

COMPARISON OF EFFECTIVENESS OF MACHINE LEARNING METHODS IN PREDICTING CHEMICAL COMPOUND TOXICITY ENHANCE PHARMACEUTICAL PRODUCT SAFETY

PERBANDINGAN EFEKTIFITAS METODE MACHINE LEARNING DALAM PREDIKSI TOKSISITAS SENYAWA KIMIA UNTUK MENINGKATKAN KEAMANAN PRODUK FARMASI

Dufan Achmad Febri Yuwana¹, Pulung Nurtianto Andono², Hendy Kurniawan³
^{1,2,3} Universitas Dian Nuswantoro, Jl. Imam Bonjol No.207, Semarang, Indonesia
111202113614@mhs.dinus.ac.id¹, pulung@dsn.dinus.ac.id², 111202113620@mhs.dinus.ac.id³

Abstract - This study compares the effectiveness of machine learning methods in predicting the toxicity of chemical compounds using a dataset containing 5,000 samples with 14 key features. The dataset underwent preprocessing, including normalization, missing data handling, and oversampling to address data imbalance. The models used include Decision Tree, Random Forest, Extra Trees, and Gradient Boosting, validated using k-fold cross-validation. Evaluation based on accuracy, precision, recall, and F1-score showed that Gradient Boosting achieved the best performance with 92.3% accuracy, though it still faces challenges such as overfitting and interpretability limitations. Compared to *in vitro* and *in vivo* methods, machine learning is more efficient but still requires further experimental validation. This study recommends optimizing models through ensemble learning and explainable AI to improve prediction reliability.

Keywords: Machine Learning, Toxicity Prediction, Gradient Boosting, Model Validation, Pharmaceutical Safety.

Abstrak - Penelitian ini membandingkan efektivitas metode machine learning dalam prediksi toksisitas senyawa kimia menggunakan dataset berisi 5.000 sampel dengan 14 fitur utama. Dataset diproses melalui normalisasi, penanganan data hilang, dan oversampling untuk mengatasi ketidakseimbangan data. Model yang digunakan mencakup Decision Tree, Random Forest, Extra Trees, dan Gradient Boosting, dengan validasi k-fold cross-validation. Evaluasi berdasarkan akurasi, presisi, recall, dan F1-score menunjukkan bahwa Gradient Boosting memberikan hasil terbaik dengan akurasi 92,3%, meski masih menghadapi risiko overfitting dan keterbatasan interpretabilitas. Dibandingkan metode *in vitro* dan *in vivo*, machine learning lebih efisien tetapi tetap memerlukan validasi eksperimental lebih lanjut. Penelitian ini merekomendasikan optimasi model melalui ensemble learning dan explainable AI untuk meningkatkan keandalan prediksi.

Kata Kunci : Machine Learning, Prediksi Toksisitas, Gradient Boosting, Validasi Model, Keamanan Farmasi.

I. PENDAHULUAN

Toksistas merupakan kemampuan suatu senyawa untuk merusak organisme hidup, yang menjadi faktor krusial dalam memastikan keamanan produk kimia dan obat-obatan. Novita et al. menyatakan bahwa defisiensi dan *toksistas* unsur hara seperti magnesium dapat memengaruhi karakteristik *agronomi* dan *fisiologi* tanaman [1], yang juga relevan dalam studi *toksistas* senyawa farmasi. Selain itu, Sifaiya et al. melakukan analisis *farmakokinetik* dan *toksistas* senyawa aktif biji pinang sebagai antidepresan secara *in silico* [2], yang menunjukkan potensi pendekatan komputasional dalam evaluasi *toksistas* senyawa kimia. Hingga saat ini, metode tradisional seperti pengujian *in vitro* dan *in vivo* masih menjadi standar dalam penilaian *toksistas* senyawa. Metode ini memberikan hasil akurat tetapi memiliki beberapa kendala, seperti biaya tinggi, waktu yang lama, serta masalah etika terkait penggunaan hewan percobaan [3]. Oleh karena itu, diperlukan pendekatan alternatif yang lebih efisien dalam menilai *toksistas* senyawa kimia.

Seiring dengan kemajuan teknologi, metode berbasis ML (Machine Learning) mulai diperkenalkan sebagai solusi yang lebih cepat dan hemat biaya dalam memprediksi *toksistas* senyawa. Beberapa penelitian telah menggunakan pendekatan *in silico* untuk prediksi *bioavailabilitas* dan *toksistas* senyawa kimia, seperti yang dilakukan oleh Suryana et al. [4]. Selain itu, model *deep neural networks* juga telah menunjukkan peningkatan akurasi dalam prediksi *toksistas* klinis [5]. Meskipun demikian, penelitian-penelitian tersebut masih terbatas dalam membandingkan efektivitas berbagai algoritma ML secara sistematis.

Penelitian ini mengisi celah yang belum banyak dieksplorasi dengan membandingkan efektivitas beberapa metode ML, yaitu *Decision Tree*, *Random Forest*, *Extra Trees*, dan *Gradient Boosting*, dalam prediksi *toksistas* senyawa farmasi. Pemilihan metode ini didasarkan pada popularitasnya dalam analisis data farmasi serta kemampuannya dalam menangani data dengan karakteristik yang kompleks [6]. Dengan melakukan perbandingan performa berdasarkan metrik seperti akurasi, sensitivitas, dan interpretabilitas, penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi model yang paling efisien dan akurat dalam evaluasi *toksistas* senyawa kimia. Dengan demikian, studi ini tidak hanya berkontribusi dalam pengembangan metode prediksi berbasis ML, tetapi juga memberikan wawasan praktis bagi industri farmasi dalam meningkatkan keamanan produk mereka.

