

Abstrak

Lingkungan, komponen penting dalam kehidupan, menghadapi tantangan dari pertumbuhan industri dan penggunaan bahan kimia, seperti cairan ionik (IL). Pada awalnya, IL adalah dianggap ramah lingkungan dan berguna di berbagai bidang, seperti elektrokimia dan katalisis, tetapi beberapa IL sulit terurai dan dapat mencemari tanah dan air. IL terdiri dari kation dan anion organik, yang masing-masing memiliki keunggulan seperti stabilitas termal yang tinggi dan volatilitas yang rendah. Namun, lebih banyak IL mencemari lingkungan dan menghambat enzim Asetilkolinesterase (AChE), yang menyebabkan kerusakan pada ekosistem. Dalam penelitian ini, kami bertujuan untuk memprediksi toksisitas cairan ionik terhadap enzim asetilkolinesterase. Penghambatan AChE dapat diukur dengan kolorimetri tetapi juga dapat dianalisis dengan metode in-silico dan machine learning. Salah satu metode in-silico yang akan digunakan adalah support vector machine (SVM). Penelitian ini dilakukan untuk memprediksi toksisitas cairan ionik terhadap AChE menggunakan SVM yang dioptimalkan dengan Firefly Algorithm. Untuk mengoptimalkan hasil model, kami menggunakan Firefly Algorithm untuk memilih fitur-fitur yang memiliki nilai korelasi yang tinggi. Selanjutnya, untuk meningkatkan akurasi prediksi model kami, tuning hyperparameter diterapkan pada RBF, polinomial, dan kernel linear. Melalui proses yang ketat ini, kami bertujuan untuk meningkatkan model dalam memprediksi toksisitas cairan ionik secara akurat terhadap enzim asetilkolinesterase aktif berdasarkan hasil. Ditemukan bahwa model SVM dengan kernel RBF memberikan hasil terbaik dengan nilai prediksi dengan R-Squared train 0.9291 dan R-Squared test 0.8339.

Kata Kunci : firefly algorithm, support vector machine, toxicity, fingerprint based.