

Human Oral Bioavailability dari Kandidat Obat Menggunakan Metode Simulated Annealing – Support Vector Machine

Fithroh Hito Naruhodo¹, Isman Kurniawan², Jondri³,

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

¹fithrohhitonaruhodo@student.telkomuniversity.ac.id,

²ismankrn@telkomuniversity.ac.id, ³jondri@telkomuniversity.ac.id,

Abstrak

Farmakokinetik merupakan ilmu yang mempelajari proses masuknya obat hingga menyatu dengan tubuh. HOB atau human oral bioavailability merupakan salah satu pengujian serta acuan penting dalam pembuatan obat. Keterbatasan sampel manusia pada pengujian eksperimen menjadi kendala pada proses ini. Pada penelitian ini, kami melakukan prediksi HOB pada kandidat obat. Penelitian ini dilakukan menggunakan *dataset* yang digunakan pada penelitian sebelumnya. Metode yang digunakan pada penelitian ini, menggunakan *Simulated Annealing* sebagai seleksi fitur dan metode prediksi yang digunakan adalah *Support Vector Machine* (SVM). Proses prediksi ini menggunakan tiga kernel yang ada SVM yaitu, kernel *Radial Basis Function* (RBF), kernel Polinomial, dan kernel Linier. Hasil menunjukkan bahwa model SVM terbaik berada pada kernel RBF dengan akurasi dan F1-Score berturut-turut 0.7968 dan 0.7911.

Kata kunci: *human oral bioavailability, machine learning, simulated annealing, support vector machine*
