

Pengaruh Tipe-Tipe Deskriptor pada Pembelajaran Mesin terhadap Akurasi Prediksi Nilai Penambatan Senyawa-Senyawa Flavonoid Terhadap Virus SARS-CoV-2 = Effect of Molecular Descriptors in Machine Learning on Prediction Accuracy of Docking Score in Bioflavonoid Compounds on SARS-CoV-2

Ahmad Fariz, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920525966&lokasi=lokal>

Abstrak

SARS-CoV-2 adalah virus yang menyebabkan pandemi COVID-19 pada 2019 kemarin. Hingga saat ini, belum ditemukan obat yang efektif dalam mengobati penyakit COVID-19. Senyawa flavonoid memiliki banyak khasiat salah satunya inhibitor virus. Hanya saja dengan banyak senyawa flavonoid menyebabkan pencarian senyawa dapat menghabiskan banyak waktu dan sumber daya untuk dilakukan pengujian berdasarkan in-vitro dan in-vivo, sehingga digunakanlah metode in-silico. Salah satu metode in-silico yang umum digunakan adalah penambatan molekuler. Akan tetapi proses penambatan molekuler ini juga masih memakan kekuatan komputasi yang tinggi. Pada Penelitian ini bertujuan untuk mengembangkan metode prediksi nilai penambatan molekuler dari senyawa flavonoid terhadap protein target SARS-CoV-2 menggunakan model pembelajaran mesin. Model yang dikembangkan yakni K-Nearest Neighbor, ExtraTrees, Gradient Boosting, dan Artificial Neural Network. Dalam penelitian ini, dibandingkan dua jenis input model, yaitu SMILES dan AlvaDesc deskriptor, untuk memprediksi interaksi antara senyawa flavonoid dan protein target SARS-CoV-2. Hasil penelitian menunjukkan deskriptor AlvaDesc memiliki akurasi yang lebih tinggi dan waktu pengembangan yang lebih singkat dibandingkan dengan deskriptor SMILES.

.....SARS-CoV-2, the virus responsible for the COVID-19 pandemic in 2019, has not yet been effectively treated with any drug. Flavonoid compounds exhibit various properties one of it is virus inhibition. However, the search for effective compounds requires extensive time and resources due to the need for in-vitro and in-vivo testing. To expedite this process, the in-silico method, particularly molecular docking, is commonly employed. Nevertheless, molecular docking itself is time-consuming and computationally demanding. Therefore, this study aims to develop a method for predicting the molecular binding affinity of flavonoid compounds to SARS-CoV-2 target proteins using machine learning and deep learning models. Two types of input model, namely SMILES and AlvaDesc descriptors, were compared to predict the interactions between flavonoid compounds and SARS-CoV-2 target proteins. The results indicate that the AlvaDesc descriptor achieves higher accuracy and shorter development time compared to the SMILES descriptor.