

Abstrak

Kanker adalah penyakit yang terjadi akibat pertumbuhan sel-sel abnormal yang tidak terkendali sehingga menyebabkan jaringan tubuh normal menjadi rusak. Penyakit ini merupakan salah satu penyakit yang mematikan. Pada tahun 2019, 1700 kematian terjadi setiap harinya disebabkan oleh kanker [1]. Beberapa agen antikanker yang cukup efektif diketahui dapat menyebabkan efek toksik yang bersifat sementara hingga kronis. Dari beberapa senyawa yang berpotensi untuk menjadi obat antikanker, senyawa *indenopyrazole* muncul sebagai salah satu senyawa yang memiliki potensi sebagai antikanker. Penelitian ini mengimplementasikan metode *simulated annealing* dan *support vector machine* pada studi QSAR untuk memprediksi aktivitas senyawa turunan *indenopyrazole* sebagai obat antikanker. Metode *simulated annealing* digunakan pada tahap seleksi fitur, sedangkan metode *support vector machine* digunakan pada tahap pembangunan model. Pada penelitian ini digunakan tiga model kernel untuk SVM, yaitu SVM dengan kernel RBF, SVM dengan kernel linier, serta SVM dengan kernel polinomial. Dari ketiga model, SVM dengan kernel RBF memiliki parameter $C = 10$, $\gamma = \text{scale}$ dan $\epsilon = 0.1$ menghasilkan nilai R^2 untuk train dan test sebesar 0.79 dan 0.60. SVM dengan kernel linear memiliki parameter $C = 1000$, $\text{degree} = 1$ dan $\epsilon = 0.1$ menghasilkan nilai R^2 untuk train dan test sebesar 0.61 dan 0.63. SVM dengan kernel polinomial memiliki parameter $C = 1000$, $\text{degree} = 2$ dan $\epsilon = 0.1$ menghasilkan nilai R^2 untuk train dan test sebesar 0.72 dan 0.50. Berdasarkan hasil validasi, hanya model dengan kernel RBF yang semua parameternya memenuhi kriteria. Dari hasil tersebut dapat disimpulkan bahwa model dengan kernel RBF adalah model terbaik dan dapat diterima.

Kata kunci : antikanker, senyawa turunan *indenopyrazole*, *Simulated Annealing*, studi QSAR, *Support Vector Machine*