**PROPOSAL PROYEK PENELITIAN TERAPAN**

“**JELAJAH MEDIKA**– *Web-Based Drug Target Prediction*”



Disusun oleh:   
**Kelompok 5**

Husni Fadhilah Dhiya Ul Haq 23523034

I Putu Pawesi Siantika 23523035

**PROGRAM STUDI MAGISTER INFORMATIKA**

**INSTITUT TEKNOLOGI BANDUNG**

**2024**

Daftar isi

[1. Pendahuluan 4](#_Toc160014708)

[1.2. Tujuan Proyek 6](#_Toc160014709)

[1.3. Manfaat Proyek 6](#_Toc160014710)

[1.3.1. Untuk Organisasi 6](#_Toc160014711)

[1.3.2. Untuk Pemangku Kepentingan 7](#_Toc160014712)

[1.3.3. Analisis SWOT 7](#_Toc160014713)

[2. Cakupan Proyek 10](#_Toc160014714)

[2.1. Ruang Lingkup 10](#_Toc160014715)

[2.2.1. Waktu 10](#_Toc160014716)

[2.2.2. Anggaran 11](#_Toc160014717)

[2.2.3. Sumber Daya 11](#_Toc160014718)

[2.2.4. Produk 11](#_Toc160014719)

[3. Studi Literatur 12](#_Toc160014720)

[3.2. Analisis Arsitektur Monolitik dan Pendekatan Alternatif dalam Pengembangan Aplikasi *Machine Learning* 16](#_Toc160014721)

[4. Metodologi proyek 18](#_Toc160014722)

[5. Rencana kegiatan proyek 19](#_Toc160014723)

[4.1. *Milestone* Utama 19](#_Toc160014724)

[4.2. Work-Breakdown Structure dan Gant Chart 19](#_Toc160014725)

[5. Teknologi dan Proses 24](#_Toc160014726)

[5.1. Teknologi 24](#_Toc160014727)

[6. rencana komunikasi 26](#_Toc160014728)

[6.1. Alat dan Frekuensi 26](#_Toc160014729)

[7. Manajemen Risiko 27](#_Toc160014730)

[8. Target Hasil dan Kriteria Penerimaan 30](#_Toc160014731)

[8.1. Hasil yang Diharapkan 30](#_Toc160014732)

[9. Pemantauan dan Evaluasi 33](#_Toc160014733)

[10. Struktur Organisasi Proyek 35](#_Toc160014734)

[11. Rencana Anggaran Biaya 36](#_Toc160014735)

[12. Kesimpulan 38](#_Toc160014736)

[12.1. Ringkasan Proposal 38](#_Toc160014737)

[12.2. Seruan untuk Tindakan 38](#_Toc160014738)

[Daftar Pustaka 49](#_Toc160014739)

# Pendahuluan

* 1. **Latar Belakang**

Penggunaan kembali obat merupakan strategi yang memanfaatkan obat-obat yang sudah ada untuk menemukan penggunaan terapeutik baru, yang menawarkan solusi lebih cepat dan lebih ekonomis dibandingkan dengan proses pengembangan obat baru. Strategi ini bergantung pada pemahaman mendalam tentang interaksi obat dengan target di dalam tubuh untuk mengidentifikasi manfaat terapeutik yang tidak terduga. Penelitian oleh Zhou dkk. (2015) menunjukkan bahwa analisis interaksi obat dapat mengungkap wawasan baru tentang efek dan aplikasi potensial obat, sementara teknik komputasi seperti faktorisasi matriks probabilistik yang dibahas oleh Cobanoglu dkk. (2013) terbukti efektif dalam mengidentifikasi kandidat penggunaan ulang yang menjanjikan.

Dari perspektif ekonomi, penggunaan kembali obat berpotensi menurunkan biaya dan mempersingkat waktu yang dibutuhkan untuk pengembangan terapi baru. Hal ini dikarenakan pemanfaatan obat yang telah disetujui dan memiliki profil keamanan yang jelas mengurangi risiko kegagalan. Menurut Pushpakom dkk. (2018), strategi ini menawarkan keuntungan dengan memanfaatkan senyawa yang sudah teruji, sehingga mengurangi biaya pengembangan dan mempercepat waktu masuk ke pasar.

Aplikasi *web* yang sudah ada seperti DT-Web, TargetNet, dan DINIES, memainkan peran penting dalam prediksi interaksi obat-target (DTI). DT-Web (Alaimo dkk. 2015) menggunakan algoritma DT-Hybrid untuk prediksi DTI, TargetNet (Yao dkk. 2016) memprediksi aktivitas molekul dengan model Naïve Bayes dan sidik jari molekuler, sedangkan DINIES (Yamanishi dkk. 2014) mengintegrasikan berbagai jenis data biologis untuk prediksi DTI. Meskipun teknologi ini menawarkan kemajuan signifikan, terdapat keterbatasan seperti kemampuan adaptasi, generalisasi model, dan integrasi data yang membatasi efektivitasnya.

Solusi untuk mengatasi keterbatasan ini adalah dengan menerapkan teknologi *knowledge graph* (KG), yang menawarkan kerangka kerja yang lebih dinamis dan fleksibel. Grafik pengetahuan memungkinkan integrasi berbagai jenis data dan hubungan yang kompleks, yang dapat meningkatkan akurasi prediksi DTI. Pendekatan ini, seperti yang dijelaskan oleh Gaudelet dkk. (2021), dapat memfasilitasi pemahaman yang lebih mendalam tentang hubungan obat-target dan meningkatkan efisiensi penemuan obat. Sementara itu menurut Zhang dkk. (2023) penggunaan *knowledge graph* dengan memanfaatkan *neural network* telah terbukti efektif dalam menangkap dan memanfaatkan hubungan antara obat dan protein, memberikan dukungan kuat untuk interpretabilitas biologis dalam aplikasi DTI dan DTA.

Aplikasi DT-Web dan TargetNet menggunakan arsitektur monolitik, yang mengintegrasikan seluruh logika aplikasi menjadi satu. Menurut Yokohama (2019) dan Serban (2019), pendekatan ini menimbulkan masalah terkait stabilitas. Dalam konteks aplikasi pembelajaran mesin dengan arsitektur monolitik, terdapat isu *error* berantai, di mana perubahan format data pada model logika dapat berdampak pada keseluruhan logika aplikasi, seperti diungkapkan oleh Hornerman A dan rekan-rekannya (2019). Oleh karena itu, sangat dianjurkan untuk memisahkan logika-logika yang ada untuk memfasilitasi proses *debugging* dan untuk meningkatkan stabilitas sistem, seperti disarankan oleh Yokohama dan kawan-kawan (2019). Berbagai metode telah diusulkan untuk mengatasi masalah ini, seperti penerapan arsitektur *Model-Service-Client + Retraining* oleh Runyu (2020), serta pola arsitektur *gateway* oleh Yokohama dan rekan-rekannya (2019). Pola *Model-Service-Client + Retraining* dipilih untuk proyek ini karena keunggulannya dalam hal monitoring dan retraining model untuk menjaga akurasi bahkan meningkatkan akurasi model prediksi.

Oleh karena itu, proposal ini merekomendasikan pembangunan sebuah aplikasi berbasis *web* yang diberi nama “Jelajah Medika”. Aplikasi ini dirancang untuk memanfaatkan model yang didasarkan pada GNN *(Graph Neural Network)* dan *Knowledge Graph* dalam memprediksi interaksi antara obat dan targetnya. Tujuan utama dari “Jelajah Medika” adalah untuk mengatasi berbagai tantangan yang telah diuraikan sebelumnya, serta mempercepat proses penemuan terapeutik baru.

## Tujuan Proyek

Tujuan dari proyek ini adalah mengembangkan sebuah aplikasi berbasis *web* untuk memprediksi hubungan antara obat dengan target dengan menggunakan model GNN *(Graph Neural Network)* dan *Knowledge Graph* untuk membantu *stakeholder* di bidang farmasi dalam menemukan terapeutik baru.

