Prediksi Inhibitor MMP-9 sebagai Terapeutik Antikanker menggunakan CNN-1D yang dioptimalkan dengan Algoritma Monarch Butterfly

Shabrina Salsabila¹, Isman Kurniawan²

^{1,2,3}Fakultas Infromatika, Universitas Telkom, Bandung ¹shabrinasalsa@student.telkomuniversity.ac.id, ²ismankrn@telkomuniversityac.id,

Abstrak

Pengembangan obat terapeutik yang menargetkan penghambat MMP-9 telah menunjukkan potensi dalam pengobatan antikanker. Penghambat Matrix Metalloproteinase-9 (MMP-9) adalah biomolekul yang menawarkan potensi sebagai terapi antikanker baru. Pengembangan obat terapeutik konvensional untuk kanker menghadapi tantangan yang signifikan karena biaya rata-rata yang tinggi, dan solusi alternatifnya adalah penggunaan Machine Learning. Penelitian ini mengusulkan pendekatan pembelajaran mendalam menggunakan Jaringan Syaraf Tiruan Convolutional Neural Network (1D-CNN) yang dioptimalkan dengan algoritma Monarch Butterfly Optimization (MBO) untuk memprediksi aktivitas senyawa penghambat MMP-9. Kumpulan data terdiri dari 1.123 sampel yang diklasifikasikan berdasarkan nilai pIC50. Tiga arsitektur 1D-CNN awal dievaluasi dan kemudian dioptimalkan melalui MBO dengan berbagai ukuran populasi. Hasilnya menunjukkan bahwa arsitektur CNN yang lebih dalam meningkatkan kinerja klasifikasi, sementara MBO secara signifikan meningkatkan konvergensi dan akurasi. Di antara skema optimasi, skema ketiga, dengan menggunakan ukuran populasi 25, mencapai akurasi tes tertinggi sebesar 0.7747 dan F1-score 0.7744, yang mengindikasikan generalisasi yang superior. Temuan ini menyoroti efektivitas penggabungan 1D-CNN dan MBO untuk prediksi senyawa antikanker yang efisien dan akurat.

Kata kunci: Kanker MMP-9 Inhibitor, MBO, 1-D CNN, Klasifikasi