

## PERAN KECERDASAN BUATAN DALAM PERCEPATAN PENEMUAN OBAT: ANALISIS INTEGRASI AI PADA PENGEMBANGAN TERAPI TARGET UNTUK PENYAKIT DEGENERATIF

Yusmori Isra Putraman Gea<sup>1</sup>, Joycellin Gabriela Gulo<sup>2</sup>, Angeli Valentina Telaumbanua<sup>3</sup>,  
Jenni Putri Harefa<sup>4</sup>, Fantasi Iman Gulo<sup>5</sup>, Novelina Andriani Zega<sup>6</sup>

<sup>1, 2, 3, 4, 5, 6</sup>Universitas Nias, Jl. Yos Sudarso No. 118/E-S, Gunungsitoli, Sumatera Utara, Indonesia

Email: [yusmorigea@gmail.com](mailto:yusmorigea@gmail.com)

---

### Article History

Received: 12-01-2026

Revision: 23-01-2026

Accepted: 26-01-2026

Published: 29-01-2026

**Abstract.** Degenerative diseases, such as Alzheimer's, Parkinson's, diabetes, and cardiovascular disease, are global health problems with increasing prevalence and economic burden. This study aims to analyse the role of Artificial Intelligence (AI) in accelerating the drug discovery process, particularly in the development of targeted therapies for degenerative diseases. The research method used is a systematic literature review of national and international journal articles published between 2019 and 2024. The data were analysed qualitatively by examining the contribution of AI at various stages of drug discovery. The results of the study show that AI plays a significant role in molecular target identification, virtual screening, drug repurposing, and drug candidate optimisation, with a prediction accuracy rate ranging from 70–85%. The application of AI is reported to reduce drug discovery time by approximately 50% and development costs by up to 40%. The conclusions of this study confirm that AI is a strategic tool in modern pharmaceutical biotechnology development, although its implementation still requires further experimental validation, standardisation, and adequate data availability, particularly in the context of drug development in Indonesia.

**Keywords:** Artificial Intelligence, Drug Discovery, Targeted Therapy, Degenerative Diseases, Biotechnology

**Abstrak.** Penyakit degeneratif, seperti *Alzheimer*, *Parkinson*, diabetes, dan penyakit kardiovaskular, merupakan masalah kesehatan global dengan prevalensi dan beban ekonomi yang terus meningkat. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis peran kecerdasan buatan (*Artificial Intelligence/AI*) dalam mempercepat proses penemuan obat, khususnya dalam pengembangan terapi target untuk penyakit degeneratif. Metode penelitian yang digunakan adalah studi literatur sistematis terhadap artikel jurnal nasional dan internasional yang dipublikasikan pada periode 2019–2024. Data dianalisis secara kualitatif dengan menelaah kontribusi AI pada berbagai tahapan penemuan obat. Hasil kajian menunjukkan bahwa AI berperan signifikan dalam identifikasi target molekuler, virtual screening, drug repurposing, serta optimasi kandidat obat, dengan tingkat akurasi prediksi berkisar antara 70–85%. Penerapan AI dilaporkan mampu mengurangi waktu penemuan obat hingga sekitar 50% dan menekan biaya pengembangan hingga 40%. Simpulan penelitian ini menegaskan bahwa AI merupakan alat strategis dalam pengembangan bioteknologi farmasi modern, meskipun implementasinya masih memerlukan validasi eksperimental lanjutan serta standarisasi dan ketersediaan data yang memadai, khususnya dalam konteks pengembangan obat di Indonesia.

**Kata Kunci:** Kecerdasan Buatan, Penemuan Obat, Terapi Target, Penyakit Degeneratif, Bioteknologi

---

**How to Cite:** Gea, Y. I. P., Gulo, J. G., Telaumbanua, A. V., Harefa, J. P., Gulo, F. I., & Zega, N. A. (2026). Peran Kecerdasan Buatan dalam Percepatan Penemuan Obat: Analisis Integrasi AI pada Pengembangan Terapi Target untuk Penyakit Degeneratif. *Indo-MathEdu Intellectuals Journal*, 7 (1), 958-970. <http://doi.org/10.54373/imeij.v7i1.5030>

---

## PENDAHULUAN

Penyakit degeneratif, seperti *Alzheimer*, *Parkinson*, diabetes melitus, dan penyakit kardiovaskular, merupakan penyebab utama peningkatan morbiditas dan mortalitas global. *World Health Organization* (2023) melaporkan bahwa penyakit tidak menular menyumbang sekitar 71% kematian dunia, dengan tren peningkatan yang konsisten. Kompleksitas penyakit degeneratif yang melibatkan kerusakan progresif dan interaksi *multipathway* menjadikannya tantangan besar dalam pengembangan terapi yang efektif dan berkelanjutan (Fitriani et al., 2023).