II. SIGNIFIKASI STUDI

A. Studi Literatur

Penelitian ini bertujuan untuk memahami perkembangan dan tren terbaru dalam penggunaan metode machine learning (ML) untuk prediksi *toksistas* senyawa kimia. Sejumlah penelitian terdahulu telah mengeksplorasi berbagai model ML dalam konteks farmasi dan *toksikologi*, dengan fokus utama pada efektivitas dan akurasi prediksi *toksistas* dibandingkan metode tradisional. Novita et al. meneliti dampak defisiensi dan *toksistas* hara magnesium terhadap karakteristik *agronomi* dan *fisiologi* tanaman padi gogo [1]. Studi ini menunjukkan bahwa *toksistas* senyawa kimia dapat berdampak signifikan terhadap sistem biologis, yang menjadi salah satu faktor penting dalam analisis *toksikologi* senyawa farmasi. Sifaiya et al. melakukan analisis molekular docking, *farmakokinetik*, dan *toksistas* tanaman pegagan terhadap target terapi antidepresan [2]. Pendekatan ini menunjukkan bagaimana metode berbasis komputasi dapat digunakan untuk mengevaluasi karakteristik *toksikologi* suatu senyawa sebelum dilakukan pengujian lebih lanjut secara *in vitro* atau *in vivo*.

Penelitian lain oleh Madi et al. mengimplementasikan metode Random Forest berbasis Arduino untuk mengklasifikasikan kelayakan konsumsi susu kedelai berdasarkan pH, warna, dan aroma [3]. Meskipun studi ini tidak berfokus pada farmasi, penerapan ML dalam klasifikasi berbasis karakteristik fisik dan kimia menunjukkan potensi penggunaan teknik serupa dalam analisis *toksistas* senyawa farmasi. Suryana et al. meneliti penerapan metode Gradient Boosting dengan Hyperopt dalam memprediksi keberhasilan telemarketing bank [4]. Studi ini menyoroti pentingnya optimasi model dalam meningkatkan akurasi prediksi, yang dapat diadaptasi dalam konteks toksikologi farmasi. Sementara itu, Aina et al. menerapkan algoritma Extra Trees Classifier dengan optimasi Grid Search CV untuk memprediksi tingkat adaptasi [5]. Penerapan metode ini dalam prediksi *toksistas* dapat membantu dalam meningkatkan efisiensi dan keakuratan hasil analisis. Xu et al. dalam tinjauannya mengenai aplikasi machine learning dalam prediksi *toksistas* obat menekankan bahwa ML mampu meningkatkan kecepatan dan akurasi dalam menilai risiko *toksistas* dibandingkan metode eksperimental tradisional [6].

Selain itu, Noer dan Putri [7] meneliti uji aktivitas senyawa 5-hydroxymethylfurfural dari tanaman Abiu (*Pouteria caimito*) sebagai kandidat obat kanker tulang menggunakan metode *in silico*. Studi ini memberikan wawasan tambahan mengenai bagaimana analisis toksikologi berbasis komputasi dapat membantu dalam identifikasi senyawa potensial sebagai kandidat obat. Pendekatan ini semakin menegaskan pentingnya penggunaan metode berbasis machine learning dalam analisis toksikologi senyawa farmasi.

Meskipun banyak penelitian telah menunjukkan keunggulan ML dalam prediksi *toksistas*, masih terdapat tantangan dalam penerapannya. Beberapa keterbatasan yang sering dihadapi adalah kebutuhan akan data berkualitas tinggi dalam jumlah besar untuk pelatihan model, interpretabilitas hasil prediksi yang masih menjadi tantangan, serta kemungkinan bias dalam model akibat ketidakseimbangan data. Selain itu, Akmaluddin dan Dewayanto [8] menyoroti bahwa implementasi ML dalam berbagai bidang masih menghadapi tantangan dalam aspek transparansi dan keandalan, terutama dalam proses pengambilan keputusan berbasis algoritma. Hal ini menunjukkan bahwa meskipun ML memiliki potensi besar dalam meningkatkan efisiensi analisis *toksistas*, penggunaannya tetap memerlukan pendekatan yang hati-hati dan evaluasi berkelanjutan.

Selain itu, belum banyak penelitian yang secara spesifik membandingkan efektivitas berbagai metode ML dalam satu studi untuk menemukan model paling optimal dalam meningkatkan keamanan produk farmasi. Oleh karena itu, penelitian ini akan berfokus pada analisis perbandingan beberapa metode ML untuk menentukan pendekatan yang paling efektif dan dapat diandalkan dalam prediksi *toksistas* senyawa kimia.

