

yang kecil sebesar 0,0003.

4.3 Validasi Model

Setelah pemilihan fitur dan penyesuaian *hyperparameter*, berbagai parameter validasi digunakan untuk menghitung kinerja model. Parameter yang digunakan adalah *precision*, *recall*, dan *F1-score*. *Confusion matrix* untuk set pelatihan dan set pengujian ditunjukkan dalam tabel 7 Hasil terbaik dalam set pelatihan diperoleh oleh XGBoost, dengan nilai TP (*True Positive*) sebesar 8220, nilai FP (*False Positive*) sebesar 76, nilai TN (*True Negative*) sebesar 8274 dan FN (*False Negative*) sebesar 22. Di sisi lain, dalam set pengujian, hasil terbaik diperoleh oleh XGBoost dengan nilai TP, FP, TN, dan FN masing-masing 1633, 21, 1663, dan 2.

Tabel 7 Hasil Confusion Matriks

Metode	TP	FP	TN	FN
<b>Train (Pelatihan)</b>				
Random Forest	8214	82	8266	30
AdaBoost	7618	678	7001	1295
<b>XGBoost</b>	<b>8220</b>	<b>76</b>	<b>8274</b>	<b>22</b>
<b>Test (Pengujian)</b>				
Random Forest	1630	24	1660	5
AdaBoost	1526	128	1417	248
<b>XGBoost</b>	<b>1633</b>	<b>21</b>	<b>1663</b>	<b>2</b>

Untuk menilai kemampuan tiga model Random Forest, AdaBoost, dan XGBoost dalam mendeteksi toksisitas, baik pada data pelatihan maupun pengujian dapat dilihat pada Tabel 8 yang menampilkan hasil metrik evaluasi.

Tabel 8 Hasil Perhitungan Parameter Validasi

Metode	Akurasi	Precision	Recall	F1-Score
<b>Train (Pelatihan)</b>				
Random Forest	0,9932	0,9901	0,9963	0,9932
AdaBoost	0,8810	0,9117	0,8439	0,8764
<b>XGBoost</b>	<b>0,9940</b>	<b>0,9908</b>	<b>0,9973</b>	<b>0,9941</b>
<b>Test (Pengujian)</b>				
Random Forest	0,9912	0,9857	0,9969	0,9913
AdaBoost	0,8867	0,9171	0,8510	0,8828
<b>XGBoost</b>	<b>0,9930</b>	<b>0,9875</b>	<b>0,9987</b>	<b>0,9931</b>

Model XGBoost memiliki akurasi tertinggi pada data pelatihan dengan 0,994 dan data pengujian dengan 0,993, diikuti oleh Random Forest dengan 0,993 pada data pelatihan dan 0,991 pada data pengujian. Model AdaBoost memiliki akurasi yang jauh lebih rendah, yaitu 0,881 untuk data pelatihan dan 0,886 untuk data pengujian.

5. Kesimpulan

Prediksi toksisitas dengan studi kasus pada jenis toksisitas AR-LBD dilakukan menggunakan Firefly Algorithm dan metode Ensemble. Penelitian ini melibatkan perbandingan metode Ensemble, termasuk Random Forest, Adaboost, dan XGBoost. Penelitian ini menunjukkan bahwa pemilihan fitur menggunakan algoritma Firefly mampu meningkatkan efisiensi model dengan mengurangi jumlah fitur yang digunakan tanpa mengurangi akurasi secara signifikan. Dari hasil seleksi, XGBoost memiliki akurasi tertinggi dengan skor 0.9891 dan memilih 386 fitur. Optimasi *hyperparameter* memberikan peningkatan terbesar pada AdaBoost dengan selisih akurasi 0,0286. Pada tahap validasi, XGBoost menunjukkan performa terbaik dengan akurasi tertinggi (0,9940 pada data pelatihan dan 0,9930 pada data pengujian), serta jumlah kesalahan prediksi paling sedikit berdasarkan confusion matrix. Random Forest juga menunjukkan kinerja baik, sementara AdaBoost memiliki performa yang lebih rendah. Secara keseluruhan, kombinasi seleksi fitur dan optimasi *hyperparameter* meningkatkan kinerja model, dengan XGBoost sebagai metode terbaik untuk mendeteksi toksisitas senyawa. Oleh karena itu, Firefly Algorithm dan Ensemble telah terbukti menjadi alternatif yang efektif untuk memprediksi toksisitas AR-LBD. Model prediktif ini dapat dikembangkan lebih lanjut menggunakan metode berbeda untuk pemilihan fitur dan klasifikasi dalam studi-studi mendatang. Untuk penelitian selanjutnya, kami menyarankan menambahkan jumlah iterasi dan beberapa *hyperparameter* lain.

Daftar Pustaka

[1] D. E. Sinaga, A. P. Windarto, and R. A. Nasution, "Analisis Data Mining Algoritma Decision Tree Pada Prediksi Persediaan Obat (Studi Kasus : Apotek Franch Farma)," *klik*, vol. 2, no. 4, pp. 123–131, Feb. 2022, doi: 10.30865/klik.v2i4.328.

