

ABSTRAK

Penemuan obat tradisional merupakan proses yang menantang dan mahal, sehingga memerlukan pengembangan metode komputer yang lebih efisien dan akurat. Cyclooxygenase-2 (COX-II) merupakan target penting dan telah ditetapkan untuk terapi antikanker, namun memperkirakan bioaktivitas inhibitor farmakologis potensial tetap menjadi tantangan besar. Model pembelajaran mesin tradisional seringkali gagal memanfaatkan sepenuhnya struktur graf alami molekul, sehingga membatasi efektivitas prediksinya. Studi ini mengembangkan dan menguji Graph Convolutional Network (GCN), model pembelajaran mendalam yang mengekstrak karakteristik langsung dari graf kimia, untuk secara andal mengklasifikasikan bioaktivitas inhibitor COX-II yang potensial. Sebuah dataset berisi 2.646 senyawa kimia diperoleh dari basis data ChEMBL, diproses, dan diklasifikasikan sebagai aktif atau tidak aktif berdasarkan nilai IC₅₀. Molekul-molekul tersebut diubah menjadi representasi graf untuk dimasukkan ke dalam arsitektur GCN, yang ditingkatkan menggunakan modifikasi sistematis dan optimasi hiperparameter otomatis dengan Particle Swarm Optimization (PSO) dan Hybrid Bat Algorithm (HBA). Kinerja model GCN dievaluasi secara cermat dibandingkan dengan model dasar Artificial Neural Network (ANN), Long Short-Term Memory (LSTM), dan Convolutional Neural Network (CNN). Hasil penelitian menunjukkan bahwa strategi berbasis GCN jelas lebih unggul. Model akhir yang dioptimalkan dengan PSO (GCN-PSO) menunjukkan kinerja terbaik, dengan Akurasi 0,9121, Skor F1 0,9378, dan Matthews Correlation Coefficient (MCC) 0,7878. Studi ini mendukung konsep bahwa GCN menawarkan kerangka kerja yang lebih efektif untuk prediksi bioaktivitas dengan belajar dari topologi molekuler. Model berkinerja tinggi yang dihasilkan merupakan alat terverifikasi untuk penyaringan virtual, yang membantu mempercepat fase awal kritis dalam penemuan obat antikanker potensial.

Kata kunci: Graph Convolutional Network, Inhibitor COX-II, Prediksi Bioaktivitas, Optimisasi Hiperparameter, Penemuan Obat, Antikanker