## Manfaat Proyek

Manfaat yang dapat diperoleh dalam proyek penelitian ini adalah:

### Untuk Organisasi

1. **Peningkatan Reputasi dan Kredibilitas:** Mengembangkan dan meluncurkan aplikasi "Jelajah Medika" yang inovatif akan menempatkan organisasi sebagai pemimpin pemikiran dalam teknologi kesehatan dan farmasi. Hal ini akan meningkatkan reputasi dan kredibilitas di mata industri, investor, dan komunitas ilmiah.
2. **Pendapatan dan Pertumbuhan Bisnis:** Aplikasi ini membuka peluang baru untuk pendapatan melalui lisensi, langganan, atau model monetisasi lainnya. Dengan menawarkan solusi unik untuk mendeteksi interaksi obat-target, organisasi dapat menarik basis pengguna yang luas, dari perusahaan farmasi hingga institusi penelitian, yang berkontribusi pada pertumbuhan bisnis jangka panjang.
3. **Keunggulan Kompetitif:** Dengan memanfaatkan teknologi *Deep Learning* untuk prediksi DTI, "Jelajah Medika" memberikan keunggulan kompetitif atas aplikasi dan layanan serupa. Hal ini memungkinkan organisasi untuk menduduki posisi unik di pasar, menarik investasi, dan mengamankan kemitraan strategis.
4. **Optimalisasi R&D:** Aplikasi ini dapat digunakan dalam lingkup internal untuk mempercepat proses penelitian dan pengembangan, membantu mengidentifikasi kandidat obat baru atau *repurposing* obat dengan efisiensi biaya yang lebih baik, mengurangi waktu dan biaya yang terkait dengan pengembangan obat.

### Untuk Pemangku Kepentingan

1. **Akses ke Inovasi Terbaru:** Pemangku kepentingan, termasuk peneliti, dokter, dan perusahaan farmasi, mendapatkan akses ke alat canggih yang memungkinkan eksplorasi cepat dari interaksi obat-target, mempercepat penemuan terapeutik baru dan meningkatkan hasil pasien.
2. **Peningkatan Efisiensi Penelitian**: "Jelajah Medika" mengoptimalkan proses penelitian dengan menyediakan analisis prediktif yang akurat, mengurangi waktu dan sumber daya yang diperlukan untuk eksperimen laboratorium dan uji klinis.
3. **Pendukung Keputusan Klinis**: Dengan menyediakan data yang akurat dan terkini mengenai interaksi obat-target, aplikasi ini menjadi alat bantu keputusan yang berharga untuk praktisi kesehatan dalam merancang rencana pengobatan yang lebih efektif dan personalisasi.
4. **Dampak Sosial dan Kesehatan Masyarakat**: Melalui peningkatan akses ke penemuan medis, aplikasi ini berkontribusi pada kesehatan masyarakat yang lebih baik dengan mempercepat pengembangan dan distribusi terapi baru untuk penyakit yang belum terlayani dengan baik.

### Analisis SWOT

Analisis SWOT adalah alat strategis yang digunakan untuk menilai kekuatan (*Strengths*), kelemahan (*Weaknesses*), peluang (*Opportunities*), dan ancaman (*Threats*) yang berkaitan dengan proyek pengembangan aplikasi *web* "Jelajah Medika". Analisis ini bertujuan untuk mengidentifikasi faktor internal dan eksternal yang dapat mempengaruhi keberhasilan atau kegagalan proyek. Berikut adalah penjelasan terperinci tentang setiap komponen dalam analisis SWOT untuk "Jelajah Medika".

* + - 1. *Strengths*
    1. Inovasi Teknologi: Penggunaan teknologi *Deep Learning* untuk prediksi interaksi obat-target menawarkan pendekatan yang lebih akurat dan efisien dibandingkan metode tradisional, memberikan keunggulan kompetitif yang kuat.
    2. Antarmuka Pengguna yang Ramah: Desain antarmuka pengguna yang intuitif memudahkan para peneliti, dokter, dan profesional kesehatan lainnya untuk mengakses dan menganalisis data.
    3. Kecepatan dan Akurasi: Kemampuan untuk memproses dan menganalisis data besar dengan cepat dan akurat, mempercepat penemuan dan pengembangan obat baru.
    4. Dukungan Komunitas Ilmiah: Kolaborasi dengan institusi penelitian dan universitas meningkatkan kredibilitas dan menyediakan akses ke pengetahuan serta data terkini.
       1. *Weaknesses*

1. Ketergantungan pada Data Berkualitas: Efektivitas aplikasi sangat bergantung pada ketersediaan dan kualitas data input, yang mungkin terbatas atau bervariasi.
2. Kompleksitas Teknologi: Tingkat kompleksitas dalam menggunakan teknologi grafik pengetahuan mungkin memerlukan kurva pembelajaran yang curam untuk beberapa pengguna.
3. Biaya Pengembangan dan Pemeliharaan: Biaya awal yang tinggi untuk pengembangan teknologi canggih dan kebutuhan pemeliharaan berkelanjutan dapat menjadi beban finansial.
4. Persaingan di Pasar: Pasar teknologi kesehatan yang cepat berkembang berarti aplikasi ini menghadapi persaingan ketat dari solusi serupa.
   * + 1. *Opportunities*
5. Kebutuhan untuk Penemuan Obat yang Lebih Cepat: Dengan penyakit baru dan resistensi obat yang meningkat, ada permintaan yang besar untuk mempercepat penemuan dan pengembangan obat baru.
6. Kemitraan Strategis: Potensi untuk membentuk kemitraan dengan perusahaan farmasi, institusi penelitian, dan organisasi kesehatan untuk memperluas jangkauan dan pengaruh aplikasi.
7. Ekspansi Pasar: Kemampuan untuk memasuki pasar baru dengan menyesuaikan aplikasi untuk berbagai spesialisasi medis dan penelitian.
8. Pengembangan AI dan *Deep Learning*: Integrasi dengan AI lanjutan dan teknologi pembelajaran mesin berbasis jaringan syaraf tiruan dapat meningkatkan kemampuan prediktif dan analitis aplikasi.
   * + 1. *Threats*
9. Perubahan Regulasi: Perubahan dalam regulasi kesehatan dan kebijakan privasi data dapat mempengaruhi operasional aplikasi.
10. Keamanan Data: Risiko keamanan data besar, termasuk potensi pelanggaran data, yang dapat merusak reputasi dan kepercayaan pengguna.
11. Kemajuan Teknologi oleh Pesaing: Pesaing yang mengembangkan solusi serupa atau lebih canggih dapat mengurangi keunikan dan nilai aplikasi.
12. Keterbatasan Sumber Daya: Sumber daya yang terbatas untuk penelitian dan pengembangan berkelanjutan dapat memperlambat inovasi dan peningkatan aplikasi.

# Cakupan Proyek

## Ruang Lingkup

Ruang lingkup dalam proyek penelitian ini adalah:

1. Membuat model berbasis *deep learning*

Model akan menerima input awal berupa data senyawa obat, matriks *adjacency* yang menggambarkan keterhubungan atom antar senyawa, dan data *sequence protein*. Kemudian akan menghasilkan suatu *knowledge graph* yang selanjutnya diproses menjadi representasi *embedding* sebagai input dari model *deep learning* untuk melakukan tugas prediksi *drug-target interaction* (DTI).

1. Membuat aplikasi berbasis *web*

Aplikasi *web* akan dibangun untuk fungsi sebagai antarmuka pengguna, memungkinkan interaksi antara sistem dan pengguna. *Web* ini akan menampilkan output dari model algoritma dan memfasilitasi pengguna dalam mengakses informasi atau melakukan analisis tertentu sesuai dengan fitur yang disediakan.

1. Membuat karya tulis ilmiah

Sebagai bagian dari proyek penelitian, akan dihasilkan sebuah karya tulis ilmiah yang mendokumentasikan seluruh proses penelitian, dari perancangan hingga hasil yang diperoleh. Karya tulis ini akan mengeksplorasi aspek-aspek akademis dari proyek, termasuk metodologi, analisis data, dan interpretasi hasil, dalam konteks ilmu informatika.

* 1. Batasan Pelaksanaan Proyek

Adapun batasan – batasan pelaksanaan proyek dijelaskan sebagai berikut.

### Waktu

Proyek ini harus selesai dalam periode 1 semester (4 bulan / 16 minggu) terhitung dari proyek ini diinisiasikan.

## Anggaran

Proyek ini memiliki anggaran maksimal Rp. 500.000.000. Anggaran ini mencakup semua biaya yang berkaitan dengan pengembangan aplikasi, termasuk perangkat keras, perangkat lunak, dan operasional lainnya.