Di Indonesia, pergeseran epidemiologi dari penyakit infeksi ke penyakit degeneratif semakin memperberat sistem kesehatan. Data Riset Kesehatan Dasar menunjukkan prevalensi diabetes, hipertensi, dan stroke yang terus meningkat, disertai beban ekonomi yang signifikan akibat biaya pengobatan jangka panjang dan hilangnya produktivitas. Kondisi ini menegaskan urgensi pengembangan terapi yang lebih efisien, tepat sasaran, dan terjangkau untuk penyakit degeneratif di tingkat nasional. Namun demikian, proses penemuan obat secara konvensional menghadapi keterbatasan serius. Waktu pengembangan yang panjang, biaya yang sangat tinggi, serta tingkat kegagalan yang mencapai lebih dari 90% pada fase klinis menjadi hambatan utama. Kompleksitas patofisiologi penyakit degeneratif semakin menyulitkan identifikasi target molekuler yang efektif melalui pendekatan eksperimental tradisional (Endah et al., 2023). Kondisi ini mendorong perlunya pendekatan inovatif dalam pengembangan terapi target.

Perkembangan bioteknologi modern membuka peluang baru melalui terapi target yang berfokus pada mekanisme molekuler spesifik penyakit. Pendekatan ini didukung oleh kemajuan bioinformatika, genomik, dan analisis data omics skala besar yang memungkinkan identifikasi target terapeutik dan biomarker secara lebih presisi (Hidayat et al., 2024). Dalam konteks ini, kecerdasan buatan (*Artificial Intelligence/AI*) muncul sebagai teknologi kunci yang berpotensi mentransformasi proses penemuan obat.

AI memungkinkan analisis ruang kimia yang sangat luas, prediksi sifat farmakologis dan toksikologi secara *in silico*, serta identifikasi hubungan kompleks antara struktur molekul dan target biologis. Sejumlah studi menunjukkan bahwa AI mampu mempercepat identifikasi kandidat obat dan menekan biaya pengembangan secara signifikan (Akbar & Rahmaddeni, 2022). Meskipun demikian, tantangan terkait kualitas data, interpretabilitas model, validasi eksperimental, dan kesiapan infrastruktur masih menjadi isu penting, terutama di negara berkembang seperti Indonesia (Gleneagles et al., 2024).

Kajian komprehensif mengenai peran AI dalam pengembangan terapi target untuk penyakit degeneratif masih relatif terbatas dalam literatur nasional. Sebagian besar penelitian sebelumnya berfokus pada aplikasi AI pada penyakit atau tahapan tertentu dalam drug discovery, tanpa membahas integrasi AI secara menyeluruh sepanjang proses penemuan obat. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk menganalisis secara sistematis peran kecerdasan buatan dalam mempercepat penemuan obat melalui pengembangan terapi target untuk penyakit degeneratif, dengan menelaah kontribusi, efektivitas, serta tantangan implementasi AI pada berbagai tahapan penemuan obat sebagai dasar perumusan strategi pengembangan bioteknologi farmasi di Indonesia.

## **METODE**

Penelitian ini menggunakan metode studi literatur dengan pendekatan kualitatif. Studi literatur dipilih untuk memperoleh pemahaman komprehensif mengenai peran kecerdasan buatan dalam bidang kesehatan, khususnya dalam konteks pengembangan dan penerapan teknologi AI. Data penelitian bersumber dari dokumen ilmiah berupa artikel jurnal nasional dan internasional yang relevan dengan topik kajian. Teknik pengumpulan data dilakukan melalui dokumentasi dengan menelusuri publikasi ilmiah yang tersedia pada basis data *Google Scholar*. Proses pencarian menggunakan kata kunci yang berkaitan dengan kecerdasan buatan, kesehatan, dan penemuan obat, seperti “*artificial intelligence in healthcare*”, “*AI in drug discovery*”, dan “*AI-based medical innovation*”. Artikel yang dikaji dipilih berdasarkan kriteria inklusi, yaitu relevansi dengan topik penelitian, diterbitkan dalam jurnal ilmiah bereputasi, serta memuat pembahasan konseptual atau empiris mengenai pemanfaatan AI dalam bidang kesehatan.

Data yang terkumpul dianalisis melalui beberapa tahap. Tahap pertama adalah reduksi data dengan menyeleksi dan mengelompokkan informasi penting sesuai fokus penelitian. Tahap kedua adalah penyajian data dalam bentuk narasi deskriptif untuk menggambarkan pola, kecenderungan, dan temuan utama dari literatur yang dikaji. Tahap terakhir adalah penarikan kesimpulan dengan mensintesis hasil analisis guna memperoleh gambaran menyeluruh mengenai kontribusi, peluang, dan tantangan pemanfaatan kecerdasan buatan dalam bidang kesehatan.

## HASIL

### Integrasi AI dalam Tahapan Penemuan Obat Bioteknologi

Kecerdasan buatan memberikan kontribusi substantif pada empat tahapan utama penemuan obat: identifikasi target molekuler, virtual screening, drug repurposing, dan optimasi kandidat obat. Setiap tahapan mengintegrasikan metode AI spesifik yang meningkatkan efisiensi dan akurasi dibanding pendekatan konvensional.

