
Implementasi Harris Hawks Optimization-Support Vector Machine dalam Memprediksi Bioaktivitas Inhibitor Protease NS3 sebagai Anti Virus Dengue

Muhammad Altaf Dhiyaurrahman¹, Isman Kurniawan²

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

¹altafd@students.telkomuniversity.ac.id, ²ismankrn@telkomuniversity.ac.id

Abstrak

Dengue merupakan penyakit tropis yang disebabkan oleh virus Flavivirus dan menjadi beban kesehatan masyarakat global dengan lebih dari 390 juta kasus tiap tahun. Salah satu pendekatan dalam pengembangan antivirus adalah menargetkan NS3 protease, enzim penting dalam replikasi virus. Namun, proses identifikasi inhibitor potensial melalui metode konvensional sering kali mahal dan memakan waktu. Penelitian ini bertujuan untuk mengimplementasikan kombinasi metode Harris Hawks Optimization (HHO) dan Support Vector Machine (SVM) dalam memprediksi bioaktivitas inhibitor NS3 protease. Dataset diambil dari ChEMBL dan disaring menjadi 591 senyawa aktif dan non-aktif. Seleksi fitur dilakukan dengan HHO dalam tiga skema kernel berbeda (RBF, Polynomial, dan Linear), kemudian model SVM dioptimasi menggunakan GridSearchCV. Kernel RBF mencapai hasil terbaik dengan akurasi 84% dan skor F1 0.84. Kombinasi HHO dan SVM terbukti efektif dalam meningkatkan efisiensi dan akurasi prediksi inhibitor NS3, serta menunjukkan potensi signifikan dalam percepatan penemuan obat antivirus dengue.

Kata kunci: dengue, NS3 protease, machine learning, Harris Hawks Optimization, Support Vector Machine

Abstract

Dengue is a tropical disease caused by the Flavivirus virus and is a global public health burden with more than 390 million cases each year. One approach in antiviral development is to target NS3 protease, an important enzyme in viral replication. However, the process of identifying potential inhibitors through conventional methods is often expensive and time-consuming. This study aims to implement a combination of Harris Hawks Optimization (HHO) and Support Vector Machine (SVM) methods to predict the bioactivity of NS3 protease inhibitors. The dataset was obtained from ChEMBL and filtered into 591 active and inactive compounds. Feature selection was performed using HHO with three different kernel schemes (RBF, Polynomial, and Linear), followed by SVM model optimization using GridSearchCV. The RBF kernel achieved the best results with an accuracy of 84% and an F1 score of 0.84. The combination of HHO and SVM proved effective in improving the efficiency and accuracy of NS3 inhibitor prediction, demonstrating significant potential in accelerating the discovery of dengue antiviral drugs.

Keywords: dengue, NS3 protease, machine learning, Harris Hawks Optimization, Support Vector Machine

1. Pendahuluan

Latar Belakang

Dengue merupakan penyakit disebabkan oleh virus Flavivirus, yang memiliki empat serotipe berbeda (DENV-1 hingga DENV4) yang mengandung virus RNA berantai positif dengan tiga protein struktural dan tujuh protein non-struktural [1]. Umumnya virus dengue ditularkan oleh nyamuk Aedes dan dipengaruhi berbagai faktor seperti urbanisasi, kekebalan kelompok yang rendah, perubahan sosial dan demografis, dan kondisi lingkungan [2]. Infeksi dengue dapat menyebabkan berbagai gejala, mulai dari demam ringan hingga penyakit serius [3]. Ancaman penyakit dengue telah meningkat di seluruh dunia selama 30 tahun terakhir, sebanyak 390 juta infeksi diperkirakan terjadi setiap tahun, dengan 96 juta di antaranya menunjukkan gejala klinis [4].

Upaya pencegahan dan pengobatan masih menghadapi tantangan besar karena belum tersedia terapi antivirus yang terbukti efektif, dan vaksin yang ada belum mencakup semua serotipe optimal [5], [6]. Selain itu pengembangan obat memerlukan waktu dan biaya yang besar, serta pengendalian vektor juga menjadi hambatan [7]. Salah satu target yang menjanjikan adalah NS3 protease berperan penting dalam proses pemotongan poliprotein virus sehingga memungkinkan replikasi virus dengue [8]. Bioaktivitas inhibitor terhadap enzim ini mengacu pada kemampuan senyawa untuk menghambat NS3 protease, yang diukur