910, 10.5637, dan 10.2362. Namun berdasarkan metrik yang digunakan, akurasi model yang dilaporkan masih tergolong rendah dan masih berpotensi untuk ditingkatkan.

Tantangan utama dalam pengembangan ML adalah bagaimana mengembangkan model yang akurat sehingga hasil prediksi relevan dan mampu mengungkap sifat-sifat sebenarnya dari suatu material yang diuji. Oleh karena itu, pada penelitian ini kami melakukan pengujian 10 model ML yang terdiri dari 5 model linear dan 5 model nonlinier. Berdasarkan pengujian awal, didapatkan 3 model linier terbaik antara lain MLR, Ridge, dan Lasso. Sedangkan untuk 3 model

nonlinier terbaik antara lain *decision tree regressor* (DTR), *K-nearest neighbors* (KNN), dan *support vector regressor* (SVR). Selanjutnya, pada penelitian ini kami melaporkan perbandingan kinerja model linier terbaik, yaitu MLR dan model nonlinier terbaik, yaitu DTR dalam memprediksi nilai efisiensi penghambatan korosi/*corrosion inhibition efficiency* (CIE) dari senyawa turunan piridazin sebagai inhibitor korosi. MLR sering digunakan untuk menghubungkan deskriptor molekuler kuantum dengan efisiensi inhibisi yang diukur secara eksperimental (Obot & Umoren, 2020). DTR mampu menghasilkan solusi yang lebih sederhana (De Castro Ribeiro et al., 2021). Dengan menerapkan metode normalisasi dan *k-fold cross validation* dalam penelitian ini, kinerja model ML dapat meningkat dan menghasilkan nilai metrik evaluasi yang lebih baik dari penelitian sebelumnya. Penelitian ini bertujuan membandingkan algoritma linier MLR dan nonlinier DTR berbasis pendekatan ML untuk studi kasus prediksi nilai efisiensi penghambatan korosi/*corrosion inhibition efficiency* (CIE) dari senyawa turunan piridazin sebagai inhibitor korosi.

METODE

Penelitian ini merupakan kajian teoritis berbasis data dengan pendekatan ML. Dalam penelitian ini, kami menggunakan dataset senyawa piridazin yang telah dipublikasikan (Quadri et al., 2022). Dataset terdiri dari 20 senyawa piridazin dengan sifat-sifat molekuler kuantum sebagai fitur (variabel independen) dan nilai CIE sebagai target (variabel dependen). Fitur-fitur molekuler yang digunakan antara lain energi total, HOMO, LUMO, energi gap (ΔE), momen dipol (μ), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), global hardness (η), global softness (σ), dan fraksi elektron yang ditransfer (ΔN).



Gambar 1. Pengembangan model ML

Berdasarkan Gambar 1, tahap awal pengembangan model ML adalah melakukan normalisasi pada dataset. Normalisasi merupakan langkah penting dalam pra-pemrosesan dimana data di ubah disesuaikan berdasarkan skala pada setiap fitur agar memiliki kontribusi yang setara, serta langkah ini memainkan peran kunci dalam kesuksesan algoritma ML untuk menghasilkan model prediktif yang efektif (Singh & Singh, 2020). Metode normalisasi yang digunakan adalah *RobustScaler*.

Penggunaan *K-Fold Cross Validation* diaplikasikan dalam menentukan model ML agar menghasilkan performa yang optimal dan valid melalui proses pelatihan yang berulang. Dalam penelitian ini, akan dibagi menjadi 5 lipatan ($k = 5$). Dalam setiap tahap iterasi, satu dari beberapa tahapan digunakan sebagai data pengujian, sementara bagian lainnya digunakan sebagai data pelatihan. Pada umumnya, nilai k biasanya bernilai 5 atau 10 lipatan ($k = 5$ atau

10) (Akrom, Rustad, Saputro, & Dipojono, 2023; Akrom, Rustad, Saputro, Ramelan, et al., 2023a, 2023b).

