

Abstrak

World Health Organization (WHO) memprediksi bahwa kanker akan menjadi penyebab utama kematian di dunia. Salah satu metode yang dapat dilakukan untuk mengatasi kanker adalah kemoterapi. Pada awalnya, sel kanker dapat merespon aktivitas kemoterapi, namun seiring dengan berjalannya waktu tampak resistensi terhadap sel kanker. Oleh karena itu, diperlukan upaya dalam pengembangan obat anti-kanker yang baru. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi senyawa turunan *indenopyrazole* sebagai obat anti-kanker dengan *Ant Colony Optimization* (ACO) sebagai seleksi fitur dan *Artificial Neural Network* (ANN) sebagai model prediksi. Pada penelitian sebelumnya menyatakan bahwa *indenopyrazole* memiliki kemampuan yang korelatif dan prediktif sebagai agen obat anti-kanker. Kandidat obat anti-kanker diprediksi terlebih dahulu sifat fisiokimia, toksisitas dan biologinya dengan menggunakan metode *Quantitative Structure and Activity Relationships* (QSAR). Senyawa turunan *indenopyrazole* yang digunakan pada penelitian ini sebanyak 93 senyawa dengan jumlah deskriptor 1876. Kemudian deskriptor diseleksi menggunakan *Pearson Correlation Coefficient* (PCC) untuk mendapatkan 100 deskriptor dengan nilai korelasi yang tinggi terhadap target. Deskriptor yang berjumlah 100 kemudian di seleksi menggunakan algoritma ACO untuk mendapatkan fitur yang relevan. Jumlah deskriptor terbaik yang didapatkan dari ACO adalah 10 deskriptor. Model prediksi ANN dibuat dengan 3 topologi yaitu model dengan 1, 2 dan 3 *hidden layer*. Berdasarkan prediksi ANN, model dengan 3 *hidden layer* lebih baik karena memiliki nilai R_{test}^2 0.882 sedangkan model dengan 1 dan 2 *hidden layer* secara berurutan adalah 0.5218 dan 0.6591.

Kata Kunci: Kanker, *indenopyrazole*, *Quantitative Structure and Activity Relationships*, *Ant Colony Optimization*, *Artificial Neural Network*.