

ABSTRAK

Prediksi afinitas obat-target (Drug-Target Affinity/DTA) merupakan elemen krusial dalam proses penemuan obat, mengingat metode tradisional cenderung memakan waktu dan biaya yang signifikan. Namun demikian, pendekatan komputasi yang ada saat ini sering kali menghadapi keterbatasan dalam merepresentasikan kompleksitas struktural dan sekuensial dari obat dan protein, yang pada akhirnya berdampak pada penurunan kinerja prediksi. Penelitian ini mengusulkan sebuah metode baru untuk meningkatkan akurasi prediksi DTA dengan menggabungkan Dynamic Graph Attention Networks (GATv2) dan Bidirectional Long Short-Term Memory (BiLSTM). Model yang diusulkan dirancang untuk mengintegrasikan fitur multi-skala, termasuk representasi graf motif obat, serta menerapkan three-way multi-head attention mechanism untuk menangkap interaksi kompleks antara representasi obat dan protein. Berdasarkan evaluasi pada dataset Davis dan KIBA, model ini menunjukkan kinerja yang unggul dibandingkan metode baseline dan benchmark yang ada, dengan pencapaian metrik evaluasi berupa MSE sebesar 0,3209 dan 0,1864, CI sebesar 0,8646 dan 0,8616, serta r_m^2 sebesar 0,5046 dan 0,6672, secara berturut-turut. Pendekatan ini berhasil mengatasi kelemahan pada mekanisme attention statis, keterbatasan dalam representasi multi-skala, dan penyederhanaan pemodelan interaksi pada metode eksisting, sehingga memberikan kontribusi signifikan dalam meningkatkan keandalan prediksi DTA.

Kata Kunci: drug-target affinity, drug graph, protein sequences, dynamic graph attention network, multi-scales features, attention mechanism