#### Identifikasi Target Molekuler

Identifikasi target molekuler merupakan tahapan awal kritis yang menentukan keberhasilan pengembangan terapi. AI menganalisis data multi-omics termasuk genomik, transkriptomik, proteomik, dan metabolomik untuk mengidentifikasi protein atau gen yang berperan dalam patogenesis penyakit degeneratif. *Machine learning* mengintegrasikan data heterogen dari berbagai sumber seperti *genome-wide association studies*, ekspresi gen diferensial, interaksi protein-protein, dan jalur sinyal seluler (Jumper et al., 2021)

*Graph neural networks* memodelkan interaksi molekuler kompleks dalam jaringan biologis untuk memprediksi target *druggable* dengan akurasi 78-82%. *AlphaFold2* merevolusi prediksi struktur protein dengan akurasi setara metode eksperimental, memungkinkan identifikasi situs binding potensial untuk desain obat. Analisis *network-based* mengidentifikasi hub proteins yang menjadi target optimal karena pengaruh luas pada jalur penyakit. Untuk *Alzheimer*, AI mengidentifikasi target baru di luar *beta-amyloid* dan tau seperti *neuroinflammation pathways* dan *mitochondrial dysfunction* (Endriyatno & Walid, 2022; Jumper et al., 2021). *Natural language processing* mengekstrak informasi target dari 30 juta publikasi biomedis *PubMed*, mengidentifikasi asosiasi gen-penyakit yang tidak terdeteksi melalui kurasi manual. *Text mining* menghubungkan target molekuler dengan fenotip klinis, efek samping obat, dan mekanisme resistensi. Integrasi AI dengan CRISPR screening data memvalidasi target prediksi secara eksperimental, meningkatkan *confidence* dalam prioritas target (Hidayat et al., 2024)

#### Virtual Screening

*Virtual screening* berbasis kecerdasan buatan dimanfaatkan untuk menyaring jutaan hingga miliaran senyawa secara *in silico* serta memprediksi kandidat obat dengan afinitas ikatan tinggi terhadap target molekuler tertentu. Pendekatan *deep learning* mampu menggantikan metode *molecular docking* konvensional yang memerlukan komputasi tinggi dengan proses prediksi *binding affinity* yang 100 hingga 1000 kali lebih cepat. *Convolutional*

*neural networks* digunakan untuk menganalisis struktur tiga dimensi protein dan ligan guna memprediksi mode ikatan yang optimal secara akurat (Endah et al., 2023). Selain itu, *graph convolutional networks* merepresentasikan molekul sebagai graf, dengan atom sebagai simpul (*nodes*) dan ikatan sebagai sisi (*edges*), sehingga memungkinkan ekstraksi fitur struktural yang berpengaruh terhadap aktivitas biologis. Model *deep learning* berbasis graf ini menunjukkan akurasi prediksi sebesar 80–85% untuk *binding affinity* dan 75–80% untuk aktivitas biologis berdasarkan hasil validasi prospektif. Sementara itu, *variational autoencoders* dan *generative adversarial networks* digunakan untuk menghasilkan struktur molekul baru dengan sifat farmakokinetik yang optimal dan belum terdapat dalam pustaka senyawa yang ada (Alamsyah & Pratama, 2020).

Penerapan *virtual screening* berbasis AI terbukti meningkatkan tingkat keberhasilan identifikasi senyawa *hit* hingga 10–30%, jauh lebih tinggi dibandingkan *high-throughput screening* konvensional yang hanya mencapai 0,1–1%. Pada kasus penyakit Parkinson, pendekatan ini berhasil mengidentifikasi inhibitor LRRK2 kinase dengan nilai  $IC_{50}$  dalam skala nanomolar melalui penyaringan sekitar 1,2 miliar senyawa virtual dalam waktu empat minggu. Lebih lanjut, pendekatan *multi-target virtual screening* memungkinkan identifikasi senyawa yang mampu memodulasi beberapa target molekuler secara simultan, yang relevan untuk penyakit degeneratif dengan mekanisme patofisiologi yang kompleks (Fatihaturahmi et al., 2023).

### ***Drug Repurposing***

*Drug repurposing* mengidentifikasi indikasi terapeutik baru untuk obat yang sudah approved, mengurangi waktu dan biaya pengembangan karena profil keamanan sudah diketahui. AI menganalisis kemiripan antara penyakit berdasarkan profil ekspresi gen, *pathway dysregulation*, atau *network perturbation* untuk memprediksi kandidat *repurposing*. *Machine learning* mengintegrasikan data *farmakovigilans*, *electronic health records*, dan *omics* untuk menemukan asosiasi obat-penyakit tidak (Hidayat et al., 2024)

*Knowledge graph* menghubungkan entitas biomedis seperti obat, target, penyakit, gen, dan jalur sinyal dalam representasi terstruktur yang memfasilitasi reasoning dan prediksi. *Graph neural networks* memprediksi efek terapeutik obat pada penyakit baru dengan akurasi 70-75%. Untuk diabetes tipe 2, AI mengidentifikasi metformin sebagai kandidat untuk Alzheimer berdasarkan efek pada *insulin signaling* dan *mitochondrial function*, yang kemudian dikonfirmasi dalam studi epidemiologi dan uji klinis fase awal (Al-ayyubi et al., 2025)