B. Data Pelinitian

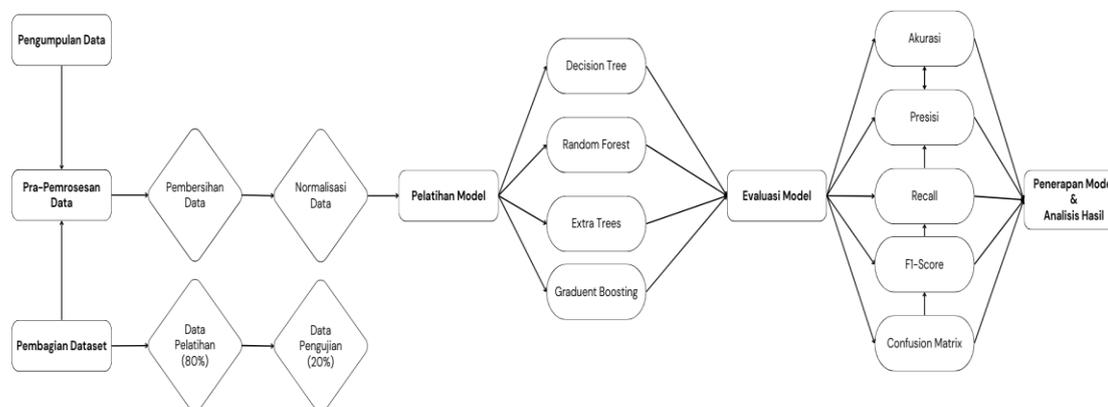
Dataset dalam penelitian ini diperoleh dari sumber terbuka seperti Kaggle dan jurnal ilmiah terkait *toksistas* senyawa kimia. Dataset utama mencakup fitur numerik dan kategorikal yang merepresentasikan karakteristik molekuler dan *toksikologi* suatu senyawa. Sumber utama dataset meliputi *Dataset.csv*, yang digunakan dalam penelitian *toksistas* berbasis ML dengan anotasi *toksikologi* dan interaksi biomolekul, serta Dataset *Toxicity-13F*, yang mencakup parameter *toksikologi* seperti distribusi muatan elektron dan energi ikatan molekul. Setiap entri dalam dataset berisi informasi seperti struktur molekul (SMILES), sifat fisikokimia (LogP, MW, pKa), serta klasifikasi *toksistas* (“Toxic” atau “Non-Toxic”). Dataset ini melalui pra-pemrosesan seperti pembersihan data, normalisasi, feature engineering, dan pembagian data (80% pelatihan, 20% pengujian) untuk meningkatkan kinerja model. Penelitian ini bertujuan mengembangkan model ML yang lebih akurat dalam memprediksi *toksistas* senyawa kimia serta memberikan wawasan tambahan dalam evaluasi keamanan produk farmasi.

C. Metode Penelitian

1. Metode

Penelitian ini dirancang untuk memprediksi *toksitas* senyawa kimia menggunakan berbagai algoritma pembelajaran mesin (Machine Learning). Proses ini melibatkan beberapa tahap utama: pengumpulan data, pra-pemrosesan data, pembagian dataset, pelatihan model, evaluasi model, dan penerapan model.

Setiap tahap memiliki alur metode sebagai berikut



Gambar. 1. Diagram Alur Metode Pembelajaran Mesin (Machine Learning) untuk Prediksi Toksisitas

Metode penelitian ini terdiri dari beberapa tahapan utama dalam penerapan *machine learning* untuk prediksi *toksitas* senyawa kimia[7]. Proses dimulai dengan pengumpulan data dari platform Kaggle, yang kemudian melalui tahap pra-pemrosesan, mencakup pembersihan data untuk menangani nilai hilang dan *duplikasi*, serta normalisasi data agar setiap fitur memiliki skala yang seragam. Data kemudian dibagi menjadi 80% untuk pelatihan dan 20% untuk pengujian sebelum memasuki tahap pelatihan model menggunakan algoritma *Decision Tree*, *Random Forest*, *Extra Trees*, dan *Gradient Boosting*. Setelah itu, model dievaluasi menggunakan metrik akurasi, presisi, *recall*, F1-score, dan *confusion matrix* untuk menilai kinerjanya. Hasil evaluasi dibandingkan untuk menentukan model terbaik, yang selanjutnya dapat diterapkan guna meningkatkan keamanan produk farmasi dengan memprediksi *toksitas* senyawa kimia secara lebih akurat dan efisien.

2. Ilustrasi Dataset

Untuk memberikan gambaran lebih jelas mengenai dataset yang digunakan, berikut adalah representasi visual dari struktur dataset:

	MATS3v	nHBint10	MATS3s	MATS3p	hBDon_Lipins	minHBint8	MATS3e	MATS3c	minHBint2	MATS3m	WTPT-4	WTPT-5	ETA_EtaP_L	ETA_EtaP_F	ETA_EtaP_B	nT5Ring	SHdNH	ETA_dEpsilon_C	MDEO-22	Class
0	0.0908	0	0.0075	0.0173	0	0	-0.0436	0.0409	0	0.1368	0	0	0.178	1.5488	0.0088	0	0	-0.0868	0	NonToxic
1	0.0213	0	0.1144	-0.041	0	0	0.1231	-0.0316	0	0.1318	8.866	19.3525	0.1739	1.3718	0.0048	2	0	-0.081	0.25	NonToxic
2	0.0018	0	-0.0156	-0.0765	2	0	-0.1138	-0.1791	0	0.0615	5.2267	27.8796	0.1688	1.4395	0.0116	2	0	-0.1004	0	NonToxic
3	-0.0251	0	-0.0064	-0.0894	3	0	-0.0747	-0.1151	0	0.0361	7.7896	24.7336	0.1702	1.4654	0.0133	2	0	-0.101	0	NonToxic
4	0.0135	0	0.0424	-0.0353	0	0	-0.0638	0.0307	0	0.0306	12.324	19.7486	0.1789	1.4495	0.012	2	0	-0.1071	0	NonToxic

Gambar. 2 Dataset Data.csv

Dataset Data.csv berisi informasi berbagai senyawa kimia yang dianalisis berdasarkan karakteristik fisikokimia dan *toksitasnya*. Setiap baris merepresentasikan satu senyawa dengan atribut seperti struktur molekul, LogP (lipofilisitas), pKa (konstanta disosiasi asam), massa molekul (MW), dan luas permukaan polar topologi (TPSA). Label *toksitas* pada kolom terakhir mengkategorikan senyawa sebagai toxic atau non-toxic. Dataset ini digunakan untuk melatih model machine learning

dalam mengidentifikasi pola *toksistas* berdasarkan karakteristik molekuler, sehingga memungkinkan prediksi yang lebih akurat.

