

**PETUNJUK PENGGUNAAN
IJAH WEBSERVER**

Oleh:
Wisnu Kusuma, Vektor Dewanto, *et al.*

**Tropical Biopharmaca Research Center & Computer Science Department
Bogor Agricultural University**

March 7, 2017 2:47pm

DAFTAR ISI

| | |
|--|-----------|
| Daftar Isi | ii |
| 1 Pendahuluan | 2 |
| 1.1 Apa Itu Ijah Webserver? | 2 |
| 1.1.1 Definisi | 2 |
| 1.1.2 Kasus-penggunaan (<i>use-case</i>) | 2 |
| 1.1.2.1 Use-case 1 (Both drug-and-target inputs) | 2 |
| 1.1.2.2 Use-case 2 (Drug-side inputs only) | 3 |
| 1.1.2.3 Use-case 3 (Target-side inputs only) | 3 |
| 1.1.3 Menu-menu | 3 |
| 1.2 Tampilan Awal (<i>Home Page</i>) | 4 |
| 1.2.1 Overview | 4 |
| 1.2.1.1 URL | 4 |
| 1.2.1.2 Home Page | 4 |
| 1.2.2 Kotak Masukan (<i>Input Fields</i>) | 4 |
| 1.2.2.1 Drug-side | 4 |
| 1.2.2.2 Target-side | 5 |
| 1.2.3 Tombol Eksekusi | 5 |
| 1.2.3.1 Search (Search and Predict) | 6 |
| 1.2.3.2 Reset | 6 |
| 1.2.4 Deretan Tombol Contoh (<i>Example</i>) | 6 |
| 1.2.5 Deretan Menu | 6 |
| 1.2.6 Judul, Versi, Logo, dan <i>Copyright</i> Ijah | 7 |
| 1.2.7 Visitor Log | 7 |
| 1.3 Repositori (Gudang) <i>Source Code</i> | 7 |
| 2 Langkah-langkah Penggunaan | 9 |
| 2.1 Memberikan Masukan (<i>inputs</i>) | 9 |
| 2.1.1 Drug-side input | 9 |
| 2.1.2 Target-side input | 11 |
| 2.2 Memproses Input | 12 |
| 2.3 Membaca dan Menganalisis Luaran (<i>outputs</i>) | 13 |
| 2.3.1 Summary | 13 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2.3.2 | Connectivity Graph | 14 |
| 2.3.3 | Connectivity Text | 16 |
| 2.3.4 | Metadata Text | 18 |
| 2.4 | Memodifikasi Output | 19 |
| 2.4.1 | Filter | 20 |
| 2.4.2 | Predict | 22 |
| 3 | Menu-menu | 24 |
| 3.1 | Manual | 24 |
| 3.2 | Downloads | 24 |
| 3.2.1 | Metadata | 25 |
| 3.2.2 | Connectivity Data | 25 |
| 3.2.3 | Similarity (kernels) data | 26 |
| 3.2.4 | Feature data | 26 |
| 3.2.5 | Documents | 26 |
| 3.3 | Help/FAQ | 26 |
| 3.4 | Ijahv1 | 28 |
| 3.5 | Disclaimer | 28 |
| 3.6 | ContactUs | 29 |
| 3.6.1 | Topik | 30 |
| 3.6.2 | Isi Pesan | 30 |
| 3.6.3 | Isi Data Diri Anda | 31 |
| 3.6.4 | Kirim Tanggapan | 31 |
| 3.7 | AboutUs | 31 |
| 4 | Pangkalan Data (<i>Database</i>) Rujukan | 33 |
| 4.1 | Data Konektivitas | 33 |
| 4.1.1 | <i>Plant-Compound connectivity</i> | 33 |
| 4.1.1.1 | Knapsack | 33 |
| 4.1.1.2 | StreptomeDB | 34 |
| 4.1.1.3 | Dr. Duke's Ethnobotanical Databases | 34 |
| 4.1.2 | <i>Compound-Protein connectivity</i> | 34 |
| 4.1.2.1 | DrugBank | 34 |
| 4.1.2.2 | Supertarget + Matador | 35 |
| 4.1.2.3 | Transformer | 35 |
| 4.1.2.4 | Antibiotic'ome | 35 |
| 4.1.2.5 | Therapeutic Target Database (TTD) | 35 |
| 4.1.2.6 | BindingDB | 35 |

| | |
|--|-----------|
| | 1 |
| 4.1.2.7 PubChem | 36 |
| 4.1.2.8 GLIDA: GPCR-Ligand Database | 36 |
| 4.1.2.9 PDTD: Potential Drug Target Database | 36 |
| 4.1.2.10 PolySearch | 36 |
| 4.1.3 <i>Protein-Disease connectivity</i> | 36 |
| 4.1.3.1 Uniprot | 36 |
| 4.1.3.2 KEGG | 37 |
| 4.2 Metadata | 37 |
| 4.2.1 Plant Metadata | 37 |
| 4.2.1.1 KNApSAcK | 37 |
| 4.2.1.2 Herbalis Nusantara | 37 |
| 4.2.1.3 The Plant List | 37 |
| 4.2.2 Compound Metadata | 38 |
| 4.2.2.1 KEGG | 38 |
| 4.2.2.2 DrugBank | 38 |
| 4.2.2.3 CAS | 38 |
| 4.2.3 Protein Metadata | 38 |
| 4.2.3.1 Uniprot | 38 |
| 4.2.3.2 PDB | 38 |
| 4.2.3.3 HPRD | 38 |
| 4.2.4 Disease Metadata | 39 |
| 4.2.4.1 OMIM | 39 |
| 4.2.4.2 HPO | 39 |
| 4.2.4.3 ORPHAnet | 39 |
| 5 Metode Prediksi | 40 |
| 5.1 BLM-NII | 40 |
| 5.2 WNN-GIP | 40 |
| Daftar Pustaka | 42 |

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Apa Itu Ijah Webserver?

1.1.1 Definisi

Ijah Webserver merupakan sebuah webserver yang menyajikan pencarian dan/atau prediksi terhadap hubungan antara tanaman dan khasiatnya pada suatu penyakit. Informasi yang disajikan berupa hubungan antara tanaman dengan senyawa (Plant-Compound), senyawa dengan bioprotein (Compound-Protein), dan bioprotein dengan penyakit (Protein-Disease). Selain pencarian dari *database*, Ijah juga melakukan prediksi terhadap hubungan yang belum diketahui menggunakan beberapa jenis algoritme, dan memberikan hasil berupa tingkat kemungkinan kebenaran prediksi. Hasil keterhubungan ini (baik hasil pencarian maupun prediksi) disajikan dalam beberapa jenis keluaran, yang utama yaitu visualisasi dalam bentuk graf *multi-partite*. Tujuan Ijah Webserver adalah menyederhanakan dan membantu proses penelitian obat herbal atau Jamu dengan memberikan informasi potensi tanaman.

1.1.2 Kasus-penggunaan (*use-case*)

Ada beberapa kasus-penggunaan (*use-case*) dalam pencarian saat menggunakan Ijah Webserver.

1.1.2.1 Use-case 1 (Both drug-and-target inputs)

Use-case ini melibatkan kedua sisi input yaitu *Drug-side* dan *Target-side*. pada *use case* ini, input dari kedua sisi harus ada. Pencarian ini bersifat end-to-end, misalkan Plant to Disease, dimana kita memasukkan beberapa jenis tanaman dari sisi Drug-side dan beberapa jenis penyakit dari Target-side, lalu hasilnya akan menunjukkan senyawa apa dalam tanaman tersebut yang dapat menarget protein yang ada dalam penyakit tersebut, sehingga berkhasiat menyembuhkan. Variasi input pada *use-case* ini meliputi **Plant-Protein**, **Plant-Disease**, **Compound-Protein**, dan **Compound-Disease**.

1.1.2.2 Use-case 2 (Drug-side inputs only)

Use-case ini melibatkan hanya satu sisi yaitu *Drug-side* saja. pada *use-case* ini, input dari salah satu *drug-side* (Plant atau Compound) harus ada. Sifat pencarian ini, misal kita memasukkan tanaman saja (Plant Search Only), maka semua senyawa yang terkandung dalam tanaman itu akan muncul, lalu protein yang terkait dengan senyawa tersebut, dan penyakit yang terkait dengan protein tersebut. Sederhananya semua yang terkait dengan tanaman yang diinputkan. Variasi input pada *use-case* ini meliputi **Plant Search Only** dan **Compound Search Only** yang pada dasarnya sama dengan Plant Search.

1.1.2.3 Use-case 3 (Target-side inputs only)

Use case ini melibatkan hanya satu sisi yaitu *Target-side* saja. pada *use case* ini, input dari salah satu *Target-side* (Protein atau Disease) harus ada. Sifat pencarian ini mirip dengan Drug inputs only, namun bedanya dari sisi Target. Misal pada pencarian dari penyakit (Disease Search Only) akan muncul semua yang berkaitan dengan penyakit itu, termasuk tanaman yang berhubungan. Variasi input pada *use-case* ini meliputi **Protein Search Only** dan **Disease Search Only**.

1.1.3 Menu-menu

Ijah Webserver memiliki beberapa menu, yaitu:

- Home
- Manual
- Downloads
- Help/FAQ
- IjahV1
- Disclaimer
- ContactUs
- AboutUs

Penjelasan tentang menu-menu tersebut ada pada **Bab 3. Menu-menu**.

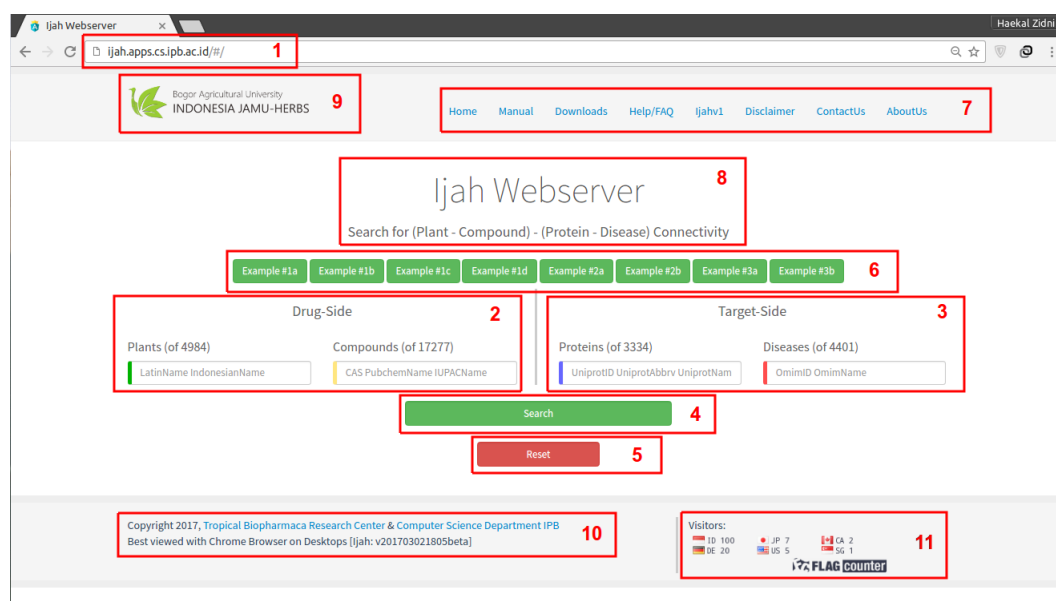
1.2 Tampilan Awal (*Home Page*)

1.2.1 Overview

1.2.1.1 URL

Ijah Webserver dapat diakses pada alamat URL **http://ijah.apps.cs.ipb.ac.id**

1.2.1.2 Home Page



Gambar 1.1: Halaman utama Ijah Webserver: (1) URL Ijah; (2) Kotak Masukan *Drug-side*; (3) Kotak Masukan *Target-side*; (4) Tombol Eksekusi (Search/Search and Predict); (5) Tombol Reset; (6) Deretan Tombol Contoh; (7) Deretan Menu; (8) Judul; (9) Logo Ijah Webserver; (10) *Copyright* dan versi Ijah; (11) *Visitor Log*

1.2.2 Kotak Masukan (*Input Fields*)

1.2.2.1 Drug-side

Pada *Drug-side*, input terdiri dari tanaman (Plant) dan senyawa (Compound). Untuk menjaga konsistensi, ketika salah satu dipilih, maka pilihan lain akan menghilang, misal kita telah memilih untuk menginputkan Plant, maka Compound tidak bisa dipilih, begitu pula sebaliknya. Jika ingin mengembalikan/mengosongkan kondisi input kembali, gunakan tombol **Reset**.

Plants

Input Plant terdiri dari nama Latin dan nama Indonesia dari tanaman, yang dipisahkan oleh suatu garis vertikal. Hal ini memudahkan jika kita hanya mengetahui nama latin suatu tanaman dan tidak mengetahui nama lokalnya, begitu pula sebaliknya jika hanya mengetahui nama lokalnya. Selain membantu pencarian, pada kasus salah satu nama tidak diketahui maka akan didapat pengetahuan mengenai nama tanaman tersebut.

Compounds

Input Compound terdiri dari ID CAS, ID PubChem, atau nama IUPAC dari senyawa tersebut, setiap ID dipisahkan oleh garis vertikal.

1.2.2.2 Target-side

Pada Target-side, input terdiri dari Protein dan penyakit (Disease). Untuk menjaga konsistensi, ketika salah satu dipilih, maka pilihan lain akan menghilang, misal kita telah memilih untuk menginputkan Protein, maka Disease tidak bisa dipilih, begitu pula sebaliknya. Jika ingin mengembalikan/mengosongkan kondisi input kembali, gunakan tombol **Reset**.

Protein

Input Protein terdiri dari nama Uniprot, singkatan *abbreviation* Uniprot, atau ID Uniprot. Nama dan ID dipisahkan oleh garis vertikal.