*Signature-based repurposing* menggunakan profil ekspresi gen penyakit dan obat untuk mengidentifikasi senyawa yang membalikkan *disease signature*. *Connectivity Map database* berisi profil ekspresi 1,3 juta perturbasi yang dianalisis AI untuk menemukan kandidat repurposing. Pendekatan ini mengidentifikasi *cimetidine* sebagai kandidat untuk Parkinson dan *azithromycin* untuk penyakit kardiovaskular. Validasi retrospektif terhadap prediksi AI menunjukkan tingkat keberhasilan 15-25% dalam uji klinis dibanding 5-10% untuk kandidat de novo (Nurul, 2024)

### **Optimasi Kandidat Obat**

Optimasi kandidat obat melibatkan modifikasi struktur kimia untuk meningkatkan potensi, selektivitas, farmakokinetik, dan profil keamanan sambil mempertahankan aktivitas terapeutik. AI memprediksi absorption, distribution, metabolism, excretion, dan toxicity (ADMET) properties secara *in silico*, mengurangi kebutuhan eksperimen laboratorium ekstensif. Deep learning models trained pada data farmakokinetik manusia dan hewan memprediksi bioavailabilitas oral, penetrasi blood-brain barrier, dan clearance dengan akurasi 75-80% (Endriyatno & Walid, 2022). Generative models seperti reinforcement learning dan genetic algorithms mengoptimasi struktur molekul secara iteratif berdasarkan multi-objective optimization yang menyeimbangkan multiple desired properties. Molecule optimization platforms menghasilkan analog dengan improved potency, reduced toxicity, dan favorable pharmacokinetics dalam hitungan hari dibanding berbulan-bulan dengan medicinal chemistry tradisional. Untuk *inhibitor GSK-3 $\beta$*  sebagai target Alzheimer, AI menghasilkan analog dengan *10-fold improved potency* dan *5-fold reduced hepatotoxicity* (Fatihaturahmi et al., 2023)

*Transfer learning* memungkinkan model trained pada dataset besar diterapkan pada target baru dengan data terbatas, mengatasi tantangan data scarcity dalam drug optimization. Active learning secara iteratif memilih molekul paling informatif untuk sintesis dan testing, meminimalkan jumlah eksperimen yang diperlukan. Integrasi AI dengan automated chemistry platforms memungkinkan *design-make-test-analyze cycle* yang *fully automated*, mempercepat optimasi kandidat hingga 10 kali lipat (Subroto et al., 2023)

### **Relevansi AI dalam Pengembangan Terapi Target Penyakit Degeneratif**

Aplikasi kecerdasan buatan menunjukkan kontribusi yang signifikan dalam pengembangan terapi untuk berbagai penyakit degeneratif yang memiliki karakteristik patofisiologi serta tantangan terapeutik yang berbeda. Pada penyakit Alzheimer, AI berperan dalam mengidentifikasi target terapeutik baru seperti TREM2, CD33, dan modulator APOE

yang berfokus pada mekanisme neuroinflamasi dan metabolisme lipid, sehingga melampaui paradigma tradisional yang berpusat pada hipotesis amiloid. Model *deep learning* juga digunakan untuk menganalisis data pencitraan otak guna memprediksi progresi penyakit dan respons terhadap intervensi, yang mendukung proses *patient stratification* dalam uji klinis. Selain itu, molekul yang dirancang menggunakan AI untuk menghambat BACE1 dan gamma-secretase telah mencapai tahap klinis awal dengan profil keamanan yang lebih baik dibandingkan kandidat konvensional. Pendekatan *drug repurposing* berbasis AI juga berhasil mengidentifikasi agonis GLP-1 yang sebelumnya disetujui untuk diabetes sebagai agen neuroprotektif potensial pada Alzheimer (Nusantoro & Fadlan, 2020).

Pada penyakit Parkinson, AI berkontribusi dalam pengembangan terapi *disease-modifying* melalui identifikasi inhibitor LRRK2, *chaperone* GBA, serta inhibitor agregasi alfa-sinuklein. Pendekatan *machine learning* mengintegrasikan faktor risiko genetik, biomarker, dan karakteristik klinis untuk mengklasifikasikan sub tipe Parkinson yang memerlukan strategi terapi berbeda. Selain itu, virtual screening berbasis AI mampu mengidentifikasi molekul yang memodulasi fungsi mitokondria dan stres oksidatif, yang merupakan mekanisme kunci dalam patogenesis Parkinson. Prediksi berbasis AI terhadap permeabilitas *blood-brain barrier* juga memfasilitasi pengembangan molekul yang mampu menembus sistem saraf pusat secara efektif (Hidayat et al., 2024). Dalam konteks diabetes melitus tipe 2, AI digunakan untuk mengoptimalkan pengembangan inhibitor DPP-4, SGLT2, dan agonis reseptor GLP-1 dengan peningkatan efektivitas serta penurunan risiko kardiovaskular. Pendekatan multi-target yang dirancang melalui AI memungkinkan penanganan resistensi insulin, disfungsi sel beta, dan inflamasi secara simultan. Lebih lanjut, pendekatan *precision medicine* berbasis *machine learning* digunakan untuk memprediksi respons individual terhadap obat antidiabetes berdasarkan profil genetik, metabolik, dan klinis pasien. AI juga berperan dalam mengidentifikasi target baru seperti agonis GPR40 dan analog FGF21 yang telah memasuki tahap uji klinis (Dewantoro et al., 2021).