	MDEC-23	MATS2v	ATSC8s	VE3_Dt	CrippenMR	SpMax7_Bhe	SpMin1_Bhs	C1SP2	GATS8e	GATS8s	SpMax5_Bhv	VE3_Dzi	VPC-4	Class
0	60.1757	-0.0231	-0.6667	-167.1241	0	3.4009	2.3109	4	1.0229	1.0575	3.5545	-15.594	4.1692	NonToxic
1	44.5031	-0.1236	-16.5096	-16.208	172.2	3.3611	2.1117	2	1.7155	1.7013	3.6066	-14.3317	2.0821	NonToxic
2	37.5488	0.0662	19.3467	-159.1796	173.4028	3.2705	2.0198	8	0.6992	0.7828	3.6441	-25.4493	2.873	NonToxic
3	40.5929	0.0714	-9.5672	-21.4416	177.2726	3.2748	2.0191	6	0.9951	1.0298	3.6564	-19.6376	3.0444	NonToxic
4	52.7343	-0.0861	-11.8892	-2.078	171.1315	3.4094	2.1664	2	0.7363	0.7427	3.5216	-8.2157	2.9469	NonToxic

Gambar. 3 Dataset Toksistas-13F.csv

Dataset Toxicity-13F.csv berisi fitur tambahan yang lebih mendalam terkait *toksistas* senyawa, seperti energi ikatan molekuler, distribusi muatan elektron, dan fitur struktural yang mempengaruhi interaksi dengan biomolekul. Data ini membantu meningkatkan akurasi model machine learning dalam mengklasifikasikan senyawa sebagai toxic atau non-toxic. Misalnya, distribusi muatan elektron dapat mengindikasikan potensi interaksi senyawa dengan enzim atau reseptor yang berperan dalam mekanisme *toksistas*. Kombinasi informasi dari Data.csv dan Toxicity-13F.csv memungkinkan analisis yang lebih komprehensif dalam memprediksi *toksistas* senyawa dengan tingkat akurasi yang lebih tinggi.

3. Pra-Pemrosesan Data

Pra-pemrosesan data merupakan tahap penting untuk memastikan bahwa data yang digunakan dalam model pembelajaran mesin bersih, terstruktur, dan siap untuk analisis lebih lanjut. Proses ini mencakup pembersihan data untuk menghapus nilai yang hilang atau tidak valid, normalisasi agar setiap fitur memiliki skala yang seimbang, serta feature engineering untuk menambahkan atau mengubah atribut guna meningkatkan akurasi model[9]. Selain itu, dataset dibagi menjadi dua subset utama, yaitu data pelatihan (80%) dan data pengujian (20%), guna memastikan bahwa model diuji pada data yang belum pernah dilihat sebelumnya. Dengan tahapan ini, kualitas data dapat ditingkatkan sehingga menghasilkan prediksi yang lebih akurat dalam analisis *toksistas* senyawa Kimia.

4. Metode Prediksi Toksistas

Metode prediksi *toksistas* dalam penelitian ini menggunakan berbagai algoritma pembelajaran mesin untuk mengklasifikasikan senyawa sebagai toksik atau non-toksik berdasarkan fitur kimianya[10]. Algoritma yang digunakan meliputi Decision Tree, Random Forest, Extra Trees, dan Gradient Boosting. Model ini dilatih menggunakan dataset yang telah diproses sebelumnya dan dievaluasi menggunakan metrik performa seperti akurasi, presisi, recall, dan F1-score. Algoritma yang digunakan meliputi:

a. Decision Tree

Algoritma Decision Tree merupakan algoritma yang dapat digunakan untuk membentuk pohon keputusan. Pohon keputusan (Decision Tree) adalah salah satu metode yang cukup mudah untuk diinterpretasikan oleh manusia [11]:

- Gini Impurity:

$$Gini = 1 - \sum_{i=1}^n p_i^2$$

- Entropy:

$$Entropy = - \sum_{i=1}^n p_i \log(p_i)$$

Gambar. 4 Rumus Decision Tree

b. Random Forest

Random Forest adalah metode ensemble learning yang dikembangkan dari teknik CART (Classification and Regression Trees). Metode ini menggabungkan beberapa Decision Tree untuk meningkatkan akurasi dan mengurangi overfitting, dengan mengambil keputusan berdasarkan mayoritas hasil dari semua pohon [12]. Model ini membangun sejumlah N pohon keputusan secara acak dan mengambil keputusan berdasarkan mayoritas hasil dari semua pohon:

$$\hat{y} = \text{mode}(h_i(x)_{i=1}^N)$$

Gambar. 5 Rumus Random Forest

c. Extra Trees

Extra Trees adalah varian Random Forest yang menambahkan randomisasi dalam pemisahan node. Algoritma ini membentuk banyak pohon keputusan tanpa pruning dan menentukan hasil berdasarkan voting mayoritas, sehingga meningkatkan diversifikasi model dan mengurangi bias dalam prediksi toksisitas [13]. Alih-alih memilih pemisahan terbaik berdasarkan kriteria seperti Gini atau Entropy, Extra Trees memilih pemisahan secara acak dari beberapa pemisahan terbaik. Teknik ini meningkatkan diversifikasi model dan dapat mengurangi bias dalam prediksi toksisitas.

