

Prediksi Inhibitor ER alfa pada Kanker Payudara menggunakan Molecule Attention Transformer Hydrogen Bond (MATH) = Predicting Inhibitors of ER alpha Breast Cancer using Molecule Attention Transformer Hydrogen Bond (MATH)

Rizki Triyani Pusparini, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920530756&lokasi=lokal>

Abstrak

Kanker payudara menempati urutan kedua penyebab kematian wanita, pencegahannya dapat dilakukan dengan skrining dini dan meningkatkan kesadaran diri. Obat terapi hormon dengan target kadar estrogen menawarkan perawatan potensial. Namun, penemuan obat konvensional untuk perawatan kanker payudara memerlukan proses yang ekstensif dan mahal. Studi ini menyajikan kerangka kerja untuk menganalisis hubungan *Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR) dari inhibitor reseptor estrogen alfa. Pendekatan kami menggunakan *supervised learning*, mengintegrasikan informasi *self-attention* Transformer dan graf molekul untuk memprediksi inhibitor reseptor estrogen alfa. Kami melatih lima model klasifikasi untuk memprediksi inhibitor pada kanker payudara. Di antara semua model, model MATH yang kami usulkan mencapai precision, recall, f1-score, dan specificity yang unggul, dengan nilai masing-masing 0,952, 0,972, 0,960, dan 0,922, beserta dengan ROC-AUC 0,977. MATH menunjukkan kinerja yang kuat, menunjukkan potensi untuk membantu peneliti di bidang farmasi dan kesehatan khususnya dalam mengidentifikasi kandidat senyawa penghambat alfa estrogen dan memandu jalur penemuan obat.

.....Breast cancer ranks as the second leading cause of death among women, but early screening and self-awareness can help prevent it. Hormone therapy drugs that target estrogen levels offer potential treatments. However, conventional drug discovery entails extensive, costly processes. This study presents a framework for analyzing the quantitative structure-activity relationship (QSAR) of estrogen receptor alpha inhibitors. Our approach utilizes supervised learning, integrating self-attention Transformer and molecular graph information to predict estrogen receptor alpha inhibitors. We establish five classification models for predicting these inhibitors in breast cancer. Among these models, our proposed MATH model achieves remarkable precision, recall, f1-score, and specificity, with values of 0.952, 0.972, 0.960, and 0.922, respectively, alongside a ROC-AUC of 0.977. MATH exhibits robust performance, suggesting its potential to assist pharmaceutical and health researchers in identifying candidate compounds for estrogen alpha inhibitors and guiding drug discovery pathways.