Selanjutnya pada pengembangan model ML, kami membandingkan algoritma linier dan non-linier. Model linear diimplementasikan menggunakan MLR, yaitu metode analisis statistik yang memodelkan satu variabel dependen dan dua atau lebih variabel independen dengan asumsi linearitas. Dalam banyak kasus, MLR menghasilkan korelasi yang direpresentasikan dalam bentuk garis lurus yang paling mendekati seluruh data individu, meliputi parameter target dan keluaran (Li et al., 2019). Korelasi antar fitur dan target yang cenderung memiliki kemiringan diidentifikasi melalui penerapan teknik regresi linier (Douche et al., 2020). Sementara itu, model non-linear menggunakan DTR, yang menggambarkan alur keputusan dalam bentuk pohon dan digunakan untuk memprediksi nilai numerik berdasarkan serangkaian keputusan yang diambil dari data latihan. Pada penelitian ini parameter pada model DTR yaitu *MaxDepth* menggunakan nilai yang rendah yaitu 3. Hal ini diperkuat oleh Elmachtoub et al. (Elmachtoub et al., 2020) yang mengungkapkan bahwa model DTR dengan tingkat *MaxDepth* yang lebih terbatas sering kali menjadi pilihan yang diutamakan karena kemampuannya dalam memberikan interpretasi yang lebih jelas dan mengurangi risiko terjadinya *overfitting*.

Evaluasi model digunakan metrik *coefficient of determination* (R^2) yang mengevaluasi dua set data menggunakan nilai berskala 0 sampai 1, *mean absolute error* (MAE) yang mencerminkan kesalahan secara lebih intuitif, dan *root mean squared error* (RMSE) yang mengukur sejauh mana prediksi nilai sebenarnya (Lv et al., 2020; Obaseki & Elijah, 2021).

HASIL DAN PEMBAHASAN

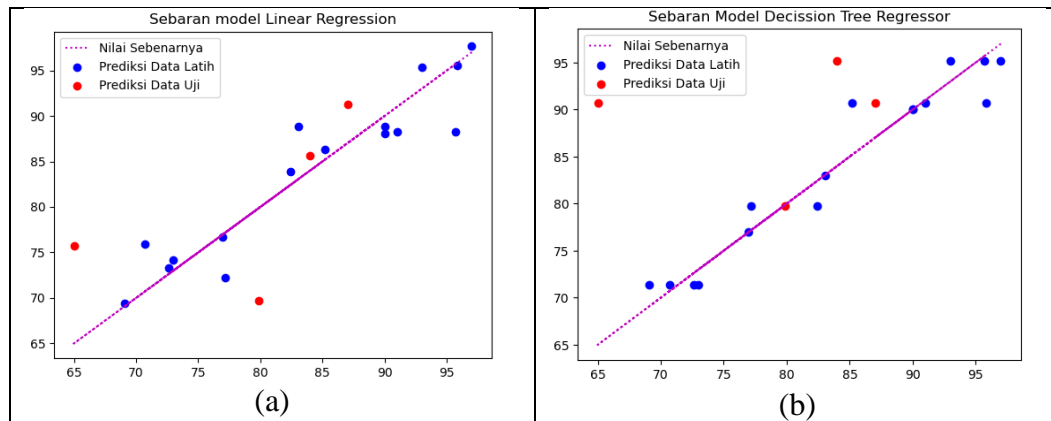
Hasil

Perbandingan kinerja model prediksi MLR dan DTR berdasarkan metrik evaluasi seperti R^2 , MAE, dan RMSE ditabulasikan pada Tabel 1. DTR menghasilkan R^2 lebih tinggi serta MAE dan RMSE lebih rendah dari MLR. Model yang baik adalah yang memiliki R^2 mendekati 1 dan nilai MAE dan RMSE terendah.

