

## ***Artificial Intelligence (AI) dalam Pengembangan Nanopartikel sebagai Sistem Penghantaran Obat***

Hannie Fitriani<sup>1</sup>, Muhammad Hidayatullah<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Farmasi, Universitas Islam Indonesia, Yogyakarta, Indonesia

<sup>2</sup>Program Studi Teknik Sipil, Universitas Islam Indonesia, Yogyakarta, Indonesia

Email<sup>1\*</sup>: [hanniefitriani@uii.ac.id](mailto:hanniefitriani@uii.ac.id)

### **ABSTRAK**

Nanoteknologi telah berkembang pesat dalam berbagai aspek, salah satunya adalah di bidang industri farmasi, terutama pada sistem penghantaran obat. Pemanfaatan nanoteknologi sebagai pembawa obat mampu meningkatkan efisiensi sistem penghantarannya. Proses pengembangan formulasi obat dengan nanopartikel masih sangat kompleks, dengan biaya yang mahal, dan memerlukan waktu yang lama. Penerapan *Artificial Intelligence (AI)* menjadi salah satu metode yang cepat dan diharapkan mampu meningkatkan penghantaran obat melalui nanoteknologi secara efektif, efisien, dan akurat, yang prosesnya dimulai dengan proses preformulasi dan formulasi. Penyusunan artikel ini bertujuan untuk membahas penerapan berbagai metode AI seperti *Machine Learning (ML)*, *Deep Learning (DL)*, dan *Neural Network (NN)* dalam pengembangan sistem penghantaran obat berbasis nanopartikel. Penelitian ini dilakukan melalui kajian literatur terbaru dalam tiga tahun terakhir (2022–2024) yang diakses dari berbagai database ilmiah seperti PubMed, ScienceDirect, dan Google Scholar. Penggunaan AI dalam pengembangan nanopartikel sebagai sistem penghantaran obat memiliki potensi besar untuk meningkatkan efisiensi, mempercepat proses pengembangan, serta mengurangi biaya dan waktu penelitian. Namun, implementasi AI memerlukan kolaborasi multidisiplin serta peningkatan kualitas data untuk validasi model.

**Kata Kunci:** *Artificial Intelligence*, Nanopartikel, Sistem Penghantaran Obat

### **ABSTRACT**

*Nanotechnology has developed rapidly in various aspects, one of which is in the pharmaceutical industry, particularly in drug delivery systems. The Nanotechnology as a drug carrier can increase the efficiency of delivery systems. The process of developing drug formulations using nanoparticles remains highly complex, expensive, and time-consuming. The application of Artificial Intelligence (AI) is a rapid method and is expected to improve drug delivery through nanotechnology effectively, efficiently, and accurately, starting with pre-formulation and formulation. This article aims to discuss the application of various AI methods such as Machine Learning (ML), Deep Learning (DL), and Neural Networks (NN) in the development of nanoparticle-based drug delivery systems. This research was conducted through a review of the latest literature from the last three years (2022–2024) accessed from various scientific databases such as PubMed, ScienceDirect, and Google Scholar. The AI in the development of nanoparticles as drug delivery systems has significant*

*potential to increase efficiency, accelerate the development process, and reduce research costs and time. However, AI implementation requires multidisciplinary collaboration and improved data quality for model validation.*

**Keywords:** *Artificial Intelligence, Nanoparticles, Drug Delivery Systems*

## PENDAHULUAN

Nanoteknologi merupakan pengembangan teknologi yang banyak dimanfaatkan dalam berbagai bidang, termasuk dalam ilmu farmasi sistem penghantaran obat (1). Pemanfaatan material pada skala nanometer mampu meningkatkan bioavailabilitas, stabilitas obat, efektivitas terapi, dan kemampuan targeting obat ke jaringan atau organ tertentu. Berbagai jenis nanopartikel seperti nanoliposom, niosom, dendrimer, dan nanopartikel polimerik telah dikembangkan sebagai sistem pembawa obat yang lebih efektif dan efisien (2). Tetapi, pemanfaatan teknologi ini juga memiliki beberapa tantangan, seperti waktu yang lama dalam proses preformulasi, optimasi formula yang cukup kompleks, stabilitas fisikokimia, potensi toksisitas jangka panjang, serta biaya produksi yang tinggi (3).

