

Abstrak

Dalam beberapa tahun terakhir, penelitian tentang absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas (ADMET) telah meningkat secara signifikan. Hal ini disebabkan oleh tingginya tingkat kegagalan penemuan obat selama tahap pengembangan obat. Lebih dari 90% senyawa obat gagal selama proses pengembangannya, dan penyebab utama kegagalan ini adalah kinerja buruk parameter ADMET. Salah satu parameter ADMET kunci adalah Ketersediaan Oral Manusia (HOB), yang sangat penting dalam menentukan nasib obat baru dalam uji klinis. Ketersediaan Oral Manusia (HOB) adalah parameter farmakokinetik yang mengukur sejauh mana suatu obat, ketika dikonsumsi secara oral, dapat diserap dan mencapai sirkulasi sistemik dalam tubuh manusia. Namun, eksperimen konvensional tentang HOB memakan waktu dan biaya yang besar. Alternatifnya adalah penggunaan pendekatan in-silico. Pendekatan in-silico dapat ditingkatkan dengan menggunakan pembelajaran mesin untuk memberikan prediksi HOB yang lebih akurat. Tujuan dari penelitian ini adalah mengimplementasikan algoritma metaheuristik Grey Wolf Optimization (GWO) dalam arsitektur Long Short-Term Memory (LSTM) untuk memprediksi HOB. Pemilihan GWO dan LSTM didorong oleh potensi mereka untuk mengoptimalkan dan meningkatkan akurasi prediksi HOB, mengatasi tantangan yang dihadapi oleh pendekatan eksperimental konvensional. Berdasarkan hasil penelitian, kami memperoleh model terbaik dengan 3 lapisan tersembunyi, fungsi aktivasi relu, dan pengoptimal SGD. Untuk data uji, model mencapai nilai F1-score dan akurasi masing-masing sebesar 0,776 dan 0,722.

Kata kunci : ADMET, prediksi HOB, LSTM, GWO