

Analisis perbandingan pemodelan fingerprint dan pemodelan farmakofor untuk identifikasi senyawa turunan katinon = Analysis of comparison between fingerprint modeling and pharmacophore modeling method for identification of cathinone derivatives compound

Muhammad Siddiq Winarko, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20475062&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRACT

Saat ini new psychoactive substances NPS telah menjadi fenomena yang perlu diperhatikan karena perkembangannya yang cepat untuk menghindari hukum yang berlaku dalam suatu negara. Perkembangan senyawa katinon pada tahun 2013 tercatat sebanyak 30 senyawa katinon sintetik kemudian terjadi peningkatan pada tahun 2018 menjadi 89 senyawa katinon sintetik. Artificial intelligence AI telah menjadi menjadi alat bantu manusia dalam melakukan pengolahan data, perkembangan AI menjadi machine learning dan deep learning penggunaannya meliputi pengenalan objek, klasifikasi gambar dan pengenalan pose manusia. Struktur suatu senyawa diubah menjadi bentuk pemodelan fingerprint sebagai informasi yang akan digunakan oleh metode clustering machine learning dan deep learning untuk melakukan klasifikasi senyawa. Sedangkan metode pemodelan farmakofor akan dijadikan pembandingan dengan kedua metode diatas. Metode deep learning dengan pemodelan fingerprint mampu memberikan hasil akurasi dan Cohen Kappa dengan nilai 99,32 dan 0,992. Hasil ini menunjukkan bahwa metode deep learning dengan pemodelan fingerprint memiliki potensi sebagai instrumen untuk mencegah perkembangan new psychoactive substances dengan cara menegakan hukum yang berlaku di indonesia.

ABSTRACT

Nowadays new psychoactive substances NPS have become a phenomenon that needs to be noticed because of its rapid development in order to avoid applicable law within a country. Development of the compound katinon in the year 2013 recorded as many as 30 synthetic katinon compounds then increased in 2018 to 89 synthetic katinon compounds. Artificial intelligence AI has become a tool of human being in doing data processing, AI development become machine learning and deep learning its use include object recognition, image classification and human pose recognition. The structure of a compound was transformed into a form of fingerprint modeling as the information that will be used by the clustering method machine learning and deep learning to classify the compound. While the method of modeling pharmacophore will be used as a comparison with both methods above. Deep learning method with fingerprint modeling can give accuracy and Cohen Kappa with 99.32 and 0.992. This result shows that deep learning method with fingerprint modeling has potential as an instrument to prevent expansion of new psychoactive substances by enforcing applicable law in Indonesia.