

Pemindaian Dibantu Machine Learning Terhadap Senyawa Turunan Pirimidina-Pirazol Sebagai Inhibitor Korosi Baja Dalam Larutan Hidroklorik = Machine Learning-Assisted Scanning Of Pyrimidine-Pyrazole Derivatives As Steel Corrosion Inhibitors In Hydrochloric Solution

M. Ali Yafi Rizky, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920544177&lokasi=lokal>

Abstrak

Korosi dalam industri menyebabkan kerugian ekonomi signifikan dengan mengurangi masa pakai peralatan. Upaya pencegahan seperti penggunaan inhibitor korosi telah dilakukan, tetapi pemilihannya memakan waktu dan biaya, terutama untuk aplikasi di lingkungan asam. Oleh karena itu, pendekatan machine learning (ML) diperlukan untuk mengatasi masalah ini. ML digunakan untuk memprediksi sifat elektronik senyawa turunan pirimidina-pirazol. Sifat elektronik tersebut didapatkan melalui simulasi Teori Fungsional Kerapatan (DFT, *Density Functional Theory*) yang kemudian dapat digunakan untuk mengetahui efisiensi inhibitor senyawa karena memiliki korelasi yang linier. Model ML yang akan digunakan adalah *K-Nearest Neighbors* (KNN), *Support Vector Regression* (SVR), *Extreme Gradient Boosting* (XGBoost), *Gradient Boosting*, *Extra Trees*, dan *Artificial Neural Network* (ANN) dengan menggunakan deskriptor SMILES dan AlvaDesc sebagai fitur untuk menjelaskan struktur kimia dari senyawa organik. Model terbaik telah diidentifikasi yang dapat memprediksi sifat elektronik senyawa turunan pirimidina-pirazol dengan akurasi tertinggi dan jumlah fitur yang optimal. Proses validasi model dilakukan dengan membandingkan hasil prediksi dengan data dari literatur. Hasil penelitian menunjukkan model terbaik adalah model XGB dengan akurasi rata-rata yang mencapai 96,50%.

.....Corrosion in industry causes significant economic losses by reducing the lifespan of equipment. Various strategies, like corrosion inhibitors, are used, but selecting effective inhibitors for acidic environments is costly and time-consuming. To address this, machine learning (ML) was applied to predict the electronic properties of pyrimidine-pyrazole derivatives using Density Functional Theory (DFT) simulations. ML models employed are K-Nearest Neighbors (KNN), Support Vector Regression (KNN), Extreme Gradient Boosting (XGB), Gradient Boosting (GB), Extra Trees (ET), and Artificial Neural Network (ANN) using SMILES and AlvaDesc descriptors as features to elucidate the chemical structure of organic compounds. From the aforementioned models, the optimal model was identified that could predict the electronic properties of pyrimidine-pyrazole derivative compounds with the highest accuracy and optimal number of features. The model validation process involved a comparison of the prediction results with data from previous studies. The results demonstrated that the optimal model was XGB, with an average accuracy of 96.50%.