

Prediksi Inhibitor MMP-9 berbasis in silico sebagai Terapi Anti Kanker dengan menggunakan Algoritma Particle Swarm Optimization-XGBoost

Citra Aulia Sakinah¹, Isman Kurniawan²

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

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

Abstrak

Kanker merupakan masalah kesehatan global utama, dan matrix metalloproteinase-9 (MMP-9) menjadi target penting dalam terapi anti-kanker karena perannya dalam perkembangan dan metastasis tumor. Pendekatan machine learning dalam beberapa tahun terakhir menunjukkan potensi besar untuk mempercepat penemuan obat secara in silico, namun masih diperlukan peningkatan akurasi prediktif bioaktivitas inhibitor MMP-9 sebagai bagian dari strategi pengobatan kanker. Studi ini membangun model prediktif bioaktivitas inhibitor MMP-9 dengan menggabungkan Particle Swarm Optimization (PSO) untuk seleksi fitur dan XGBoost untuk klasifikasi. Dataset mencakup 1.123 senyawa yang diklasifikasikan berdasarkan nilai IC50 dan dianalisis menggunakan PaDEL-Descriptor untuk ekstraksi fitur molekul. Tiga skema populasi PSO diuji untuk mengidentifikasi subset fitur paling relevan yang memengaruhi akurasi klasifikasi. Hasil eksperimen menunjukkan bahwa skema pop35 memberikan performa prediktif terbaik dengan akurasi uji dan recall sebesar 0,8210, precision sebesar 0,8246, dan skor F1 sebesar 0,8208. Temuan ini mengindikasikan bahwa kombinasi PSO dan XGBoost secara efektif meningkatkan akurasi dan ketahanan model in silico, menawarkan strategi yang menjanjikan dalam identifikasi awal kandidat inhibitor MMP-9 untuk penemuan obat anti-kanker.

Kata kunci: kanker, inhibitor mmp-9, particle swarm optimization, xgboost