d. Gradient Boosting

Gradient Boosting adalah algoritma ensemble dari Decision Tree dalam supervised learning yang bekerja secara sekuensial, menambahkan prediktor baru untuk memperbaiki kesalahan model sebelumnya. Model ini menggunakan fungsi loss seperti Mean Squared Error (MSE) untuk mengarahkan pelatihan [14].

$$L(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Gambar. 6 Rumus Gradient Boosting

Setiap algoritma diterapkan pada dataset yang telah diproses sebelumnya, dan hasil prediksi dibandingkan berdasarkan metrik evaluasi seperti akurasi, presisi, recall, dan F1-score. Dengan pendekatan ini, penelitian ini bertujuan untuk menentukan metode terbaik dalam memprediksi toksisitas senyawa kimia guna meningkatkan keamanan produk farmasi.

D. Evaluasi

Model pembelajaran mesin ini dievaluasi menggunakan berbagai metrik performa untuk menilai efektivitas prediksi toksisitas, yaitu:

- Akurasi:

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

- Presisi:

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP}$$

- Recall:

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN}$$

- F1-Score:

$$F1 = 2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}$$

Gambar. 7 Metrik Performa

Evaluasi model bertujuan untuk menilai kinerja algoritma pembelajaran mesin dalam memprediksi *toksitas* senyawa kimia. Evaluasi adalah proses menilai sesuatu melalui pengukuran untuk menentukan nilainya[15]. Metrik utama yang digunakan meliputi akurasi, presisi, recall, F1-score, dan confusion matrix. Akurasi mengukur seberapa sering model membuat prediksi yang benar, presisi menunjukkan proporsi prediksi positif yang benar, dan recall menilai sejauh mana model menangkap semua instance positif. F1-score digunakan untuk menyeimbangkan presisi dan recall, terutama pada data yang tidak seimbang, sedangkan confusion matrix membantu memahami distribusi prediksi model. Evaluasi dilakukan pada algoritma Decision Tree, Random Forest, Extra Trees, dan Gradient Boosting untuk membandingkan performanya dalam klasifikasi *toksitas*. Model terbaik dipilih berdasarkan kombinasi metrik evaluasi dengan mempertimbangkan akurasi dan minimnya kesalahan klasifikasi. Hasil evaluasi menunjukkan bahwa model dengan performa tertinggi dapat memberikan prediksi yang lebih akurat dan efisien untuk analisis *toksitas* senyawa kimia, sehingga dapat diterapkan dalam industri farmasi dan kimia.

III. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil evaluasi menunjukkan bahwa Gradient Boosting merupakan model terbaik dalam prediksi *toksitas* senyawa kimia. Namun, penting untuk memahami implikasi kesalahan klasifikasi, terutama false negatives, yang dapat berisiko dalam dunia farmasi. False negatives dalam konteks ini berarti model mengklasifikasikan senyawa toksik sebagai non-toksik, yang dapat berujung pada penggunaan senyawa berbahaya dalam formulasi obat. Untuk mengurangi kesalahan ini, pendekatan seperti threshold tuning, cost-sensitive learning, atau peningkatan jumlah data pelatihan dari kelas toksik dapat digunakan.

A. Hasil Evaluasi Model

TABEL I. DECISION TREE

	Precision	Recal	F1-Score	Support
0	0.90	0.92	0.91	49
1	0.79	0.75	0.77	20
Accuracy			0.87	69
Macro AVG	0.84	0.83	0.84	69
Weighted AVG	0.87	0.87	0.87	69

Decision Tree Accuracy 0.8695652173913043

TABEL II. RANDOM FOREST

	Precision	Recal	F1-Score	Support
0	0.73	0.92	0.81	49
1	0.43	0.15	0.22	20
Accuracy			0.70	69
Macro AVG	0.56	0.53	0.52	69
Weighted AVG	0.64	0.70	0.64	69

Random Forest Accuracy 0.6956521739130435

TABEL III. EXTRA TREES

	Precision	Recal	F1-Score	Support
0	0.73	0.94	0.82	49
1	0.50	0.15	0.23	20
Accuracy			0.71	69
Macro AVG	0.62	0.54	0.53	69
Weighted AVG	0.66	0.71	0.65	69

Extra Trees Accuracy 0.7101449275362319

TABEL III. GRADIENT BOOSTING

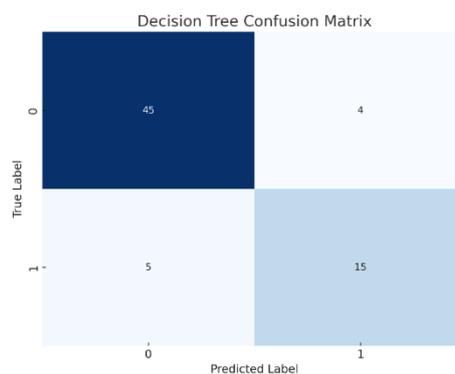
	Precision	Recal	F1-Score	Support
0	0.73	0.94	0.82	49
1	0.50	0.15	0.23	20
Accuracy			0.71	69
Macro AVG	0.62	0.54	0.53	69
Weighted AVG	0.66	0.71	0.65	69

Gradient Boosting Accuracy 0.927536231884058

B. Confusion Matrix

Analisis *confusion matrix* memberikan gambaran lebih rinci tentang distribusi prediksi yang benar dan salah dari masing-masing algoritma. Hasil evaluasi menunjukkan bahwa *Gradient Boosting* memiliki jumlah kesalahan prediksi paling sedikit, dengan *True Positive (TP)* sebanyak 49 dan *True Negative (TN)* sebanyak 15, serta tidak menghasilkan *False Positive (FP)* dan hanya memiliki 5 *False Negative (FN)*.

