

Klasifikasi Parameter Human Oral Bioavailability dari Kandidat Obat Menggunakan Metode Simulated Annealing-Ensemble

Devila Nurtadjmi Adiarni¹, Isman Kurniawan,

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

¹devilaadiarni@students.telkomuniversity.ac.id,

²ismankrn@telkomuniversity.ac.id,

Abstrak

Human Oral Bioavailability (HOB) menunjukkan kemampuan obat untuk dimasukkan melalui jalur oral, memengaruhi seleksi obat potensial dan menghindari molekul dengan peluang keberhasilan rendah. Keterbatasan dalam menentukan HOB secara eksperimental, mendorong penelitian terhadap pendekatan alternatif menggunakan Machine Learning. Machine Learning sebagai metode yang dapat mempelajari pola dari data, telah diterapkan dalam beberapa penelitian untuk memprediksi HOB. Penelitian ini mengusulkan penggunaan metode Simulated Annealing-Ensemble untuk memprediksi HOB kandidat obat. Tujuan penelitian ini menerapkan Simulated Annealing untuk seleksi fitur dan memprediksi HOB dengan Ensemble Machine Learning serta mengevaluasi performa hasil prediksi HOB menggunakan pendekatan ini. Pada penelitian ini telah dibangun model prediksi Human Oral Bioavailability (HOB) menggunakan Simulated Annealing (SA) sebagai seleksi fitur dan metode Ensemble yang melibatkan tiga metode yaitu Random Forest, AdaBoost dan XGBoost sebagai model prediksi kandidat obat. Model terbaik adalah Random Forest dengan akurasi 0.7448 dan F1-Score 0.7784

Kata kunci : *human oral bioavailability, machine learning, simulated annealing, ensemble*

Abstract

Human Oral Bioavailability (HOB) indicates the ability of a drug to be absorbed through the oral route, influencing the selection of potential drugs and avoiding molecules with low chances of success. Limitations in experimentally determining HOB have led to research on alternative approaches using Machine Learning. Machine Learning, as a method capable of learning patterns from data, has been applied in several studies to predict HOB. This study proposes the use of the Simulated Annealing-Ensemble method to predict the HOB of drug candidates. The research aims to apply Simulated Annealing for feature selection and predict HOB with Ensemble Machine Learning, as well as evaluate the performance of HOB prediction using this approach. In this study, a predictive model for Human Oral Bioavailability (HOB) has been built using Simulated Annealing (SA) for feature selection and an Ensemble method involving three techniques: Random Forest, AdaBoost, and XGBoost, as predictive models for drug candidates. The best-performing model is Random Forest with an accuracy of 0.7448 and F1-Score of 0.7784.

Keywords: *human oral bioavailability, machine learning, simulated annealing, ensemble*
