
Pemodelan Prediktif Letalitas Antibiotik β -Laktam Menggunakan Support Vector Machine

Salsabilla Laura Lanzari¹, Isman Kurniawan²

^{1,2}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

¹lwrzriii@students.telkomuniversity.ac.id, ²ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Antibiotik β -laktam telah banyak digunakan di sektor kesehatan dan peternakan efektif mengatasi infeksi bakteri. Namun, akibat proses degradasi yang lambat, antibiotik ini memiliki resistensi terhadap lingkungan dan dapat menimbulkan toksisitas terhadap organisme darat maupun akuatik. Hal tersebut membuat pengujian toksisitas antibiotik ini, terutama letalitasnya menjadi penting. Penelitian ini bertujuan untuk membangun model prediktif letalitas antibiotik β -laktam menggunakan algoritma Support Vector Machine (SVM) sebagai pemodel utama. SVM dikembangkan dengan tiga jenis kernel, yaitu linear, radial basis function (RBF), dan polynomial. Teknik optimasi menggunakan Grid Search dan Algoritma Fireworks (FWA) untuk menemukan konfigurasi hyperparameter terbaik. Dataset yang digunakan terdiri dari 30 senyawa β -laktam dengan nilai pLC₅₀ sebagai target. Hasil evaluasi menunjukkan bahwa kernel RBF menghasilkan nilai R² tertinggi dibandingkan kernel lainnya, baik pada Grid Search maupun FWA. Secara khusus, Grid Search menghasilkan performa yang lebih baik dibandingkan FWA, dengan nilai R² sebesar 0,6572.

Kata kunci: antibiotik β -laktam, letalitas, regresi, support vector machine, algoritma fireworks

Abstract

The β -lactam antibiotics have been extensively used in the healthcare and livestock sectors to effectively treat bacterial infections. However, due to the slow biodegradation, these antibiotics show environmental persistence and can cause toxicity to terrestrial and aquatic organisms. This makes testing the toxicity of these antibiotics, especially their lethality, important. This study aims to build a predictive model of β -lactam antibiotic lethality using Support Vector Machine (SVM) as the main modeling approach. SVM was developed with three types of kernels, namely linear, radial basis function (RBF), and polynomial. Optimization techniques using Grid Search and Fireworks Algorithm (FWA) were employed to find the best hyperparameter configurations. The dataset consisted of 30 β -lactam compounds with pLC₅₀ values as the target. Evaluation results showed that the RBF kernel achieved the highest R² score compared to other kernels across both Grid Search and FWA. Specifically, Grid Search yielded better performance than FWA, with an R² value of 0.6572.

Keywords: β -lactam antibiotic, lethality, regression, support vector machine, fireworks algorithm
