

Analisis perbandingan metode deep learning dan pemodelan farmakofor untuk identifikasi senyawa turunan kanabinoid = Analysis of comparison between deep learning and pharmacophore modeling method for identification of cannabinoid derivates

Gerry May Susanto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20474830&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Dalam beberapa tahun terakhir, new psychoactive substances NPS telah berkembang cepat dalam pasaran sebagai alternatif legal obat yang diatur oleh dunia internasional dengan potensi resiko kesehatan serius. Pada tahun 2016, sebanyak 21 senyawa diantara 56 jenis NPS yang beredar di Indonesia telah teridentifikasi merupakan turunan kanabinoid. Namun, hanya 43 dari 56 NPS yang sudah diatur dalam Peraturan Menteri Kesehatan Nomor 2 tahun 2017. Kemudian diperkirakan NPS akan terus bertambah. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh metode yang paling baik untuk mengklasifikasi senyawa baru golongan kanabinoid dengan menggunakan deep learning untuk meningkatkan performa analisis in silico. Penelitian ini membandingkan metode deep learning dan pemodelan farmakofor. fingerprint dua dimensi dan deskriptor sifat fisikokimia digunakan sebagai bahan pembelajaran metode deep learning. Kedua model yang dihasilkan oleh dua metode akan digunakan untuk mengklasifikasikan golongan senyawa kanabinoid baru. Didapatkan deep learning menggunakan fingerprint dua dimensi sebagai metode terbaik. Metode ini memberikan hasil akurasi dan Kohen Kappa dengan nilai 0,9904 dan 0,9876 secara berurutan. Namun, metode deep learning menggunakan deskriptor dan pemodelan farmakofor memberikan nilai akurasi 0.8958 dan 0,68 dan Kohen Kappa 0,8622 dan 0,396 . Dapat disimpulkan dari nilai akurasi dan Kohen Kappa bahwa metode deep learning fingerprint memiliki potensi untuk digunakan sebagai instrumen untuk mengklasifikasi NPS.

<hr>

ABSTRACT

In recent years, new psychoactive substances NPS have rapidly emerged in market purportedly as legal alternatives to internationally controlled drugs, with potential to pose serious health risks. In 2016, from 56 substances which were found in Indonesia, 21 among them were found as cannabinoid derivates. However, there only 43 out of 56 NPS which have been regulated by Ministry of Health Republic of Indonesia, yet NPS expected to increase. The purpose of this study was to gain the best method to classify new cannabinoid class substances using deep learning to enhance performance of in silico analysis. This study will compared deep learning and pharmacophore modeling methods. Two dimentional fingerprint and physicochemical properties descriptor will be used as learning parameters for deep learning method. The two models produced by two methods will be used to classify new cannabinoid substances class. Deep learning with two dimentional fingerprint was found as the best method. This method shows the highest accuracy and Cohen Kappa scores, with values of 0.9904 and 0.9876 consecutively. However, deep learning method with descriptor and pharmacophore modeling method gave accuracy 0.8958 and 0.68 and Cohen Kappa 0.8622 and 0.396 . These results conclude that deep learning method with two dimentional fingerprint gives an alternative method to be used as an instrument for NPS classification.