### Sumber Daya

Tim proyek terdiri dari 3 anggota, termasuk *project manager*, *machine learning engineer*, dan *software engineer*. Pembagian tim dengan jumlah tersebut sudah ditentukan oleh dosen pengampu mata kuliah IF5200 Proyek Penelitian Terapan.

### Produk

Produk yang dikembangkan merupakan sebuah aplikasi *web* menggunakan model deep learning untuk memprediksi afinitas dan target dengan masukan nama obat. Aplikasi ini dibatasi dengan kondisi sebagai berikut.

* 1. Model *deep learning* yang digunakan menerima masukan berupa nama obat. Keluaran dari model berupa nama target (protein) dan level afinitas dari hubungan antara obat yang dimasukan dengan target (protein).
  2. Seluruh analisis dan pengembangan model untuk *deep learning* akan berpusat pada pemanfaatan teknologi grafik pengetahuan (Knowledge Graph - KG), yang memungkinkan integrasi data yang luas dan mendalam dari sumber-sumber yang beragam.
  3. Data yang digunakan dalam pengembangan model *deep learning* secara eksklusif berasal dari *dataset* Kiba dan Davis.
  4. Aplikasi hanya menghadirkan fitur pencarian nama target dan afinitasinya berdasarkan nama obat yang diberikan.
  5. Pengguna hanya dapat memasukan satu nama obat untuk sekali sesi pencarian nama target beserta afinitasnya.
  6. Pengembangan aplikasi akan menggunakan *framework* Bootstrap untuk *front* *end*; Node.js dan Flask untuk *backend*; neo4j dan Postgresql untuk *database,*  *framework* PyTorch untuk *deep learning*.

# Studi Literatur

**3.1** Analisis Pendekatan *Graph Attention Network* dalam Prediksi *Drug-Target Interaction*

Pengembangan obat memakan waktu dan biaya besar, namun regulasi yang semakin ketat menyebabkan penurunan obat baru yang masuk pasar. Sebagai alternatif, teknologi *screening* seperti *drug repurposing* dan *repositioning* menjadi penting untuk mengidentifikasi penggunaan baru untuk obat yang sudah ada (Y. Zhang et al., 2023). Di antara itu, pendekatan yang menggunakan Graf Pengetahuan (*Knowledge Graphs*/KG) menjanjikan dalam banyak tugas, termasuk penggunaan kembali obat, prediksi toksisitas obat, dan prioritas gen-target penyakit. Dalam KG penemuan obat, elemen-elemen penting seperti gen, penyakit, dan obat direpresentasikan sebagai entitas, sementara hubungan antara mereka menunjukkan interaksi (Bonner et al., 2022). Dalam konteks ini, metode komputasi, terutama berbasis *deep learning*, menjadi solusi untuk memprediksi interaksi obat-target (DTI) dengan akurasi tinggi. Teknologi CNN dan *attention mechanism* memainkan peran penting dalam memperkuat prediksi DTI. Selain itu, metode berbasis faktorisasi matriks juga membantu dalam memprediksi DTI dengan akurat. Dengan menggabungkan berbagai metode komputasi, pengembangan obat dapat menjadi lebih efisien dan terjangkau, membuka jalan bagi inovasi dalam penelitian obat.

Beberapa metode terbaru telah diusulkan untuk memprediksi interaksi obat-target (DTI) dengan menggunakan teknik faktorisasi matriks. KBMF2K (Cobanoglu et al., 2013) mengonversi informasi obat dan target menjadi matriks kernel dan menerapkan faktorisasi matriks Bayesian untuk mendapatkan representasi obat dan target dalam dimensi rendah. Metode SPLCMF (Liang et al., 2019) menggunakan strategi *self-paced learning* untuk memilih sampel pelatihan secara progresif dan mengendalikan proses pembelajaran fitur, sehingga meningkatkan kemampuan generalisasi dan akurasi prediksi model. Metode-metode berbasis faktorisasi matriks ini telah menunjukkan kinerja yang menjanjikan dalam prediksi DTI, memberikan wawasan berharga dalam pengembangan obat dan penemuan target.

Selain itu, teknik pembelajaran jaringan saraf telah banyak diterapkan dalam berbagai bidang, termasuk bioinformatika. Metode jaringan pembelajaran telah diterapkan dalam memprediksi tipe sel dan lintasan sel, serta memperkenalkan penggabungan data genomik heterogen dalam jaringan kanker temporal. Terakhir, *graph neural network* telah menunjukkan keberhasilan dalam memproses data spasial non-Euclidean dengan efisiensi yang luar biasa. Dengan memanfaatkan informasi intrinsik yang terdapat dalam simpul dan ketergantungannya, jaringan ini dapat mengekstrak informasi fitur yang berharga, memungkinkan identifikasi dan prediksi yang akurat.

Metode prediksi interaksi obat-target (DTI) dapat diklasifikasikan menjadi dua kategori: prediksi interaksi (DTI) dan prediksi afinitas (DTA). Metode interaksi berbasis grafik molekuler obat dan urutan protein saat ini efektif dan umum digunakan. Beberapa contoh termasuk CPGL (Zhao et al., 2022), GanDTI (Wang et al., 2021), GraphCPI (Quan et al., 2019), MGraphDTA (Yang et al., 2022), SAG-DTA (S. Zhang et al., 2021), dan TransformerCPI (Chen et al., 2020). Umumnya, SMILES obat dikonversi menjadi grafik molekuler menggunakan RDKit, dan fitur-fitur molekuler dipelajari oleh jaringan saraf grafik (GNN). Pada sisi protein, berbagai metode seperti segmentasi N-gram dan penggunaan CNN diterapkan untuk memproses urutan protein. Metode ini dapat memprediksi baik interaksi (DTI) maupun afinitas (DTA) dengan akurasi tinggi.

Pentingnya memprediksi afinitas obat-target juga ditekankan, dengan penggunaan grafik molekuler dan urutan protein. Beberapa metode, seperti GraphDTA (Nguyen et al., 2021), DeepGLSTM (Mukherjee et al., 2022), dan GDGRU-DTA (Zhijian et al., 2022), menggabungkan GCNs dan LSTM/GRU untuk memproses fitur molekuler obat dan urutan protein. Selain itu, metode seperti X-DPI dan WGNN-DTA (Jiang et al., 2022) memanfaatkan teknologi terkini seperti Mol2vec, BERT, dan ESM untuk memperkaya fitur yang dipelajari model. Terakhir, pendekatan baru muncul dengan memanfaatkan grafik protein daripada urutan protein. Contohnya, DGraphDTA (Jiang et al., 2020) menggunakan kontak map dari urutan protein untuk membentuk grafik protein. WGNN-DTA memanfaatkan ESM untuk menghasilkan grafik protein, mengoptimalkan waktu proses dan meningkatkan akurasi prediksi.

**Tabel 1.** *Review* Penelitian Terkait Prediksi DTI Berbasis *Knowledge Graph* dan *Deep Learning*

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| ***Author, Year*** | ***Task dan Dataset*** | ***Methods*** | ***Performance*** |
| (Nguyen et al., 2021) | Prediksi *Drug-Target Affinity* berdasarkan grafik molekul obat dan urutan protein pada Dataset KIBA dan DAVIS | GraphDTA yang menggunakan GCN, GAT, atau GIN untuk memperoleh fitur tingkat tinggi. Untuk protein, CNN diadopsi untuk mempelajari fitur tersembunyi | MSE, CI, dan r2m pada dataset Davis dan KIBA masing-masing sebesar 0.251, 0.881, dan 0.676, serta 0.135, 0.894, dan 0.772 |
| (Mukherjee et al., 2022) | Prediksi *Drug-Target Affinity* berdasarkan grafik molekul obat dan urutan protein pada Dataset KIBA dan DAVIS | DeepGLSTM yang menggabungkan beberapa GCN untuk mempelajari berbagai fitur obat | MSE, CI, dan r2m pada dataset Davis dan KIBA masing-masing sebesar 0.250, 0.891, dan 0.681, serta 0.133, 0.897, dan 0.792 |
| (Jiang et al., 2022) | Prediksi *Drug-Target Affinity* berdasark grafik molekul obat & urutan protein pada data KIBA dan DAVIS, prediksi *Drug-Target Interaction* pada dataset Human & C.elegans | WGNN-DTA memanfaatkan ESM untuk menghasilkan grafik protein, mengoptimalkan waktu proses dan meningkatkan akurasi prediksi | MSE, CI, dan r2m pada dataset Davis dan KIBA sebesar 0.215, 0.900, dan 0.711, serta 0.140, 0.899, dan 0.749. AUC, Precision, dan Recall pada dataset Human dan C.elegans masing-masing sebesar 0.978, 0.926, dan 0.960, serta 0.989, 0.969, dan 0.954 |
| (Wang et al., 2021) | Prediksi *Drug-Target Interaction* pada dataset Human dan C.elegans | GanDTI mencakup teknik yang memusatkan perhatian pada wilayah protein yang berinteraksi paling baik dengan obat yang diinginkan | AUC, Precision, dan Recall, dan F1-Score pada dataset Human dan C.elegans masing-masing sebesar 0.982, 0.943, 0.941, dan 0.942 serta 0.984, 0.943, 0.947, dan 0.945 |
| ***Proposed Method*** | **Prediksi *Drug-Target Interaction* pada dataset KIBA dan DAVIS** | ***Graph Attention Network* mencakup pendekatan yang berfokus pada bagian protein yang memiliki interaksi paling optimal dengan obat yang dituju** |  |