Disease

Input Disease terdiri dari nama OMIM atau ID OMIM. Nama dan ID dipisahkan oleh garis vertikal.

1.2.3 Tombol Eksekusi

Setelah memberikan input, ada beberapa aksi yang dapat dilakukan, yaitu meneruskan pencarian dengan tombol Search atau mengosongkan semua input dengan tombol Reset.

1.2.3.1 Search (Search and Predict)

Bergantung pada jenis input yang diberikan, tombol ini dapat menjalankan fungsi Search saja atau Search and Predict. Lengkapnya lihat pada bagian **Proses**.

1.2.3.2 Reset

Tombol Reset ini **memiliki fungsi yang cukup penting**. Saat ini terdapat kekurangan dimana saat menghapus input, input tidak benar-benar terhapus namun telah tersimpan untuk diproses. Sementara kekurangan ini masih diusahakan untuk diatasi, *sangat dianjurkan* menggunakan tombol Reset ini untuk menghapus input ke kondisi kosong semula.

1.2.4 Deretan Tombol Contoh (*Example*)

Deretan tombol contoh ini merupakan kumpulan contoh *use-case* yang ada pada Ijah Webserver. Jadi selain menggunakan input manual, tombol-tombol contoh ini dapat memudahkan dalam menuju *use-case* tertentu. Kumpulan contoh ini terbagi menjadi tiga kelompok, dimana Example #1a - #1d merupakan *use-case Both Drug and Target inputs*, Example #2a - #2b merupakan *use-case Drug inputs only*, dan Example #3a - #3b merupakan *use-case Target inputs only*. Lebih lengkapnya:

- **Example #1a** - Plant-Disease
- **Example #1b** - Plant-Protein
- **Example #1c** - Compound-Protein
- **Example #1d** - Compound-Disease
- **Example #2a** - Plant search only
- **Example #2b** - Compound search only
- **Example #3a** - Protein search only
- **Example #3b** - Disease search only

1.2.5 Deretan Menu

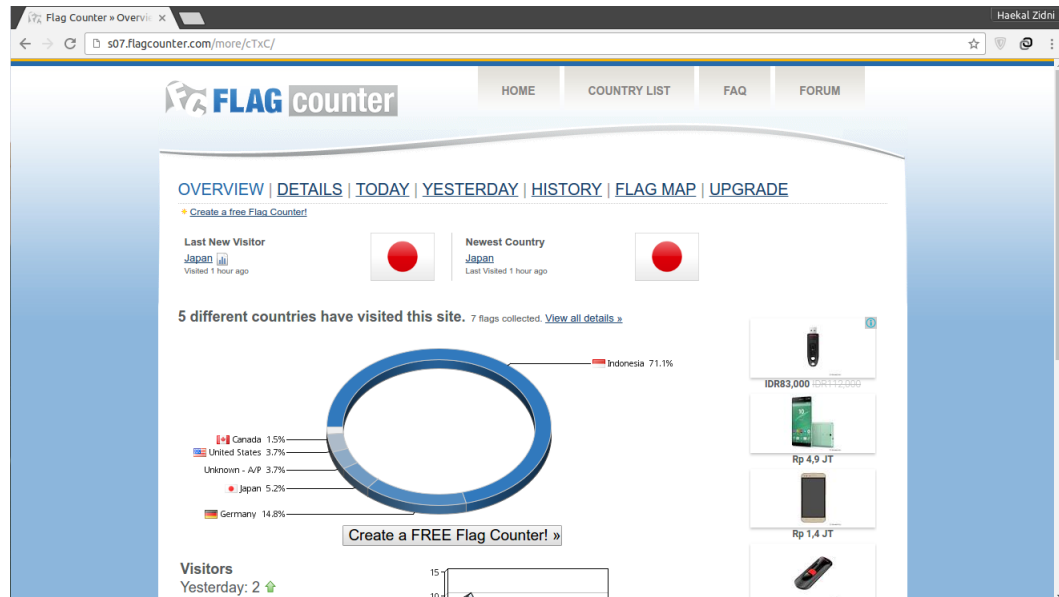
Pada bagian ini ada sederetan menu yang dapat di-klik. Penjelasan lebih lanjut tentang menu ini ada pada bagian **Bab 3. Menu-menu**.

1.2.6 Judul, Versi, Logo, dan *Copyright* Ijah

Pada bagian tengah halaman terdapat judul webserver ini, yaitu **“Ijah Webserver – Search for (Plant-Compound) – (Protein-Disease) Connectivity”**. Logo Ijah terdapat pada bagian kiri atas. Pada bagian bawah kiri halaman terdapat bagian yang berisi *copyright* dan versi Ijah Webserver yang berjalan. Di bagian ini juga ada saran penggunaan untuk pengalaman terbaik saat menggunakan Ijah Webserver. Pada nomor versi Ijah Webserver, 8 digit pertama merupakan format tahun-bulan-tanggal dan 4 digit terakhir merupakan jam dan menit. Sebagai contoh di Ijah Webserver v201702231639 berarti versi ini di-*deploy* pada tanggal 23 Februari 2017 pukul 16:39. Pada *copyright* dijelaskan bahwa hak cipta Ijah Webserver ada pada Departemen Ilmu Komputer IPB dan Pusat Riset Biofarmaka IPB.

1.2.7 Visitor Log

Visitor Log terdapat di sebelah kanan bawah, setelah *copyright* dan versi. Visitor Log adalah fitur yang menghitung jumlah kunjungan Ijah Webserver beserta negara asal kunjungan. Area Visitor Log ini dapat diklik untuk melihat statistik kunjungan lebih lengkap, seperti pada gambar 1.2



Gambar 1.2: Statistik lebih detail yang akan muncul setelah mengklik area Visitor Log

1.3 Repositori (Gudang) *Source Code*

Source Code untuk Ijah Webserver dapat diakses di repositori GitHub di alamat URL <https://github.com/tttor/csipb-jamu-prj>.

Beberapa folder utama dalam repositori tersebut antara lain:

- **Webserver**
<https://github.com/tttor/csipb-jamu-prj/tree/master/webserver>.
- **Database** (lihat bab 4)
<https://github.com/tttor/csipb-jamu-prj/tree/master/database>.
- **Predictor** (lihat bab 5)
<https://github.com/tttor/csipb-jamu-prj/tree/master/predictor>.

BAB 2

LANGKAH-LANGKAH PENGGUNAAN

Pada bagian ini akan dijelaskan secara rinci langkah-langkah penggunaan Ijah Webserver. Langkah-langkah ini mengacu pada Use-case 1 (Plant-Disease). Untuk use-case lainnya mirip, hanya berbeda pada masukan yang diisikan.

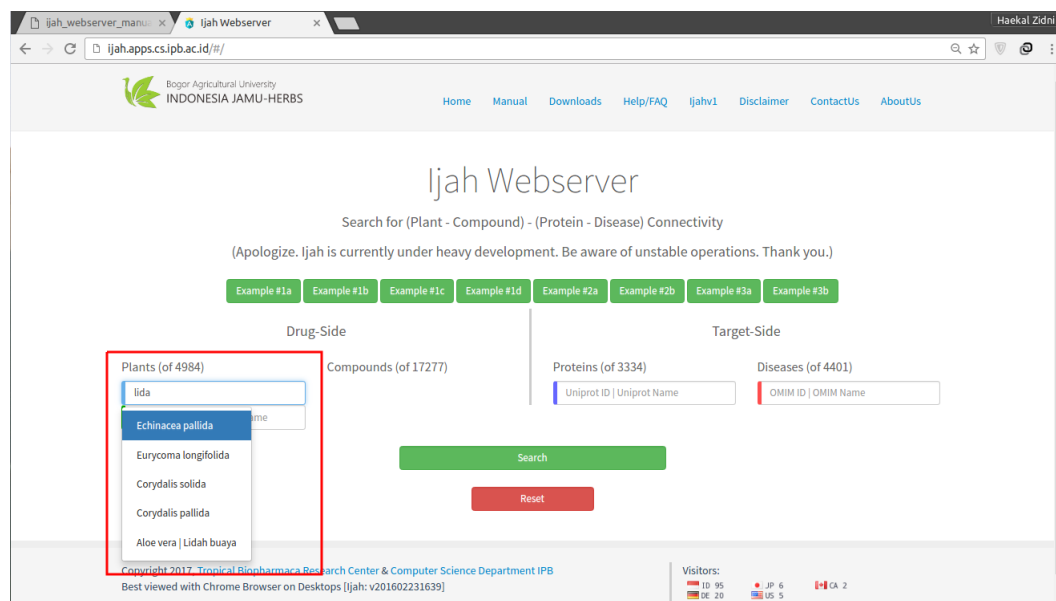
2.1 Memberikan Masukan (*inputs*)

The screenshot shows the Ijah Webserver interface. At the top, there is a navigation bar with links: Home, Manual, Downloads, Help/FAQ, Ijahv1, Disclaimer, ContactUs, and AboutUs. The main heading is "Ijah Webserver" with the subtitle "Search for (Plant - Compound) - (Protein - Disease) Connectivity". Below this, there are eight example buttons: Example #1a, Example #1b, Example #1c, Example #1d, Example #2a, Example #2b, Example #3a, and Example #3b. The main search area is divided into two sections: "Drug-Side" and "Target-Side". The "Drug-Side" section has two input fields: "Plants (of 4984)" with a dropdown menu showing "LatinName IndonesianName" (labeled 1) and "Compounds (of 17277)" with a dropdown menu showing "CAS PubchemName IUPACName" (labeled 2). The "Target-Side" section has two input fields: "Proteins (of 3334)" with a dropdown menu showing "UniprotID UniprotAbbrev UniprotName" (labeled 3) and "Diseases (of 4401)" with a dropdown menu showing "OmimID OmimName" (labeled 4). Below these fields are "Search" and "Reset" buttons. At the bottom, there is a footer with copyright information and a visitor counter.

Gambar 2.1: Input Fields Ijah Webserver: Drug-Side - (1) Plants, (2) Compounds, Target-side - (3) Proteins, (4) Diseases

2.1.1 Drug-side input

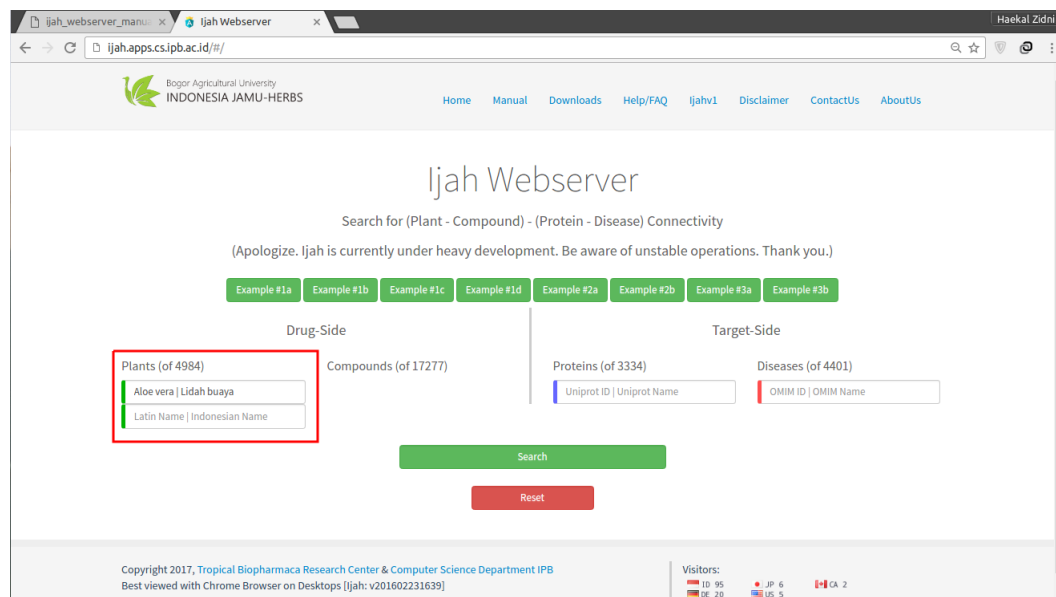
Pada saat memberikan masukan pada (input fields) Ijah, perlu diperhatikan bahwa Ijah Webserver telah memiliki fitur *autocomplete*, cukup mengetikkan sebagian dari nama latin atau nama Indonesia pada Plants atau salah satu ID dari input lainnya, maka saran yang mendekati hasil yang dimaksud sudah muncul. Untuk memulai, masukkan input pada Drug-side, misal tanaman.



Gambar 2.2: Contoh saran dari *autocomplete* ketika memasukkan ‘lida’

Untuk memilih, klik pilihan yang diinginkan. **Penting:** mengetikkan input secara manual hingga akhir tidak akan dianggap sebagai input yang *valid*. Klik pilihan yang diinginkan agar masuk sebagai input yang *valid*.

Sebagai contoh, kita ingin memasukkan lidah buaya. Klik **“Aloe Vera | Lidah Buaya”** pada pilihan yang muncul. Jika sudah diklik, maka kotak akan terisi.



