

ABSTRAK

Di dalam pengembangan obat, memprediksi efek samping memiliki peran penting, karena molekul obat dapat secara tidak sengaja berinteraksi dengan protein non-target, yang berpotensi menimbulkan efek samping. Metode prediksi tradisional seperti pendekatan in vivo dan in vitro memiliki kelemahan terkait protokol keamanan, biaya, dan efisiensi. Studi ini menggunakan pendekatan in-silico dengan memanfaatkan alat-alat numerik dan *Simplified Molecular Input Line Entry System* (SMILES) sebagai representasi senyawa kimia, yang menyederhanakan senyawa kimia dan mengoptimalkan perhitungan. Pada penelitian ini, kami melakukan penelitian dengan tujuan untuk meningkatkan model prediksi dengan SMILES2Vec, yang merupakan proses perubahan SMILES menjadi vektor numerik untuk efisiensi deep learning. Selain itu, arsitektur *Long Short-Term Memory* (LSTM) kami pilih untuk memproses data teks, dioptimalkan menggunakan *Monarch Butterfly Optimization* (MBO). Dalam perbandingan model dengan without tuning dan with tuning, kami melihat wawasan tentang kinerja, terutama akurasi dan F1-Score. Hasil yang didapatkan, pada model without tuning yang menggunakan lapisan 3-unit LSTM mencapai akurasi 62,94% dan F1-Score 75,54%, sedangkan pada model with tuning, mencapai akurasi 65,34% dan F1-Score 75,91%. Peningkatan yang serupa terlihat dalam arsitektur lainnya. Sehingga didapatkan, model terbaik with tuning adalah lapisan konvolusi dengan LSTM, dengan nilai yang mencapai 75,94% pada metrik F1-Score. Pada studi ini juga dapat digarisbawahi bahwa model with tuning dengan kombinasi SMILES2Vec dengan LSTM yang dioptimalkan dengan MBO, memiliki keunggulan dalam meningkatkan performa prediksi dibandingkan dengan model without tuning.

Kata kunci: obat, efek samping, gangguan darah dan limfatik, smiles2vec, lstm, monarch butterfly optimization, algoritma optimisasi