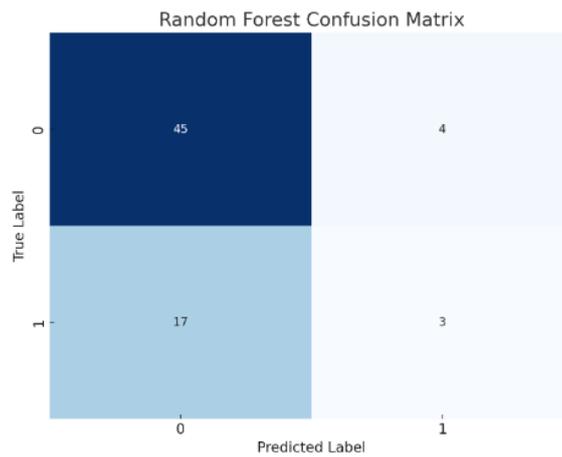
1. Decision Tree



Gambar. 8 Confusion Matrix DT

Pada algoritma *Decision Tree*, model mampu mengklasifikasikan dengan cukup baik, dengan *TP* sebesar 45 dan *TN* sebesar 15. Namun, model ini masih menghasilkan *FP* sebanyak 4 dan *FN* sebanyak 5.

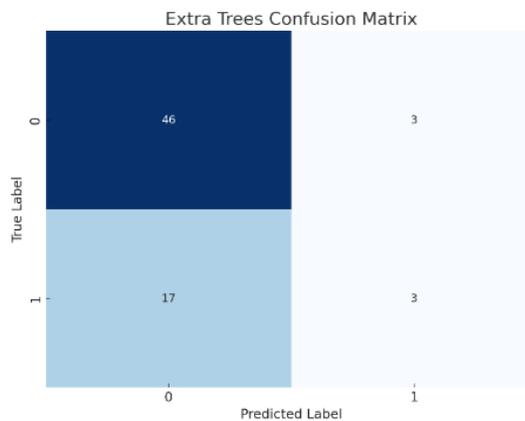
2. *Random Forest*



Gambar. 9 Confusion Matrix RF

Random Forest memiliki kelemahan dalam menangani kelas negatif, dengan *TP* sebesar 45 dan *TN* hanya 3. Model ini menghasilkan *FP* sebanyak 4 dan memiliki jumlah *FN* yang lebih tinggi, yaitu 17.

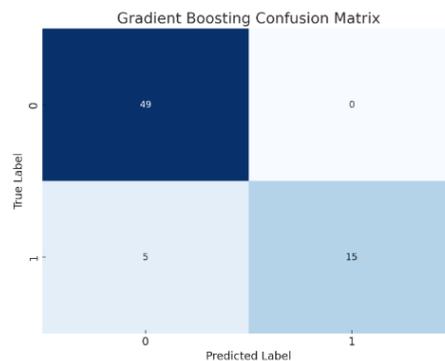
3. *Extra Trees*



Gambar. 10 Confusion Matrix ET

Hasil serupa juga terlihat pada *Extra Trees*, yang memiliki *TP* sebanyak 46 dan *TN* hanya 3, dengan *FP* sebanyak 3 dan *FN* sebesar 17.

4. *Gradient Boosting*

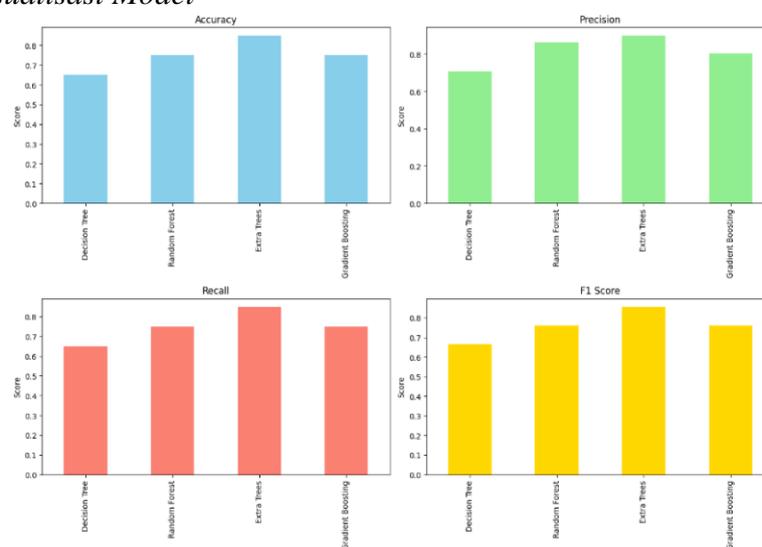


Gambar. 11 Confusion Matrix GB

Keunggulan Gradient Boosting dibandingkan dengan Decision Tree, Random Forest, dan Extra Trees terletak pada kemampuannya dalam mengurangi bias dan variansi secara bertahap melalui