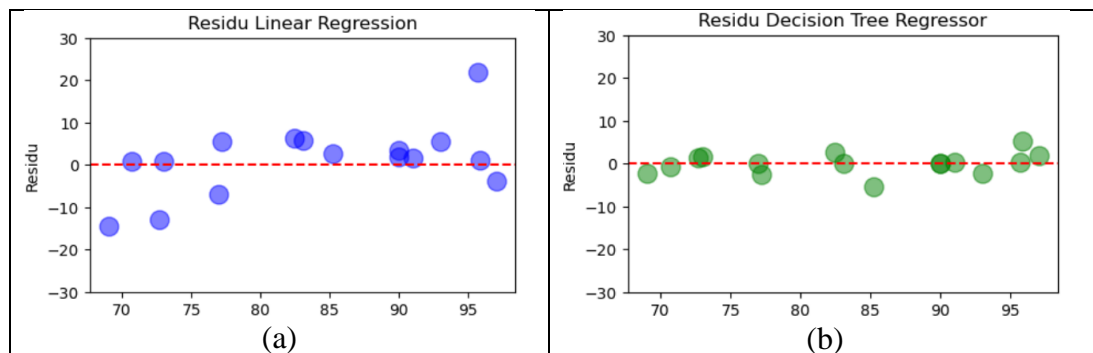
Tabel 1. Performa model MLR dan DTR

Performa	Model	
	MLR	DTR
R^2	0.908	0.936
MAE	2.059	1.658
RMSE	2.704	2.357

Plot distribusi data poin prediksi dan plot residual eror untuk masing-masing model divisualisasikan pada Gambar 2 dan 3. Kedua plot tersebut digunakan dalam memahami sejauh mana model akurat. Pada Gambar 2, dapat diamati bahwa sebaran data poin prediksi DTR cenderung lebih mendekati garis nilai sebenarnya (*fitting line*) dibandingkan MLR. Artinya model DTR memiliki kemampuan prediksi yang lebih baik dibandingkan model MLR untuk dataset piridazin yang digunakan. Hal tersebut mengindikasikan bahwa model DTR lebih mampu menghasilkan nilai prediksi yang mendekati nilai sebenarnya dibandingkan model MLR. Sementara Gambar 3 menampilkan residual error (selisih antara nilai sebenarnya dengan nilai prediksi), dimana sebaran residual eror DTR lebih mendekati garis nol dibanding MLR, yang menunjukkan bahwa kesalahan prediksi DTR lebih rendah.

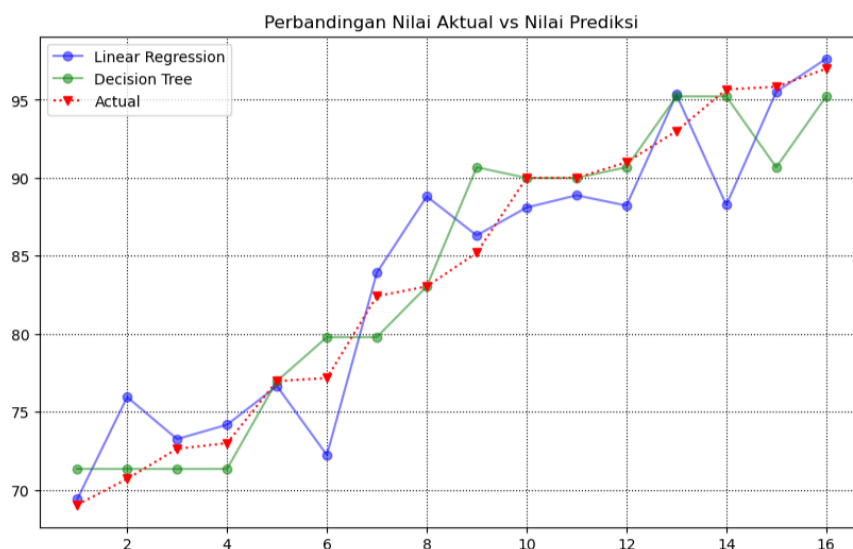


Gambar 2. Sebaran data poin dari model (a) MLR dan (b) DTR



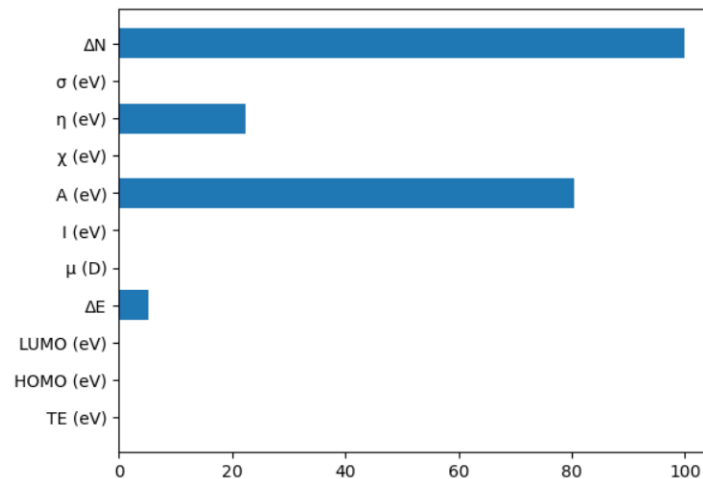
Gambar 3. Residual eror pada model (a) MLR dan (b) DTR

Target yang diprediksi oleh model yang dikembangkan pada penelitian ini adalah nilai CIE (efisiensi penghambatan korosi). Perbandingan nilai CIE hasil prediksi DTR dan MLR terhadap nilai CIE sebenarnya (eksperimental) disajikan pada Gambar 4. Dapat dilihat bahwa plot nilai CIE model DTR (warna hijau) cenderung mendekati/menyerupai plot nilai CIE sebenarnya (warna merah) dibandingkan plot nilai CIE model MLR. Semakin mirip plot prediksi terhadap plot sebenarnya, menunjukkan model mampu melakukan kinerja prediksi dengan baik.



