

Implementasi Firefly Algorithm-Support Vector Machine untuk Prediksi Blood-Brain Barrier Penetration dari Kandidat Obat

Satria Ginting¹, Isman Kurniawan²

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

satriaginting@students.telkomuniversity.ac.id, ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Blood-Brain Barrier Penetration (BBBp) adalah kemampuan suatu zat atau senyawa kimia untuk melintasi sawar darah-otak (BBB), sebuah sistem perlindungan alami antara aliran darah dan jaringan otak yang membatasi dan mengontrol apa yang dapat masuk ke dalam otak. Dengan perkiraan 98% molekul kecil tidak dapat melintasi BBB, metode komputasi yang andal dan efisien sangat dibutuhkan untuk memprediksi penetrasi BBB. Deteksi Penetrasi Barrier Darah-Otak dapat dilakukan dengan menggunakan teknik seperti NeuroCart. Sifat fisikokimia dapat digunakan sebagai fitur molekuler untuk memprediksi BBBp, dan model BBBp *in silico* dapat meningkatkan teknik estimasi ketidakpastian. Namun, meta-analisis formal tidak dapat dilakukan karena banyaknya tes dan variasi dalam implementasinya. Oleh karena itu, metode yang dapat memprediksi penetrasi BBB secara andal dari kandidat obat sangat dibutuhkan. Penelitian ini bertujuan untuk mengimplementasikan Firefly Algorithm-Support Vector Machine dalam memprediksi Blood-Brain Barrier Penetration dari kandidat obat. Ada beberapa kernel yang digunakan yaitu kernel linear, kernel polynomial, dan kernel Radial Basis Function (RBF). Ketiga kernel tersebut mendapatkan hasil atau performa yang berbeda, dan kernel Radial Basic Function (RBF) menunjukkan performa yang kuat dengan akurasi pengujian sebesar 0.870 dan nilai F1 sebesar 0.920. Hasil ini menggarisbawahi potensi kernel polinomial dan RBF untuk aplikasi yang lebih luas dalam tugas-tugas pemodelan prediktif.

Kata kunci : Blood-Brain Barrier Penetration (BBBp), Blood-Brain Barrier (BBB), Firefly Algorithm (FA), Support Vector Machine (SVM), Feature Selection, Machine Learning, Predictive Modeling