Gambar 2.3: Setelah diklik input akan terlengkapi, dan kotak baru muncul di bawahnya

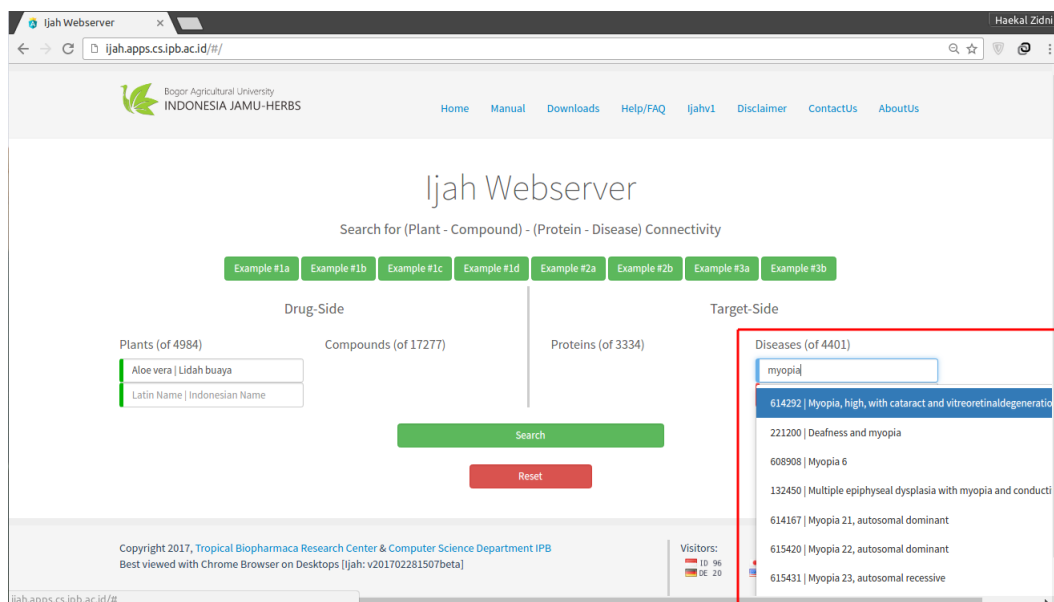
Setelah memasukkan satu input, maka kotak baru akan muncul secara otomatis, jika kita ingin menambahkan input di kategori itu. Kotak baru akan terus muncul

setelah satu input yang *valid* masuk. Langkah ini berlaku untuk *field* lain seperti Compounds, Proteins, dan Diseases.

Perlu diperhatikan, pada gambar 2.3, saat input hanya berasal dari satu Side (dalam kasus ini hanya pada Drug-side), tombol eksekusi akan berlabelkan **Search** saja. Jika input terisi dari kedua Side maka label tombol akan berubah seperti pada gambar 2.5.

2.1.2 Target-side input

Setelah memasukkan input dari Drug-side (dalam use-case ini memasukkan tanaman), maka dilanjutkan dengan memasukkan input dari Target-side. Cara memberikan masukan tetap sama. Kali ini sebagai contoh akan diinputkan disease “**614292 | Myopia, high, with cataract and vitreoretinaldegeneration**”



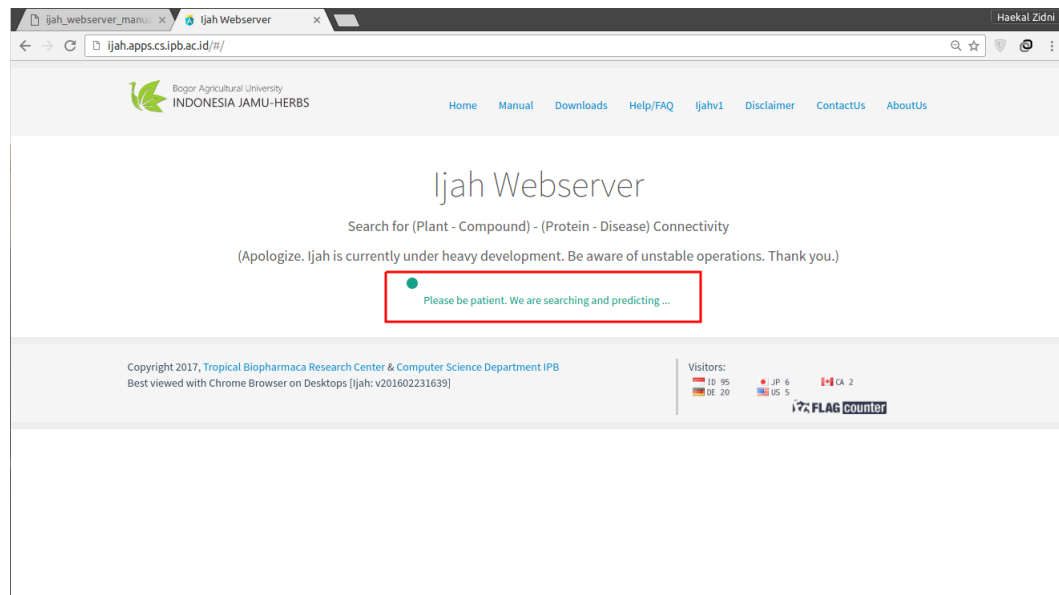
Gambar 2.4: *autocomplete* pada saat memasukkan Target berupa Disease

The screenshot shows the Ijah Webserver interface. At the top, there is a navigation bar with links: Home, Manual, Downloads, Help/FAQ, Ijahv1, Disclaimer, ContactUs, and AboutUs. The main heading is "Ijah Webserver" with the subtitle "Search for (Plant - Compound) - (Protein - Disease) Connectivity". Below this, there are example buttons: Example #1a, Example #1b, Example #1c, Example #1d, Example #2a, Example #2b, Example #3a, and Example #3b. The interface is divided into two main sections: "Drug-Side" and "Target-Side". Under "Drug-Side", there are input fields for "Plants (of 4984)" and "Compounds (of 17277)". Under "Target-Side", there are input fields for "Proteins (of 3334)" and "Diseases (of 4401)". A red box labeled "1" highlights the input fields for "Plants" and "Diseases". Below these fields, there is a green button labeled "Search and Predict" and a red button labeled "Reset". A red box labeled "2" highlights the "Search and Predict" button. At the bottom, there is a footer with copyright information and a visitor counter.

Gambar 2.5: (1) Input dari kedua sisi sudah lengkap. (2) Perhatikan tombol eksekusi yang berlabel *Search and Predict*

2.2 Memproses Input

Setelah memasukkan input, langkah berikutnya yaitu input dapat diproses. Setelah tombol eksekusi diklik, maka proses Search and Predict akan berjalan. Selama proses berjalan, akan muncul animasi seperti pada gambar 2.6



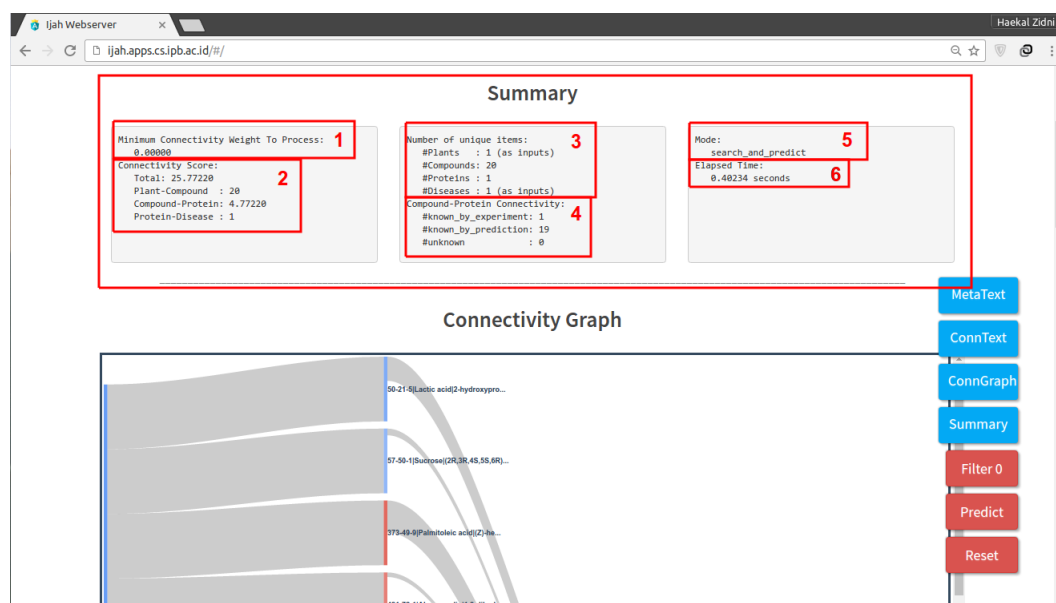
Gambar 2.6: Animasi saat proses Search and Predict sedang berlangsung

2.3 Membaca dan Menganalisis Luaran (*outputs*)

Catatan: jika layout halaman output terlihat saling menumpuk, silakan *zoom out* browser anda hingga terlihat sesuai (bergantung resolusi monitor anda).

Setelah proses selesai, maka luaran (*output*) yang dihasilkan sudah dapat dibaca. Terdapat empat kategori *output* yang dihasilkan, yaitu:

2.3.1 Summary



Gambar 2.7: Output Summary

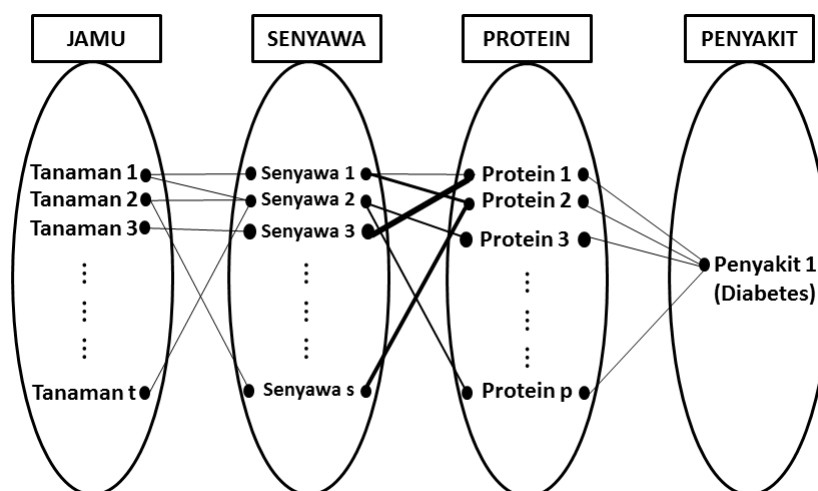
Output Summary adalah ringkasan dari proses output, yang meliputi:

1. **Minimum Connectivity Weight to Display** – nilai minimum skor yang ditampilkan, dapat diubah melalui filter yang akan dijelaskan di bagian Filter pada Navigasi.
2. **Connectivity Score** – adalah jumlah dari weight dari tiap connectivity. Label “Total” menunjukkan penjumlahan connectivity-score dari 3 jenis connectivity. Weight tersebut mengindikasikan tingkat kepercayaan bahwa suatu connectivity benar-benar ada; weight bernilai 1 menunjukkan 100% kepercayaan, yaitu untuk data-data dari database, sedangkan weight bernilai 0 menunjukkan 0% kepercayaan bahwa suatu connectivity ada.
3. **Number of Unique Items** – jumlah entitas unik (tidak termasuk pengulangan) yang terlibat dalam proses.

4. **Compound-Protein Connectivity** – jumlah konektivitas senyawa dan protein. **Known by experiment** artinya data sudah valid 100%, berasal dari pangkalan data, sedangkan **Known by prediction** berarti konektivitas hasil prediksi algoritme, **Unknown** artinya konektivitas yang tidak diketahui baik dari pangkalan data maupun hasil prediksi algoritme.
5. **Mode** – mode proses, apakah Search saja atau Search and Predict.
6. **Elapsed Time** – waktu yang dihabiskan untuk menyelesaikan proses.

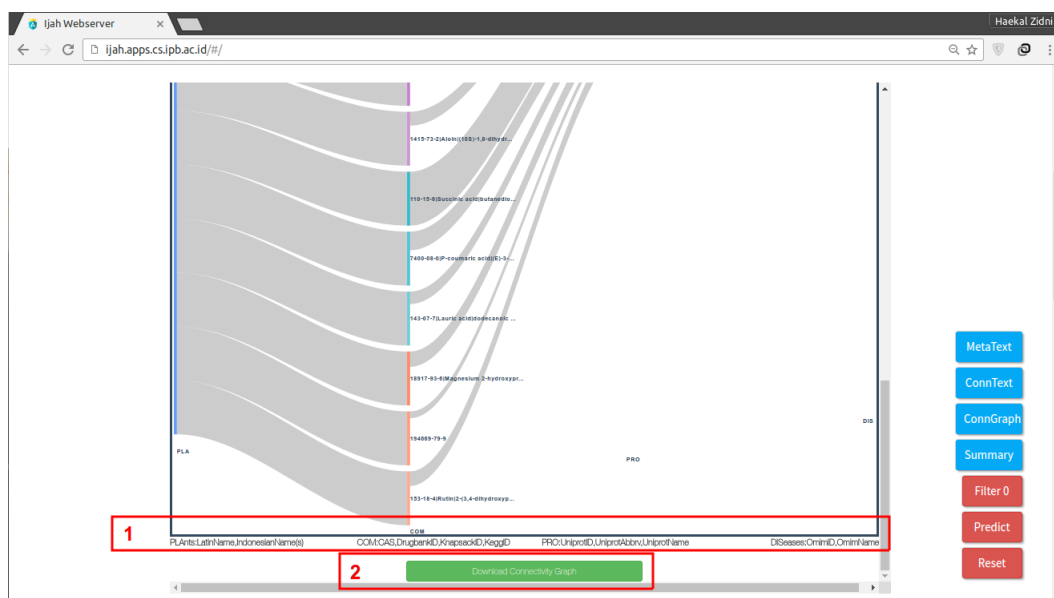
2.3.2 Connectivity Graph

Connectivity Graph merupakan model output yang berupa *multi-partite graph*, yaitu graf yang vertexnya terbagi menjadi beberapa partisi (himpunan).



Gambar 2.8: Contoh *multipartite graph*

Pada model Connectivity Graph Output, terdapat vertex dari Plant ke Compound, Compound ke Protein, dan Protein ke Disease, ada 4 partisi pada graf ini.