Gambar 4. Plot nilai prediksi model MLR dan DTR terhadap nilai sebenarnya

Plot fitur penting ditampilkan pada gambar 5 membantu dalam memahami fitur-fitur mana saja yang berpengaruh terhadap kinerja model dalam memprediksi variabel target yaitu CIE. Fitur-fitur yang paling berpengaruh antara lain fraksi elektron yang ditransfer (ΔN), afinitas elektron (A), global hardness (η), dan energi gap (ΔE).



Gambar 5. Fitur penting model DTR

Pembahasan

Berdasarkan metrik kinerja evaluasi model pada Tabel 1, model nonlinier DTR menghasilkan kinerja prediksi yang lebih baik dibandingkan model MLR. Hal tersebut dapat dilihat dari metrik evaluasi, yaitu R^2 , MAE dan RMSE. DTR menghasilkan $R^2 = 0.936$, MAE = 1.658, dan RMSE = 2.357, sedangkan MLR menghasilkan $R^2 = 0.908$, MAE = 2.059, dan RMSE = 2.704. DTR memiliki nilai R^2 yang lebih tinggi dan nilai MAE dan RMSE yang lebih rendah dari MLR. Hasil tersebut menunjukkan bahwa DTR lebih mampu mempelajari variasi pola pada dataset, sehingga menghasilkan prediksi yang lebih mendekati nilai aktual dengan akurasi yang tinggi.

Pada Gambar 2 yang mengilustrasikan sebaran data poin prediksi model MLR dan DTR, terlihat bahwa sebaran data poin prediksi model DTR secara visual lebih mendekati *fitting line* (garis prediksi) daripada model MLR. Sebaran data poin model MLR lebih bervariasi dan cenderung lebih jauh dari garis prediksi. Selain itu, model DTR memiliki kesalahan prediksi lebih rendah dari MLR. Hal ini dapat dilihat dari plot residual error pada Gambar 3, dimana sebaran residual error model DTR cenderung mendekati garis nol dari pada model MLR. Pada Gambar 4, dapat dilihat juga bahwa plot nilai CIE model DTR cenderung lebih dekat dan menyerupai plot nilai CIE sebenarnya dibandingkan plot nilai CIE model MLR. Ini juga mendukung keunggulan model DTR dibandingkan model MLR dalam memprediksi nilai CIE senyawa piridazin. Hal tersebut berkaitan dengan fakta bahwa model DTR menghasilkan metrik R^2 lebih tinggi serta MAE dan RMSE lebih rendah dibandingkan MLR (lihat Tabel 1). Selain itu juga berkaitan dengan fakta bahwa DTR mampu menghasilkan sebaran data poin prediksi lebih dekat dengan *fitting line* dibandingkan MLR (lihat Gambar 2), serta DTR memiliki residual error yang rendah (dekat dengan garis 0) (lihat Gambar 3).

Berdasarkan hasil-hasil tersebut, model DTR diindikasikan menjadi pilihan yang tepat dalam memprediksi nilai CIE senyawa piridazin. DTR menunjukkan kemampuannya untuk menangani hubungan yang lebih rumit antara variabel input (sifat molekuler, yaitu energi total, HOMO, LUMO, energi gap, momen dipol, potensial ionisasi, afinitas elektron, elektronegativitas, global hardness, global softness, dan fraksi elektron yang ditransfer) dengan variabel output (CIE), memungkinkannya mengenali pola-pola yang lebih kompleks dalam dataset. Dengan kata lain, model DTR memiliki tingkat kesalahan yang lebih rendah dan

akurasi yang lebih tinggi dalam memprediksi nilai CIE. Hal tersebut dapat dilihat dari metrik evaluasi, dimana R^2 yang lebih tinggi, serta MAE dan RMSE yang lebih rendah dibandingkan MLR.

