
Prediksi Bioaktivitas Penghambat Protease NS3 sebagai Anti Virus Dengue Berbasis In-Silico Menggunakan LSTM - Algoritma Firefly

GirasMatahari¹, IsmanKurniawan²

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

¹girasaja@student.telkomuniversity.ac.id, ²ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Dengue adalah penyakit yang disebabkan oleh virus yang ditularkan melalui nyamuk *Aedes* dan menjadi masalah kesehatan global dengan jutaan kasus setiap tahun. Salah satu target utama dalam pengembangan obat dengue adalah NS3 protease, protein esensial yang berperan dalam replikasi virus, namun pendekatan konvensional masih menghadapi keterbatasan biaya dan efektivitas. Teknologi kecerdasan buatan, khususnya metode *Machine Learning* telah menunjukkan potensi besar dalam mempercepat penemuan obat dengan meningkatkan efisiensi dan akurasi prediksi. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi bioaktivitas senyawa dengan menggunakan pendekatan berbasis kecerdasan buatan. Metode yang digunakan mencakup pendekatan in-silico untuk bioaktivitas, di mana model *Long Short-Term Memory* (LSTM) dioptimasi menggunakan *Algoritma Firefly*. Hasil terbaik dicapai pada skenario optimasi dengan nilai beta 0,8, yang menghasilkan model 3-layer dengan konfigurasi [125, 37, 73] dan fungsi aktivasi sigmoid. Model ini mencapai akurasi sebesar 0,7647 dan *F1score* sebesar 0,7705 pada data uji, yang menunjukkan performanya baik dan klasifikasi yang seimbang serta konsisten antar kelas. Hasil ini membuktikan bahwa pendekatan LSTM yang dioptimasi dengan *Algoritma Firefly* dapat menyaring senyawa secara efisien dan berkontribusi pada pengembangan obat anti-dengue yang lebih efektif.

Kata kunci: Dengue, NS3 protease, Kecerdasan buatan, Machine Learning, Long Short-Term Memory (LSTM), Algoritma Firefly

Abstract

Dengue is a disease caused by a virus transmitted through *Aedes* mosquitoes and has become a global health problem with millions of cases every year. One of the main targets in the development of dengue drugs is the NS3 protease, an essential protein that plays a role in viral replication, yet conventional approaches still face limitations in cost and effectiveness. Artificial intelligence technology, particularly Machine Learning methods, has shown great potential in accelerating drug discovery by enhancing the efficiency and accuracy of predictions. This research aims to predict the bioactivity of compounds using an artificial intelligence-based approach. The methods used include in-silico approaches for bioactivity, where the Long Short-Term Memory (LSTM) model is optimized using the Firefly Algorithm. The best results were achieved in the optimization scenario with a beta value of 0,8, resulting in a 3-layer model with the configuration [125, 37, 73] and a sigmoid activation function. This model achieved an accuracy of 0,7647 and an *F1 score* of 0,7705 on the Uji data, indicating that its performance is good and the classification is balanced and consistent across classes. These results prove that the LSTM approach optimized with the Firefly Algorithm can efficiently filter compounds and contribute to the development of more effective anti-dengue drugs.

Keywords: Dengue, NS3 protease, Artificial Intelligence, Machine Learning, Long Short-Term Memory (LSTM), Firefly Algorithm

1. Pendahuluan

1.1. Latar Belakang

Dengue merupakan penyakit yang disebabkan oleh infeksi virus yang ditularkan melalui gigitan nyamuk *Aedes aegypti* atau *Aedes albopictus*. Gejalanya bervariasi, mulai dari demam dengue (DF) yang ditandai dengan demam, ruam, dan nyeri, hingga *Dengue Shock Syndrom* (DSS) yang dapat berakibat fatal jika tidak segera ditangani [1]. Infeksi yang terjadi berulang kali disebabkan oleh perilaku manusia, adaptasi mikroorganisme, serta faktor lingkungan seperti globalisasi, yang berkaitan dengan kepadatan penduduk, sanitasi yang buruk, dan meningkatnya interaksi manusia dengan vektor penyakit [2]. Pada awal tahun 2023, tercatat adanya lonjakan kasus demam berdarah dengan lebih dari 6,5 juta kasus dan 7.300 kematian, yang tersebar di lebih dari 100 negara. Wilayah yang paling terdampak meliputi Amerika, Asia Tenggara, dan Pasifik Barat, dengan Asia menyumbang sekitar 70% dari total kasus global [3].

NS3 adalah protein penting dalam virus dengue yang memiliki peran signifikan dalam proses replikasi. Bersama dengan kofaktor NS2B, NS3 membentuk enzim protease yang memecah protein virus menjadi komponen yang diperlukan untuk reproduksi. Mengingat fungsinya yang vital, NS3 menjadi sasaran utama dalam pengembangan obat antivirus untuk menghambat penyebaran dengue [4]–[6]. Pendekatan in-silico telah