Berdasarkan *table review* diatas, diputuskan bahwa proyek ini menggunakan *method Graph Attention Network* sebagai acuan untuk menentukan prediksi *Drug-Target Interaction* yang mencakup pendekatan yang berfokus pada bagian protein yang memiliki interaksi paling optimal dengan obat yang dituju.

## Analisis Arsitektur Monolitik dan Pendekatan Alternatif dalam Pengembangan Aplikasi *Machine Learning*

Dalam dunia pengembangan perangkat lunak, terutama pada aplikasi yang berbasis machine learning, arsitektur monolitik memang menawarkan kesederhanaan dalam tahap pengembangan awal. Namun, seperti yang diungkap oleh Yokohama (2019) dan Serban (2019), arsitektur ini dapat menimbulkan masalah signifikan ketika aplikasi berkembang menjadi lebih kompleks. Isu utama yang muncul adalah kesulitan dalam pembaruan dan skalabilitas, serta risiko terjadinya error berantai. Dalam konteks machine learning, perubahan format data atau logika yang terintegrasi dalam satu basis kode dapat menyebabkan "cascading error", seperti yang dinyatakan oleh Hornerman A et al. (2019).

Strategi pemisahan logika menjadi solusi yang direkomendasikan untuk mengatasi tantangan ini. Pemisahan logika tidak hanya dapat meningkatkan stabilitas sistem tetapi juga memudahkan proses debugging. Dengan membagi aplikasi menjadi modul atau komponen yang lebih kecil, perubahan pada satu bagian tidak akan langsung mempengaruhi bagian lain dari aplikasi. Ini membuat proses pembaruan menjadi lebih mudah dan mengurangi risiko terjadinya error berantai. Pendekatan arsitektur alternatif yang sering dibandingkan dengan monolitik adalah arsitektur berbasis mikroservis. Arsitektur mikroservis memecah aplikasi menjadi sekumpulan layanan kecil yang berkomunikasi melalui API. Setiap layanan dapat dikembangkan, di-deploy, dan dikelola secara independen. Ini memungkinkan tim pengembang untuk mengadopsi teknologi yang paling sesuai untuk kebutuhan spesifik setiap layanan dan mempercepat proses deploy. Selain itu, arsitektur mikroservis dapat meningkatkan skalabilitas aplikasi karena layanan dapat di-skalakan secara independen berdasarkan kebutuhan.

Mengadopsi arsitektur berbasis mikroservis atau pendekatan pemisahan logika lainnya membutuhkan pemikiran dan perencanaan yang matang. Tim pengembang perlu mempertimbangkan faktor-faktor seperti kompleksitas komunikasi antar layanan, konsistensi data, dan *overhead* manajemen layanan. Namun, dengan perencanaan yang tepat dan implementasi yang efektif, pendekatan ini dapat memberikan manfaat signifikan dalam hal stabilitas, skalabilitas, dan kemudahan pembaruan aplikasi berbasis *machine learning*.

**Tabel 2.** *Review* Penelitian Terkait Arsitektur untuk Aplikasi Berbasis *Machine Learning*

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| *Author, Year* | *Title* | *Methods* | *Result* |
| *Runyu Xu*, 2020 | *A Design Pattern for Deploying Machine Learning Models to Production* | *Model-Service-Client + Retraining* | ***Advantages:***  *Loosely coupled between ML component and others component****,***  *Improved design and development efficiency, reducing deployment time*, ***glue code (anti-pattern) is mitigated****,* and ***provide monitoring and retraining*.**  ***Drawbacks:***  *Resource limitation and vendor locks* |
| *Kamikodanaka, Nakahara-ku, Kawasaki, Kanagawa, 2019* | *Machine Learning System Architectural Pattern*  *For Improving Operational Stability* | *Gateway-Routing*  *Architectural Pattern* | ***Advantages:***  *Separation of ML system and business logic**and Focused*  *Development & Maintenance.*  ***Drawbacks:***  *Increased complexity,* *overhead and latency, and resources intensiveness* |

Berdasarkan Tabel 2, pada proyek ini akan diterapkan arsitektur *Model-Service-Client + Retraining*. Hal ini didukung adanya kelebihan dalam hal monitoring dan retraining data yang memungkinkan aplikasi “Jelajah Medika” dapat menjaga bahkan meningkatkan akurasi model yang digunakan.

# Metodologi proyek

Metodologi yang diterapkan dalam proyek ini berlandaskan pada Kerangka Kerja Kelompok Proses Manajemen Proyek atau disingkat PMPG (dalam Bahasa Inggris). PMPG memecah proyek ke dalam lima fase utama: inisiasi, perencanaan, eksekusi, pengendalian, dan penutupan. Fase-fase ini bisa tumpang tindih dan berlangsung secara simultan. Berikut adalah gambaran singkat tentang masing-masing fase:

1. **Fase Inisiasi**: Tahap ini menekankan pada penentuan dasar proyek, meliputi tujuan, lingkup, dan rencana awal.
2. **Fase Perencanaan**: Membangun lebih lanjut dari apa yang telah ditetapkan selama inisiasi, fase ini berfokus pada penetapan jadwal, estimasi biaya, dan distribusi sumber daya untuk keseluruhan proyek.
3. **Fase Eksekusi**: Melaksanakan tugas-tugas yang telah dirancang sebelumnya untuk membawa pekerjaan proyek ke penyelesaian.
4. **Fase Pengendalian**: Bertanggung jawab atas pemantauan progres proyek dan pengelolaannya untuk mengantisipasi dan menangani masalah secepat mungkin.
5. **Fase Penutupan**: Menandakan selesainya seluruh aktivitas dalam semua fase, termasuk pembubaran tim proyek dan formalitasi penyelesaian proyek dengan klien.

Dengan demikian, metodologi ini memberikan kerangka komprehensif untuk mengelola proyek dari konsepsi hingga penyelesaian, memastikan semua aspek terkontrol dan terdokumentasi dengan baik.

# Rencana kegiatan proyek

Proyek dilaksanakan selama 16 minggu, dengan tanggal mulai dan tanggal selesai sebagai berikut.

Rencana tanggal mulai : 6 Februari 2024

Rencana tanggal selesai : 22 Mei 2024

## *Milestone* Utama

*Milestone* pelaksanaan proyek dapat dilihat pada Tabel 3.