Pemilihan DTR sebagai model yang lebih unggul juga didukung oleh analisis fitur penting (*feature importance*), yang mengukur sejauh mana suatu fitur berpengaruh terhadap kinerja algoritma. Fitur penting bertujuan untuk mengurangi kesalahan serta mengeliminasi gangguan yang terdapat dalam dataset, sehingga memberikan hasil yang lebih umum dan relevan (Thanush et al., 2022). Dalam pengembangan model prediktif, penting untuk memilih fitur input yang memiliki dampak yang signifikan pada variabel target (Mythreyi et al., 2021). Dari hasil analisis fitur penting pada Gambar 5, dapat dilihat bahwa ada empat fitur yang memiliki dampak signifikan pada model DTR, yaitu ΔN , A, η , dan ΔE . Hal ini menunjukkan bahwa fitur-fitur tersebut memiliki peran kuat dalam mempengaruhi prediksi dari model tersebut. Model DTR diperkuat oleh kemampuannya untuk mengenali pola yang kompleks dalam data, yang mungkin tidak ditangani oleh model MLR. Oleh karena itu, model DTR merupakan pilihan yang lebih baik dalam memprediksi efisiensi penghambat korosi senyawa piridazin dibandingkan dengan model MLR.

Pada intinya, model DTR yang kami usulkan memiliki akurasi yang lebih tinggi dalam memprediksi nilai CIE senyawa piridazin dibandingkan MLR. Selain itu, DTR juga lebih unggul dibandingkan model ANN dari studi literatur lainnya berdasarkan metrik evaluasi RMSE (Quadri et al., 2022). Model DTR memiliki nilai RMSE = 2.357, sementara ANN memiliki nilai RMSE = 10.564. RMSE yang lebih rendah menunjukkan akurasi model yang lebih baik.

SIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian, didapatkan bahwa model nonlinier DTR lebih unggul dibandingkan model linier MLR dalam memprediksi efisiensi penghambatan korosi (CIE) senyawa turunan piridazin sebagai inhibitor korosi. DTR memiliki nilai R^2 , MAE, RMSE secara berturut-turut sebesar 0.908, 2.059, 2.704. DTR juga memiliki sebaran data poin prediksi lebih dekat dengan *fitting line* dan residual eror yang rendah. Selain itu, ditemukan juga bahwa dua fitur utama yang paling bertanggungjawab terhadap kinerja model DTR adalah fraksi elektron yang ditransfer (ΔN) dan afinitas elektron (A), berdasarkan analisis fitur penting.

REFERENSI

- 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. <https://doi.org/10.23960/jtaf.v10i1.2927>
- Akrom, M., Rustad, S., Saputro, A. G., & Dipojono, H. K. (2023). Data-driven investigation to model the corrosion inhibition efficiency of pyrimidine-pyrazole hybrid corrosion inhibitors. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1229, 114307. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114307>
- Akrom, M., Rustad, S., Saputro, A. G., Ramelan, A., Fathurrahman, F., & Dipojono, H. K. (2023). 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, 106402. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106402>
- Akrom, M., & Sutojo, T. (2023). Investigation of QSPR-Based Machine Learning Models in Pyrimidine Corrosion Inhibitors. *Eksergi*, 20(2), 107-111. <https://doi.org/10.31315/e.v20i2.9864>