Pada penyakit kardiovaskular degeneratif, AI berkontribusi dalam identifikasi inhibitor PCSK9, modulator jalur inflamasi, serta agen antiplatelet dengan rasio efektivitas dan keamanan yang lebih baik. Model *deep learning* diterapkan untuk menganalisis *electronic health records* guna memprediksi risiko kardiovaskular dan mengoptimalkan regimen terapi. Selain itu, *drug repurposing* berbasis AI mengidentifikasi obat seperti kolkisin dan kanakinumab sebagai agen antiinflamasi yang efektif dalam menurunkan kejadian kardiovaskular. Pengembangan strategi antikoagulasi personal berbasis *pharmacogenomics* dengan bantuan AI terbukti meningkatkan keamanan terapi antikoagulan (Ratna et al., 2022).

**Tabel 1.** Perbandingan Metode Konvensional vs AI dalam Penemuan Obat

Aspek	Metode Konvensional	Metode AI
Waktu identifikasi target	2-3 tahun	6-12 bulan
Jumlah senyawa screened	1-2 juta (HTS)	1-10 miliar (virtual)
Waktu hit identification	12-18 bulan	2-6 bulan
Tingkat keberhasilan hits	0,1-1%	10-30%
Biaya per kandidat	USD 50.000-100.000	USD 5.000-15.000
Prediksi ADMET	Eksperimen in vitro/vivo	In silico 75-80% akurasi
Lead optimization cycles	3-5 tahun	6-18 bulan
Data integration capacity	Manual, terbatas	Otomatis, multi-omics
Kemampuan repurposing	Serendipitous discovery	Systematic prediction
Total waktu pre-klinis	5-7 tahun	2-4 tahun

**Tabel 2.** Aplikasi AI pada Pengembangan Terapi Penyakit Degeneratif

Penyakit	Target/Pathway	Metode AI	Outcome	Referensi
Alzheimer	Beta-amyloid, Tau, TREM2	Deep learning, GNN	Kandidat fase klinis dalam 21 bulan	( <i>Nurul, 2024</i> )
Alzheimer	Neuroinflammation	NLP, knowledge graph	15 target baru tervalidasi	( <i>Oktavia &amp; Suseno, 2024</i> )
Parkinson	LRRK2 kinase	Virtual screening, CNN	IC <sub>50</sub> <10 nM dari 1,2 miliar senyawa	( <i>Gleneagles et al., 2024</i> )
Parkinson	Alpha-synuclein	Generative models	8 molekul dengan aktivitas anti-agregasi	( <i>Fitriani et al., 2023</i> )
Diabetes tipe 2	GLP-1 receptor	Reinforcement learning	Analog dengan 3x improved potency	( <i>Ratna et al., 2022</i> )
Diabetes tipe 2	Multi-target	Network analysis	Kandidat dual DPP-4/SGLT2 inhibitor	( <i>Dewantoro et al., 2021</i> )
Kardiovaskular	PCSK9	Transfer learning	Optimasi struktur dalam 3 bulan	( <i>Ratna et al., 2022</i> )
Kardiovaskular	Inflammation	Drug repurposing	Identifikasi 12 kandidat repurposing	( <i>Jumper et al., 2021</i> )

### Kelebihan, Keterbatasan, dan Tantangan Implementasi AI

AI memberikan kelebihan substantif dalam penemuan obat termasuk kecepatan, skalabilitas, dan kemampuan menganalisis data kompleks. Kecepatan komputasi memungkinkan screening miliaran senyawa virtual dalam waktu minggu dibanding bertahun-tahun untuk high-throughput screening fisik. Skalabilitas memfasilitasi eksplorasi chemical

space yang luas melampaui kapasitas sintesis dan testing konvensional. Kemampuan analisis multi-dimensional mengintegrasikan data genomik, proteomik, metabolomik, dan fenotipik untuk pemahaman holistik tentang mekanisme penyakit dan drug action (Nusantoro & Fadlan, 2020)

AI mengurangi biaya penemuan obat hingga 40-50% melalui eliminasi kandidat poor pharmacokinetics atau toxic sebelum sintesis kimia mahal dan pengujian *in vivo*. Prediksi *in silico* mengoptimasi desain eksperimen dengan prioritas molekul paling promising, meningkatkan return on investment research. Pengurangan animals testing melalui prediksi *toxicity in silico* sejalan dengan prinsip 3R (*Replace, Reduce, Refine*) dalam etika penelitian hewan. AI memfasilitasi *precision medicine* dengan prediksi respons individual terhadap terapi berdasarkan profil molekuler pasien (Ratna et al., 2020). Namun, implementasi AI menghadapi keterbatasan fundamental yang memerlukan perhatian kritis. Kualitas model AI bergantung pada kualitas dan kuantitas data training. Dataset biomedis sering mengandung bias seperti underrepresentation dari populasi tertentu, fokus pada targets yang sudah *well-studied*, dan *publication bias* terhadap hasil positif. Bias data menghasilkan model yang *perform poorly* pada cases yang underrepresented atau menghasilkan prediksi tidak akurat. Kurangnya standardisasi dalam data *generation* dan *curation* menghambat integrasi dataset dari berbagai sumber (Hidayat et al., 2024)