**Tabel 3.** *Milestone Proyek*

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| No | Milestone | Perkiraan waktu selesai |
| 1 | Proposal selesai dibuat | 28 Februari 2024 |
| 2 | *Software Design Document* (SDD) selesai dibuat | 16 Maret 2024 |
| 3 | Integrasi sistem *user interface* dengan sistem model prediksi | 15 April 2024 |
| 4 | Sistem berhasil di-*deploy* | 26 April 2024 |
| 5 | Pengujian sistem telah dilakukan | 6 Mei 2024 |
| 6 | Pembuatan karya tulis ilmiah | 13 Mei 2024 |
| 7 | Presentasi hasil akhir | 22 Mei 2024 |

## Work-Breakdown Structure dan Gant Chart

*Work-Breakdown*  *Structure* pelaksanaan proyek ini ditampilkan pada lampiran dokumen 1. Secara rinci, *wbs* dijelaskan pada lampiran dokumen 2.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **PROJECT TITLE** | **Jelajah Medika** | **COMPANY NAME** | **-** |
| **PROJECT MANAGER** | **Dimmas Mulya** | **DATE** | **27/02/2024** |

3.1.1 Pembangunan Model Prediksi

3.4 Pengujian Sistem

3.1.2 Pembangunan Sistem untuk User Interface

3.1 Pembangunan Sistem

1.2 Penyusuanan Proposal

**Lampiran dokumen 1.** WBS Tree

**WORK BREAKDOWN STRUCTURE TREE**

3.1.1.1 Pemahaman Masalah dan Data

3.1.1.2 Pemilihan Arsitektur dan Pelatihan Model

3.1.1.3 Evaluasi dan Optimasi Model

3.1.1.4 Deployment Model dan Peningkatan Performa Model

5.1 Presentasi Akhir Proyek

4.1 - 4.13 Progress Report week-3 – week 15

3.5 Pembuatan Karya Tulis Ilmiah

**Jelajah Medika**

3.2 Integrasi Sistem

1.1 Kick-Off Meeting

3.3 Deployment Sistem

2.3 Pembuatan SRS

2.4 Pembuatan SDD

2.2 Requirement Engineering

2.1 Perancangan WBS

1. Closing
2. Execution
3. Monitoring
4. Planning
5. Initiation

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Level**  **Tabel 4.** Gantt Chart | **Nama Tugas** | **Februari** | | | | | **Maret** | | | | | **April** | | | | **Mei** | | | |
| **1** | **2** | **3** | **4** | **5** | | **6** | **7** | **8** | **9** | | **10** | **11** | **12** | **13** | **14** | **15** | **16** |
| **Initiation** | |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 1.1 | *Kick-off meeting* |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 1.2 | Penyusunan proposal |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | L |  |  |  |  |  |  |
| 1.2.1 | Laporan selesai disusun |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | I |  |  |  |  |  |  |
| **Planning** | |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | B |  |  |  |  |  |  |
| 2.1 | Perancangan WBS (*Work-Breakdown Structure*) |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | U |  |  |  |  |  |  |
| 2.2 | *Requirement Engineering* |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | R |  |  |  |  |  |  |
| 2.3 | Pembuatan dokumen *Software Requirement Specifications* (SRS) |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 2.4 | Pembuatan *Software Design Document* (SDD) |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | L |  |  |  |  |  |  |
| 2.4.1 | *Software Design Document* (SDD) selesai disusun |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | E |  |  |  |  |  |  |
| **Execution** | |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | B |  |  |  |  |  |  |
| 3.1 | Pembangunan Sistem |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | A |  |  |  |  |  |  |
| 3.1.1 | Pembangunan Model Prediksi |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | R |  |  |  |  |  |  |
| 3.1.1.1 | Pemahaman Masalah dan Data |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | A |  |  |  |  |  |  |
| 3.1.1.2 | Pemilihan Arsitektur dan Pelatihan Model |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | | N |  |  |  |  |  |  |
| 3.1.1.3 | Evaluasi dan Optimasi Model |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.1.1.4 | *Deployment* Model dan Peningkatan Performa Model |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.1.2 | Pembangunan Sistem untuk *User Interface* |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.2 | Integrasi sistem *user interface* dengan sistem model prediksi |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.2.1 | Sistem *user interface* dengan sistem model prediksi berhasil diintegrasikan |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.3 | *Deployment* sistem yang sudah terintegrasi |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.3.1 | Berhasil men-*deploy*  sistem yang sudah terintegrasi |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.4 | Pengujian sistem |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.4.1 | Pengujian sistem berhasil |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.5 | Pembuatan Karya Tulis Ilmiah |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |
| 3.5.1 | Karya tulis ilmiah selesai |  |  |  |  |  | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Keterangan** |  | Total durasi per tahap |  | Durasi per *task* |  | *Milestone* |  |  |  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Level** | **Nama Tugas** | **Februari** | | | | **Maret** | | | | | **April** | | | | **Mei** | | | |
| **1** | **2** | **3** | **4** | | **5** | **6** | **7** | **8** | **9** | **10** | **11** | **12** | **13** | **14** | **15** | **16** |
| **Controlling** | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 4.1 | *Progress report* 1 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | L |  |  |  |  |  |  |
| 4.2 | *Progress report* 2 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | I |  |  |  |  |  |  |
| 4.3 | *Progress report* 3 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | B |  |  |  |  |  |  |
| 4.4 | *Progress report* 4 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | U |  |  |  |  |  |  |
| 4.5 | *Progress report* 5 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | R |  |  |  |  |  |  |
| 4.6 | *Progress report* 6 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 4.7 | *Progress report* 7 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | L |  |  |  |  |  |  |
| 4.8 | *Progress report* 8 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | E |  |  |  |  |  |  |
| 4.9 | *Progress report* 9 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | B |  |  |  |  |  |  |
| 4.10 | *Progress report* 10 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | A |  |  |  |  |  |  |
| 4.11 | *Progress report* 11 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | R |  |  |  |  |  |  |
| 4.12 | *Progress report* 12 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | A |  |  |  |  |  |  |
| 4.13 | *Progress report* 13 |  |  |  |  | |  |  |  |  |  | N |  |  |  |  |  |  |
| **Closing** | |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 5.1 | Presentasi akhir proyek |  |  |  |  | |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Keterangan** |  | Total durasi per tahap |  | Durasi per *task* |  | *Milestone* |

# Teknologi dan Proses

## Teknologi

Teknologi dan proses yang digunakan dalam proyek ini dijelaskan sebagai berikut.

* + 1. Pengembangan *front-end*: Akan menggunakan HTML5, CSS3, dan JavaScript dengan *framework* Boostsrap.
    2. Penggunaan *server*: **AWS** (untuk *machine learning*),
    3. Pengembangan *back-end*: Node.js dan Flask akan digunakan untuk logika *server*, pengelolaan *database*, dan integrasi API.
    4. *Database*: Menggunakan basis data graf seperti Neo4j untuk menyimpan dan mengelola data kompleks interaksi obat-target dengan efisien. Ini akan memungkinkan query yang cepat dan analisis data berbasis grafik. PostgreSql digunakan untuk mengelolad data non-graf seperti, nama akun pengguna dan sebagainya.
    5. *Version Control*: Menggunakan GitHub sebagai alat kontrol versi dari pengembangan perangkat lunak.
    6. *Machine Learning* dan AI: Penerapan PyTorch untuk kerangka kerja pembelajaran mesin yang akan menganalisis dan memprediksi interaksi obat-target.
    7. *Notebook Interpreter*: Menggunakan Jupyter Notebook sebagai alat untuk melakukan eksperimen dan pengembangan kode implementasi *machine learning*.
    8. Keamanan Data: Penerapan protokol keamanan seperti enkripsi data, autentikasi dua faktor, dan pengujian penetrasi untuk melindungi data dan memenuhi standar kepatuhan.
    9. Pengujian: Penggunaan pengujian manual untuk memastikan fungsionalitas, kinerja, dan keamanan aplikasi. Alat pengujian seperti Jest (kode berbasis JavaScript) dan PyTest (kode berbasis Python) akan digunakan dalam proyek ini.
    10. Dokumentasi: Penggunaan *Google Workspace* sebagai media penyimpanan dokumen – dokumen penting pada proyek ini.
    11. *Feedback* dan Iterasi: Mengumpulkan *feedback* dari pengguna melalui survei, wawancara pengguna, atau sesi *testing* untuk terus meningkatkan dan menyesuaikan aplikasi berdasarkan kebutuhan pengguna.

# Rencana Komunikasi

Komunikasi efektif adalah kunci keberhasilan setiap proyek. Untuk aplikasi "Jelajah Medika", merancang strategi komunikasi yang efisien dan menentukan alat serta frekuensi komunikasi yang tepat akan memastikan semua anggota tim tetap terinformasi dan selaras dengan tujuan proyek. Berikut merupakan kunci dalam komunikasi yang diterapkan pada proyek ini.

