

Abstrak

Coronavirus disease 2019 (COVID-19) merupakan jenis penyakit yang muncul dalam dua tahun terakhir yang disebabkan oleh *Virus Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2* atau SARS-CoV-2. COVID-19 telah menyebabkan lebih dari 215 juta orang terinfeksi dan lebih dari 4,47 juta orang meninggal dunia per-tanggal 27 Agustus 2021. Sejauh ini belum diterima atau ditemukan obat yang dapat mengobati dan menyembuhkan pasien COVID-19, meskipun protokol RT-PCR dan sekuensing DNA standar telah dikembangkan untuk tujuan diagnostik. Terkait urgensi desain obat, maka digunakanlah salah satu protease fungsional SARS-CoV-2 yaitu *papain-like protease* (PLpro) sebagai target obat. Di antara metode penemuan obat secara *in silico*, *Quantitative Structure Activity Relationship* (QSAR) merupakan salah satu metode yang dimanfaatkan karena telah banyak berhasil digunakan untuk memprediksi dan mengklasifikasi aktivitas biologis terhadap senyawa yang belum teruji. Penelitian ini bertujuan untuk membangun model klasifikasi QSAR untuk *in-house molecules* sebagai *inhibitor* pada *papain-like protease* (PLpro) SARS-CoV-2. Proses klasifikasi dilakukan menggunakan metode SVM (*Support Vector Machine*) yang terlebih dahulu dilakukan reduksi fitur menggunakan *genetic algorithm*. *Dataset* yang digunakan adalah label bioaktivitas dan fitur deskriptor berupa fingerprint PubChem dan Extended yang dihitung berdasarkan struktur molekul. Jumlah fitur direduksi dengan cara menghilangkan fitur yang memiliki variansi < 0.1 dan < 0.2 . Hasil penelitian menunjukkan bahwa hasil terbaik didapatkan melalui implementasi SVM kernel Polynomial pada deskriptor PubChem dan *VarianceThreshold* 0.2 dengan nilai akurasi dan *F1-Score* berturut-turut 70.370% dan 63.636%.

Kata kunci : *Papain-like Protease* (PLpro), SARS-CoV-2, COVID19, *quantitative structure activity relationship* (QSAR), *genetic algorithm*, *support vector machine* (SVM)