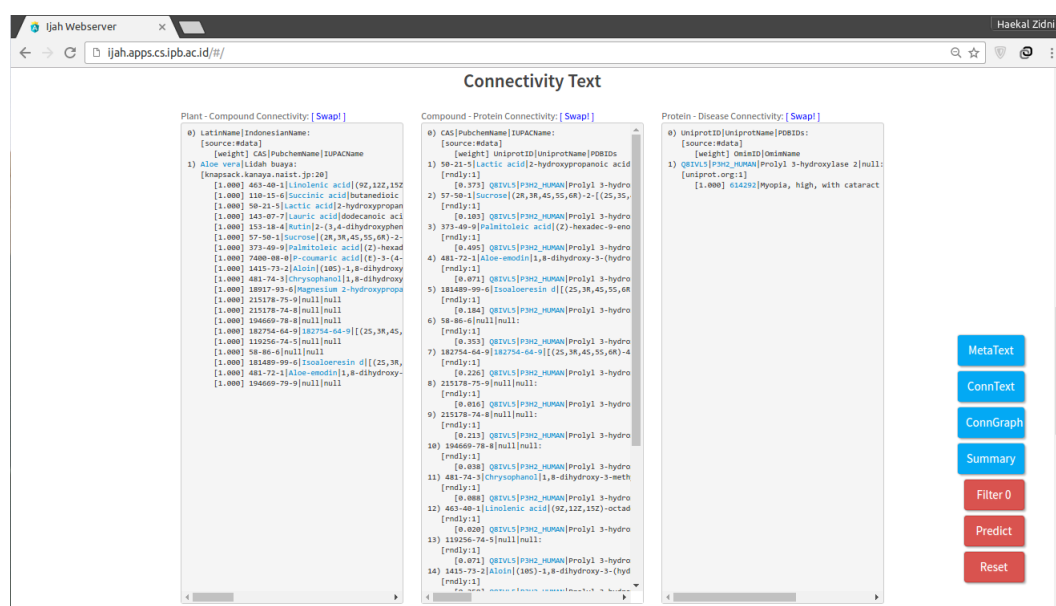
Gambar 2.10: Bagian bawah Connectivity Graph – (1) Keterangan Graf, (2) Tombol Download

Petunjuk Penggunaan Ijah Webserver v201703021805beta (dibuat: March 7, 2017 2:47pm)

Navigasi graf dapat dilakukan dengan menggulir *scrolling* ke atas dan bawah. Graf ini bisa didownload menggunakan tombol Download di bawah graf, dengan format gambar PNG.

2.3.3 Connectivity Text

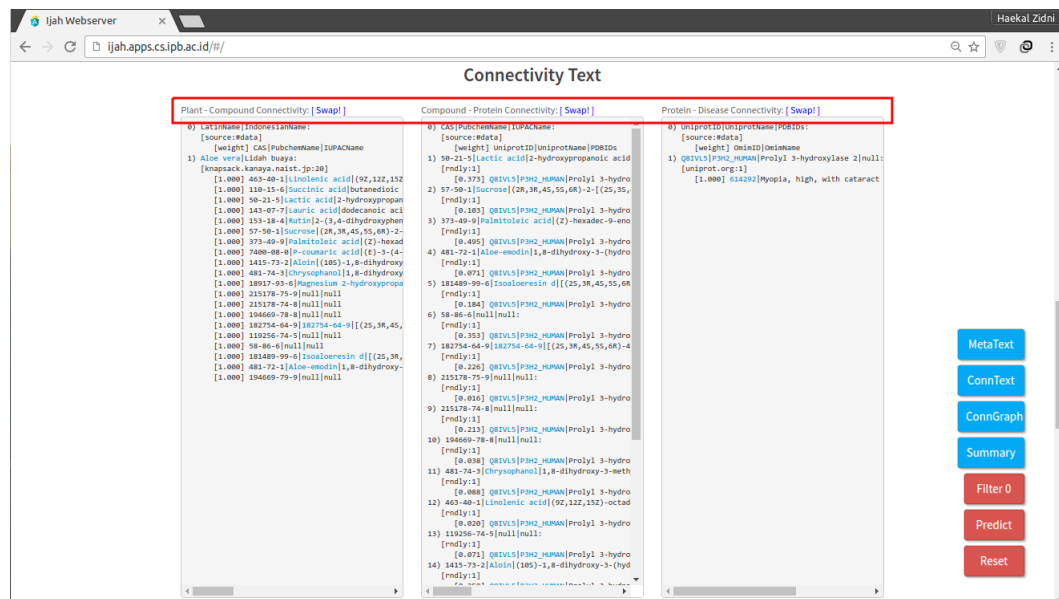
Selain dalam bentuk *multipartite graph*, output juga dihasilkan dalam bentuk Connectivity Text, yaitu teks yang berisi konektivitas antar entitas



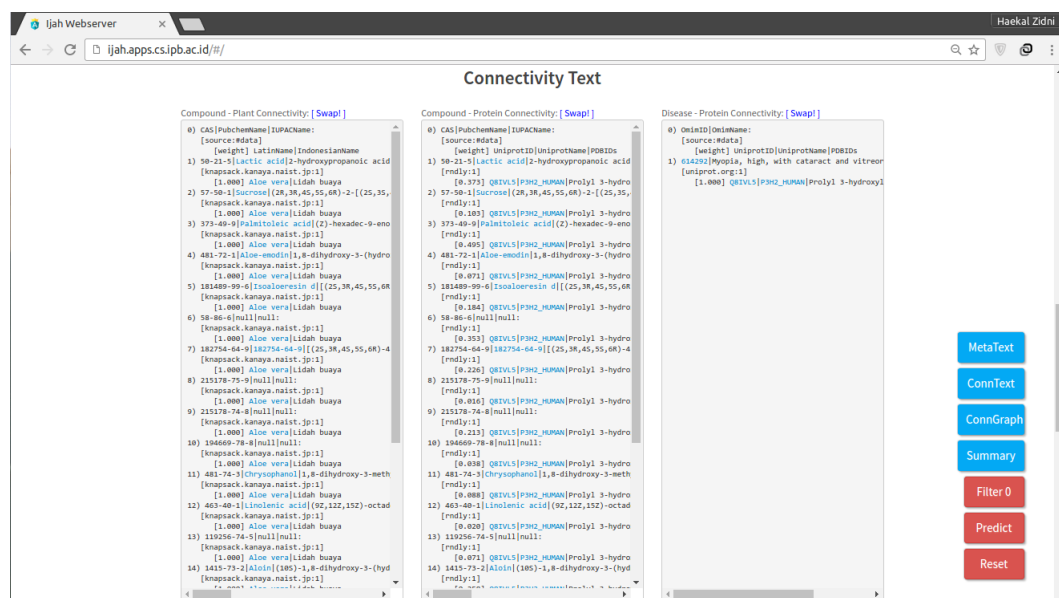
Gambar 2.11: Connectivity Text pada Ijah Webserver

Isi pada output Text yaitu data konektivitas (nama dan ID entitas pertama), sumber data konektivitas, serta bobot nilai konektivitas (1 jika terhubung 100% by experiment, jika by prediction nilainya akan bervariasi antara 0 sampai 1, lebih mendekati 1 maka lebih baik), lalu nama dan ID entitas keduanya.

Pada output Text, dapat dilakukan *swapping* konektivitas, misal dari Plant-Compound menjadi Compound-Plant. Hal ini dapat dilakukan dengan mengklik tombol **Swap!** di bagian atas tiap kotak konektivitas.

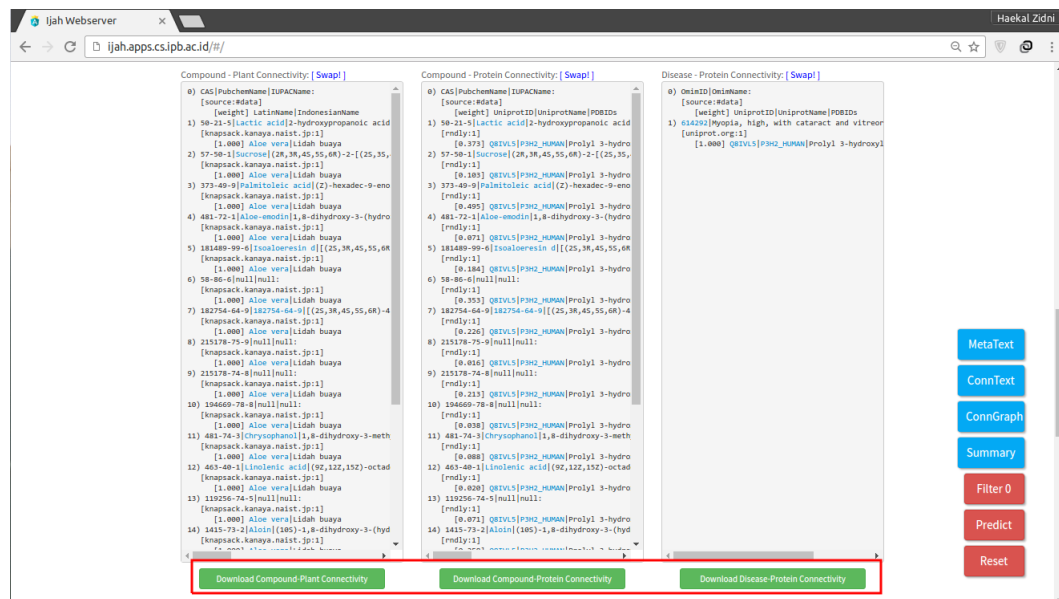


Gambar 2.12: Posisi tombol Swap untuk Connectivity Text



Gambar 2.13: Hasil Swapping pada Plant-Compound dan Protein-Disease. Perhatikan bahwa konektivitasnya berubah menjadi Compound-Plant dan Disease-Protein

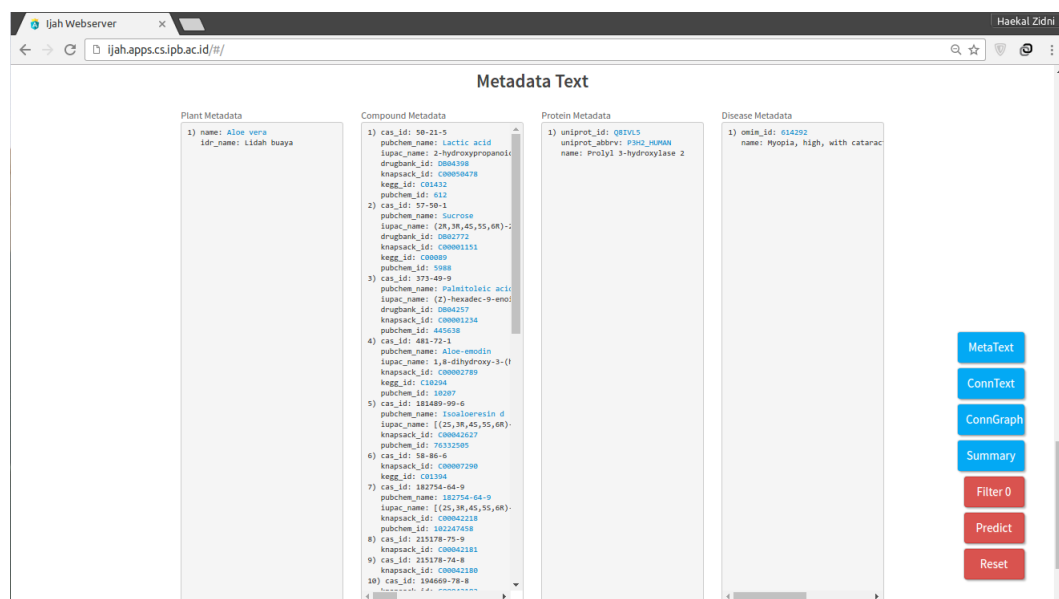
Seperti Connectivity Graph, Connectivity Text juga memiliki tombol Download untuk mendownload file teks konektivitas ini. Download dilakukan per konektivitas sehingga terbagi menjadi tiga file.



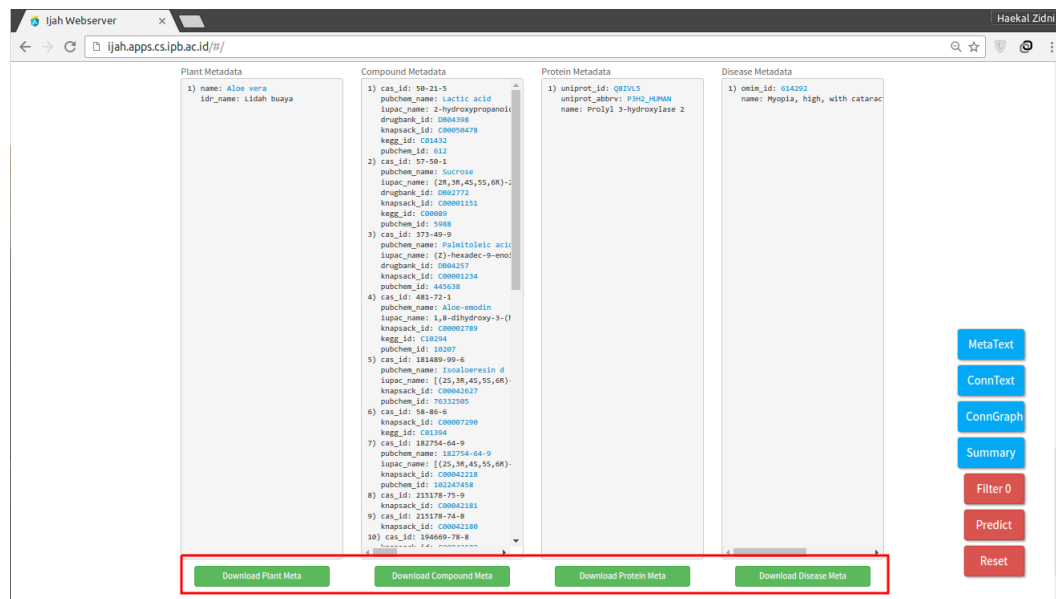
Gambar 2.14: Tombol Download untuk mengunduh file teks konektivitas

2.3.4 Metadata Text

Metadata Text berisi metadata (nama dan ID) dari semua entitas yang terlibat dalam proses ini. Pada bagian bawah, juga terdapat tombol Download untuk mengunduh teks Metadata ini. Pada metadata ini, jika ada item yang tidak ditampilkan pada salah satu entitas namun ada di entitas lainnya, artinya *value* item tersebut pada entitas tersebut tidak ada. Sebagai contoh, pada metadata Compounds, ada beberapa senyawa yang tidak memiliki nama PubChem sehingga tidak ditampilkan.