- [2] D. Sun, W. Gao, H. Hu, and S. Zhou, "Why 90% of clinical drug development fails and how to improve it?". Available: <https://doi.org/10.1016/j.apsb.2022.02.002>
- [3] T. T. V. Tran, A. S. Wibowo, H. Tayara, and K. T. Chong, "Artificial Intelligence in Drug Toxicity Prediction: Recent Advances, Challenges, and Future Perspectives". Available: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.3c00200>
- [4] A. H. Vo, T. R. V. Vleet, R. R. Gupta, M. J. Liguori, and M. S. Rao, "An Overview of Machine Learning and Big Data for Drug Toxicity Evaluation". Available: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemrestox.9b00227>
- [5] A. Lysenko, A. Sharma, K. A. Boroevich, and T. Tsunoda, "An integrative machine learning approach for prediction of toxicity-related drug safety," *Life Sci. Alliance*, vol. 1, no. 6, p. e201800098, Dec. 2018, doi: 10.26508/lsa.201800098.
- [6] L. S. McCarty, C. J. Borgert, and L. D. Burgoon, "Evaluation of the Inherent Toxicity Concept in Environmental Toxicology and Risk Assessment", doi: 10.1002/etc.4881.
- [7] G. I. Chaoyang Zhang, "A review on machine learning methods for in silico toxicity prediction". Available: <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10590501.2018.1537118>
- [8] B. S. Dokyun Na, "In silico methods and tools for drug discovery". Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0010482521006454>
- [9] R. G. Gunawan and M. Ilham Pratama, "ANALISA KINERJA ALGORITMA MACHINE LEARNING UNTUK PREDIKSI VIRUS HEPATITIS C," *CoSciTech*, vol. 4, no. 3, pp. 772–777, Jan. 2024, doi: 10.37859/coscitech.v4i3.6513.
- [10] H. F. Hongsheng Liu, "Predicting the reproductive toxicity of chemicals using ensemble learning methods and molecular fingerprints". Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378427421000035>
- [11] R. R. Rizwandy, A. Aditsania, and I. Kurniawan, "Cuckoo Search-Driven Optimization of Artificial Neural Networks for Accurate Fingerprint-Based Toxicity Prediction". Available: <https://ieeexplore.ieee.org/document/10390946>
- [12] M. F. Aditya, A. Aditsania, and I. Kurniawan, "Implementation of the Grey Wolf Algorithm in Optimization of Artificial Neural Network Method for Fingerprint-Based Toxicity Prediction". Available: <https://ieeexplore.ieee.org/document/10331599>
- [13] S. Dara, S. Dhamecherla, S. S. Jadav, C. M. Babu, and M. J. Ahsan, "Machine Learning in Drug Discovery: A Review," *Artif Intell Rev*, vol. 55, no. 3, pp. 1947–1999, Mar. 2022, doi: 10.1007/s10462-021-10058-4.
- [14] H. Zhang, J. Ma, C. Liu, J. Ren, and L. Ding, "Development and evaluation of in silico prediction model for drug-induced respiratory toxicity by using naïve Bayes classifier method". Available: <https://doi.org/10.1016/j.fct.2018.09.051>
- [15] A. Vasuki, *Nature-Inspired Optimization Algorithms*. Available: <https://www.taylorfrancis.com/chapters/mono/10.1201/9780429289071-12/firefly-algorithm-vasuki>
- [16] F. Bringezu, J. Carlos Gómez-Tamayo, and M. Pastor, "Ensemble prediction of mitochondrial toxicity using machine learning technology," *Computational Toxicology*, vol. 20, p. 100189, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.comtox.2021.100189.
- [17] H. Y. YuChen Zhang, "Adaptive firefly algorithm based on reverse search strategy". Available: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9543395>
- [18] L. C. Jun Li, "A Firefly Algorithm Based on Prediction and Hybrid Samples Learning". Available: [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-981-99-4755-3\\_23](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-981-99-4755-3_23)
- [19] M. Zeboudj and K. Belkadi, "A Firefly Algorithm-Based Approach for Web Query Reformulation.," *International Journal of Information Retrieval Research*, vol. 12, no. 2, pp. 1–16, Aug. 2022, doi: 10.4018/ijirr.299939.
- [20] L. Vergni and F. Todisco, "A Random Forest Machine Learning Approach for the Identification and Quantification of Erosive Events," *Water*, vol. 15, no. 12, p. 2225, Jun. 2023, doi: 10.3390/w15122225.
- [21] J. Chen, Q. Li, H. Wang, and M. Deng, "A Machine Learning Ensemble Approach Based on Random Forest and Radial Basis Function Neural Network for Risk Evaluation of Regional Flood Disaster: A Case Study of the Yangtze River Delta, China," *IJERPH*, vol. 17, no. 1, p. 49, Dec. 2019, doi: 10.3390/ijerph17010049.
- [22] O. Hornyák and L. B. Iantovics, "AdaBoost Algorithm Could Lead to Weak Results for Data with Certain Characteristics," *Mathematics*, vol. 11, no. 8, p. 1801, Apr. 2023, doi: 10.3390/math11081801.
- [23] O. Sagi and L. Rokach, "Ensemble learning: A survey". Available: <https://doi.org/10.1002/widm.1249>
- [24] T. Chen and C. Guestrin, "XGBoost: A Scalable Tree Boosting System," in *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, San Francisco California USA: ACM, Aug. 2016, pp. 785–794. doi: 10.1145/2939672.2939785.
- [25] "Tox21 Data Challenge 2014". Available: <https://tripod.nih.gov/tox21/challenge/index.jsp>
- [26] R. W. Arianti, "IMPLEMENTASI ALGORITMA FIREFLY DALAM MENYELESAIKAN PENGOPTIMALAN PRODUKSI SEPATU," vol. 1, no. 2, 2020.