

BAB 5

SIMPULAN DAN SARAN

Bab ini berisikan tentang simpulan dan saran terkait dengan penelitian yang telah dilakukan dan dijelaskan pada Bab terdahulu.

5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan mengenai klasifikasi senyawa dalam tanaman yang berpotensi menyembuhkan kanker paru-paru menggunakan algoritma Random Forest, dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut:

1. Model klasifikasi Random Forest mampu mengidentifikasi senyawa yang berpotensi sebagai senyawa antikanker dengan tingkat akurasi sebesar 87% pada data uji.
2. Berdasarkan evaluasi menggunakan *classification report* dan *confusion matrix*, diperoleh hasil kinerja yang spesifik yaitu:
 - Precision tertinggi pada kelas 'Potensial' (Label 1) sebesar 0.92, menunjukkan bahwa hampir semua prediksi positif benar adanya.
 - Recall tertinggi pada kelas 'Tidak Potensial' (Label 0) sebesar 0.93, menunjukkan bahwa model berhasil mengidentifikasi hampir semua senyawa yang sebenarnya tidak berpotensi antikanker.
 - Nilai F1-Score keseluruhan (Macro Avg F1-Score 0.87) menunjukkan bahwa model cukup seimbang dalam meminimalisasi kesalahan Tipe I (false positive) dan Tipe II (false negative), dengan penekanan yang baik pada identifikasi kandidat negatif.
3. Fitur-fitur kimiawi seperti *Hydrogen Bond Donor* (HBD), *Hydrogen Bond Acceptor* (HBA), massa molekul, logP dan *molecular fingerprint* terbukti berpengaruh signifikan dalam proses klasifikasi senyawa, sejalan dengan prinsip *drug-likeness*.
4. Model klasifikasi Random Forest yang dilatih menggunakan fitur Molecular Fingerprints mampu mengidentifikasi senyawa yang berpotensi aktif terhadap

target EGFR dengan sangat baik, mencapai rata-rata akurasi cross-validation sebesar 0.86.

5. Penelitian ini berkontribusi dalam membantu pengembangan awal sistem pendukung keputusan berbasis AI untuk identifikasi senyawa tanaman yang berpotensi sebagai obat kanker paru-paru, mempercepat proses skrining awal kandidat obat.
6. Prototipe sistem klasifikasi berbasis web sederhana telah berhasil diimplementasikan, menyediakan antarmuka yang intuitif untuk pengguna dalam melakukan prediksi.

5.2 Saran

Untuk pengembangan dan peningkatan kualitas penelitian di masa yang akan datang, penulis memberikan beberapa saran sebagai berikut:

1. Eksperimen dengan algoritma lain: Selain Random Forest, disarankan untuk melakukan eksperimen dengan algoritma machine learning lain seperti Support Vector Machine (SVM), XGBoost, atau metode deep learning (misalnya, Neural Networks). Perbandingan kinerja dengan algoritma ini dapat mengungkap model yang lebih optimal atau memberikan wawasan yang berbeda tentang data.
2. Pengujian lebih lanjut melalui validasi laboratorium atau kolaborasi: Hasil klasifikasi komputasi merupakan tahap skrining awal. Sangat penting untuk melakukan pengujian lebih lanjut terhadap senyawa yang diprediksi potensial melalui validasi in-vitro (misalnya, uji sitotoksitas pada lini sel kanker paru-paru) dan in-vivo (uji pada model hewan), serta berkolaborasi dengan bidang farmasi dan biologi untuk konfirmasi.
3. Pengembangan aplikasi berbasis web atau mobile yang lebih komprehensif: Model klasifikasi ini dapat dikembangkan menjadi aplikasi berbasis web atau mobile yang lebih interaktif dan fungsional, dengan fitur tambahan seperti pencarian basis data senyawa, visualisasi interaktif dari sifat molekuler, dan manajemen pengguna, agar lebih mudah diakses oleh peneliti maupun praktisi di bidang kesehatan.

4. Integrasi dengan data biologis tambahan: Akurasi dan kegunaan model dapat ditingkatkan dengan mengintegrasikan data biologis tambahan, seperti data aktivitas sitotoksik, atau bahkan data ekspresi gen, untuk memberikan gambaran yang lebih holistik tentang potensi senyawa dalam dunia nyata.



UMN
UNIVERSITAS
MULTIMEDIA
NUSANTARA