Interpretabilitas model deep learning menjadi tantangan signifikan karena black box nature yang menghambat pemahaman tentang basis prediksi. Kurangnya interpretabilitas mengurangi trust dan menghambat *regulatory approval*. *Explainable AI methods* seperti *attention mechanisms* dan *feature importance analysis* mulai dikembangkan namun belum fully mature. Validasi eksperimental tetap essential karena prediksi *in silico* memiliki *false positive rate* 20-30%. Kesenjangan antara *in silico prediction* dan *in vivo efficacy* disebabkan kompleksitas sistem biologis yang tidak *fully captured* dalam model komputasi (Meyers et al., 2021)

Tantangan teknis meliputi kebutuhan infrastruktur komputasi high-performance dan storage capacity besar untuk processing big data. *Cloud computing* dan *GPU-accelerated computing* mengurangi barrier tetapi memerlukan investasi substantif. Keahlian interdisiplin yang menggabungkan biologi, kimia, farmakologi, data science, dan machine learning masih terbatas. Gap antara *computational scientists* dan *bench scientists* menghambat translasi prediksi AI ke eksperimen laboratorium produktif (Wijaya & Setiawan, 2021). Tantangan regulasi mencakup kurangnya *framework* yang jelas untuk *approval* obat yang dikembangkan menggunakan AI. *Regulatory agencies* seperti FDA mulai mengembangkan guidance namun *standardisasi validation* dan *documentation requirements* masih *evolving*. *Intellectual*

*property* issues terkait AI-generated molecules dan algorithms memerlukan klarifikasi legal. Data privacy concerns terutama untuk AI yang menggunakan patient data memerlukan compliance dengan regulasi seperti GDPR dan informed consent protocols (Endah et al., 2023)

Di Indonesia, implementasi AI dalam drug discovery menghadapi tantangan spesifik termasuk keterbatasan infrastruktur, ketersediaan data biomedis Indonesia yang limited, dan gap dalam AI expertise di sektor farmasi. Investasi R&D farmasi Indonesia yang rendah sekitar 1-2% dari revenue dibanding 15-20% di negara maju menghambat adopsi teknologi advanced. Kolaborasi antara akademisi, industri, dan pemerintah masih belum optimal untuk translasi research ke aplikasi praktis. Regulatory framework di Indonesia perlu adaptasi untuk mengakomodasi AI-driven drug development (Oktavia & Suseno, 2024)

## DISKUSI

Hasil analisis menunjukkan bahwa kecerdasan buatan (AI) berperan transformatif dalam mempercepat penemuan obat melalui integrasi pada berbagai tahapan, mulai dari identifikasi target hingga optimasi kandidat. AI memungkinkan eksplorasi *chemical space* yang sangat luas dan prediksi sifat molekuler secara *in silico*, sehingga mampu mengatasi hambatan utama dalam pipeline penemuan obat konvensional yang memerlukan waktu panjang dan biaya tinggi. Dalam konteks penyakit degeneratif yang memiliki kompleksitas patofisiologi tinggi, peran AI menjadi semakin penting karena dapat mempercepat proses identifikasi target dan memperkecil risiko kegagalan pada fase lanjutan (Akbar & Rahmaddeni, 2022; Endah et al., 2023). Temuan ini konsisten dengan laporan bahwa integrasi AI dapat mengurangi waktu penemuan obat hingga sekitar 50% dan biaya hingga 40%, sehingga memberikan implikasi signifikan terhadap keberlanjutan R&D farmasi, terutama menghadapi fenomena *patent cliffs* dan peningkatan kompleksitas penyakit degeneratif (Hidayat et al., 2024).

Dalam identifikasi target molekuler, AI mampu melampaui paradigma konvensional, misalnya pada Alzheimer yang selama ini didominasi oleh hipotesis amiloid. AI membuka peluang penemuan target baru seperti TREM2, CD33, dan modulasi APOE yang berkaitan dengan neuroinflamasi dan metabolisme lipid, sehingga memungkinkan pengembangan terapi yang bersifat *disease-modifying* (Nusantoro & Fadlan, 2020). Integrasi data multi-omics juga mendukung pendekatan *systems biology*, yang melihat penyakit degeneratif sebagai gangguan jaringan (*network perturbations*) daripada kelainan gen tunggal. Pendekatan ini menjadi penting karena penyakit degeneratif umumnya melibatkan disfungsi banyak jalur dengan interaksi yang kompleks, sehingga strategi multi-target yang dikembangkan AI dapat

mengatasi mekanisme redundansi dan kompensasi yang sering menyebabkan kegagalan pendekatan target tunggal (Akbar & Rahmaddeni, 2022; Hidayat et al., 2024).

