

Abstrak

Coronavirus adalah jenis pneumonia yang disebabkan oleh Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus (SARS-CoV). Virus ini menyebabkan sindrom pernafasan akut yang parah dan telah menyebabkan 2 juta kasus di seluruh dunia. Meskipun SARS-CoV-1 berhasil dikendalikan pada tahun 2003, muncul strain baru virus SARS-CoV-2 yang terbukti lebih ganas dari pendahulunya. Mengenai desain inhibitor baru untuk strain ini, protease utama (Mpro) dari SARS-CoV digunakan sebagai inhibitor target. Dalam pengembangan *in silico* digunakan metode Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) yang cukup umum digunakan dalam memprediksi aktivitas biologis senyawa yang belum diuji. Penelitian ini bertujuan untuk membangun model QSAR, menggunakan senyawa aromatik disulfida sebagai senyawa pelemahan protease utama (Mpro) pada SARS-CoV. Dengan menggunakan model seleksi Genetic Algorithm (GA) dan metode prediksi Support Vector Machine (SVM), akan didapatkan rekomendasi gabungan deskriptor dominan pada senyawa disulfida aromatik, yang dapat dimanfaatkan dalam pengembangan agen antiviral SARS-CoV. Dataset yang digunakan adalah data yang berisi fitur senyawa disulfida aromatik, beserta informasi aktivitas toksisitas senyawa. Informasi deskriptor yang digunakan merupakan kolom fitur yang memiliki deviasi diatas 0,5. Hasil terbaik seleksi model GA diperoleh pada kernel RBF dengan nilai MSE terkecil 0.0273, serta hasil terbaik prediksi SVM yang didapatkan melalui implementasi model polinomial, yang mendapatkan skor pada validasi internal R^2_{train} dan validasi eksternal R^2_{test} adalah 95.2% dan 67.6%.

Kata kunci: *main protease (Mpro), quantitative structure activity relationship (QSAR), genetic algorithm, support vector machine (SVM)*