

ABSTRAK

Interaksi obat dengan protein target merupakan dasar penting dalam pengobatan dan pencegahan penyakit. Namun, efek samping yang tak terduga akibat interaksi ini tetap menjadi masalah yang serius. Sekitar 35% dari obat-obatan berinteraksi dengan beberapa target protein, menyebabkan dampak negatif yang signifikan dan beban besar dalam layanan kesehatan. Cara tradisional untuk memprediksi efek samping obat, seperti uji coba pada organisme hidup (*in-vivo*) dan uji coba dalam lingkungan laboratorium (*in-vitro*), seringkali terkendala biaya mahal dan akurasi rendah. Dalam situasi seperti ini, metode *in-silico*, khususnya yang menggunakan pembelajaran mesin, memberikan alternatif yang lebih hemat biaya dan efisien untuk memprediksi efek samping. Penelitian ini menghadirkan cara baru dengan menggunakan representasi molekuler ringan yang disebut SMILES2Vec, yang lebih baik daripada metode konvensional. Pendekatan ini tidak hanya mengatasi kendala komputasi, tetapi juga meningkatkan ketepatan prediksi. Teknik pembelajaran mendalam dengan model Gated Recurrent Unit (GRU) digunakan untuk memahami pola dalam data berurutan. Selain itu, pendekatan otomatis dengan Algoritma Bat digunakan untuk mengoptimalkan pengaturan parameter dan meningkatkan kinerja prediksi. Hasil penelitian menunjukkan peningkatan kinerja prediksi efek samping obat. Dengan melakukan tuning model GRU dengan 3 lapisan (G3) secara *without* dan mengaplikasikan tuning otomatis dengan Algoritma Bat pada skema Convolution Layer dan GRU layer (CG), berhasil mencapai hasil yang baik. Model G3 memiliki F1-Score sebesar 75,61%, sementara tuning otomatis dengan Algoritma Bat pada skema CG mengungguli dengan F1-Score sebesar 77,64%. Pendekatan otomatis ini berhasil menemukan kombinasi parameter yang lebih optimal dalam memprediksi efek samping obat. Selain itu, peningkatan kinerja prediksi efek samping obat terjadi dengan menggunakan dataset yang menggunakan representasi Kimia SMILES2Vec dan pendekatan pembelajaran mendalam dengan GRU, terutama untuk organ Sistem Darah dan Limfatik.

Kata kunci: efek samping obat, sistem darah dan limfatik, smile2vec, gru, algoritma optimisasi, bat algorithm