

ABSTRAK

Interaksi Target Obat (DTI) sangat penting dalam penelitian farmasi, membantu penemuan obat, reposisi, dan identifikasi efek samping. Teknik komputasi, khususnya pembelajaran mesin, semakin banyak digunakan karena efisiensi biaya dan waktu. Namun, prediksi DTI menghadapi tantangan, terutama ketidakseimbangan kelas. Penelitian ini menyelidiki penerapan oversampling yang diikuti dengan undersampling berbasis Ant Colony Optimization (ACO) untuk mengatasi masalah ketidakseimbangan kelas pada prediksi DTI dengan pendekatan Sequential Hybrid Sampling (SHS). Beberapa metode oversampling seperti SMOTE, Random Oversampling (ROS), dan ADASYN digunakan dalam percobaan untuk mendapatkan hasil terbaik. Hasil evaluasi menunjukkan bahwa dengan menggunakan F1-score sebagai fungsi fitness, ditemukan bahwa penggunaan ACO sebagai undersampling dengan pendekatan SHS dapat meningkatkan performa classifier. Gradient boosting digunakan sebagai metode klasifikasi dan F1-score, G-Mean, dan Balanced Accuracy digunakan sebagai metrik evaluasi. Hasil penelitian menunjukkan bahwa implementasi SHS dengan SMOTE dan ACO menghasilkan F1-score tertinggi sebesar 43,24%, Geometric Mean (G-Mean) sebesar 50,75%, dan Balanced Accuracy Score (BAS) sebesar 62,41%. Hasil ini menunjukkan bahwa implementasi SHS dengan ACO dapat meningkatkan performa classifier dalam prediksi DTI dibandingkan dengan teknik oversampling klasik. Dengan memajukan pemahaman dan metodologi untuk menangani ketidakseimbangan kelas dalam prediksi DTI, penelitian ini berkontribusi pada tujuan yang lebih luas untuk meningkatkan proses penemuan dan pengembangan obat.

Kata kunci: DTI, Oversampling, Undersampling, ACO, SMOTE