

## Implementasi Grey Wolf Algorithm pada Optimasi Metode Artificial Neural Network untuk Prediksi Toksisitas berbasis Fitur Fingerprint

Muhammad Farras Aditya, Isman Kurniawan, Annisa Aditsania,

Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

[farrasaditya@student.telkomuniversity.ac.id](mailto:farrasaditya@student.telkomuniversity.ac.id),

[ismankrn@telkomuniversity.ac.id](mailto:ismankrn@telkomuniversity.ac.id), [aaditsania@telkomuniversity.ac.id](mailto:aaditsania@telkomuniversity.ac.id),

---

### Abstrak

Obat merupakan kebutuhan primer yang digunakan untuk menyembuhkan berbagai penyakit pada makhluk hidup. Saat mengkonsumsi obat saja, dapat menyebabkan gejala toksisitas. Oleh karena itu, sangat diperlukan untuk memprediksi toksisitas dalam senyawa kimia yang dapat ditoleransi oleh tubuh. Mengenai prediksi toksisitas, diperlukan metode alternatif untuk menggantikan High-Throughput Screening (HTS), karena metodenya membutuhkan banyak waktu dan uang. Salah satu cara alternatif adalah dengan menggunakan mesin metode pembelajaran, seperti Artificial Neural Network (ANN). Ini Penelitian bertujuan untuk memprediksi toksisitas senyawa kimia dengan sidik jari berbasis fitur menggunakan metode ANN yang dioptimalkan oleh algoritma serigala abu-abu. Berdasarkan hasil tersebut, kami memperoleh model terbaik dari ANN dengan 2 hidden layer, fungsi aktivasi tanh, dan pengoptimal adam, mendapatkan hasil skor F1 dan akurasi pada data uji dengan nilai masing-masing 0,590 dan 0,887.

**Kata kunci:** *Deep learning*, prediksi toksisitas, *artificial neural network*, *grey wolf algorithm*, *fingerprint*

---