*Artificial Intelligence* dalam pengembangan nanoteknologi telah banyak dikembangkan, khususnya pada desain dan optimasi sediaan obat dalam ukuran nanopartikel. *Artificial Intelligence* dengan kemampuan analisis data berskala besar dan pembelajaran dari pola-pola yang cukup kompleks, dapat memprediksi sifat fisikokimia, toksisitas, dan efektivitas nanopartikel sebelum dilakukan formulasi pada skala laboratorium (4). Berbagai metode pada AI, seperti *Machine Learning* (ML) dan *Deep Learning* (DL), mampu mempercepat proses penelitian, serta menghemat biaya. Meski demikian, pemanfaatan AI juga menghadapi kendala, seperti perlunya data berkualitas tinggi, kompleksitas interpretasi model prediktif, serta keterbatasan transparansi dalam algoritma tertentu.

Pemanfaatan AI dalam pengembangan nanopartikel sebagai sistem penghantaran obat menjadi salah satu solusi dalam menghadapi tantangan pada formulasi obat. *Artificial Intelligence* dapat digunakan untuk merancang formulasi nanopartikel yang optimal berdasarkan berbagai parameter, seperti nilai transmitan yang berhubungan dengan kejernihan, ukuran partikel, nilai polidispers indeks atau homogenitas, nilai zeta potensial yang menunjukkan kestabilan sediaan, efisiensi enkapsulasi, dan profil pelepasan obat (5). Metode yang telah dimanfaatkan sebelumnya adalah dengan teknik *supervised learning* yang dapat diaplikasikan untuk menentukan hubungan antara parameter formulasi dan efektivitas terapeutik, sementara model prediktif lainnya dapat digunakan untuk meminimalkan efek samping dan toksisitas. Penerapan AI juga memungkinkan pengembangan terapi yang lebih personal dan presisi, sehingga meningkatkan hasil pengobatan secara keseluruhan. Pada review ini bertujuan untuk membahas penerapan AI dalam pengembangan nanopartikel pada sistem penghantaran obat, meliputi potensi, tantangan, dan prospeknya di masa depan (6).

## METODE PENELITIAN

Review menggunakan metode kajian literatur sistematis dengan sumber utama dari database PubMed, ScienceDirect, dan Google Scholar. Kata kunci yang digunakan antara lain "nanoparticle drug delivery", "artificial intelligence" "machine learning" dan "deep learning". Kriteria inklusi pada penelitian ini adalah *full access article*, serta publikasi dalam rentang waktu 2022–2024. Sedangkan kriteria eksklusinya adalah artikel *closed access*, publikasi selain dengan bahasa Inggris/Indonesia tanpa terjemahan, serta penelitian yang tidak relevan dengan aspek AI dan nanopartikel pada sistem penghantaran obat.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian yang berkaitan dengan pemanfaatan AI pada berbagai parameter kritis formulasi nanopartikel, meliputi nilai transmittan, ukuran partikel, polidispers indeks (PDI), zeta potensial, efisiensi enkapsulasi, serta profil pelepasan obat. Setiap parameter memiliki peran penting dalam menentukan stabilitas, efikasi, dan keberhasilan sistem penghantaran obat berbasis nanopartikel. Penerapan pendekatan AI, seperti ML dan DL, memungkinkan proses formulasi menjadi lebih efisien dan presisi, dengan kemampuan menganalisis data dalam jumlah besar serta mengidentifikasi pola dan hubungan nonlinier yang sulit diterjemahkan secara konvensional.

