
Implementasi optimasi Harris hawks-Multi-layer Perceptron regressor untuk memprediksi tingkat kematian antibiotik β -laktam

Muhammad Dzaky Raynaldy

^{1,2,3}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

⁴Divisi Digital Service PT Telekomunikasi Indonesia

¹mhs@students.telkomuniversity.ac.id, ²pembimbing1@telkomuniversity.ac.id,

³pembimbing2@telkomuniversity.ac.id, ⁴pembimbingluar@telkom.co.id

Abstrak

Dalam bidang pengobatan, peternakan, dan perikanan, antibiotik β -laktam telah terbukti efektif dalam mengatasi infeksi bakteri. Namun, peningkatan penggunaan antibiotik menyebabkan masalah serius seperti resistensi antibiotik dan pencemaran lingkungan akibat residu berbahaya. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengembangkan cara yang lebih efektif untuk memprediksi toksisitas antibiotik β -laktam. Masukan sistem ini terdiri dari data tentang struktur kimia antibiotik, dan keluarannya adalah prediksi tingkat toksisitasnya. Relevansi masalah ini sangat penting karena efek toksisitas antibiotik pada kesehatan manusia dan kelestarian ekosistem. Kondisi saat ini menunjukkan perbedaan antara kebutuhan prediksi yang cepat dan metode konvensional yang kurang efisien; pengujian toksisitas secara konvensional memerlukan waktu yang lama, biaya tinggi, dan menimbulkan masalah etika, terutama pada pengujian hewan. Penelitian ini menawarkan solusi dengan menggabungkan metode pembelajaran mesin dengan model multilayer perceptron regressor dan algoritma pemilihan fitur Harris Hawks Optimization. Proses pengumpulan dan praproses data, pembuatan model yang menggambarkan hubungan antara struktur dan aktivitas, serta penggunaan metrik evaluasi regresi merupakan tahapan penting dalam pengembangan sistem prediksi ini. Hasil pengujian menunjukkan bahwa model yang dioptimasi menggunakan Harris Hawks menghasilkan nilai koefisien determinasi tertinggi sebesar 0.5664 dengan nilai MAE dan RMSE yang lebih rendah dibandingkan metode pembandingan. Penelitian ini memberikan kontribusi dalam bentuk pendekatan prediktif yang efisien, hemat biaya, serta lebih etis dibandingkan metode laboratorium konvensional. Kata kunci: prediksi toksisitas, antibiotik β -laktam, pembelajaran mesin, multilayer perceptron, harris hawks, optimasi parameter

Abstract

In the fields of medicine, animal husbandry, and aquaculture, β -lactam antibiotics have proven effective in treating bacterial infections. However, the increasing use of antibiotics has led to serious issues such as antibiotic resistance and environmental pollution due to harmful residues. This study aims to develop a more efficient approach to predicting the toxicity of β -lactam antibiotics. The system takes as input the chemical structure data of antibiotics and produces an output in the form of predicted toxicity levels. This issue is highly relevant due to the impact of antibiotic toxicity on human health and environmental sustainability. Currently, there is a gap between the need for rapid toxicity prediction and the inefficiency of conventional methods, which are time-consuming, expensive, and raise ethical concerns, especially in animal testing. This research offers a solution by combining machine learning with a multilayer perceptron regressor model and the Harris Hawks Optimization algorithm for parameter tuning. The process includes data collection and preprocessing, model training to capture structure-activity relationships, and evaluation using regression metrics. The results show that the model optimized with Harris Hawks achieves the highest coefficient of determination of 0.5664, with lower MAE and RMSE values compared to the baseline method. This study contributes an efficient, low-cost, and ethical approach to toxicity prediction, providing an alternative to traditional laboratory-based testing.

Keywords: toxicity prediction, β -lactam antibiotics, machine learning, multilayer perceptron, harris hawks, parameter optimization
