

Klasifikasi Agen Anti Kanker dari Inhibitor CDK2 Menggunakan Metode *Simulated Annealing-Support Vector Machine*

Riva Yudisa Ikhsanurahman¹, Isman Kurniawan², Nurul Ikhsan³

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

¹rivayudisa@students.telkomuniversity.ac.id,

²ismankrn@telkomuniversity.ac.id,

³ikhsan@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Kanker adalah penyakit yang terjadi akibat sel-sel normal membelah tanpa terkendali dan menyerang jaringan sehat. Penyakit ini merupakan salah satu penyebab utama kematian di seluruh dunia. Terdapat 10 juta kasus kematian yang disebabkan oleh kanker berdasarkan data dari *world health organization* (WHO), Perawatan kemoterapi sebagai pengobatan kanker dimulai sejak tahun 1940 dan telah sukses sejak awal dilakukan. Namun dalam jangka panjang perawatan ini dapat berdampak buruk bagi tubuh. Sehingga diperlukan desain obat baru untuk mengatasi dampak tersebut. Umumnya obat anti kanker dapat dikembangkan dengan mempertimbangkan *Cyclin Dependent Kinases 2* (CDK2) sebagai target. Dalam membuat desain obat baru salah satu metode yang dapat digunakan adalah metode *quantitative structure-activity relationships* (QSAR). Penelitian ini bertujuan untuk membangun model prediksi pada klasifikasi agen anti kanker dari inhibitor CDK2 dengan menggunakan metode *simulated annealing* untuk seleksi fitur dan *support vector machine* (SVM) untuk membangun model prediksi. Data yang digunakan didapat dari ChemBL dengan total 1.196 data. Berdasarkan hasil penelitian, model prediksi terbaik yaitu pada kernel *polynomial* dan *rbf* dengan hasil akurasi sebesar 0,986 & 0,985, presisi 0,974 & 0,974 dan F1-Score 0,987 & 0,987.

Kata kunci : Antikanker, Simulated Annealing, QSAR, CDK2, Support Vector Machine

Abstract

Cancer is a disease that occurs when normal cells divide uncontrollably and attack healthy tissue. This disease is one of the leading causes of death worldwide. There are 10 million cases of cancer deaths based on data from the World Health Organization (WHO). Chemotherapy as a cancer treatment began in 1940 and has been successful since its inception. But in the long term this treatment can be bad for the body. So that new drug designs are needed to overcome these impacts. Generally, anti-cancer drugs can be developed by considering *Cyclin Dependent Kinases 2* (CDK2) as the target. In designing a new drug, one method that can be used is the *quantitative structure-activity relationships* (QSAR) method. This study aims to build a predictive model for the classification of anti-cancer agents from CDK2 inhibitors using the *simulated annealing* method for feature selection and a *support vector machine* (SVM) to build a prediction model. The data used were obtained from ChemBL with a total of 1.196 data. Based on the research results, the best prediction model is the *polynomial* kernel and *rbf* with an accuracy of 0.986 & 0.985, a precision of 0.974 & 0.974 and an F1-Score of 0.987 & 0.987.

Keywords: Anticancer, Simulated Annealing, QSAR, CDK2, Support Vector Machine
