

## ABSTRAK

Human Immunodeficiency Virus (HIV) merupakan virus yang dapat menyerang sel-sel imun sehingga dapat menyebabkan seseorang lebih rentan terhadap infeksi dan penyakit lain[1]. HIV juga merupakan agen yang menyebabkan penyakit Acquired Immune Deficiency Syndrome (AIDS). HIV-1 protease merupakan salah satu target aktif yang ditemukan pada penelitian untuk pengobatan HIV. Penggunaan inhibitor HIV-1 protease yang ada dalam terapi antiretroviral (ART) juga berdampak pada mutasi pada virus HIV yang dapat menyebabkan resistansi jika digunakan dalam pengobatan jangka panjang. Sehingga, inhibitor HIV-1 protease baru diperlukan untuk mengatasi masalah resistensi ini. Dalam penelitian ini, kami bertujuan untuk mengembangkan model QSAR untuk memprediksi aktivitas inhibitor HIV-1 dengan menggunakan metode gravitational search algorithm. Metode gravitational search algorithm digunakan untuk memilih deskriptor molekuler. Kami meningkatkan kinerja model dengan melakukan prosedur hyperparameter tuning. Dari hasil analisis validasi, kami menemukan bahwa model 3 berisi 7 deskriptor sebagai model terbaik. Hal ini dilihat dari perolehan nilai yang didapat paling sesuai dengan kriteria dari parameter validasi dimana nilai  $r^2$  untuk data latih dan uji masing-masing adalah 0,84 dan 0,82. Nilai  $Q^2$  untuk leave-one-out cross-validation (LOO-CV) pada data latih adalah 0,81.

**Kata Kunci :** Inhibitor HIV-1 Protease, Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR), Gravitational Search Algorithm (GSA), Neural Network (NN).