

Implementation of Simulated Annealing-Ensemble Method in Toxicity Prediction: Case Study of NR-AhR Toxicity Type

Adinda Rizqi Salsabila¹, Widi Astuti², Isman Kurniawan³

^{1,2,3}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

¹adindarizky@students.telkomuniversity.ac.id, ²widiwdu@telkomuniversity.ac.id,

³ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Orang-orang terpapar senyawa kimia yang tak terhitung jumlahnya sepanjang hidup mereka, banyak di antaranya berpotensi membahayakan. Interaksi kimia ini telah menjadi aspek integral dari kehidupan sehari-hari kita. Hidup di lingkungan kimia yang sangat reaktif melibatkan interaksi dengan berbagai elemen, mulai dari makanan yang kita konsumsi dan obat-obatan yang diresepkan hingga kosmetik yang kita gunakan, bahkan udara yang kita hirup. Ketika mengembangkan obat baru, toksisitas menjadi perhatian utama karena lebih dari 30% calon obat memiliki efek toksik yang tidak terdeteksi selama uji klinis. Potensi toksik dari senyawa kimia dan kombinasinya harus dibuktikan secara eksperimental. Oleh karena itu, untuk meminimalkan paparan kita terhadap zat berbahaya dalam produk sehari-hari, diperlukan pemahaman tentang toksisitas kimia. Penelitian ini menggunakan algoritma simulated annealing dan metode ensemble untuk memprediksi toksisitas pada studi kasus yang melibatkan jenis toksisitas Nuclear Receptor-Aryl Hydrocarbon Receptor. Tox21 Data Challenge menyediakan dataset yang digunakan dalam penelitian ini. Algoritma simulated annealing digunakan dalam proses seleksi fitur untuk mengembangkan model prediksi. Metode ensemble digunakan untuk membangun model prediksi dengan tiga metode: Random Forest, Adaptive Boosting (AdaBoost), dan Extreme Gradient Boosting (XGBoost). Model terbaik diperoleh dari model Random Forest dengan nilai akurasi sebesar 0,9806 dan F1-Score sebesar 0,9808.

Kata kunci: Algoritma Simulated Annealing, Ensemble, NR-AHR, Prediksi Toksisitas, Pembelajaran Mesin
