

Implementasi LSTM Dioptimasi dengan Camel Algorithm dalam Prediksi Toksisitas dari Ionic Liquid Terhadap Enzim Acetylcholinesterase

Hanif Aditia Sofian¹, Isman Kurniawan²
Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung
hanifaditia@student.telkomuniversity.ac.id,
ismankrn@telkomuniversity.ac.id,

Abstrak

Lingkungan menjadi perhatian utama dalam industri, termasuk penggunaan pelarut. Salah satu pelarut yang banyak digunakan dalam bidang industri adalah ionic liquid. Beberapa ionic liquid dapat mencemari tanah dan ekosistem perairan. Hal ini disebabkan oleh sifat toksisitas ionic liquid yang dapat menghambat enzim acetylcholinesterase. Oleh karena itu, enzim acetylcholinesterase dapat digunakan sebagai indikator toksisitas ionic liquid. Metode *in silico* dapat digunakan untuk mendeteksi toksisitas ionic liquid. Penelitian ini mengusulkan model LSTM yang dioptimalkan dengan algoritma Camel untuk memprediksi toksisitas ionic liquid terhadap enzim AChE. Model ini menggunakan dataset 160 ionic liquid, yang di encode menggunakan SMILES-to-vector. Skema optimasi merupakan kombinasi dari parameter-parameter dalam camel algorithm, seperti ukuran populasi, burden factor, supply init, dan death rate dengan maksimum 25 iterasi. Berdasarkan hasil penelitian, kami menemukan bahwa model terbaik adalah LSTM dengan 126 node embedding, LSTM 3 layer dengan 134, 71, dan 53 node, dan 0.2 dropout dengan nilai R2 sebesar 0.747 pada testing set. Model LSTM secara efektif menangkap pola sekuensial pada SMILES dan meningkatkan prediksi toksisitas ionic liquid terhadap enzim asetilkolinesterase.

Kata Kunci: ionic liquid, toksisitas, acetylcholinesterase enzyme, long short-term memory, optimasi, camel algorithm.