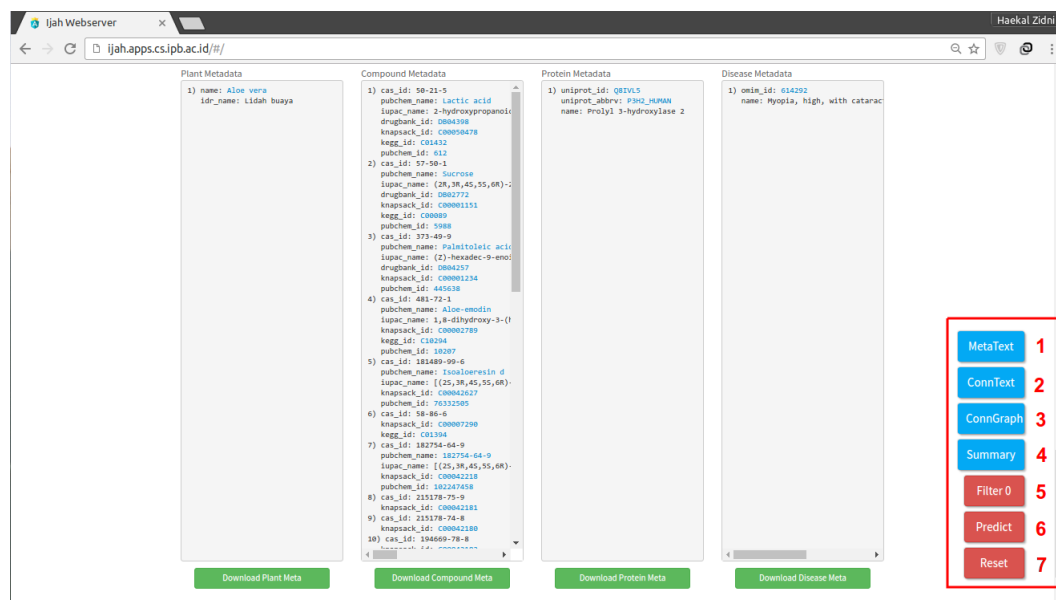
Gambar 2.15: Metadata Text Output pada Ijah Webserver



Gambar 2.16: Tombol Download untuk mengunduh file teks Metadata

2.4 Memodifikasi Output

Pada halaman output, terdapat *floating button* di sisi kanan bawah yang berisi beberapa fungsi.



Gambar 2.17: Floating button pada Ijah Webserver

Tombol-tombol pada *floating button* beserta fungsinya:

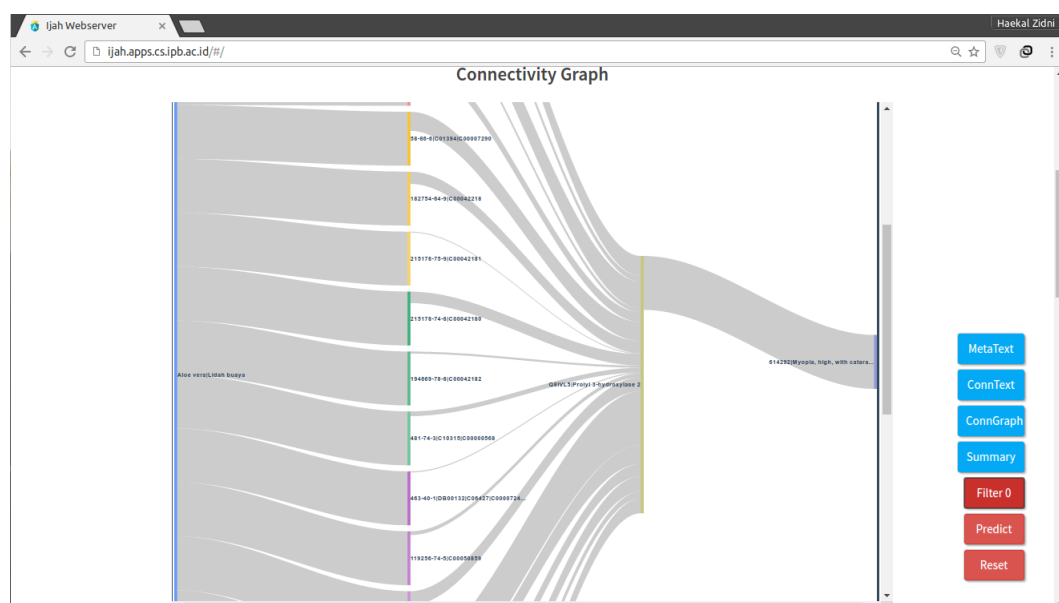
1. MetaText: jalan pintas menuju Metadata Text Output

2. **ConnText:** jalan pintas menuju **Connectivity Text Output**
3. **ConnGraph:** jalan pintas menuju **Connectivity Graph Output**
4. **Summary:** jalan pintas menuju **Summary**
5. **Filter:** akan dibahas pada bagian **Filter**
6. **Predict:** akan dibahas pada bagian **Predict**
7. **Reset:** mengosongkan seluruh hasil proses dan mengulang ke halaman awal.

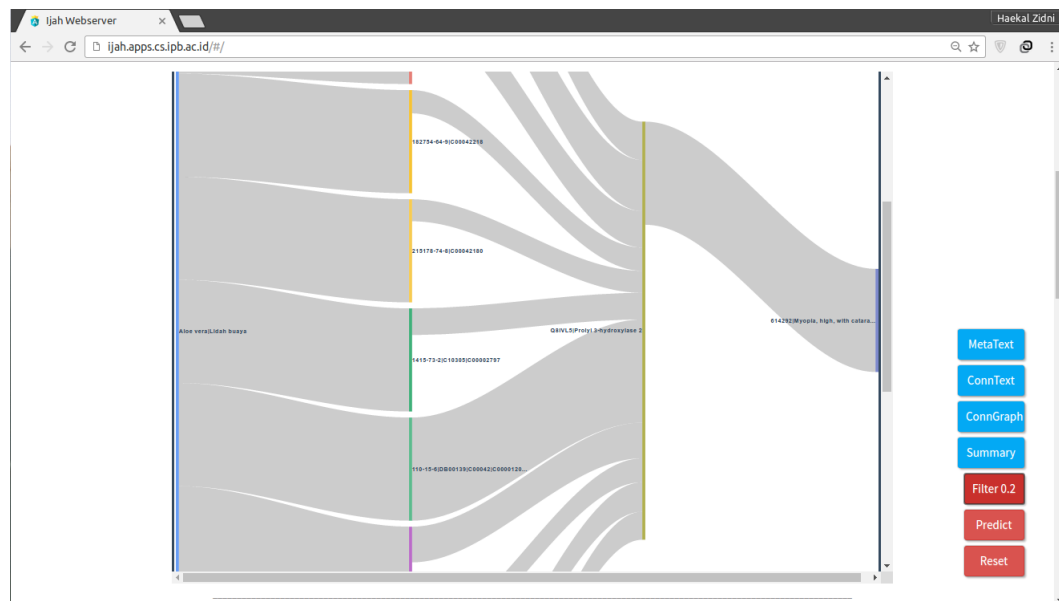
2.4.1 Filter

Tombol Filter berfungsi untuk menyaring skor konektivitas yang akan ditampilkan. Filter ini memiliki beberapa level yaitu:

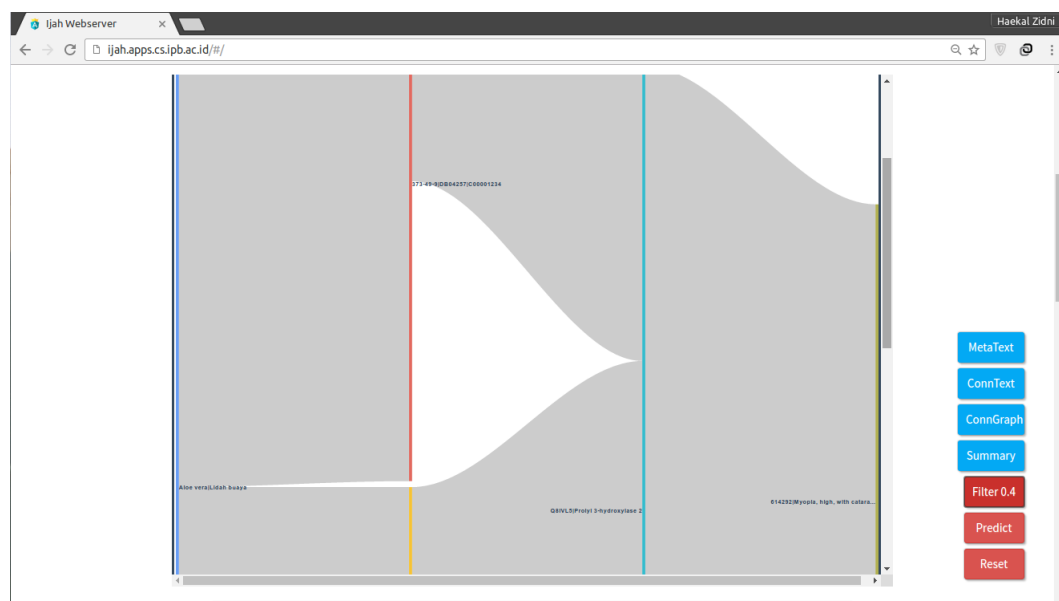
- 0 - Menampilkan keseluruhan konektivitas yang ada (minimum skor 0).
- 0.2 - Menampilkan konektivitas dengan skor minimal 0.2
- 0.4 - Menampilkan konektivitas dengan skor minimal 0.4
- 0.6 - Menampilkan konektivitas dengan skor minimal 0.6
- 0.8 - Menampilkan konektivitas dengan skor minimal 0.8
- 1 - Menampilkan konektivitas yang benar2 terhubung 100% *known by experiment* (skor 1).



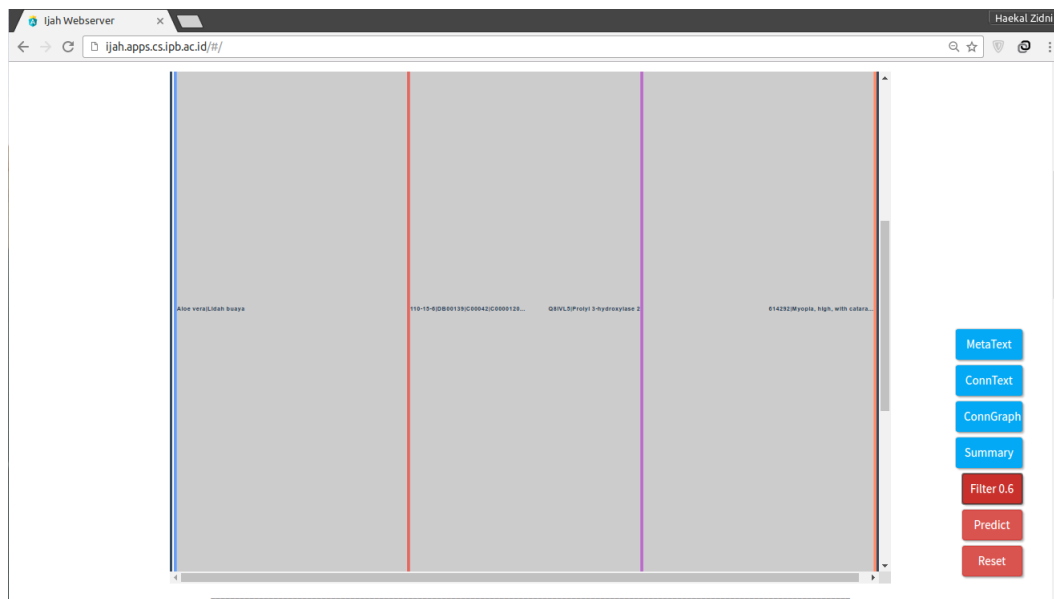
Gambar 2.18: Filter 0, menampilkan semua konektivitas



Gambar 2.19: Filter 0.2, menampilkan konektivitas minimal 0.2, output mulai berkurang



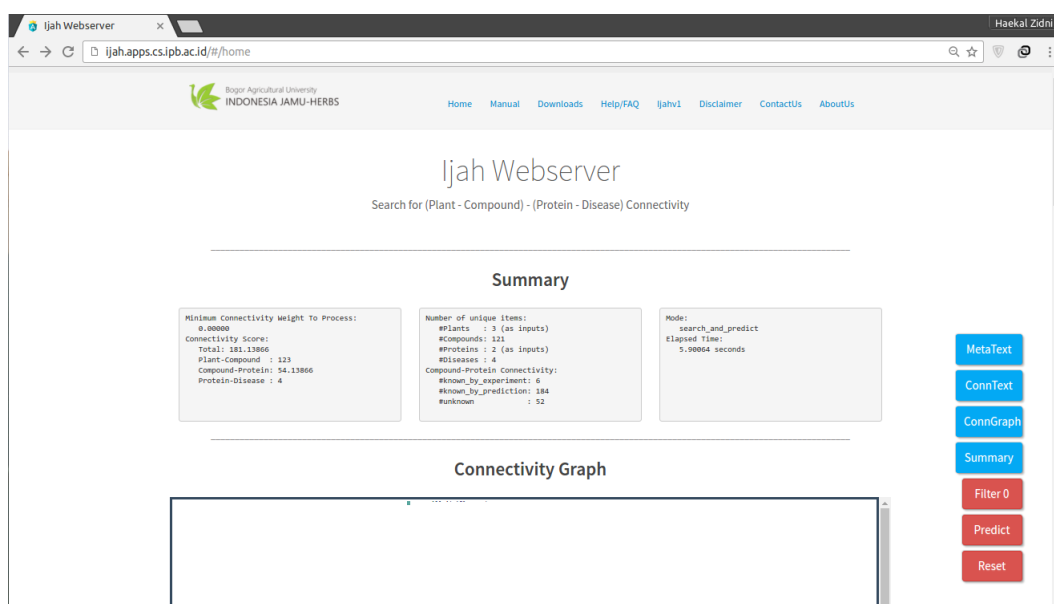
Gambar 2.20: Filter 0.4, menampilkan konektivitas minimal 0.4, output jauh berkurang karena konektivitas dengan skor minimal 0.4 semakin sedikit



