

## ABSTRAK

Proses pengembangan obat memerlukan informasi interaksi obat-target atau *drug-target interaction* (DTI) yang akurat untuk mengevaluasi potensi obat. Namun, metode tradisional yang ada saat ini untuk memperkirakan DTI tergolong lambat dan mahal. *Deep learning* menawarkan alternatif yang efisien dan efektif dengan memanfaatkan data urutan untuk melakukan prediksi. Meskipun demikian, pendekatan klasifikasi biner DTI memiliki sejumlah besar pasangan yang tidak saling berinteraksi, yang mengakibatkan ketidakseimbangan data dan berdampak negatif pada kinerja. Untuk mengatasi masalah ini, DTI dimodelkan sebagai masalah regresi yang dikenal sebagai afinitas target obat atau *drug-target affinity* (DTA), yang memprediksi kekuatan dari interaksi obat dan protein atau reseptor. Berbagai metode *deep learning* menunjukkan hasil yang kompetitif dalam prediksi DTA, namun metode-metode tersebut menghadapi tantangan dalam menangkap pola *drug-target* yang spesifik dengan data yang terbatas. Untuk mengatasi masalah tersebut, penelitian ini memanfaatkan *pre-trained language model* untuk meningkatkan representasi. Selain itu, kami juga menggunakan *gated multi-head attention* (GMHA), yang memodifikasi *multi-head attention* dengan menyertakan penskalaan dinamis dan proses gerbang untuk menangkap interaksi timbal balik dengan lebih baik. Hasilnya menunjukkan bahwa metode yang kami usulkan melebihi *benchmark* dan *baseline* di semua metrik evaluasi, dengan CI 0,893 dan 0,872 serta  $r_m^2$  0,673 dan 0,723 di Davis dan KIBA. Temuan kami lebih lanjut menunjukkan bahwa *pre-trained language model* untuk representasi obat dan reseptor target meningkatkan kinerja model prediksi DTA. Selain itu, metode GMHA secara umum mengungguli metode penggabungan sederhana, dengan keuntungan yang lebih jelas dalam set data yang lebih kompleks seperti KIBA.

**Kata kunci:** afinitas obat-target, pre-trained language model, gated multi-head attention, deep learning, regresi