

ABSTRAK

Kebanyakan orang mengkonsumsi berbagai bahan zat kimia sepanjang hidup mereka seperti obat-obatan, produk pembersih rumah tangga hingga makanan. Dalam beberapa kasus, bahan zat kimia ini bisa berbahaya dan memiliki efek toksik pada tubuh kita. Penentuan toksisitas bahan kimia sangat penting untuk meminimalkan paparan kontaminan dalam produk sehari-hari. Toksisitas juga merupakan masalah utama dalam pengembangan obat baru, dengan lebih dari 30% kandidat obat gagal dalam uji klinis karena efek toksik yang tidak terdeteksi. Namun metode deteksi toksisitas saat ini yang masih banyak digunakan adalah *in vivo* dan *in vitro* yang dinilai paling tidak efisien dan tidak manusiawi. Alternatif dari dua metode sebelumnya yaitu menggunakan metode *in silico* untuk menghemat waktu dan biaya dalam deteksi toksisitas. Salah satu metode *in silico* yang umum digunakan adalah *Deep Learning*. Oleh karena itu tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengimplementasikan *Deep Learning* dengan metode *Long Short-Term Memory* (LSTM) yang dioptimasi *Grey Wolf Optimization* (GWO) dalam memprediksi toksisitas pada studi kasus tipe toksisitas *Nuclear Receptor-Androgen Receptor* (NR-AR). Dataset yang digunakan pada penelitian ini disediakan oleh *Tox21 Data Challenge*. Pada penelitian ini LSTM akan digunakan untuk memprediksi toksisitas NR-AR, sedangkan GWO digunakan untuk mengoptimasi *hyperparameter* dari LSTM.

Kata Kunci: LSTM, GWO, NR-AR, *Tox21 Data Challenge*, *Deep learning*, *in silico*