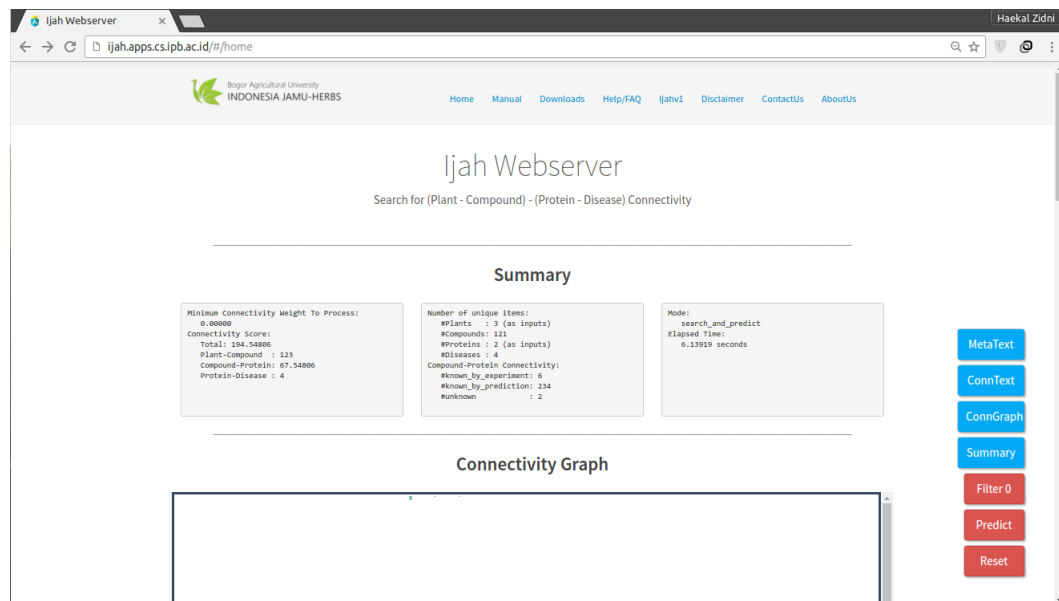
Gambar 2.21: Filter 0.6, menampilkan konektivitas minimal 0.6, hanya ada satu output yang muncul. Dalam kasus ini output yang tersisa hanya yang bernilai 1 (100% terkoneksi) sehingga filter 0.8 dan filter 1 memunculkan hasil yang sama

2.4.2 Predict

Ketika tombol eksekusi dijalankan, ada batas waktu prediksi 5 detik. Terkadang belum semua prediksi termuat pada saat output muncul, sehingga tombol **Predict** memberikan kesempatan untuk melanjutkan prediksi kembali selama 5 detik. Output yang dihasilkan mungkin akan bertambah seiring bertambahnya hasil prediksi.



Gambar 2.22: Salah satu contoh output. Nilai awal yaitu Known By Prediction sebanyak 184, dengan nilai konektivitas yang belum diketahui (Unknown) sebesar 52



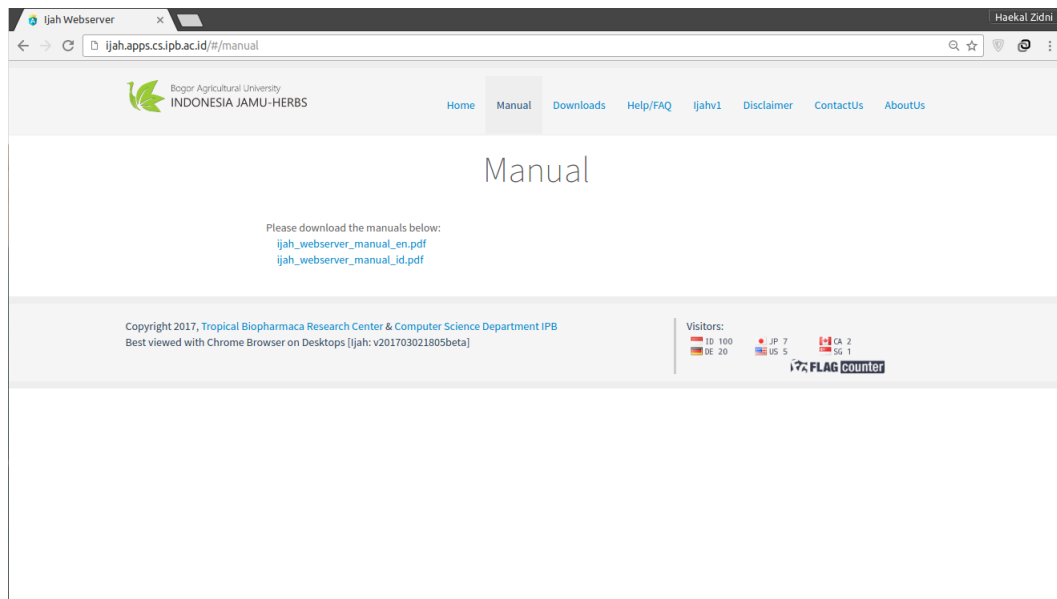
Gambar 2.23: Setelah dijalankan tombol Predict dan melakukan 5 detik prediksi tambahan, nilai Known By Prediction meningkat menjadi 234 dan Unknown berkurang hingga tersisa 2 saja

BAB 3

MENU-MENU

3.1 Manual

Menu *Manual* berisi *link* untuk mendownload file Manual penggunaan Ijah Webserver. Kedepannya, isi file Manual juga akan ditampilkan di halaman ini.

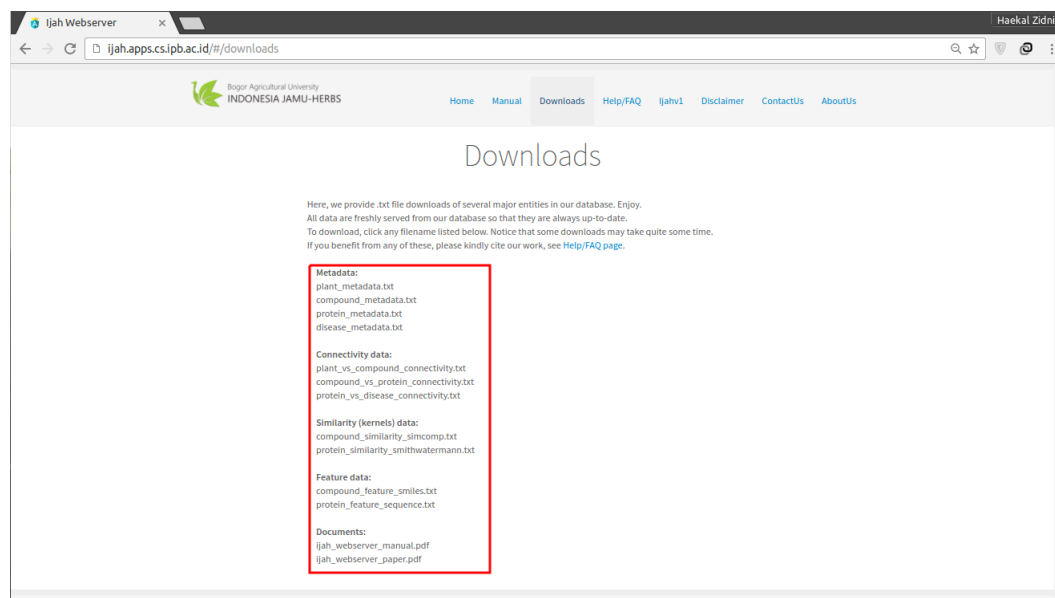


Gambar 3.1: Halaman Manual

3.2 Downloads

Menu *Downloads* menyediakan link untuk mengunduh Metadata seluruh item (tanaman, senyawa, protein, dan penyakit) yang ada dalam database Ijah Webserver. Juga disediakan data seluruh konektivitas (keterhubungan) antar item dan data lainnya seperti similarity data, data sekuens protein, dan lain lain.

Untuk mengunduh file pada halaman ini cukup klik nama file yang ingin diunduh



Gambar 3.2: Daftar file yang dapat didownload

3.2.1 Metadata

File yang dapat didownload pada kategori Metadata yaitu:

- **plant_metadata.txt** – Berisi metadata seluruh tanaman pada *database* Ijah Webserver.
- **compound_metadata.txt** – Berisi metadata seluruh senyawa (*compound*) pada *database* Ijah Webserver.
- **protein_metadata.txt** – Berisi metadata seluruh bioprotein pada *database* Ijah Webserver.
- **disease_metadata.txt** – Berisi metadata seluruh penyakit pada *database* Ijah Webserver.

3.2.2 Connectivity Data

File yang dapat didownload pada kategori Connectivity Data yaitu:

- **plant_vs_compound_connectivity.txt** – Berisi data konektivitas tanaman dengan senyawa beserta skor konektivitasnya pada *database* Ijah Webserver.
- **compound_vs_protein_connectivity.txt** – Berisi data konektivitas senyawa dengan protein beserta skor konektivitasnya pada *database* Ijah Webserver.

- **protein_vs_disease_connectivity.txt** – Berisi data konektivitas protein dengan penyakit beserta skor konektivitasnya pada *database* Ijah Webserver.

3.2.3 Similarity (kernels) data

- **compound_similarity_simcomp.txt**
- **protein_similarity_smithwatermann.txt**

3.2.4 Feature data

- **compound_feature_smiles.txt**
- **protein_feature_sequence.txt**

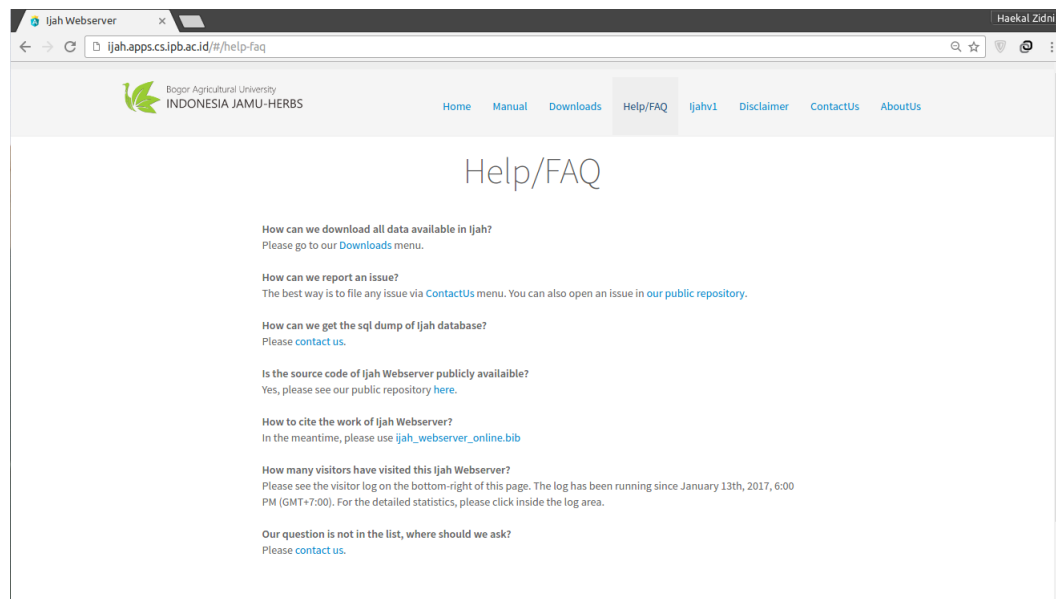
3.2.5 Documents

Dokumentasi Ijah Webserver

- **ijah_webserver_manual.pdf** – Manual penggunaan Ijah Webserver
- **ijah_webserver_paper.pdf** – Paper penelitian Ijah Webserver

3.3 Help/FAQ

Menu *Help/FAQ* berisikan beberapa pertanyaan umum (*Frequently Asked Questions*) beserta jawabannya.