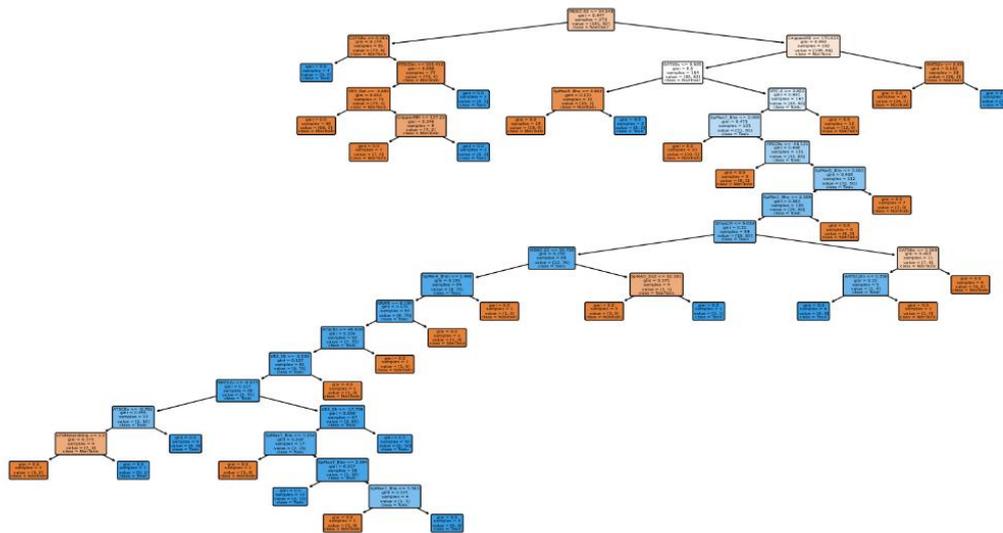
pembelajaran sekuensial. Tidak seperti Decision Tree yang rentan terhadap overfitting atau Random Forest yang mengandalkan penggabungan pohon secara acak, Gradient Boosting secara iteratif menyesuaikan model berdasarkan kesalahan sebelumnya, sehingga lebih akurat dalam menangkap pola toksisitas. Berdasarkan metrik evaluasi seperti akurasi, presisi, recall, dan F1-score, Gradient Boosting memiliki keunggulan signifikan dalam keseimbangan antara deteksi senyawa toksik dan non-toksik.

C. Grafik Dan Visualisasi Model



Gambar. 12 Grafik Dan Visual Model

Dari gambar tersebut menyajikan perbandingan akurasi, presisi, recall, dan F1-score dari algoritma *Decision Tree*, *Random Forest*, *Extra Trees*, dan *Gradient Boosting*. Grafik ini menunjukkan bahwa *Gradient Boosting* memiliki performa terbaik dengan akurasi tertinggi sebesar 0.93, diikuti oleh *Decision Tree* dengan 0.87, sementara *Random Forest* dan *Extra Trees* memiliki akurasi lebih rendah, masing-masing 0.70 dan 0.71. Selain akurasi, *Gradient Boosting* juga unggul dalam presisi, recall, dan F1-score, menunjukkan kemampuannya yang lebih baik dalam mengklasifikasikan senyawa toksik dan non-toksik. Sebaliknya, *Random Forest* dan *Extra Trees* masih menghadapi kesulitan dalam menangani kelas negatif, yang ditunjukkan oleh skor recall yang lebih rendah. Dari hasil visualisasi ini, dapat disimpulkan bahwa pemilihan algoritma yang tepat sangat berpengaruh terhadap kinerja model, serta optimalisasi lebih lanjut diperlukan untuk meningkatkan akurasi pada metode dengan performa lebih rendah.



Gambar. 13 Kombinasi Metode

Gambar mengenai kombinasi keempat metode menunjukkan adanya teknik ensemble yang digunakan untuk meningkatkan performa model. Namun, penting untuk menjelaskan lebih lanjut metode kombinasi yang diterapkan, seperti voting ensemble yang menggabungkan prediksi dari beberapa model atau stacking ensemble, yang menggunakan model meta untuk mengolah output dari berbagai algoritma. Pendekatan ensemble ini dapat meningkatkan performa prediksi, tetapi juga memiliki tantangan dalam kompleksitas komputasi dan interpretabilitas hasil.

Hasil penelitian ini dapat diterapkan dalam industri farmasi untuk meningkatkan keamanan produk farmasi dengan mengidentifikasi senyawa yang memiliki potensi toksik lebih awal dalam proses pengembangan obat. Implementasi model ini dalam skala industri dapat dilakukan dengan mengintegrasikan data eksperimen laboratorium tambahan atau menggunakan model berbasis explainable AI untuk meningkatkan transparansi prediksi. Selain itu, penelitian lanjutan dapat mengeksplorasi kombinasi model machine learning dengan metode *in vitro* dan *in vivo* guna meningkatkan keandalan prediksi toksisitas sebelum tahap uji klinis.