* Transparansi: Membangun lingkungan kerja yang terbuka di mana semua anggota tim merasa nyaman untuk berbagi ide, masalah, dan *feedback*.
* Keterlibatan *Stakeholder*: Memastikan semua pemangku kepentingan, termasuk *Product Owner, Project Manager*, dan tim pengembangan, secara aktif terlibat dalam proses komunikasi.
* Responsif: Menjamin tim responsif terhadap pertanyaan, masukan, dan kebutuhan komunikasi lainnya, baik internal maupun dari pemangku kepentingan eksternal.
* Pendokumentasian: Mencatat semua komunikasi penting dan keputusan proyek untuk referensi di masa mendatang dan untuk memastikan transparansi.

## Alat dan Frekuensi

Komunikasi antar tim proyek dapat dilakukan menggunakan alat/teknologi berikut.

* *Weekly Stand-ups*: Mengadakan pertemuan singkat seminggu sekali untuk memperbarui kemajuan, mengidentifikasi hambatan, dan merencanakan tindakan selanjutnya. Alat: Zoom/Google Meet untuk tim jarak jauh, atau secara langsung untuk tim yang berada di lokasi yang sama.
* Email: Untuk komunikasi formal dan distribusi dokumen penting. Frekuensi: Sesuai kebutuhan, dengan memastikan semua email relevan dan ringkas.
* WhatsApp: Untuk komunikasi sehari-hari, berbagi *file* cepat, dan diskusi kelompok. Frekuensi: Harian, dengan saluran atau grup khusus untuk topik atau departemen tertentu.

# Manajemen Risiko

Risiko proyek merupakan segala sesuatu yang dapat mempengaruhi kesuksesan proyek dengan menunda lini masa proyek, melebihi anggaran, atau menyebabkan penurunan kinerja proyek dengan berbagai cara. Oleh karena itu, penting untuk mengidentifikasi potensi risiko dan strategi mitigasi dengan sebaik mungkin, serta memantau risiko tersebut selama proyek berlangsung agar proyek bisa berjalan lancar. Tabel 5 memuat daftar risiko yang dapat dihadapi selama pengerjaan proyek.

**Tabel 5.** Risiko Proyek

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Kode | Risiko Kegagalan | Strategi Mitigasi Risiko |
| R-01 | Analisis kebutuhan aplikasi yang tidak memadai | Verifikasi kesesuaian kebutuhan dengan ekspektasi klien secara berkala |
| Libatkan pakar dari domain yang relevan untuk meminimalisasi kesenjangan antara kebutuhan dan implementasi, serta tingkatkan komunikasi dengan klien untuk memperkuat pemahaman bersama |
| R-02 | Kesalahan dalam estimasi durasi proyek | Lakukan *review* progres proyek secara mingguan untuk menyesuaikan rencana kerja |
| Dokumentasikan kegiatan proyek secara detail untuk memfasilitasi analisis retrospektif dan pembelajaran dari pekerjaan yang telah dilakukan. |
| R-03 | Komunikasi tim yang tidak efektif | Evaluasi dan perbaiki metode komunikasi tim, termasuk pengaturan ulang *layout* tempat kerja untuk memudahkan interaksi antar anggota tim. |
| Fasilitasi komunikasi yang lebih baik melalui pembuatan dokumentasi pekerjaan dan pembukaan forum diskusi untuk meningkatkan pertukaran ide dan *feedback*. |
| R-04 | Kekurangan Personel Pengembang | Sebelum merekrut, terapkan prinsip *cross-functionality* untuk mengoptimalkan sumber daya tim yang ada. Sesuaikan rencana kerja dengan kapasitas tim dan diskusikan perubahan jadwal atau *scope* dengan klien jika perlu. |
| R-05 | Perubahan lingkup proyek yang sering | Tetapkan batasan yang jelas terhadap cakupan proyek dari awal dan komunikasikan pentingnya batasan ini kepada klien. |
| Gunakan metode manajemen proyek yang *agile* untuk mengakomodasi perubahan dengan minimal risiko, dan pastikan setiap perubahan lingkup didokumentasikan dan disetujui oleh semua pihak terkait. |
| R-06 | Kurangnya pemahaman pengguna | Menyelenggarakan sesi pelatihan secara bertingkat yang melibatkan bimbingan mendalam untuk pengguna tentang cara menggunakan perangkat lunak. |
| Menyusun manual pengguna sebagai referensi utama tentang aplikasi. |

Setelah mengidentifikasi berbagai macam risiko kegagalan dalam proyek, selanjutnya dilakukan analisis setiap risiko untuk menetapkan level probabilitas kemunculan dan dampak yang ditimbulkan dari risiko tersebut, setiap level probabilitas kemunculan dan dampaknya dinyatakan sebagai “tinggi”, “menengah” atau “rendah”. Sehingga bisa didapatkan informasi kategori dari setiap risiko, contoh kategori risiko yakni “dapat diterima”, “tidak dapat diterima” dan “tidak dapat diterima segera”. Tabel 6 memuat analisis terhadap masing-masing risiko dalam konteks pengerjaan proyek ini.

**Tabel 6.** Analisis Risiko Proyek

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Kode | Risiko Kegagalan | Likelihood (high/ medium/ low) | Impact (high/ medium/ low) | Risk Category (Acceptable/ Unacce ptable/ Unacceptable Immediate) |
| R-01 | Analisis kebutuhan aplikasi yang tidak memadai | Medium | High | Unacceptable |
| R-02 | Estimasi waktu proyek kurang tepat | High | High | Unacceptable |
| R-03 | Komunikasi tim yang tidak efektif | Medium | High | Unacceptable Immediate |
| R-04 | Kekurangan Personel Pengembang | Low | Medium | Acceptable |
| R-05 | Perubahan lingkup proyek yang sering | High | High | Acceptable |
| R-06 | Kurangnya pemahaman pengguna | Medium | Medium | Acceptable |

# Target Hasil dan Kriteria Penerimaan

## Hasil yang Diharapkan

Untuk proyek aplikasi "Jelajah Medika", hasil yang diharapkan mencakup:

* Aplikasi Berfungsi Penuh: Sebuah platform berbasis *web* yang sepenuhnya beroperasi, memungkinkan pengguna untuk memprediksi interaksi antara obat dan target menggunakan teknologi grafik pengetahuan.
* Antarmuka Pengguna yang Intuitif: Desain antarmuka pengguna (UI) yang ramah pengguna dan pengalaman pengguna (UX) yang optimal, memastikan aksesibilitas dan kemudahan penggunaan bagi semua pengguna.
* Akurasi dan Keandalan Data: Kemampuan aplikasi untuk menyajikan prediksi yang akurat berdasarkan data terkini dan terverifikasi, dengan tingkat keandalan yang tinggi.
* Dokumentasi Lengkap: Dokumentasi teknis dan panduan pengguna yang komprehensif, memudahkan pengguna untuk memahami dan menggunakan aplikasi secara efektif.
* Kepatuhan Standar Keamanan: Implementasi protokol keamanan data yang kuat untuk melindungi informasi pengguna dan memenuhi standar keamanan data yang relevan.

**8.2.** Kriteria untuk Penerimaan

Kriteria penerimaan untuk aplikasi "Jelajah Medika" mencakup:

* Fungsionalitas: Aplikasi harus memiliki semua fitur dan fungsionalitas yang dijelaskan dalam spesifikasi proyek, termasuk kemampuan untuk melakukan prediksi DTI secara akurat. Metrik yang digunakan: ROC, AUC, Akurasi.
  + Kemampuan untuk memprediksi DTI dengan metrik dan nilai sebagai berikut:
    - AUC-ROC : minimal 85 %
    - Recall : minimal 80 %
    - Precision : minimal 80 %
    - F1-score : minimal 80 %
* Keandalan: Aplikasi harus stabil dan dapat diandalkan, dengan waktu henti yang minimal dan kemampuan untuk menangani beban kerja pengguna yang tinggi. (Node Js)
  + *Availability* : 99.9%
* Performa: Waktu respons aplikasi harus sesuai dengan standar industri, dengan proses yang efisien dan waktu pemuatan yang cepat.
  + *Response Time* : < 100 ms
  + *Latency* : <100 ms
  + *Error Rate* : < 1%
* *Usability*: Antarmuka pengguna harus intuitif dan mudah digunakan oleh target pengguna, termasuk peneliti, dokter, dan profesional kesehatan lainnya, tanpa memerlukan pelatihan teknis yang intensif. Metrik:
  + *Kepuasan pengguna* (skor kepuasan): > 80%
* Keamanan: Aplikasi harus memenuhi atau melebihi standar keamanan data yang berlaku, termasuk enkripsi data, pengelolaan akses pengguna, dan perlindungan terhadap ancaman keamanan siber. Metrik:
  + *Tingkatan Keberhasilan Autentikasi:* 100%
* Dokumentasi: Dokumentasi yang disediakan harus lengkap, jelas, dan mudah dipahami, memungkinkan pengguna untuk mengakses dan memanfaatkan semua fitur aplikasi secara efektif.
  + *Kelengkapan* : 100%
  + *Keakuratan* : 100%
  + *Waktu untuk memahami* : 2 jam

Pemenuhan kriteria-kriteria ini akan menjadi dasar untuk penerimaan akhir aplikasi "Jelajah Medika" oleh pemangku kepentingan proyek, memastikan bahwa aplikasi siap untuk diluncurkan dan digunakan oleh audien target. Proses validasi dan verifikasi yang ketat akan diterapkan untuk memastikan bahwa semua kriteria penerimaan terpenuhi sebelum peluncuran resmi.

