
Prediksi Toksisitas Uji Klinis menggunakan Artificial Neural Network yang Dioptimalkan dengan Grey Wolf Optimizer

Daffa Afia Rizfazka¹, Isman Kurniawan²,

^{1,2,3}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

⁴Divisi Digital Service PT Telekomunikasi Indonesia

¹daffaafiar@students.telkomuniversity.ac.id,

²Ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Obat-obatan, yang terdiri dari zat kimia dan biologis, bertujuan untuk meningkatkan kesehatan tetapi sering kali menimbulkan risiko toksik, termasuk efek karsinogenik dan mutagenik. Dengan hanya 10% dari kandidat obat Fase 1 yang mendapatkan persetujuan FDA—sebagian besar karena masalah kemanjuran dan keamanan—penemuan obat tradisional masih lambat, berisiko, dan tidak efisien, dengan tingkat kegagalan 96%. Metode *in silico*, yang memanfaatkan pembelajaran mesin, menawarkan pendekatan yang lebih efisien untuk memprediksi toksisitas dengan mengotomatiskan analisis dan mengurangi ketergantungan pada uji coba eksperimental. Namun, efektivitas metode ini sering kali terhalang oleh sifat padat karya dari penyetelan parameter manual, yang membutuhkan keahlian dan sumber daya komputasi yang signifikan. Untuk mengatasi keterbatasan ini, penelitian ini menggunakan metode Grey Wolf Optimization (GWO), sebuah strategi yang sangat efisien untuk memecahkan masalah optimasi, untuk meningkatkan prediksi toksisitas bahan kimia dengan menggunakan Artificial Neural Networks (ANN). Konfigurasi ANN dengan kinerja terbaik, yang menampilkan lima lapisan tersembunyi, fungsi aktivasi tanh, dan pengoptimal Adam, mencapai akurasi 0,966 dan F1-Score 0,708.

Kata kunci: Obat, *Artificial Neural Network (ANN)*, Toksisitas, Uji Klinis, *Grey Wolf Optimizer (GWO)*, *Machine Learning*

Abstract

Drugs, composed of chemical and biological substances, aim to improve health but often pose toxic risks, including carcinogenic and mutagenic effects. With only 10% of Phase 1 drug candidates gaining FDA approval—mostly due to efficacy and safety issues—traditional drug discovery remains slow, risky, and inefficient, with a 96% failure rate. In silico methods, leveraging machine learning, offer a more efficient approach to predicting toxicity by automating analysis and reducing reliance on experimental trials. However, the effectiveness of these methods is often hindered by the labor-intensive nature of manual parameter tuning, which requires significant expertise and computational resources. To address this limitation, this research employs the Grey Wolf Optimization (GWO) method, a highly efficient strategy for solving optimization problems, to enhance chemical toxicity predictions using Artificial Neural Networks (ANN). The best-performing ANN configuration, featuring five hidden layers, a tanh activation function, and Adam optimizer, attained the accuracy of 0.966 and F1-Score of 0.708.

Keywords: Drug, *Artificial Neural Network (ANN)*, Toxicity, Clinical Trial, *Grey Wolf Optimizer (GWO)*, *Machine Learning*