Tabel 1. Pemanfaatan Model AI pada Nanopartikel

| Parameter            | Model AI yang Digunakan                    | Input Variabel  | Contoh Prediksi (Skenario Hipotetis)  | Akurasi / Error      |
|----------------------|--|---|---|----------------------|
| Transmittan (%)      | <i>Support Vector Regression (SVR)</i>     | 1. Jenis minyak<br>2. Jenis surfaktan<br>3. Jenis Kosurfaktan<br>4. Rasio surfaktan dan kosurfaktan | Formula:<br>1. 20% Capryol 90<br>2. 60% Tween 80<br>3. 20% PEG 400<br><br>Prediksi transmittan:<br>95,1%, aktual: 94,3%         | $R^2 = 0.93$         |
| Ukuran Partikel (nm) | <i>Random Forest Regression (RFR), ANN</i> | 1. Komposisi formula<br>2. Metode emulsifikasi<br>3. Waktu sonikasi                                 | Input:<br>Capryol 90 25%<br>Tween 80 55%<br>Waktu sonikasi 3 menit<br><br>Prediksi ukuran partikel:<br>74,3 nm, aktual: 76,1 nm | Error < 3%           |
| PDI                  | <i>Random Forest Regression</i>            | 1. Komposisi fase minyak-air<br>2. Jenis surfaktan  | Input:<br>Minyak 10%,<br>Surfaktan 50%<br>Air 40%<br><br>Prediksi PDI: 0,215,<br>aktual: 0,220                                  | Error absolut < 0.01 |
| Zeta Potensial (mV)  | <i>Gradient Boosting Regression</i>        | 1. Jenis surfaktan<br>2. pH<br>3. <i>Ionic strength</i>   | Input:<br>pH 6,8<br>surfaktan non-ionik   | RMSE < 2 mV          |

|                                 |  |   |   |                |
|---------------------------------|--|---|---|----------------|
|                                 |  |   | Prediksi: -41,2 mV,<br>aktual: -42,0 mV   |                |
| Efisiensi<br>Enkapsulasi<br>(%) | <i>Artificial Neural<br/>Network (MLP)</i> | 1. Konsentrasi obat<br>2. Suhu pengeringan<br>3. Tipe pelarut | Formula:<br>10 mg kurkumin<br>50% Tween 80<br>Suhu evaporasi 45°C                                 | RMSE<br>= 1.2% |
|                                 |  |   | Prediksi EE: 88,2%,<br>aktual: 89,4%  |                |
| Profil<br>Pelepasan<br>Obat     | Recurrent Neural<br>Network (RNN),<br>LSTM | 1. Waktu (jam)<br>2. Formula<br>3. Jenis polimer              | Prediksi pelepasan: Jam 1<br>= 20%, Jam 2 = 35%, Jam<br>4 = 62%, Jam 8 = 90,5%,<br>Jam 12 = 96,3% | RMSE<br>< 4%   |

*Random Forest*, *Support Vector Machine*, dan *Artificial Neural Network* telah banyak dimanfaatkan dalam studi permodelan atau pengoptimalan formulasi, baik secara prediktif maupun eksperimental. Dengan menyajikan data dan skenario nyata dari berbagai studi, analisis ini tidak hanya menggambarkan potensi AI dalam penelitian farmasetika, tetapi juga mengikuti perkembangan ilmu formulasi nanopartikel berbasis data (7,8).

### **Machine Learning dalam penghantaran obat**

*Machine learning* (ML) khususnya algoritma regresi dan klasifikasi seperti *Random Forest*, *Support Vector Machine* (SVM), dan *Decision Tree*, telah banyak digunakan dalam optimasi formulasi nanopartikel (9,10). Penelitian yang pernah dilakukan dengan memanfaatkan salah satu ML yaitu *Random Forest* dalam penghantaran obat adalah pengidentifikasian gen yang memprediksi efektivitas paclitaxel pada pasien kanker kolorektal, dengan menggunakan panel NanoString 476 gen, dan didapatkan hasil bahwa *Random Forest* mampu mengidentifikasi gen spesifik biomarker prediktif pertama untuk paclitaxel (11).

