

Skrining Senyawa Turunan Phenyl Phthalimide Sebagai Inhibitor Korosi pada Baja Karbon Menggunakan Deep Learning = Screening of Phenyl Phthalimide Molecule Derivatives as Corrosion Inhibitor on Carbon Steel using Deep Learning

Mohammad Rayhan Ramadano, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920538071&lokasi=lokal>

Abstrak

Pencegahan kerusakan infrastruktur merupakan hal yang penting dalam meningkatkan factor keselamatan selama pemakaian, salah satunya pencegahan dari fenomena reaksi korosi pada struktur baja. Fenomena korosi merupakan reaksi reduksi-oksidasi yang mengakibatkan degradasi pada material sehingga dapat menimbulkan kegagalan. Oleh karena itu, berbagai penelitian dilakukan untuk mencegah korosi pada struktur baja, salah satunya yaitu pengurangan laju korosi menggunakan inhibitor organik berbasis senyawa *phenyl phthalimide*. Namun, terdapat berbagai jenis senyawa turunan *phenyl phthalimide* sehingga dibutuhkan waktu yang lama untuk melakukan pengujian secara langsung di laboratorium. Salah satu solusi yang dapat digunakan yaitu menggunakan metode DFT dan dinamika molekuler untuk menghitung sifat elektronik yang berhubungan dengan efisiensi kerja senyawa inhibitor, yaitu EHOMO, ELUMO, *band gap*, transfer elektron, dan energi adsorpsi molekul. Namun, proses simulasi dengan metode DFT dan dinamika molekuler juga masih membutuhkan waktu yang cukup lama. Oleh karena itu, dilakukan prediksi sifat elektronik menggunakan metode *deep learning*. Dikembangkan salah satu model *deep learning*, yaitu *Artificial Neural Network*. Agar model dapat menjelaskan sifat elektronik senyawa inhibitor organik, digunakan deskriptor SMILES dan Alvadesc. Dari model yang dikembangkan, didapatkan hasil berupa akurasi serta tingkat kestabilan dalam pelatihan model. Kemudian, dilakukan perbandingan model berdasarkan jenis deskriptor dan target sifat elektronik yang digunakan. Hasil penelitian menunjukkan bahwa deskriptor Alvadesc memiliki akurasi yang lebih tinggi dibandingkan dengan deskriptor SMILES. Model *Artificial Neural Network* dengan deskriptor Alvadesc dan target sifat energi adsorpsi molekul memiliki performa terbaik dengan akurasi 94,49% dan tingkat kestabilan model terbaik (standar deviasi akurasi setelah *loop run* 10 kali sebesar 0,97%.

.....Infrastructure damage preventions is crucial to enhance safety factor during service, one of them is preventing corrosion reaction phenomenon on steel structure. Corrosion phenomenon itself is a reduction-oxidation reaction that cause material degradation, hence promotes material failure. Therefore, many researches discuss to prevent corrosion on steel structure, one of them is using phenyl phthalimide-based organic inhibitor to decrease corrosion rate. However, there are many phenyl phthalimide derivatives to be tested inside laboratory that require a lot of time. One of the solutions that can be conducted is using DFT and molecular dynamics to calculate electronic properties that correlate with inhibitor efficiency, such as EHOMO, ELUMO, *band gap*, electron transfers, and molecular adsorption energy. Yet, DFT and molecular dynamics still require quite a long time. According to it, electronic properties prediction is conducted using deep learning method. One of the deep learning models, *Artificial Neural Network*, is developed. In order to enable the model to describe the molecular electronic properties, SMILES and Alvadesc descriptors are used. Model's accuracy and stability are obtained from model training. After that, each models are

compared based on descriptor types and each electronic properties as a target. Research result shown that Alvadesc descriptors provide better accuracy than SMILES descriptors. Also, the Artificial Neural Network model with Alvadesc descriptors and molecular adsorption energy as target achieve the highest performance with 94,49% accuracy and best model stability (standard deviation value of model accuracy after 10 times loop run was only 0,97%).