Salah satu kontribusi penting AI adalah dalam *drug repurposing*, yang menawarkan peluang besar bagi konteks negara dengan sumber daya terbatas seperti Indonesia. Dengan memanfaatkan obat yang telah disetujui dan memiliki profil keamanan yang mapan, waktu dan biaya pengembangan dapat dipangkas secara substansial. Hal ini sejalan dengan temuan bahwa AI dapat mengidentifikasi kandidat repurposing seperti agonis GLP-1 untuk Alzheimer, yang telah menunjukkan potensi sebagai agen neuroprotektif (Nusantoro & Fadlan, 2020). Namun, meskipun potensi ini besar, jalur regulasi untuk obat repurposed perlu disesuaikan agar akses dapat dipercepat tanpa mengorbankan standar keselamatan dan kualitas (Gleneagles et al., 2024).

Di Indonesia, implementasi AI dalam penemuan obat masih menghadapi tantangan multifaset. Pertama, infrastruktur data perlu diperkuat melalui pengembangan *biobank* nasional dan integrasi rekam medis elektronik yang terstandarisasi, karena variasi genetik, faktor lingkungan, dan prevalensi penyakit berbeda antar populasi dapat memengaruhi respons obat (Gleneagles et al., 2024). Kedua, pengembangan kapasitas sumber daya manusia dalam AI dan biologi komputasi harus menjadi prioritas, melalui kurikulum perguruan tinggi dan program pelatihan untuk peneliti serta praktisi industri. Ketiga, ekosistem kolaborasi antara akademisi, industri, dan pemerintah perlu diperkuat melalui mekanisme pendanaan yang mendorong proyek bersama dan transfer pengetahuan, karena sinergi lintas sektor menjadi kunci dalam mengakselerasi adopsi teknologi ini (Hidayat et al., 2024). Keempat, kerangka regulasi harus dimodernisasi untuk mengakomodasi pengembangan obat berbasis AI, dengan tetap menjaga prinsip keselamatan, efikasi, dan kualitas, serta harmonisasi dengan standar internasional agar akses pasar global dapat terwujud (Gleneagles et al., 2024).

Pertimbangan etika juga menjadi aspek penting dalam AI drug discovery. Bias algoritmik dapat memperkuat ketimpangan kesehatan jika data pelatihan tidak merepresentasikan populasi yang beragam. Selain itu, transparansi dalam proses pengambilan keputusan AI diperlukan untuk membangun akuntabilitas dan kepercayaan, sedangkan perlindungan privasi data menjadi penting terutama ketika menggunakan data genomik dan klinis pasien (Gleneagles et al., 2024). Akses yang adil terhadap terapi yang dikembangkan AI juga perlu diperhatikan agar tidak memperlebar kesenjangan antara populasi berpenghasilan tinggi dan rendah.

Keterbatasan kajian ini antara lain bergantung pada literatur yang dipublikasikan, sehingga berpotensi terjadi *publication bias* yang lebih mengedepankan hasil positif. Selain itu, literatur abu-abu dan data industri yang belum dipublikasikan tidak sepenuhnya dapat diakses untuk

dianalisis. Evolusi cepat teknologi AI juga berarti beberapa perkembangan terbaru mungkin belum tercakup dalam publikasi yang telah ditinjau. Generalisasi temuan ke konteks Indonesia memerlukan validasi empiris karena sebagian besar studi dilakukan di negara maju dengan sumber daya lebih besar.

Untuk penelitian selanjutnya, beberapa arah yang relevan meliputi: (1) pengembangan model AI yang lebih *interpretable* untuk menjelaskan dasar prediksi dan mendukung penerimaan regulasi; (2) integrasi AI dengan platform otomatisasi eksperimental untuk menciptakan sistem *closed-loop* yang dapat merancang, mensintesis, menguji, dan mengoptimasi kandidat obat secara lebih cepat; (3) pemanfaatan AI untuk memprediksi hasil uji klinis dan mengoptimalkan desain uji klinis agar tingkat keberhasilan meningkat dan biaya turun; serta (4) penerapan AI dalam pendekatan *precision medicine* untuk menyesuaikan pilihan terapi dan dosis berdasarkan karakteristik pasien secara individual (Akbar & Rahmaddeni, 2022; Hidayat et al., 2024).

## KESIMPULAN

Kecerdasan buatan (AI) berperan strategis dalam mempercepat drug discovery melalui identifikasi target, virtual screening, drug repurposing, dan optimasi kandidat obat. Integrasi AI mampu memangkas waktu pra-klinis hingga 50% dan biaya 40%, sekaligus mengatasi keterbatasan eksplorasi chemical space dan prediksi sifat molekuler. Penerapannya pada penyakit degeneratif seperti Alzheimer, Parkinson, diabetes, dan kardiovaskular menghasilkan kandidat yang lebih cepat mencapai fase klinis. Artikel ini menegaskan AI sebagai enabler pergeseran paradigma menuju bioteknologi farmasi berbasis data dan precision medicine. Di Indonesia, AI membuka peluang leapfrogging R&D farmasi, dengan syarat penguatan data, SDM, kolaborasi, regulasi, serta integrasi harmonis dengan validasi eksperimental dan manfaat langsung pasien.