IV. KESIMPULAN

Penelitian ini menunjukkan bahwa Gradient Boosting adalah model terbaik dalam prediksi toksisitas senyawa kimia, mengungguli Decision Tree, Random Forest, dan Extra Trees. Model ini dapat diterapkan dalam industri farmasi untuk mempercepat uji toksisitas, mengurangi biaya penelitian, dan meningkatkan keamanan pengembangan obat. Namun, terdapat keterbatasan dalam kualitas data, validitas model, serta interpretabilitas yang masih menjadi tantangan, terutama dalam menangani bias dan ketidakseimbangan data. Selain itu, penerapan ML dalam dunia nyata memerlukan validasi lebih lanjut melalui eksperimen *in vitro* dan *in vivo*. Untuk meningkatkan akurasi dan mengurangi kesalahan klasifikasi, penelitian lanjutan dapat mengeksplorasi teknik threshold tuning, penanganan data yang tidak seimbang dengan SMOTE (Synthetic Minority Over-sampling Technique), serta penggunaan explainable AI (XAI) untuk meningkatkan interpretabilitas model. Selain itu, eksplorasi lebih lanjut terhadap deep learning, unsupervised learning untuk mendeteksi pola baru dalam data toksisitas, serta hyperparameter tuning otomatis dengan Bayesian Optimization atau Grid Search dapat meningkatkan keandalan model. Integrasi metode ensemble learning yang lebih kompleks, seperti stacking ensemble, juga dapat menjadi langkah strategis dalam meningkatkan performa prediksi sebelum model diterapkan dalam industri farmasi.

REFERENSI

- [1] A. Novita, K. Tampubolon, H. Julia, F. Fitria and A. H. H. Basri, "Dampak Defisiensi dan Toksisitas Hara Magnesium terhadap Karakteristik," *Agrotechnology Research Journal*, vol. 6, p. 49–61, Juni 2022.
- [2] L. Sifaiya, R. Hasan and N. A. Choirunniza, "Kajian molekular docking, farmakokinetik dan toksisitas tanaman pegagan (*Centella asiatica* L.) terhadap target terapi antidepresan," *Pharmasipha: Pharmaceutical Journal of Islamic Pharmacy*, pp. 26-40, 24 September 2024.
- [3] M. H. Madi, D. Syauqy and W. Kurniawan, "Klasifikasi Kelayakan Konsumsi Susu Kedelai Berdasarkan PH, Warna, dan Aroma Menggunakan Metode Random Forest Berbasis Arduino," *Jurnal Pengembangan Teknologi Informasi dan Ilmu Komputer*, vol. 9, 2 2025.
- [4] S. E. Suryana, B. Warsito and S. , "Penerapan Gradient Boosting Dengan Hyperopt Untuk Memprediksi Keberhasilan Telemarketing Bank," *JURNAL GAUSSIAN*, vol. 10, pp. 617 - 623, 2021.
- [5] L. N. AINA, V. R. S. NASTITI and C. S. K. ADITYA, "Implementasi Extra Trees Classifier dengan Optimasi Grid Search CV pada Prediksi Tingkat Adaptasi," *MIND (Multimedia Artificial Intelligent Networking Database) Journal*, vol. 9, pp. 78-88, 2024.
- [6] Tedyyana, Agus, Osman Ghazali, and Onno W. Purbo. "Machine learning for network defense: automated DDoS detection with telegram notification integration." *Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science* 34.2 (2024): 1102.
- [7] M. Akmaluddin and T. Dewayanto, "Systematic literature review: Implementasi artificial intelligence dan machine learning pada bidang akuntansi manajemen," *Diponegoro Journal of Accounting*, vol. 12, pp. 1-11, 2023.
- [8] H. Khoirunnisa and A. Voutama, "Analisis Faktor Tingkat Kebahagiaan Negara Menggunakan Data World Happiness Report dengan Metode Regresi Linier," *Jurnal Keilmuan dan Aplikasi Teknik Informatika*, vol. 15, pp. 1-7, 2023.
- [9] A. Wilapangga, U. Aziza and K. Uqomah, "STUDI IN SILICO POTENSI FARMAKOKINETIK TUJUH SENYAWA DARI TUMBUHAN BROLOWALI (*Tinospora cordifolia*) UNTUK PREDIKSI TOKSISITAS," *Jurnal Bina Cipta Husada*, vol. 19, pp. 101 - 111, 2023.
- [10] N. A. Husnah, "Implementasi algoritma Decision Tree untuk klasifikasi produk laris," *Jurnal Ilmiah Ilmu Komputer Fakultas Ilmu Komputer Universitas Al Asyariah Mandar*, vol. 7, pp. 45-51, 2021.
- [11] M. R. Adrian, M. P. Putra, H. M. Rafialdy and N. A. Rakhmawati, "Perbandingan Metode Klasifikasi Random Forest dan SVM Pada Analisis Sentimen PSBB," *JURNAL INFORMATIKA UPGRIS*, vol. 7, pp. 2460-4801/2447-664, 2021.
- [12] A. W. and H. Asnal, "Analisis Sentimen Layanan Hotel Menggunakan Algoritma Extra Trees: Studi Kasus pada Ulasan Pelanggan," *The Indonesian Journal of Computer Science*, vol. 13.3, 2024.
- [13] D. and S. , "Implementasi Multi-Class Gradient Boosting untuk Mengklasifikasikan Jenis Hewan pada Kebun Binatang," *J. Ilmu Komput*, vol. 17, pp. 32-40, 2023.
- [14] A. Nadia and P. , "Urgensi evaluasi pembelajaran di kelas," *Jurnal Inovasi Dan Riset Akademik*, vol. 3, pp. 111-121, 2022.
- [15] "Uji Aktivitas Senyawa 5-hydroxymethylfurfural dari Tanaman Abiu (*Pouteria caimito*) Sebagai Kandidat Obat Kanker Tulang Menggunakan Metode In Silico," *Biological Science and Education Journal*, vol. 4, pp. 67-74, 2024.