- 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>
- Douche, D., Elmsellem, H., Anouar, E. H., Guo, L., Hafez, B., Tüzün, B., El Louzi, A., Bougrin, K., Karrouchi, K., & Himmi, B. (2020). Anti-corrosion performance of 8-hydroxyquinoline derivatives for mild steel in acidic medium: Gravimetric, electrochemical, DFT and molecular dynamics simulation investigations. *Journal of Molecular Liquids*, 308, 113042. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113042>
- 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>
- El Hajjaji, F., Salim, R., Messali, M., Hammouti, B., Chauhan, D. S., Almutairi, S. M., & Quraishi, M. A. (2019). Electrochemical studies on new pyridazinium derivatives as corrosion inhibitors of carbon steel in acidic medium. *Journal of Bio-and Tribo-Corrosion*, 5, 1-13.
- Elmachtoub, A. N., Liang, J. C. N., & McNellis, R. (2020). Decision trees for decision-making under the predict-then-optimize framework. In *International Conference on Machine Learning* (pp. 2858-2867). PMLR.
- Fayomi, O. S., Akande, I. G., & Odigie, S. (2019). Economic impact of corrosion in oil sectors and prevention: An overview. *Journal of Physics: Conference Series*, 1378(2), 022037. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1378/2/022037>
- Ghazoui, A., Bencat, N., Al-Deyab, S., Zarrouk, A., Hammouti, B., Ramdani, M., & Guenbour, M. (2013). An investigation of two novel Pyridazine derivatives as corrosion inhibitor for C38 steel in 1.0 M HCl. *International Journal of Electrochemical Science*, 8(2), 2272-2292. [https://doi.org/10.1016/s1452-3981\(23\)14308-2](https://doi.org/10.1016/s1452-3981(23)14308-2)
- Hameed, R. S. A., Aljuhani, E. H., Al-Bagawi, A. H., Shamroukh, A. H., & Abdallah, M. (2020). Study of sulfanyl pyridazine derivatives as efficient corrosion inhibitors for carbon steel in 1.0 m hcl using analytical techniques. *International Journal of Corrosion and Scale Inhibition*, 9(2), 623–643. <https://doi.org/10.17675/2305-6894-2020-9-2-16>
- Hossain, N., Asaduzzaman Chowdhury, M., & Kchaou, M. (2021). An overview of green corrosion inhibitors for sustainable and environment friendly industrial development. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 35(7), 673–690. <https://doi.org/10.1080/01694243.2020.1816793>
- Juanda, M., Pratiwi, N. L., Astuti, D. H., & Sani, S. (2022). Kajian Inhibitor Nano2 sebagai Pengendalian Laju Korosi pada Stainless Steel dalam Lingkungan Nacl 3, 5%. *Jurnal Teknik Kimia*, 16(2), 80-86. https://doi.org/10.33005/jurnal_tekkim.v16i2.3049
- Li, X., Khademi, F., Liu, Y., Akbari, M., Wang, C., Bond, P. L., Keller, J., & Jiang, G. (2019). Evaluation of data-driven models for predicting the service life of concrete sewer pipes subjected to corrosion. *Journal of Environmental Management*, 234, 431–439. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.12.098>
- Luo, W., Lin, Q., Ran, X., Li, W., Tan, B., Fu, A., & Zhang, S. (2021). A new pyridazine derivative synthesized as an efficient corrosion inhibitor for copper in sulfuric acid medium: Experimental and theoretical calculation studies. *Journal of Molecular Liquids*, 341, 117370. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.117370>
- Lv, Y. J., Wang, J. W., Wang, J., Xiong, C., Zou, L., Li, L., & Li, D. W. (2020). Steel corrosion prediction based on support vector machines. *Chaos, Solitons & Fractals*, 136, 109807.

- Mythreyi, O. V., Srinivaas, M. R., Amit Kumar, T., & Jayaganthan, R. (2021). Machine-learning-based prediction of corrosion behavior in additively manufactured Inconel 718. *Data*, 6(8), 80.
- Obaseki, M., & Elijah, P. T. (2021). Application of Artificial Neural Network Model to Predict Corrosion Rates on Pipeline. *Journal of Newviews in Engineering and Technology (JNET)*, 3(2), 65–75.
- Obot, I. B., & Umoren, S. A. (2020). Experimental, DFT and QSAR models for the discovery of new pyrazines corrosion inhibitors for steel in oilfield acidizing environment. *International Journal of Electrochemical Science*, 15(9), 9066–9080. <https://doi.org/10.20964/2020.09.72>
- Quadri, T. W., Olasunkanmi, L. O., Akpan, E. D., Fayemi, O. E., Lee, H. S., Lgaz, H., ... & Ebenso, E. E. (2022). Development of QSAR-based (MLR/ANN) predictive models for effective design of pyridazine corrosion inhibitors. *Materials Today Communications*, 30, 103163. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103163>
- Ser, C. T., Žuvela, P., & Wong, M. W. (2020). Prediction of corrosion inhibition efficiency of pyridines and quinolines on an iron surface using machine learning-powered quantitative structure-property relationships. *Applied Surface Science*, 512, 145612. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.145612>
- Singh, D., & Singh, B. (2020). Investigating the impact of data normalization on classification performance. *Applied Soft Computing*, 97, 105524. <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2019.105524>
- 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), 1-10. <https://doi.org/10.1038/s41529-023-00336-7>
- Thanush, A. A., Chitra, P., Kasinath, J., & Surya Prakash, R. (2022). Atmospheric corrosion rate prediction of low-alloy steel using machine learning models. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1248(1), 012050. <https://doi.org/10.1088/1757-899x/1248/1/012050>
- Verma, D. K. (2018). Density Functional Theory (DFT) as a Powerful Tool for Designing Corrosion Inhibitors in Aqueous Phase. *Advanced Engineering Testing*. <https://doi.org/10.5772/intechopen.78333>