

Studi QSAR pada Prediksi Inhibitor DPP-IV sebagai Agen Anti Diabetes Menggunakan Metode Algoritma Genetika-Support Vector Machine

Attariq Muhammad Kasfilla¹, Isman Kurniawan², Nurul Ikhsan³

^{1,2,3}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung,

¹attrqmksflla@students.telkomuniversity.ac.id, ²ismankrn@telkomuniversity.ac.id,,

³ikhsan@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Diabetes melitus merupakan penyakit degeneratif utama di abad ke-21 yang menyebabkan hampir 95% orang dewasa didiagnosis penyakit diabetes tipe II. Salah satu enzim yang bertanggung jawab terhadap diabetes tipe II adalah Dipeptidyl peptidase-IV (DPP IV). Akibat terbatasnya jumlah inhibitor untuk diabetes tipe II, ada kebutuhan mendesak untuk mengembangkan tambahan inhibitor DPP IV yang baru. Seiringnya perkembangan teknologi, banyak penelitian yang terlibat dalam penemuan dan optimalisasi inhibitor DPP IV baru sebagai pengobatan diabetes tipe II dengan menggunakan metode *quantitative structure-activity relationship* (QSAR). Banyak penelitian telah menemukan atau mencoba mencari salah satu obat penyakit diabetes melitus dengan menggunakan metode ini. Pada penelitian ini, penulis bertujuan membuat model untuk memprediksi aktivitas anti diabetes tipe II. Tahapan penelitian ini dibagi menjadi 2, yaitu seleksi fitur dan membangun model prediksi. Tahap seleksi fitur dilakukan dengan menggunakan metode algoritma genetika (AG), dan tahap model prediksi menggunakan metode *support vector machine* (SVM). Berdasarkan hasil yang didapatkan, penulis menemukan model prediksi terbaik pada kernel RBF dibandingkan dengan kernel lainnya. Hal ini ditunjukkan dengan akurasi yang diperoleh sebesar 0.9869, *precision* 0.9745, *recall* 1.0, dan *F1-Score* 0.9871.

Kata kunci : Diabetes melitus, dipeptidyl peptidase-IV, QSAR, algoritma genetika, *Support Vector Machine*

Abstract

Diabetes mellitus is a major degenerative disease in the 21st century which causes nearly 95% of adults to be diagnosed with type II diabetes. One of the enzymes responsible for type II diabetes is Dipeptidyl peptidase-IV (DPP IV). Due to the limited number of inhibitors for type II diabetes, there is an urgent need to develop additional new DPP IV inhibitors. Along with technological developments, a lot of research is involved in the discovery and optimization of new DPP IV inhibitors as a treatment for type II diabetes using the quantitative structure-activity relationship (QSAR) method. Many studies have found or tried to find a cure for diabetes mellitus using this method. In this study, the authors aimed to create a model to predict anti-diabetes type II activity. The stages of this research are divided into 2, namely feature selection and building a prediction model. The feature selection stage is carried out using the genetic algorithm (GA) method, and the prediction model stage uses the support vector machine (SVM) method. Based on the results obtained, the authors found the best prediction model in the RBF kernel compared to other kernels. This is shown by the accuracy obtained by 0.9869, precision 0.9745, recall 1.0, and F1-Score 0.9871.

Keywords: Diabetes melitus, dipeptidyl peptidase-IV, QSAR, Genetic Algorithm, Support Vector Machine

A. Pendahuluan

Diabetes melitus adalah penyakit yang diakibatkan kadar glukosa (gula) darah lebih tinggi dari normal[1], [2]. Penyakit ini merupakan salah satu penyakit degeneratif utama di abad ke-21[3]. Ada tiga jenis utama diabetes melitus, yaitu tipe I, tipe II, dan diabetes gestasional[3]. Obesitas adalah faktor utama penyebab diabetes[1]. Adapun faktor lain penyebab diabetes seperti resistensi insulin, produksi insulin yang tidak mencukupi, hiperglikemia kronis, peningkatan produksi glukosa hepatic, atau intoleransi glukosa[3]. Hampir 95% diabetes yang didiagnosis pada orang dewasa adalah diabetes tipe II[1]. Tanpa pengobatan, diabetes akan “melemahkan” fungsi tubuh secara bertahap yang dapat mengakibatkan amputasi anggota tubuh, kebutaan, penyakit hati berlemak, penyakit ginjal serta kematian dini[1].

Salah satu enzim yang bertanggung jawab terhadap diabetes tipe II adalah Dipeptidyl peptidase-IV (DPP IV) [2], [4]. Perhatian intensif telah diberikan kepada DPP-IV sebagai target penting untuk pengobatan diabetes tipe II[3]. Ada bukti yang menunjukkan bahwa penghambatan DPP-IV sebagai strategi untuk meningkatkan status glikemik lebih efektif pada diabetes tipe II[2], [5]. Oleh karena itu, para ilmuwan bidang kimia medis mengembangkan senyawa untuk menghambat DPP-IV, sehingga mengarah pada