

Abstrak

Manusia berpotensi terpapar berbagai jenis senyawa kimia yang beberapa di antaranya sangat berbahaya bagi tubuh. Penentuan toksisitas suatu bahan kimia sangat penting untuk meminimalkan paparan zat berbahaya dalam produk sehari-hari. Metode yang saat ini digunakan untuk mengukur tingkat toksisitas dalam jumlah besar adalah *High-Throughput Screening* (HTS). Eksperimen ini menguji apakah suatu senyawa kimia menunjukkan tingkat toksisitas tertentu. Kerugian menggunakan metode ini adalah terlalu lama dan membutuhkan biaya yang besar untuk penelitian. Oleh karena itu, banyak ahli yang menyarankan untuk menggunakan cara lain yang dapat mengurangi kekurangan tersebut. Metode alternatif yang dapat digunakan adalah dengan mengimplementasikan metode *machine learning* untuk mengurangi kekurangan dari metode HTS sebelumnya. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi toksisitas menggunakan dataset *fingerprint* menggunakan metode *Artificial Neural Network* yang dioptimalkan menggunakan *cuckoo search algorithm*. Pada penelitian ini, hasil model terbaik diperoleh dari parameter *hidden layer* 3 dengan nilai *hidden node* [61, 69, 105], dan fungsi aktivasi Relu dengan nilai F1-Score dan akurasi berturut – turut 0,6153 dan 0,9652.

Kata kunci: Toksisitas, *Fingerprint*, Prediksi, *Artificial Neural Network*, *Cuckoo Search Algorithm*