Pemanfaatan lain dari ML dalam penghantaran obat dalam nanopartikel adalah pada sediaan nanopartikel lipid yang mampu meningkatkan efektifitas, efisiensi, dan pengoptimalan proses (12). Simulasi molekuler pada formulasi nanopartikel yang diintegrasikan dengan ML, secara signifikan mampu meningkatkan akurasi prediksi dan efisiensi komputasi dalam penghantaran obat kanker yang tertarget, personal, dan mengurangi efek samping yang ditimbulkan (13).

### **Deep Learning dalam Prediksi Profil Pelepasan Obat**

*Deep learning* merupakan bagian dari AI yang menggunakan model jaringan saraf dalam (*deep neural networks*) yang terbukti menunjukkan potensi signifikan dalam bidang farmasi, terutama dalam prediksi profil pelepasan obat dari sistem nanopartikel (14). Prediksi profil pelepasan ini merupakan hal penting dalam pengembangan sistem penghantaran obat karena berhubungan langsung dengan efektivitas terapi, kestabilan obat, serta waktu paruh farmakokinetik (15). Model-model DL seperti *Convolutional Neural Networks* (CNN) dan *Recurrent Neural Networks* (RNN) dapat digunakan untuk menganalisis data formulasi dan eksperimen pelepasan obat dalam memprediksi pelepasan obat dengan akurasi yang tinggi.

Pemanfaatan ini mampu menghemat waktu serta biaya yang dibutuhkan dalam uji tahap praklinis (16).

*Deep learning* mampu menafsirkan hubungan non linier dan kompleks antar variabel formulasi, seperti komposisi polimer, ukuran partikel, pH lingkungan, dan suhu, dengan data pelepasan obat. Beberapa penelitian telah menunjukkan bahwa model DL lebih baik dari pada model statistik konvensional seperti regresi linear atau polinomial dalam memprediksi profil pelepasan obat dari berbagai jenis nanopartikel, seperti nanogel, nanopartikel polimerik, dan *lipid-based nanoparticle*.

### **Tantangan dan Solusi AI pada Nanoteknologi**

Pemanfaatan AI memiliki keterbatasan yang perlu menjadi perhatian. Salah satu tantangan utama adalah kebutuhan akan data yang besar dan berkualitas tinggi untuk melatih model agar dapat memberikan prediksi yang presisi dan akurat. Selain itu, interpretabilitas model DL masih menjadi isu, terutama dalam konteks regulasi dan validasi ilmiah, karena banyak algoritma DL yang sulit dijelaskan (17). Pendekatan *explainable AI* (XAI) dan integrasi dengan domain *knowledge* farmasi mulai diterapkan untuk meningkatkan transparansi dan kepercayaan dalam hasil prediksi. Kolaborasi antara peneliti pada bidang data dan peneliti dalam bidang farmasi sangat penting dalam mengembangkan model prediktif yang tidak hanya akurat, tetapi juga dapat diterima secara ilmiah dan etis dalam pengembangan sistem penghantaran obat berbasis nanopartikel .

### **KESIMPULAN**

Penggunaan AI dalam pengembangan nanopartikel sebagai sistem penghantaran obat memiliki potensi besar untuk meningkatkan efisiensi, mempercepat proses pengembangan, serta mengurangi biaya dan waktu penelitian. Namun, implementasi AI memerlukan kolaborasi multidisiplin serta peningkatan kualitas data untuk validasi model. Pemanfaatan AI diperkirakan akan semakin diintegrasikan dalam industri farmasi nanopartikel. Penelitian lanjutan yang perlu dikembangkan pada tema ini adalah tentang prediksi profil pelepasan obat menggunakan data *in vitro* dan *in vivo*, sehingga harapannya bisa meningkatkan akurasi prediksi, serta mengurangi penggunaan hewan uji.

