

ABSTRAK

Meningitis merupakan peradangan pada meningen yang terjadi di bagian lapisan pelindung otak dan saraf tulang belakang yang disebabkan oleh infeksi bakteri, virus, atau jamur. Penyakit ini memiliki sifat sulit dikenali karena memiliki gejala awal serupa dengan flu dimana penderita mengalami demam dan sakit kepala. Upaya pencegahan penyakit yang ada sekarang dengan memperkuat antibodi. Sedangkan, kandidat obat untuk treatment penyakit ini masih belum menemukan hasil yang optimal dalam menurunkan angka kematian akibat meningitis. Penelitian ini bertujuan untuk mencari dan menganalisis kandidat senyawa herbal yang memungkinkan menjadi inhibitor penyakit meningitis. Data-data senyawa diakuisisi dari basis data terbuka yang tervalidasi. Data yang diakuisisi berupa *smiles* dari struktur ikatan kimia senyawa. Pada proses pengolahan data dibutuhkan ekstraksi fitur senyawa dengan menerapkan konsep *molecular fingerprint*. Hasil dari ekstraksi fitur dijadikan sebagai dataset untuk membangun model klasifikasi dengan menerapkan algoritma *Neural Network* dan *Random Forest*. Dua model yang dihasilkan akan dibandingkan mana yang lebih *robust* untuk dijadikan model prediksi pencarian senyawa herbal. Hasil penelitian berupa kandidat senyawa herbal sebagai inhibitor penyakit meningitis. Senyawa kandidat ini dapat dijadikan rekomendasi penemuan obat untuk treatment pasien yang terjangkit Meningitis. Tanaman-tanaman dapat dieksplorasi lebih banyak berdasarkan hasil kandidat senyawa herbal dan tersaji pada laman *website* yang membagikan informasi terkait tanaman herbal dengan kandungan senyawa herbal kandidat inhibitor meningitis. *Website* dibangun menggunakan bahasa pemrograman HTML, CSS, dan PHP. Luaran *website* diharapkan dapat membantu peneliti selanjutnya untuk memudahkan pencarian tanaman herbal sebagai rekomendasi keberlanjutan penelitian untuk penemuan obat baru meningitis.

Kata Kunci: Skrining Senyawa Herbal, *Neural Network*, *Random Forest*, *Molecular Fingerprint*, Meningitis.

ABSTRACT

Meningitis is an inflammation of the meninges that occurs in the protective lining of the brain and spinal cord caused by a bacterial, viral or fungal infection. This disease is difficult to recognize, because it has initial symptoms similar to the flu where sufferers experience fever and headaches. Current disease prevention efforts by strengthening antibodies. Meanwhile, drug candidates for the treatment of this disease have not found optimal result in reducing mortality from meningitis. This research aims to find and analyze candidate herbal compounds that might become inhibitors of meningitis. Compound data were acquired from validated open-source databases. The data acquired is in the form of smiles from the chemical bond structure of the compound. In the data processing, feature extraction of compounds is required by applying the concept of molecular fingerprinting. The results of feature extraction are used as a dataset to build a classification model by applying Neural Network and Random Forest algorithms. The resulting two models will be compared which one is more robust and good for predicting the search for herbal compounds. The results of the research are the candidates of herbal compound candidates as meningitis disease inhibitors. This candidate compound can be used as a recommendation for drug discovery to treat patients infected with Meningitis. Plants can be explored more based on the results of candidate herbal compounds and presented on website pages that share information related to herbal plants containing herbal compounds as candidate meningitis inhibitors. Websites are built using HTML, CSS and PHP programming languages. The output of the website is expected to help future researchers to facilitate the search for herbal plants as recommendations for research continuity for the discovery of new meningitis drugs.

Keywords: *Herbal Compound Screening, Neural Network, Random Forest, Molecular Fingerprint, Meningitis.*