Gambar 3.3: Halaman Help/FAQ

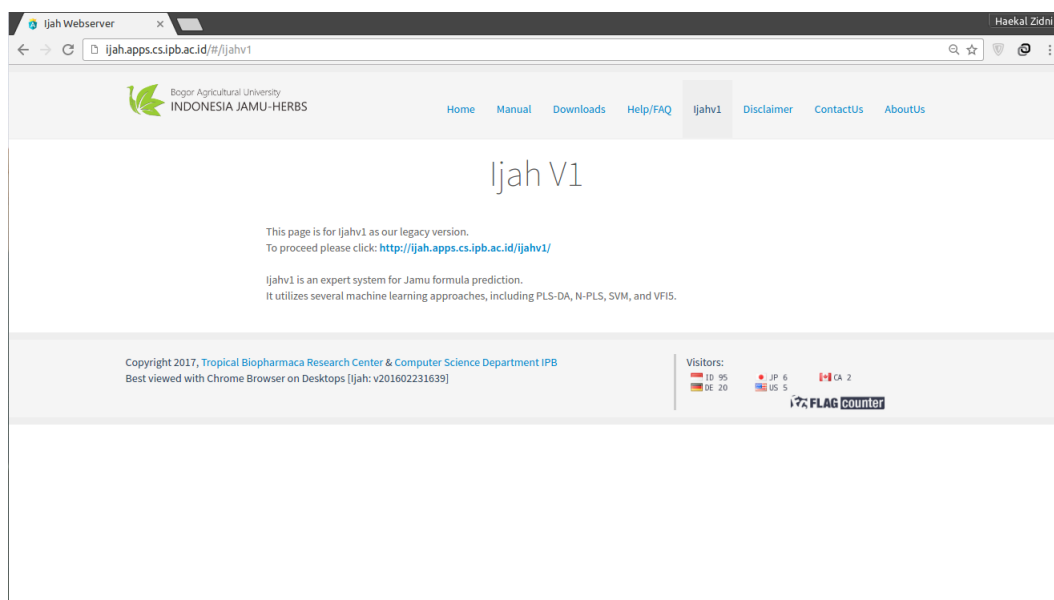
Menu FAQ ini tersedia dalam bahasa Inggris, berikut terjemahan dari pertanyaan pada menu FAQ menurut Ijah Webserver versi ini:

- **Q:** Bagaimana cara mengunduh semua data yang ada pada Ijah?
A: Silakan menuju menu **Downloads**.
- **Q:** Bagaimana cara melaporkan isu dan masalah?
A: Cara termudah yaitu dengan mengontak kami di menu **ContactUs**. Anda bisa juga menyampaikannya di repositori *code* kami. (Menuju repositori – lihat bab 1.3).
- **Q:** Bagaimana cara mendapatkan *SQL dump* dari *database* Ijah?
A: Silakan kontak tim kami di menu **ContactUs**.
- **Q:** Apakah *source code* Ijah tersedia secara publik?
A: Ya, silakan lihat repositori publik kami disini (Menuju repositori – silakan lihat bab 1.3).
- **Q:** Bagaimana cara mengutip karya Ijah Webserver?
A: Untuk saat ini silakan lihat di **ijah_webserver_online.bib**
- **Q:** Berapa kali Ijah Webserver telah dikunjungi?
A: Silakan lihat *visitor log* pada bagian kanan-bawah halaman Ijah Webserver. *Log* ini telah berjalan sejak 13 Januari 2017 pukul 18:00 (zona waktu GMT+7:00). Untuk statistik detail silakan klik pada area *visitor log*. (*Visitor log* ada pada bab 1.2.7)

- **Q:** Mengapa tata halaman terlihat berantakan? Bagaimana solusinya?
A: Kami sedang berusaha mengerjakan tata halaman yang adaptif dan bisa menyesuaikan dengan resolusi monitor. Untuk sementara waktu, mohon gunakan *zoom out/in* pada *browser* anda.
- **Q:** Pertanyaan saya tidak ada pada halaman ini, dimana kami bisa mengajukan pertanyaan?
A: Silakan kontak kami di menu **ContactUs**.

3.4 Ijahv1

Menu *Ijahv1* berisi link menuju versi awal Ijah (Ijah versi 1, atau Ijahv1)

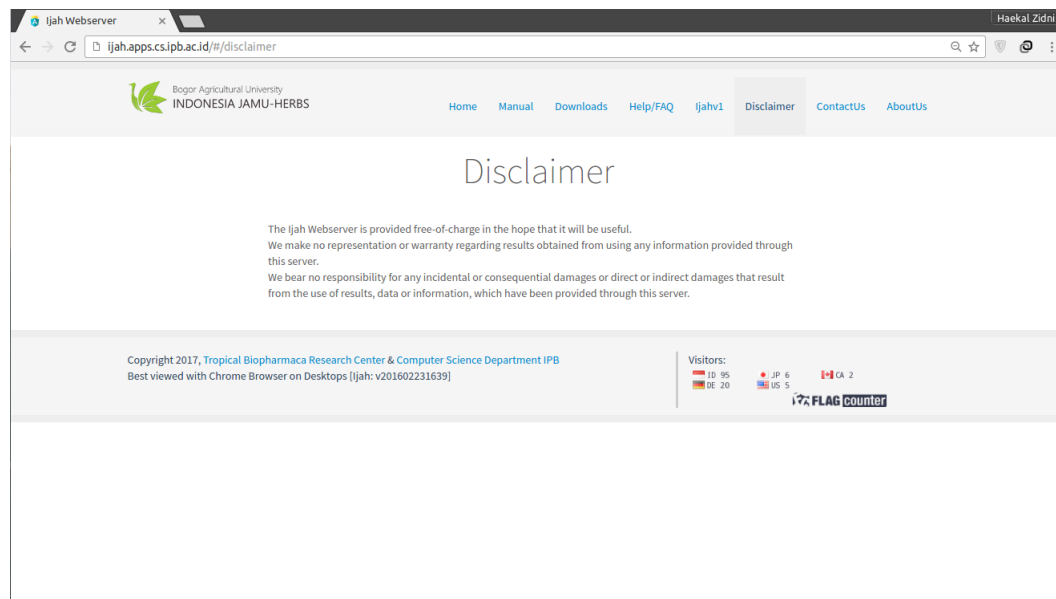


Gambar 3.4: Isi halaman menu Ijahv1

Jika anda ingin mengakses Ijahv1 silakan mengunjungi <http://ijah.apps.cs.ipb.ac.id/ijahv1/>

3.5 Disclaimer

Menu *Disclaimer* berisikan pernyataan batasan *responsibility* pihak Ijah Webserver atas penggunaan hasil *output* dari Ijah Webserver.



Gambar 3.5: Isi halaman Disclaimer

Terjemahan dari isi halaman Disclaimer yaitu:

“Ijah Webserver ini gratis, dengan harapan dapat membantu banyak pihak. Namun kami tidak menjamin akibat dari penggunaan informasi dari Webserver ini. Dan kami tidak bertanggungjawab atas insiden atau kerusakan baik langsung maupun tidak langsung yang diakibatkan oleh penggunaan data atau informasi yang kami sediakan di Webserver ini.”

3.6 ContactUs

Menu *ContactUs* merupakan sarana komunikasi antara pengguna dengan tim pengembang Ijah Webserver. Dengan mengisi tanggapan/keluhan/saran pada form Contact Us, tanggapan anda akan terkirim ke E-mail kami.

The screenshot shows the 'Contact Us' page of the Ijah Webserver. The page layout includes a header with the IPB logo and navigation links (Home, Manual, Downloads, Help/FAQ, Ijahv1, Disclaimer, ContactUs, AboutUs). The main content area is titled 'Contact Us' and contains a form with the following elements:

- Subject:** A dropdown menu with options: @ Question @ Error/Bugs @ Wishlist @ Complaint @ Suggestion @ Testimony @ Other. (Numbered 1)
- Message:** A large text area for the user's message. (Numbered 2)
- Name:** An input field with placeholder text 'YourFirstName YourLastName'. (Numbered 3)
- Email:** An input field with placeholder text 'you@yourEmail'. (Numbered 4)
- Affiliation:** An input field with placeholder text 'Your university, organization, company, etc'. (Numbered 5)
- Submit:** A green button labeled 'Submit'. (Numbered 6)

The footer contains copyright information: 'Copyright 2017, Tropical Biopharmaca Research Center & Computer Science Department IPB. Best viewed with Chrome Browser on Desktops [Ijah: v201602231639]' and a visitor counter showing 10 visitors from 95 countries, with a 'FLAG counter' logo.

Gambar 3.6: Halaman ContactUs pada Ijah Webserver: (1) Pemilihan Subject; (2) Message box; (3) Name box; (4) E-mail box; (5) Affiliation box; (6) Tombol Submit;

3.6.1 Topik

Pada bagian *Subject* anda akan memilih topik tanggapan anda

- **Question:** mengajukan pertanyaan.
- **Error/Bugs:** memberitahukan adanya kesalahan.
- **Wishlist:** menyampaikan saran fitur apa yang diinginkan pada versi selanjutnya.
- **Complaint:** menyampaikan keluhan dalam penggunaan.
- **Suggestion:** memberikan saran.
- **Testimony:** memberikan testimoni tentang Ijah Webserver.
- **Other:** untuk menyampaikan hal lain yang tidak termasuk dalam kategori diatas.

3.6.2 Isi Pesan

Isikan pesan anda pada bagian *Message*. Jumlah karakter tidak dibatasi, jadi mohon untuk tidak menggunakan singkatan jika tidak diperlukan demi memudahkan tim kami dalam membaca tanggapan anda.

3.6.3 Isi Data Diri Anda

Setelah menuliskan tanggapan, silakan isi data diri anda, nama pada bagian *Name*, alamat Email anda pada bagian *Email*, dan afiliasi anda (organisasi, universitas, atau perusahaan) pada bagian *Affiliation*.

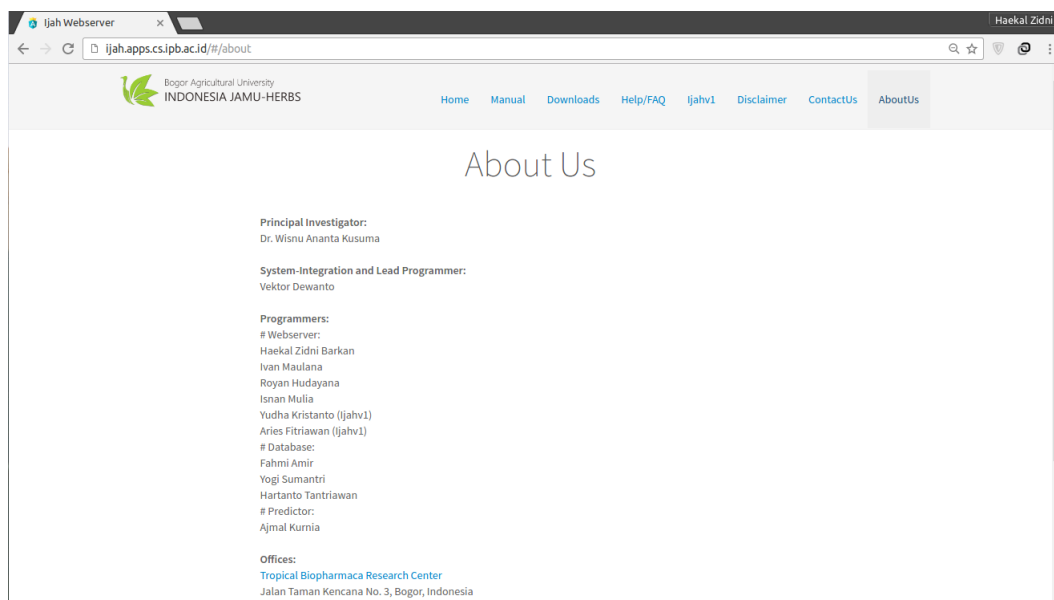
Penting: Nama dan alamat E-mail *wajib* diisi.

3.6.4 Kirim Tanggapan

Setelah semua data terisi lengkap, tekan **Submit** dan tanggapan anda akan terkirim.

3.7 AboutUs

Menu *AboutUs* berisi info tentang tim pengembang Ijah Webserver



Gambar 3.7: Isi halaman About Us

Tim pengembang Ijah Webserver yaitu:

- Principal Investigator:
Dr. Wisnu Ananta Kusuma
- System-Integration and Lead Programmer:
Vektor Dewanto
- Programmers:
Webserver:

- Haekal Zidni Barkan
- Ivan Maulana
- Royan Hudayana
- Isnan Mulia
- Yudha Kristanto (Ijahv1)
- Aries Fitriawan (Ijahv1)

Database:

- Fahmi Amir
- Yogi Sumantri
- Hartanto Tantriawan

Predictor:

- Ajmal Kurnia

BAB 4

PANGKALAN DATA (*DATABASE*) RUJUKAN

Repositori untuk *database* Ijah Webserver dapat dilihat di <https://github.com/tttor/csipb-jamu-prj/tree/master/database>. Repositori *database* Ijah terbagi menjadi tiga bagian yaitu:

- **Crawler** – berisi *code* untuk menarik data (*crawling*) dari pangkalan data yang menjadi referensi.
- **Insertter** – berisi *code* untuk memasukkan data hasil *crawling* ke dalam *database* Ijah.
- **Ref** – berisi referensi pangkalan data yang digunakan. Referensi ini akan terus diperbarui.

4.1 Data Konektivitas

Konektivitas (*connectivity*) antar entitas, sering juga disebut interaksi (*interaction*) atau relasi (*relation*), menyatakan hubungan atau keterkaitan antar dua entitas, dalam konteks ini hubungan dari entitas pada Drug-side dengan entitas pada Target-side.

Hingga versi ini, pangkalan data yang sudah dimasukkan sebagai rujukan yaitu KNApSAcK, DrugBank, KEGG, Uniprot, OMIM, CAS, dan PDB.

4.1.1 *Plant-Compound connectivity*

4.1.1.1 Knapsack

KNApSAcK [5?] adalah pangkalan data yang berisi informasi hubungan antara spesies tanaman dengan metabolit, yang sangat berguna untuk membantu riset metabolomik. Inti pangkalan data KNApSAcK saat ini telah berisi 101,500 data hubungan spesies-metabolit yang mencakup 20,741 spesies tanaman dan 50,048 metabolit. KNApSAcK dapat diakses di alamat URL http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK_Family/.

4.1.1.2 StreptomeDB

StreptomeDB adalah pangkalan data bioinformatika farmasi yang memiliki fitur sebagai berikut:

- 1,600 produk alami
- 600 organisme produsen
- 1,000 referensi literatur
- 350 aktivitas
- 1,800 konektivitas senyawa-aktivitas
- 400 konektivitas senyawa-rute sintetis
- sistem klasifikasi filogenetik untuk ratusan spesies

StreptomeDB dapat diakses di alamat URL **<http://www.pharmaceutical-bioinformatics.de/streptomedb/>**.