### **REFERENSI**

1. Mazayen ZM, Ghoneim AM, Elbatanony RS, Basalious EB, Bendas ER. Pharmaceutical nanotechnology: from the bench to the market. *Future Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2022 Jan 15;8(1):12.
2. Ahmad MU, Ali SM, Ahmad I. 7 - Applications of Nanotechnology In Pharmaceutical Development. In: Ahmad MU, editor. *Lipids in Nanotechnology* [Internet]. AOCS Press; 2012 [cited 2025 Jul 18]. p. 171–90. Available from: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B978098189367950010X>
3. Zhuo Y, Zhao YG, Zhang Y. Enhancing Drug Solubility, Bioavailability, and Targeted Therapeutic Applications through Magnetic Nanoparticles. *Molecules*. 2024 Jan;29(20):4854.

4. Olawade DB, Ige AO, Olaremu AG, Ijiwade JO, Adeola AO. The synergy of artificial intelligence and nanotechnology towards advancing innovation and sustainability - A mini-review. *Nano Trends*. 2024 Dec 1;8:100052.
5. Hassan SADH, Almaliki MNS, Hussein ZA, Albehadili HM, Rabeea Banoon S, Abboodi A, et al. Development of Nanotechnology by Artificial Intelligence: A Comprehensive Review. *Journal of Nanostructures*. 2023 Oct 1;13(4):915–32.
6. Wang Q, Liu Y, Li C, Xu B, Xu S, Liu B. Machine Learning-Enhanced Nanoparticle Design for Precision Cancer Drug Delivery. *Advanced Science*. n/a(n/a):e03138.
7. Nan X, Shi W, Wang J, He L, Wang T, Yang H, et al. Modeling composed nanoparticles of chitosan-N-acetylene-L-cysteine with support vector regression. *AIP Advances*. 2020 Mar 24;10(3):035322.
8. Wang Y, Brahmia A, Shahbaz A, Sahramaneshi H, Alkhalifah T, Yang J. A novel machine learning model for innovative microencapsulation techniques and applications in advanced materials, textiles, and food industries. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2025 Dec 1;224:116082.
9. Kolluri S, Lin J, Liu R, Zhang Y, Zhang W. Machine Learning and Artificial Intelligence in Pharmaceutical Research and Development: a Review. *AAPS J*. 2022 Jan 4;24(1):19.
10. Wang Q, Liu Y, Li C, Xu B, Xu S, Liu B. Machine Learning-Enhanced Nanoparticle Design for Precision Cancer Drug Delivery. *Advanced Science*. n/a(n/a):e03138.
11. Sundar R, Barr Kumarakulasinghe N, Huak Chan Y, Yoshida K, Yoshikawa T, Miyagi Y, et al. Machine-learning model derived gene signature predictive of paclitaxel survival benefit in gastric cancer: results from the randomised phase III SAMIT trial. *Gut*. 2022 Apr;71(4):676–85.
12. Dorsey PJ, Lau CL, Chang T chiun, Doerschuk PC, D’Addio SM. Review of machine learning for lipid nanoparticle formulation and process development. *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2024 Dec 1;113(12):3413–33.
13. Jahandoost A, Dashti R, Houshmand M, Hosseini SA. Utilizing machine learning and molecular dynamics for enhanced drug delivery in nanoparticle systems. *Sci Rep*. 2024 Nov 4;14(1):26677.
14. Das KP, J C. Nanoparticles and convergence of artificial intelligence for targeted drug delivery for cancer therapy: Current progress and challenges. *Front Med Technol*. 2023 Jan 6;4:1067144.
15. Vora LK, Gholap AD, Jetha K, Thakur RRS, Solanki HK, Chavda VP. Artificial Intelligence in Pharmaceutical Technology and Drug Delivery Design. *Pharmaceutics*. 2023 Jul 10;15(7):1916.

16. Jiang Z, Li P. DeepDR: a deep learning library for drug response prediction. *Bioinformatics*. 2024 Nov 18;40(12):btac688.
17. Lorenc A, Mendes BB, Coniot J, Sousa DP, Conde J, Rodrigues T. Machine learning for next-generation nanotechnology in healthcare. *Matter*. 2021 Oct 6;4(10):3078–80.