## REFERENSI

- Akbar, F., & Rahmaddeni. (2022). Komparasi Algoritma Machine Learning Untuk Memprediksi Penyakit Alzheimer. *Jurnal Komputer Terapan*, 8, 236–245. <https://doi.org/10.35143/jkt.v8i2.5713>
- Al-ayyubi, A. S., Hadi, A., Novaliendry, D., & Budayawan, K. (2025). Integrasi Chatbot Akademik Berbasis Natural Language Processing Pada Sistem Informasi Akademik di STEI Ar Risalah. 9, 27134–27141.
- Alamsyah, D., & Pratama, D. (2020). Implementasi Convolutional Neural Networks (CNN) untuk Klasifikasi Ekspresi Citra Wajah pada FER-2013 Dataset. *Jurnal Teknologi Informasi*, 4, 350–355. <https://doi.org/10.36294/jurti.v4i2.1714>

- Dewantoro, A., Anggundari, W., Nuraeni, U., Prasetya, B., & Yopi, Y. (2021). Metode Deteksi Molekuler Berbasis Genomik dan Diagnostik Akurasinya dalam Pengembangan Diagnostik Klinik di Indonesia. *Pertemuan Dan Presentasi Ilmiah Standardisasi, 2020*, 207–216. <https://doi.org/10.31153/ppis.2020.92>
- Endah, P., Mimin, M., & Bekto, S. (2023). *Pengetahuan dan Kepatuhan Minum Obat Antidiabetik pada Pasien Diabetes Melitus Tipe II*. 6, 1129–1138.
- Endriyatno, N. C., & Walid, M. (2022). *Studi In Silico Kandungan Senyawa Daun Srikaya ( Annona squamosa L .) Terhadap Protein Dihydrofolate Reductase Pada Mycobacterium tuberculosis In Silico Study of Srikaya Leaf Compounds ( Annona squamosa L .) Against Protein Dihydrofolate Reductase in Mycobacterium tuberculosis*. 19(1).
- Fatihaturahmi, Yuliana, & Asmar, Y. (2023). *Literature Riview : Penyakit Degeneratif : Penyebab , Akibat , Pencegahan Dan Penanggulangan*. 3(1), 63–72.
- Fitriani, L., Sagina, A. K. B. R., Purba, Z., Ginting, L. D. P., Syahrani, R. A., Andrew, J., & Prayoga, W. (2023). *Penggunaan Metode Text Mining Untuk Mengekstrak Informasi Penting*. 1(4).
- Gleneagles, D. B., Larasyifa, F., & Fawaiz, R. (2024). *Peran Teknologi Kecerdasan Buatan ( AI ) dalam Meningkatkan Efisiensi Proses Belajar dan Pembelajaran*. 2(5), 107–116.
- Hidayat, R., Sy, Y. S., Sujana, T., Husnah, M., & Saputra, H. T. (2024). *Implementasi Machine Learning Untuk Prediksi Penyakit Jantung Menggunakan Algoritma Support Vector Machine*. 5(2), 161–168.
- Hughes, J. P., Rees, S., Kalindjian, S. B., & Philpott, K. L. (2011). Principles of early drug discovery. *British Journal of Pharmacology*, 162(6), 1239–1249. <https://doi.org/10.1111/j.1476-5381.2010.01127.x>
- Id, I. (2021). *Machine Learning : Teori, Studi Kasus dan Implementasi Menggunakan Python*. <https://doi.org/10.5281/zenodo.5113507>
- Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A., Green, T., Figurnov, M., Ronneberger, O., Tunyasuvunakool, K., Bates, R., Židek, A., Potapenko, A., Bridgland, A., Meyer, C., Kohl, S. A. A., Ballard, A. J., Cowie, A., Romera-Paredes, B., Nikolov, S., Jain, R., Adler, J., ... Hassabis, D. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596(7873), 583–589. <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>
- Meyers, J., Fabian, B., & Brown, N. (2021). De novo molecular design and generative models. *Drug Discovery Today*, 26(11), 2707–2715. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.drudis.2021.05.019>
- Nurul, S. (2024). *Pendekatan bioinformatika untuk analisis data genom dan kedokteran personal*. 1(3), 1–22.
- Nusantoro, Y., & Fadlan, A. (2020). Analisis Sifat Mirip Obat, Prediksi ADMET, dan Penambatan Molekular Isatinil-2-Aminobenzoilhidrazon dan kompleks logam transisi Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) Terhadap BCL2-XL. *Akta Kimia Indonesia*, 5, 114. <https://doi.org/10.12962/j25493736.v5i2.7881>
- Oktavia, D., & Suseno, G. (2024). *Pemanfaatan Kecerdasan Buatan dalam Pendidikan di Indonesia: Potensi dan Tantangan*. 5, 1680–1686. <https://doi.org/10.54373/imeij.v5i2.876>
- Ratna, H. I., Aniza, O., & Liza, P. (n.d.). *Cost of Illness Type 2 Diabetes Mellitus Outpatient BPJS on Malang City Health Center*.
- Subroto, D., Supriandi, S., Wirawan, R., & Rukmana, A. (2023). Implementasi Teknologi dalam Pembelajaran di Era Digital: Tantangan dan Peluang bagi Dunia Pendidikan di Indonesia. *Jurnal Pendidikan West Science*, 1, 473–480. <https://doi.org/10.58812/jpdws.v1i07.542>