# Pemantauan dan Evaluasi

**9.1.** Indikator Kinerja Utama

Untuk memastikan kesuksesan aplikasi "Jelajah Medika", pengukuran dan pemantauan kinerja akan dilakukan melalui Indikator Kinerja Utama (KPI) berikut:

* + Akurasi Prediksi: Persentase prediksi interaksi obat-target yang terbukti akurat ketika divalidasi melalui data eksperimental atau klinis.
  + Waktu Respons Aplikasi: Waktu yang diperlukan aplikasi untuk memuat dan merespons permintaan pengguna, yang menunjukkan efisiensi performa.
  + Kepuasan Pengguna: Skor kepuasan pengguna yang diukur melalui survei, *feedback*, dan ulasan, menunjukkan kegunaan dan keefektifan aplikasi.
  + Keandalan Sistem: Tingkat *uptime* aplikasi dan frekuensi *crash* atau masalah teknis, menunjukkan stabilitas sistem.
  + Kepatuhan Keamanan Data: Keberhasilan dalam memenuhi audit keamanan dan tidak adanya pelanggaran data, menunjukkan kekuatan protokol keamanan.

**9.2.** Mekanisme Evaluasi

Mekanisme evaluasi untuk aplikasi "Jelajah Medika" akan melibatkan beberapa metode untuk memastikan pengumpulan data yang komprehensif dan analisis kinerja yang akurat:

* + Survei dan *Feedback* Pengguna: Melakukan survei berkala dan mengumpulkan *feedback* secara langsung dari pengguna untuk menilai kepuasan dan mengidentifikasi area untuk peningkatan.
  + Pertemuan *Review* Kinerja: Mengadakan pertemuan berkala dengan tim proyek dan pemangku kepentingan untuk me-*review* kinerja aplikasi, membahas hasil evaluasi, dan merencanakan strategi peningkatan.
  + Uji Penerimaan Pengguna (UAT *Testing*): Sebagai langkah final dalam proses evaluasi, akan dilakukan Uji Penerimaan Pengguna (UAT) untuk memastikan bahwa aplikasi memenuhi persyaratan dan ekspektasi pengguna. UAT menjadi kesempatan untuk memvalidasi fungsi aplikasi dalam kondisi penggunaan nyata dan mengumpulkan *feedback* penting sebelum peluncuran penuh atau iterasi selanjutnya.

# Struktur Organisasi Proyek

Dalam menunjang keberlangsungan proyek ini, struktur tim akan memiliki peran masing – masing yang dijelaskan pada Tabel 7.

**Tabel 7.** Struktur Tim Proyek

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| No | Nama | Peran |
| 1 | Gusti Ayu Putri Saptawati S. | *Product Owner* |
| 2 | Dimmas Mulya | *Project Manager* |
| 3 | Husni Fadhilah Dhiya Ul Haq | *Machine Learning Engineer,* Penulis Karya Ilmiah |
| 4 | I Putu Pawesi Siantika | *Software Engineer*, Penulis Karya Ilmiah |

Deskripsi Peran:

* + - * *Product Owner* (Gusti Ayu Putri Saptawati S.): Bertanggung jawab untuk menentukan visi produk, mengelola *backlog* produk, dan memastikan fitur dan fungsi aplikasi sesuai dengan kebutuhan pengguna.
      * Project *Manager* (Dimmas Mulya): Bertanggung jawab untuk perencanaan, pelaksanaan, dan penutupan proyek. Memastikan proyek berjalan sesuai dengan jadwal, anggaran, dan ruang lingkup yang ditetapkan.
      * *Machine Learning Engineer* (Husni Fadhilah Dhiya Ul Haq): Mengembangkan dan mengimplementasikan algoritma pembelajaran mesin untuk memprediksi interaksi obat-target, serta memastikan keakuratan dan efisiensi model.
      * *Software Engineer* (I Putu Pawesi Siantika): Bertanggung jawab untuk pengembangan teknis aplikasi, termasuk *coding*, integrasi sistem, dan pengujian perangkat lunak.
      * Penulis Karya Ilmiah (Husni Fadhilah Dhiya Ul Haq) dan (I Putu Pawesi Siantika): Bertanggung jawab dalam menyusun karya tulis ilmiah di bidang keahlian masing-masing.

# Rencana Anggaran Biaya

Rencana anggaran proyek ini ditampilkan pada Tabel 8.

**Tabel 8.** Rencana Anggaran Biaya

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **No** | **Uraian Kegiatan** | **Volume**  **Satuan** | **Waktu** | **Harga Satuan**  **(Rp)** | **Total**  **(Rp)** |
| **I.** | **Biaya Langsung Personil** | | |  |  |
| 1 | *Project Manager* | 1 Orang | 4 Bulan | 6.046.086 \* | 24.184.344 |
| 2 | *Machine Learning Engineer* | 1 Orang | 4 Bulan | 11.875.000\* | 47.500.000 |
| 3 | *Software Engineering* | 1 Orang | 4 Bulan | 12.398.561\* | 49.594.244 |
| 4 | Penulis Karya Ilmiah / Peneliti | 1 Orang | 4 Bulan | 6.900.000 \* | 27.600.000 |
|  | **Total Biaya Langsung Personil** | | |  | 148.878.588 |
|  |  | | |  |  |
| **II**. | **Biaya Langsung Non Personil** | | |  |  |
|  | 1. **Infrastruktur** | | |  |  |
| 1 | Sewa server training & optimisasi model *machine learning* | 1 jam | 6 Bulan | 35.827 | 154.772.640 |
| 22 | Lenovo Thinkpad X1 Carbon Intel Core i5 | 4 Item |  | 6.400.000 | 25.600.000 |
| 33 | *Internet service provider* | 1 Paket | 6 Bulan | 280.000 | 1.120.000 |
|  | **B. Dokumen Administrasi** | | |  |  |
| 11 | APC IEEE Access | 1 *Paper* |  | 30.486.982 | 30.486.982 |
| 22 | Biaya akses publikasi dan database ilmiah di IEEE | 1 Paket | 1 tahun | 25.014.960 | 25.014.960 |
|  | **C. Biaya Tambahan** | | |  |  |
| 11 | Marketing dan Diseminasi | 1 Paket |  | 20.000.000 | 20.000.000 |
| 22 | Lisensi software development tools | 1 Paket | 6 Bulan | 10.000.000 | 10.000.000 |
| 33 | Keamanan Siber | 1 Paket | 6 Bulan | 10.000.000 | 10.000.000 |
| 44 | Cadangan untuk Biaya Tak Terduga | 10% dari total |  |  | 40.027.317 |
|  | **Total Biaya Langsung Non Personil** | | |  | 317.021.899 |
|  |  |  |  |  |  |
|  | **Total Biaya (I + II)** | | |  | 440.300.487 |
|  | **Pajak PPN (11%) \*** | | |  | 48.433.053 |
|  | **Grand Total** | | |  | **488.733.540** |

**Keterangan:**

\*) ***Wilayah Indonesia pada tahun 2023***

# Kesimpulan

## Ringkasan Proposal

Proyek "Jelajah Medika" merupakan inisiatif untuk mengembangkan aplikasi *web* yang canggih, bertujuan untuk memprediksi interaksi antara obat dan targetnya menggunakan teknologi grafik pengetahuan *(knowledge graph)*. Dengan memanfaatkan algoritma pembelajaran mesin terkini dan basis data yang luas tentang obat-obatan serta target biologis, aplikasi ini dirancang untuk memberikan wawasan baru dalam penemuan obat, mempercepat proses identifikasi kandidat obat yang potensial, dan mengurangi risiko dan biaya yang terkait dengan pengembangan obat.

