

## Abstrak

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengembangkan model prediktif untuk mengukur toksisitas cairan ionik (IL) terhadap enzim asetil-kolinesterase (AChE), secara spesifik mengevaluasi kinerja model ANN yang dioptimalkan dengan GWO dalam memprediksi toksisitas IL terhadap AChE. Jaringan saraf tiruan (JST) yang dioptimalkan oleh Grey Wolf Optimizer (GWO) digunakan. Penggunaan IL yang berlebihan, terlepas dari volatilitasnya yang rendah dan stabilitas termal yang tinggi, menimbulkan kekhawatiran terhadap lingkungan dan kesehatan manusia karena potensi toksisitasnya terhadap sistem biologis. Untuk mengatasi masalah ini, satu set data dari 160 IL dikodekan menggunakan deskriptor PaDEL, dan model ANN dibangun dan dioptimalkan menggunakan GWO untuk meningkatkan kinerja prediktif. Model ANN yang dioptimalkan, dikonfigurasi dengan satu lapisan tersembunyi, 97 node tersembunyi, fungsi aktivasi tanh, dan pengoptimal Adam, mencapai akurasi prediksi yang tinggi dengan nilai  $R^2$  sebesar 0,870. Hasil ini menunjukkan keefektifan model dalam memprediksi toksisitas IL dan potensinya untuk mengurangi ketergantungan pada metode penilaian toksisitas tradisional yang membutuhkan banyak tenaga kerja. Penelitian di masa depan harus mengeksplorasi integrasi algoritma metaheuristik yang lebih canggih untuk lebih meningkatkan kinerja model dan memperluas penerapannya ke berbagai prediksi toksisitas bahan kimia yang lebih luas. Pendekatan ini memiliki implikasi yang signifikan untuk pengembangan bahan kimia yang lebih aman dan penilaian risiko lingkungan.

*Kata Kunci*—acetylcholinesterase, artificial neural network, grey wolf algorithm, ionic liquid, toxicity prediction.