

Penggunaan Machine Learning untuk Memprediksi Senyawa-Senyawa Turunan Quinoline Sebagai Inhibitor Plasmodium Falciparum = Utilization of Machine Learning to Predict Quinoline Derivatives as Inhibitors of Plasmodium falciparum

Sinaga, Aditya Asprilla, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920544155&lokasi=lokal>

Abstrak

Malaria merupakan penyakit fatal yang disebabkan oleh parasit *Plasmodium* dan ditularkan melalui gigitan nyamuk Anopheles, dengan setengah populasi dunia berisiko terinfeksi. Pada tahun 2021, terdapat 247 juta kasus dan 619.000 kematian akibat malaria, meningkat selama puncak pandemi COVID-19. Komplikasi malaria yang mematikan termasuk malaria serebral, masalah pernapasan, dan kegagalan organ. Penelitian obat anti malaria tradisional menggunakan metode in-vitro yang memakan waktu dan biaya tinggi, sedangkan metode in-silico menawarkan alternatif lebih cepat dan ekonomis, meskipun memiliki keterbatasan. Penelitian ini mengevaluasi interaksi senyawa turunan kuinolon dengan protein target Plasmodium falciparum menggunakan pembelajaran mesin untuk meningkatkan efisiensi prediksi nilai penambatan dengan berbagai model, yaitu K-Nearest Neighbor, Xtra Trees, Xtreme Gradient Boosting, dan Artificial Neural Network. Model menggunakan dua jenis masukan, yaitu SMILES dan deskriptor AlvaDesc, yang memberikan informasi struktural dan sifat fisik serta kimia senyawa. Hasil yang didapatkan dari model ini adalah akurasi serta waktu pelatihan model dan kemudian dilakukan perbandingan antara model beserta deskriptornya. Hasil penelitian memperlihatkan AlvaDesc sebagai deskriptor dan model terbaik yaitu Xtreme Gradient Boosting memiliki akurasi yang baik sebesar 83,6% dan waktu 2 menit 05 detik. Hasil rata-rata perbedaan nilai prediksi dengan nilai aktual sebesar 0,23030.

.....Malaria is a fatal disease caused by the *Plasmodium* parasite and transmitted through the bite of Anopheles mosquitoes, with half of the world's population at risk of infection. In 2021, there were 247 million cases and 619,000 deaths due to malaria, an increase observed during the peak of the COVID-19 pandemic. The deadly complications of malaria include cerebral malaria, respiratory issues, and organ failure. Traditional antimalarial drug research using in-vitro methods is time-consuming and costly, while in-silico methods offer a faster and more economical alternative, despite their limitations. This study evaluates the interaction of kuinolon derivative compounds with the target protein of Plasmodium falciparum using machine learning to enhance the efficiency of docking score predictions with various models, namely K-Nearest Neighbor, Extra Trees, Extreme Gradient Boosting, and Artificial Neural Network. The models use two types of inputs: SMILES and AlvaDesc descriptors, which provide structural and physical-chemical properties of the compounds. The results obtained from these models include accuracy and model training time, and a comparison is made between the models and their descriptors. The study results indicate that AlvaDesc as a descriptor and the Extreme Gradient Boosting model performed the best, achieving good accuracy of 83.6% with a training time of 2 minutes and 05 seconds. The average difference between the predicted and actual values was 0.23030.