

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN.....	iii
PERNYATAAN ORISINALITAS.....	iv
KATA PENGANTAR	v
ABSTRAK	vii
<i>ABSTRACT</i>	viii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL.....	xii
BAB 1 PENDAHULUAN	13
1.1 Latar Belakang	13
1.2 Rumusan Masalah	14
1.3 Tujuan dan Manfaat.....	14
1.3.1 Tujuan Penelitian	14
1.3.2 Manfaat Penelitian	15
1.4 Batasan Masalah.....	15
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA.....	16
2.1 Penelitian Terdahulu.....	16
2.2 Dasar Teori	18
2.2.1 Protein Meningitis	18
2.2.2 Basis Data Bioinformatika	20
2.2.3 Ekstraksi Fitur	24
2.2.4 Metode Penelitian	26
2.2.5 Uji Performa Model	31
2.2.6 Senyawa Herbal	38
2.2.7 Website	41
BAB 3 METODOLOGI	43
3.1 Metode yang Digunakan.....	43
3.1.1 Studi Literatur	45
3.1.2 Pengumpulan Data	45
3.1.3 Pre-Processing Data	47
3.1.4 Ekstraksi Fitur	48
3.1.5 Klasifikasi Model Multilayer Perceptron dan Random Forest	48
3.1.6 Prediksi Senyawa Herbal	55

3.1.7	Analisis Hasil dan Pembahasan	56
3.1.8	Website	56
3.1.9	Kesimpulan dan Saran	56
3.2	Alat dan Bahan Penelitian	57
3.3	Jadwal Pelaksanaan	58
BAB 4	HASIL DAN PEMBAHASAN	60
4.1	Pengumpulan Data.....	60
4.2	<i>Pre-processing</i> Data dan Ekstraksi Fitur	63
4.3	Klasifikasi Model	67
4.4	Screening Herbal	79
4.4.1	Website	84
BAB 5	KESIMPULAN DAN SARAN	90
5.1	Kesimpulan	90
5.2	Saran.....	91
	DAFTAR PUSTAKA	92
	LAMPIRAN	97
	Lampiran 1. Program untuk ekstraksi fitur data senyawa aktif, decoy, dan herbal	97
	Lampiran 2. Program scrapping senyawa diketahui berdasarkan nama	108
	Lampiran 3. Program scrapping senyawa diketahui berdasarkan nama	110
	Lampiran 4. Database Tanaman Herbaldb dari 10 kandidat senyawa terbaik	115
	BIODATA PENULIS	132

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Tujuh protein target vital meningitis.....	19
Gambar 2. 2 Contoh ekstraksi fitur pada senyawa aspirin menggunakan molecular fingerprint	25
Gambar 2. 3 Contoh perbedaan cis (kiri) dan trans (kanan) pada senyawa.....	25
Gambar 2. 4 Contoh beberapa kode biner pada PubChem fingerprint.....	26
Gambar 2. 5 Hasil metrik antara XGBoost, RF, dan MLP oleh peneliti sebelumnya [5]27	
Gambar 2. 6 Contoh konsep MLP dengan one hidden layer pada struktur Neural Network	28
Gambar 2. 7 Pelabelan kelas pada algoritma random forest.....	30
Gambar 2. 8 <i>Confussion Matrix</i> untuk uji performa model.....	31
Gambar 2. 9 AUC-ROC Curve	37
Gambar 2. 10 Titik threshold terbaik terhadap probabilitas	37
Gambar 2. 11 Daftar senyawa herbal pada halaman web herbaldb	39
Gambar 2. 12 Pencarian senyawa (+)-alpha-Cyperone pada database PubChem	39
Gambar 2. 13 Bentuk struktur senyawa 2D (kiri) dan 3D (kanan)	40
Gambar 2. 14 Tanaman yang mengandung senyawa (+)-alpha-Cyperone.....	40
Gambar 2. 15 Khasiat pada spesies teki yang bersifat antipiretik.....	41
Gambar 4. 1 Contoh hasil ekstraksi fitur senyawa herbal	64
Gambar 4. 2 Contoh hasil ekstraksi fitur senyawa aktif.....	65
Gambar 4. 3 Contoh hasil ekstraksi fitur senyawa decoy	65
Gambar 4. 4 Contoh data senyawa herbal dan mengalami error scrapping karena tidak ditemukan id pubchemnya	65
Gambar 4. 5 Hasil <i>Confussion Matrix</i> untuk menguji performance metrics model klasifikasi (a,b,c) dan visualisasi performance metrics ROC AUC Curve dan memeriksa nilai log loss terhadap threshold Random Forest (d,e)	74
Gambar 4. 6 Hasil <i>Confussion Matrix</i> untuk menguji kualitas model klasifikasi (a,b,c,d,e) MultiLayer Perceptron	75
Gambar 4. 7 Hasil prediksi skor probabilitas senyawa herbal menggunakan Multilayer Perceptron	81

DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Daftar situs dan halaman utama database protein.....	20
Tabel 3. 1 Contoh atribut dari beberapa data sekunder yang telah diakuisisi berdasarkan protein target yang diperoleh dari drugbank database.....	46
Tabel 3. 2 Features Pubchem molecular fingerprint yang akan digunakan untuk ekstraksi fitur pada data senyawa yang telah siap di ekstraksi.....	47
Tabel 3. 3 Contoh beberapa senyawa herbal yang diakuisisi dan tervalidasi dalam PubChem.....	55
Tabel 3. 4 Alat dan bahan penelitian.....	57
Tabel 3. 5 Jadwal Pelaksanaan.....	58
Tabel 4. 1 Data Senyawa Aktif yang diakuisisi pada 7 Protein Target Meningitis.....	60
Tabel 4. 2 Contoh data senyawa aktif.....	62
Tabel 4. 3 Contoh data senyawa decoy.....	63
Tabel 4. 4 Contoh data senyawa herbal.....	63
Tabel 4. 5 Tuning Hyperparameter Random Forest dan Multilayer Perceptron.....	68
Tabel 4. 6 Analisis Parameter.....	70
Tabel 4. 7 Percobaan dan parameter yang digunakan.....	73
Tabel 4. 8 Hasil Confussion Matrix pada data latih, uji, dan validasi.....	76
Tabel 4. 9 Hasil peforma data uji RF dan MLP.....	77
Tabel 4. 10 Hasil prediksi senyawa herbal.....	81
Tabel 4. 11 Tabel hasil pencarian tanaman yang menganyang memiliki kandungan dari 10 senyawa herbal terbaik.....	82