

## Pengujian Penghambat Tirosin Kinase Berbasis Kecerdasan Buatan: Model Jaringan Saraf Berbagai Fungsiskor dan Pemanfaatan Fitur Molekuler Morgan Fingerprint

Oleh:

Dr. La Ode Aman, M.Si (NIDN. 0021047704)

Prof. Dr. Netty Ino Ischak, M.Si (NIDN. 0023026803)

Dr. Widy Susanti Abdulkadir, S.Si, M.Si, Apt (NIDN. 0017127106)

Keluarga reseptor ErbB, termasuk EGFR dan HER2, memainkan peran penting dalam pertumbuhan dan kelangsungan hidup sel serta dikaitkan dengan perkembangan berbagai jenis kanker seperti kanker payudara dan paru-paru. Dalam penelitian ini, kami mengembangkan model pembelajaran mendalam untuk memprediksi afinitas pengikatan inhibitor ErbB menggunakan sidik jari molekul yang diperoleh dari representasi SMILES. Representasi SMILES untuk setiap inhibitor ErbB diperoleh dari basis data ChEMBL. Kami pertama-tama menghasilkan sidik jari Morgan dari string SMILES dan menerapkan docking menggunakan AutoDock Vina untuk menghitung nilai afinitas pengikatan. Setelah menyaring dataset berdasarkan afinitas pengikatan, kami melatih model jaringan saraf dalam (DNN) untuk memprediksi nilai afinitas pengikatan dari sidik jari molekul. Model ini mencapai kinerja yang signifikan, dengan Mean Squared Error (MSE) sebesar 0,259, Mean Absolute Error (MAE) sebesar 0,366, dan nilai R-squared ( $R^2$ ) sebesar 0,939 pada data pelatihan. Meskipun kinerja sedikit menurun pada data uji ( $R^2 = 0,773$ ), model ini tetap menunjukkan kemampuan generalisasi yang kuat. Hasil ini menunjukkan bahwa pendekatan pembelajaran mendalam sangat efektif untuk memprediksi afinitas pengikatan inhibitor ErbB, menawarkan alat yang berharga untuk penyaringan virtual dan penemuan obat.

**Kata Kunci:** Deep Learning, Morgan Fingerprints, Afinitas Pengikatan, ErbB