

Application of Ensemble Method on QSAR Study of PTP1B Inhibitor as Anti-diabetes Mellitus

Muhamad Al Rafi Bhadraka, Azka Khoirunnisa, Isman Kurniawan

School of Computing, Telkom University, Bandung

malrafi@student.telkomuniversity.ac.id, azkakhoi@telkomuniversity.ac.id, ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Diabetes Mellitus (DM) merupakan suatu penyakit metabolik, yang ditandai oleh ketidaknormalan peningkatan kadar glukosa darah. DM dikategorikan menjadi beberapa tipe yaitu tipe 1, tipe 2, diabetes onset usia muda (MODY), diabetes gestasional, diabetes neonatus, dan penyebab sekunder karena endokrinopati, penggunaan steroid, dan sebagainya. Pada tahun 2012, International Diabetes Federation (IDF) menyatakan bahwa prevalensi nasional diabetes di Indonesia adalah 4,8%. Salah satu solusi yang tepat untuk menangani masalah itu adalah dengan membangun model QSAR dengan metode ensemble untuk suatu penemuan obat penyembuh diabetes. Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) adalah suatu metode yang digunakan untuk membangun model komputasi atau matematis. Metode ini bekerja dengan cara mencoba menemukan hubungan yang signifikan secara statistik antara fungsi dan struktur dengan menggunakan teknik kemometrik. Penelitian ini menggunakan metode ensemble dan bertujuan untuk membandingkan performa dari Random Forest, AdaBoost, dan XGBoost. Metode ensemble ini berhasil memprediksi aktivitas dari PTP1B inhibitor. Pemilihan fitur dan parameter tuning dilakukan, dan hasilnya, XGBoost dengan menggunakan 90% dari total fitur adalah algoritma yang terbaik. Nilai akurasi, recall, precision, dan F1-score berturut-turut adalah 94.84%, 94.74%, 94.86%, dan 95.27%.

Kata kunci : QSAR, Diabetes, PTP1B, Metode Ensemble