4.1.1.3 Dr. Duke's Ethnobotanical Databases

Pangkalan data ini berisi informasi tanaman etnobotani, penggunaan secara etnobotanikal, senyawa kimia, dan data aktivitas biologi. Disini terdapat 49,788 entri. Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases dapat diakses di alamat URL **<https://phytochem.nal.usda.gov/phytochem/search>**.

4.1.2 *Compound-Protein connectivity*

4.1.2.1 DrugBank

DrugBank [3] adalah pangkalan data yang berisi informasi obat dan target obat. Sebagai sumber informasi untuk bioinformatika dan *cheminformatics* (informatika kimia), DrugBank menggabungkan rincian data obat (sifat kimia, farmakologi, dan data farmasi) dengan informasi dari target obat (sekuens, struktur, dan *pathway*). DrugBank memiliki cakupan yang luas, referensi yang komprehensif dan deskripsi data yang sangat rinci. DrugBank sendiri banyak digunakan oleh industri obat, ahli kimia obat, apoteker, dokter, mahasiswa, dan masyarakat umum. DrugBank dapat diakses di alamat URL **<http://www.drugbank.ca/>**.

4.1.2.2 Supertarget + Matador

Supertarget adalah pangkalan data yang berisi informasi hubungan target obat (*drug-target relations*). Terdiri dari tiga entitas berbeda yaitu **Drugs**, **Proteins**, dan **Side Effects** (Obat, Protein, dan Efek Samping). Supertarget dapat diakses di alamat URL <http://insilico.charite.de/supertarget/>.

4.1.2.3 Transformer

Transformer adalah pangkalan data yang berisi informasi transformasi dan transportasi xenobiotik dalam tubuh manusia. Terdapat pula informasi interaksi enzim fase I dan II dan transporter obat, juga memiliki data obat tradisional Tiongkok. Transformer dapat diakses di alamat URL <http://bioinformatics.charite.de/transformer/>.

4.1.2.4 Antibiotic'ome

Antibiotic'ome adalah pangkalan data yang menyediakan informasi hubungan retrobiosintesis dari struktur produk alami yang dicocokkan dengan antibiotik yang telah diketahui targetnya, dengan tujuan memprediksi target dari molekul yang diinputkan pengguna. Antibiotic'ome dapat diakses di alamat URL <https://magarveylab.ca/antibioticome/>.

4.1.2.5 Therapeutic Target Database (TTD)

Therapeutic Target Database (TTD) adalah pangkalan data yang menyediakan informasi protein therapeutic dan target asam nukleat yang telah dipelajari dan diteliti, penyakit yang ditarget, informasi pathway dan obat-obatan terkait yang diarahkan ke target tersebut. Dalam pangkalan data ini juga terdapat data fungsi target, sekuens protein, struktur kimia 3D, sifat ikatan ligan, penamaan enzim dan struktur obat, kelas terapi, dan status pengembangan klinis. TTD dapat diakses di alamat URL <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>.

4.1.2.6 BindingDB

BindingDB adalah pangkalan data yang menyediakan informasi afinitas ikatan dan interaksi protein yang diperhitungkan sebagai target obat. BindingDB memiliki 1,314,279 binding data untuk 6,799 target protein dan 582,607 molekul. BindingDB dapat diakses di alamat URL <http://www.bindingdb.org/bind/index.jsp>.

4.1.2.7 PubChem

PubChem adalah pangkalan data molekul kimia dan aktivitasnya terhadap penelitian biologi. Sistem ini dipelihara oleh National Center for Biotechnology Information (NCBI), suatu komponen pada National Library of Medicine, yang merupakan bagian dari National Institutes of Health (NIH) Amerika Serikat. PubChem dapat diakses secara gratis melalui suatu web user interface. Jutaan struktur senyawa dan dataset pemerianannya dapat didownload secara gratis melalui FTP. PubChem memuat pemerian bahan-bahan dan molekul kecil yang terbentuk kurang dari 1000 atom dan 1000 ikatan. Lebih dari 80 vendor database berkontribusi pada database PubChem yang terus bertumbuh. PubChem dapat diakses di alamat URL <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.

4.1.2.8 GLIDA: GPCR-Ligand Database

GPCR-Ligand Database (GLIDA) adalah pangkalan data GPCR dan ligan yang terkait. GPCR memiliki fitur sistem informasi kompleks yang mencakup informasi biologis GPCR dan informasi kimiawi dari ligannya, juga fitur pencarian silang antara GPCR dan ligannya. GLIDA dapat diakses di alamat URL <http://pharminfo.pharm.kyoto-u.ac.jp/services/glida/>.

4.1.2.9 PDTD: Potential Drug Target Database

PDTD adalah pangkalan data yang bersifat informatif sekaligus struktural dari target obat baik yang telah diketahui maupun yang masih berupa potensi. PDTD memiliki 1,207 entri yang mencakup 841 target obat potensial dari Protein Data Bank (PDB). PDTD dapat diakses di alamat URL <http://www.dddc.ac.cn/pdtd/>.

4.1.2.10 PolySearch

PolySearch adalah pangkalan data yang dapat mencari hubungan antar gen, jaringan, penyakit, nama gen/protein, kompartemen sel, mutasi, obat, dan metabolit. PolySearch dapat diakses di alamat URL <http://wishart.biology.ualberta.ca/polysearch/index.htm>.

4.1.3 *Protein-Disease connectivity*

4.1.3.1 Uniprot

UniProt [1] (Universal Protein Resource) adalah pangkalan data yang berisi informasi sekuens protein dan data anotasinya. UniProt adalah hasil kolaborasi antara

European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI), *Swiss Institute of Bioinformatics (SIB)*, dan *Protein Information Research (PIR)*. Pangkalan data UniProt sendiri terbagi menjadi beberapa bagian, yaitu **UniProtKB** (Knowledge Base), **UniRef** (Reference Cluster), dan **UniParc** (UniProt Archive). UniProt dapat diakses di alamat URL <http://www.uniprot.org/>.

4.1.3.2 KEGG

KEGG [2] (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) adalah pangkalan data yang mengintegrasikan berbagai data terkait pathway, genom organisme, gen protein, similaritas sekuens gen, glycans, reaksi biokimia, penamaan enzim, obat-obatan, penyakit, ortologi fungsional, dan zat-zat terkait kesehatan (*health-related substances*). KEGG dapat diakses di alamat URL <http://www.kegg.jp/kegg/>.

4.2 Metadata

Metadata merupakan informasi mendetail dari setiap entitas, sebagai contoh pada Plant, metadata yang ada yaitu nama Latin dan nama Indonesia, atau pada Protein metadata yang ada yaitu ID Uniprot, nama Uniprot, dan ID Protein Data Bank (PDB).

4.2.1 Plant Metadata

Metadata tanaman dirujuk dari

4.2.1.1 KNApSACk

Silakan lihat bagian 4.1.1.1.

4.2.1.2 Herbalis Nusantara

Pangkalan data ini dimiliki oleh Asosiasi Herbalis Nusantara, dan menyimpan informasi ilmiah tentang tanaman-tanaman obat lokal. Dapat diakses di alamat URL <http://www.herbalisnusantara.com/obatherbal/>.

4.2.1.3 The Plant List

The Plant List adalah daftar dari seluruh spesies tanaman yang diketahui. The Plant List merupakan hasil kolaborasi *Royal Botanic Gardens* (Inggris) dan *Kew and*

Missouri Botanical Garden (USA). The Plant List dapat diakses di alamat URL <http://www.theplantlist.org/>.

4.2.2 Compound Metadata

Metadata senyawa dirujuk dari

4.2.2.1 KEGG

Silakan lihat bagian 4.1.3.2.

4.2.2.2 DrugBank

Silakan lihat bagian 4.1.2.1.

4.2.2.3 CAS

CAS (Chemical Abstract Services) adalah pangkalan data yang berisikan berbagai informasi konten ilmu kimia, diantaranya CHEMLIST yang merupakan pangkalan data senyawa kimia. CAS dapat diakses di alamat URL <http://www.cas.org/content/cas-databases>.

4.2.3 Protein Metadata

Metadata protein dirujuk dari

4.2.3.1 Uniprot

Silakan lihat bagian 4.1.3.1.

4.2.3.2 PDB

PDB (Protein Data Bank) adalah pangkalan data yang berisikan berbagai informasi struktur protein, asam nukleat, dan struktur kompleks lainnya yang ditujukan untuk membantu studi dan riset pertanian dan *biomedicine*. PDB dapat diakses pada alamat URL <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>.

4.2.3.3 HPRD

HPRD (Human Protein Reference Database) adalah pangkalan data referensi untuk domain arsitektur protein, modifikasi protein post-translasional, jaringan interaksi

dan asosiasi terhadap penyakit untuk setiap protein pada proteom manusia. HPRD dapat diakses di alamat URL <http://hprd.org/>.

4.2.4 Disease Metadata

Metadata penyakit dirujuk dari

4.2.4.1 OMIM

OMIM (Online Mendelian Inheritance in Man) adalah pangkalan data yang berisi informasi gen manusia, kelainan genetik, dan ciri fenotipe genetik. OMIM berfokus pada hubungan antara gen dengan fenotipe. Dari 23,000 entri pada OMIM, 8,425 diantaranya merepresentasikan fenotipe sedangkan sisanya merepresentasikan gen. OMIM dapat diakses pada alamat URL <http://www.omim.org/>.

4.2.4.2 HPO

HPO (Human Phenotype Ontology) adalah pangkalan data yang menyediakan data abnormalitas fenotipe pada penyakit-penyakit pada manusia. Setiap istilah dalam HPO mendeskripsikan suatu gejala abnormalitas fenotipe. Saat ini HPO memuat 11,000 istilah dan 115,000 rujukan penyakit hereditas. HPO dapat diakses pada alamat URL <http://human-phenotype-ontology.github.io/>.

4.2.4.3 ORPHAnet

Orphanet adalah portal referensi informasi untuk penyakit langka dan obatnya secara khusus. Orphanet dapat diakses pada alamat URL <http://www.orpha.net/consor/cgi-bin/index.php>.

BAB 5

METODE PREDIKSI

Pada bab ini akan dibahas sedikit mengenai metode prediksi yang digunakan pada *predictor* Ijah Webserver.

5.1 BLM-NII

BLM-NII [4] adalah metode prediksi yang merupakan pengembangan dari metode BLM (*Bipartite Local Model*). BLM sendiri sudah terbukti efektif dalam prediksi interaksi target-obat, namun karena bersifat *local model*, terdapat kelemahan yaitu tidak bisa memprediksi obat baru atau target baru yang belum pernah diketahui interaksinya sebelumnya. Oleh karena itu BLM dikembangkan dengan menambahkan prosedur NII (*Neighbor-based Interaction-profile Inferring*) untuk menangani prediksi kandidat obat baru atau target baru tersebut. Secara spesifik, profil interaksi yang diinferensi akan diperlakukan sebagai label informasi dan digunakan sebagai model pembelajaran untuk mengenali kandidat tersebut. Kemampuan ini penting untuk mencari target dari kandidat obat baru dan sebaliknya, mencari obat dari kandidat target baru. Metode NII menurunkan model data latih dari tetangga (*neighbor*) dari kandidat yang akan diinferensi. Definisi *neighbor* pada konteks ini yaitu entitas lain (drug atau target) yang memiliki kemiripan tinggi dengan entitas kandidat. Kemiripan ditentukan dari struktur kimia.

5.2 WNN-GIP

WNN-GIP [6] adalah metode prediksi yang ditujukan untuk memprediksi interaksi senyawa dan obat baru yang belum diketahui interaksinya. Metode ini menggunakan interaksi obat yang sudah diketahui sebelumnya untuk memprediksi yang baru dengan menggunakan algoritma *regularized least square algorithm* yang menggabungkan kernel yang dikonstruksi dari profil interaksi senyawa obat dengan target. Profil interaksi ini dibangun dengan algoritme WNN (*Weighted Nearest Neighbor*) menggunakan informasi kimia dan informasi interaksi yang sudah diketahui dalam dataset. WNN sendiri dapat digunakan sendiri secara *standalone* untuk memprediksi interaksi obat baru. Selain digunakan secara *standalone*, metode ini juga dapat digabungkan dengan metode GIP. Metode-metode ini dapat disesuaikan

juga untuk memprediksi interaksi target baru atau bahkan keduanya (obat daru dan target baru).

DAFTAR PUSTAKA

- [1] A. Bateman and et.al. UniProt: a hub for protein information. *Nucleic Acids Res.*, 43(Database issue):D204–212, Jan 2015.
- [2] M. Kanehisa, S. Goto, Y. Sato, M. Furumichi, and M. Tanabe. KEGG for integration and interpretation of large-scale molecular data sets. *Nucleic Acids Res.*, 40(Database issue):D109–114, Jan 2012.
- [3] C. Knox, V. Law, T. Jewison, P. Liu, S. Ly, A. Frolkis, A. Pon, K. Banco, C. Mak, V. Neveu, Y. Djoumbou, R. Eisner, A. C. Guo, and D. S. Wishart. DrugBank 3.0: a comprehensive resource for 'omics' research on drugs. *Nucleic Acids Res.*, 39(Database issue):D1035–1041, Jan 2011.
- [4] Jian-Ping Mei, Chee Keong Kwoh, Peng Yang, Xiaoli Li, and Jie Zheng. Drug-target interaction prediction by learning from local information and neighbors. *Bioinformatics*, 29(2):238–245, 2013.
- [5] K. Nakamura, N. Shimura, Y. Otabe, A. Hirai-Morita, Y. Nakamura, N. Ono, M. A. Ul-Amin, and S. Kanaya. KNApSACk-3D: a three-dimensional structure database of plant metabolites. *Plant Cell Physiol.*, 54(2):e4, Feb 2013.
- [6] T. van Laarhoven and E. Marchiori. Predicting Drug-Target Interactions for New Drug Compounds Using a Weighted Nearest Neighbor Profile. *PLoS ONE*, 8(6):e66952, 2013.