QSAR Study on Diacylglycerol Acyltransferase-1 (DGAT-1) Inhibitor as Anti-diabetes using PSO-SVM Methods

I Kadek Andrean Pramana Putra[1], Isman Kurniawan[2], Reza Rendian Septiawan[3]
[1]School of Computing, Informatics, Telkom University
[2]Reserach Center of Human Centric Engineering, Telkom University
[3]School of Electrical Engineering, Telkom University
[1]andrepramana@student.telkomuniversity.ac.id, [2*]ismankrn@telkomuniversity.ac.id, [3]zaseptiawan@telkomuniversity.ac.id,

Abstract

Diabetes *mellitus* merupakan salah satu penyakit kronis yang umumnya bisa menjangkiti semua kalangan baik usia muda maupun lansia. Untuk saat ini belum ditemukan obat khusus yang dapat menyembuhkan diabetes secara total. Diabetes *mellitus* dapat diobati dengan baik menggunakan terapi enzim tertentu yang terus dikembangkan. Salah satu langkah yang memungkinkan untuk pengobatan penderita diabetes *mellitus* yaitu dengan menghambat pertumbuhan *Diacylglycerol Acyltransferase*-1 (DGAT1). Dalam pengembangan *in silico* menggunakan metode *Quantitative Structure Activity Relationship* (QSAR), metode ini cukup umum digunakan untuk memprediksi aktivitas biologis senyawa yang belum diuji. Penelitian ini bertujuan untuk membangun model QSAR, menggunakan senyawa *Diacylglycerol Acyltransferase*-1 sebagai penghambat pertumbuhan diabetes. Dengan menggunakan model seleksi fitur *Particle Swarm Optimization* (PSO) dan metode prediksi *Support Vector Machine* (SVM), akan menghasilkan rekomendasi gabungan descriptor dominan pada senyawa *Diacylglycerol Acyltransferase*-1, yang dapat dimanfaatkan dalam pengembangan Anti-diabetes. Dataset yang digunakan yaitu 228 data yang berisi informasi aktivitas senyawa dari *Diacylglycerol Acyltransferase*-1 senyawa sebanyak 1444 fitur. Informasi descriptor yang digunakan merupakan kolom fitur yang memiliki deviasi diatas 0.5. Hasil terbaik seleksi PSO diperoleh oleh kernel Polynomial dengan nilai R^2 0.629, serta hasil prediksi terbaik yang didapatkan melalui implementasi model RBF, didapatkan skor pada masing-masing validasi internal R^2_{train} dan validasi eksternal R^2_{test} dengan nilai 75% dan 67.2%.

Keywords*: Diabetes, Diacylglycerol Acyltransferase-1,Particle Swarm Optimization, QSAR, Support Vector Machine*