

**Abstrak**

Penelitian ini bertujuan untuk mengimplementasikan algoritma Firefly-Ensemble dalam memprediksi toksisitas dengan studi kasus *Androgen Receptor Ligand Binding Domain* (AR-LBD). Toksisitas merupakan faktor utama penyebab kegagalan obat dalam uji klinis, dan prediksi toksisitas yang akurat sangat penting untuk mengoptimalkan proses pengembangan obat. Penelitian ini menggunakan Firefly Algorithm untuk seleksi fitur dan metode Ensemble, yang mencakup Random Forest, AdaBoost, dan XGBoost, untuk pengoptimalan parameter model. Hasil penelitian menunjukkan bahwa penggunaan Firefly Algorithm sebagai seleksi fitur dapat meningkatkan akurasi model pada beberapa model, terutama XGBoost, dengan akurasi sebesar 99,30%, F1-score 99,31%, recall 99,88%, dan precision 98,75%. Selain itu, penerapan pengoptimalan parameter menggunakan metode Ensemble juga berkontribusi pada peningkatan kinerja model, dengan XGBoost menunjukkan performa terbaik, diikuti oleh Random Forest dan AdaBoost. Hasil ini menunjukkan bahwa kombinasi algoritma Firefly-Ensemble meningkatkan akurasi prediksi toksisitas, sehingga dapat digunakan untuk mendukung pengembangan metode *in silico* dalam toksikologi dan penemuan obat.

**Kata kunci :** Pembelajaran Mesin, Algoritma Firefly, Ensemble, AR-LBD, Toksisitas