Kunci dari proposal ini adalah penggunaan teknologi grafik pengetahuan untuk mengintegrasikan dan menganalisis data yang kompleks dari berbagai sumber, memungkinkan identifikasi hubungan dan pola yang tidak terlihat sebelumnya. Diharapkan, dengan meningkatkan pemahaman tentang interaksi obat-target, aplikasi ini akan membantu dalam mengidentifikasi kombinasi obat yang lebih efektif dan aman, mempercepat waktu pengembangan obat ke pasar, dan yang paling penting, menyediakan terapeutik baru yang lebih baik untuk pasien.

Selain itu, "Jelajah Medika" juga bertujuan untuk menjadi platform kolaboratif, mengundang peneliti dari berbagai disiplin ilmu untuk berkontribusi dan memanfaatkan data yang terkumpul. Dengan memfasilitasi kolaborasi lintas disiplin, proyek ini berharap dapat mendorong inovasi dan percepatan dalam penemuan obat, sekaligus membangun komunitas yang kuat dari para ilmuwan, peneliti, dan profesional di industri farmasi.

## Seruan untuk Tindakan

Untuk mendukung keberhasilan "Jelajah Medika", diperlukan kolaborasi aktif antara peneliti, praktisi kesehatan, dan perusahaan farmasi. Seruan ini mengajak semua pihak terkait untuk mengadopsi dan mendukung pengembangan teknologi ini, serta mendorong investasi lebih lanjut dalam riset dan pengembangan teknologi grafik pengetahuan, demi kemajuan di bidang farmasi dan kesehatan.

**DOKUMEN WORK BREAKDOWN STRUCTURE (WBS)**

**Lampiran 2.** DetailWBS

1. **Model Proses Software Engineering**:

Proses rekayasa perangkat lunak untuk proyek ini akan menggunakan incremental model.

1. Tahapan Proses:
   * + 1. Inisiasi (*initiation*): membentuk tim, menentukan *project manager*, dan membuat gambaran kasar kebutuhan proyek.
       2. Perencanaan (*planning*): menentukan *scope* proyek, *tech stack*, peran anggota tim, dan membentuk rincian pekerjaan yang akan dilakukan.
       3. Eksekusi (*executing*): membuat, menguji, dan men-*deploy* sistem.
       4. Kontrol dan monitor (*controlling and monitoring*): mengamati jalannya proyek, kondisi tim, dan mengatur risiko.
       5. Penutupan (*closing*): memaparkan dan menyerahkan hasil proyek.
2. Alasan Pemilihan:

Kebutuhan proyek telah ditetapkan pada awalnya, memungkinkan untuk memecahnya menjadi berbagai fungsi atau modul. Setiap modul dikembangkan secara bertahap. Pengguna tidak perlu menunggu sampai perangkat lunak selesai sepenuhnya karena bagian yang kritis diselesaikan terlebih dahulu. Selain itu, model ini membutuhkan manajemen yang sederhana. Proses pengujian dan perbaikan bug juga lebih mudah dilakukan, sehingga risiko kegagalan proyek relatif rendah.

1. **Work Breakdown Structure:**
   * 1. Dekomposisi utama WBS:

Dekomposisi utama WBS dilakukan berdasarkan *Project Management Process Group* (PMPG) dengan 5 tahap utama, yaitu *Initiation*, *Planning*, *Execution*, *Monitoring*, dan *Closing*.

* + 1. Work Breakdown Structure:

1. *Initiation*
   1. *Kick-Off Meeting*
   2. Penyusunan Proposal
2. *Planning*
   1. Perancangan WBS
   2. *Requirement Engineering*
   3. Pembuatan SRS
   4. Pembuatan SDD
3. *Execution*
   1. Pembangunan Sistem
4. Pembangunan Model Prediksi
   * + 1. Pemahaman Masalah dan Data
       2. Pemilihan Arsitektur dan Pelatihan Model
       3. Evaluasi dan Optimasi Model
       4. *Deployment* Model dan Peningkatan Performa Model
5. Pembangunan Sistem untuk *User Interface*
   1. Integrasi Sistem
   2. *Deployment* Sistem
   3. Pengujian Sistem
   4. Pembuatan Karya Tulis Ilmiah
6. *Monitoring*
   1. *Progress* *Report Week* 3-15
7. *Closing*
   1. Presentasi Akhir Proyek
      1. Kamus WBS

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ***Initiation*** | | |
| 1.1. *Kick-Off Meeting* | | |
| Hasil |  | Penanda proyek dimulai |
| Sumber Daya dan Beban |  | Tim proyek: 3 jam |
| Durasi |  | 1 hari |
| No. Task Pendahulu |  | - |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
|  | 1.2. Penyusunan Proposal | |
| Hasil |  | Dokumen proposal proyek penelitian |
| Sumber Daya dan Beban |  | Tim proyek: 120 jam |
| Durasi |  | 15 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 1.1 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |

|  |  |
| --- | --- |
| ***Planning*** | |
| 2.1. Perancangan WBS *(Work-Breakdown Structure)* | |
| Hasil | Dokumen *Work Breakdown Structure* |
| Sumber Daya dan Beban | Tim proyek: 10 jam |
| Durasi | 14 hari |
| No. Task Pendahulu | 1.1 |
| Penanggung Jawab | *Project manager* |
| 2.2. *Requirement Engineering* | |
| Hasil | Keputusan *tech stack* yang digunakan |
| Sumber Daya dan Beban | Tim proyek: 20 jam |
| Durasi | 14 hari |
| No. Task Pendahulu | 2.1 |
| Penanggung Jawab | *Project manager* |
| 2.3. Pembuatan SRS *(Software Requirement Specification)* | |
| Hasil | Dokumen *Software Requirement Specification* |
| Sumber Daya dan Beban | Tim proyek: 20 jam |
| Durasi | 14 hari |
| No. Task Pendahulu | 2.2 |
| Penanggung Jawab | *Project manager* |
| 2.4. Pembuatan SDD *(Software Design Document)* | |
| Hasil | Dokumen *Software Design Document* |
| Sumber Daya dan Beban | Tim proyek: 20 jam |
| Durasi | 14 hari |
| No. Task Pendahulu | 2.3 |
| Penanggung Jawab | *Project manager* |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ***Execution*** | | |
| 3.1. Pembangunan Sistem | | |
| Hasil |  | Sistem berbasis web dan model prediksi telah dibangun |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *project manager*: 20 jam  1 *software engineer*: 200 jam  1 *machine learning engineer*: 200 jam |
| Durasi |  | 49 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 2.3 dan 2.4 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.2. Integrasi Sistem | | |
| Hasil |  | Sistem berbasis web telah terhubung dengan model prediksi |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *project manager*: 12 jam  1 *software engineer*: 50 jam  1 *machine learning engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 3.1 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.3. Deployment Sistem | | |
| Hasil |  | Sistem diluncurkan dan dapat diakses |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *project manager*: 6 jam  1 *software engineer*: 50 jam  1 *machine learning engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 3.2 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.4. Pengujian Sistem | | |
| Hasil |  | Sistem diuji dan diperbaiki sesuai *requirement* |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *project manager*: 6 jam  1 *software engineer*: 50 jam  1 *machine learning engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 3.3 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.1.1. Pembangunan Model Prediksi | | |
| Hasil |  | Model prediksi telah dibangun |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *machine learning engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 2.3 dan 2.4 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.1.2. Pembangunan Sistem untuk *User Interface* | | |
| Hasil |  | Tampilan akhir web telah dibangun |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *software engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 2.3 dan 2.4 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.1.1.1. Pemahaman Masalah dan Data | | |
| Hasil |  | Pemahaman masalah, data berhasil dikumpulkan |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *machine learning engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 2.3 dan 2.4 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.1.1.2. Pemilihan Arsitektur dan Pelatihan Model | | |
| Hasil |  | Arsitektur model dipilih dan dilakukan proses pelatihan model dengan data latih |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *machine learning engineer*: 80 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 3.1.1.1 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.1.1.3. Evaluasi dan Optimasi Model | | |
| Hasil |  | Model telah dilakukan pengujian dengan data uji |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *machine learning engineer*: 50 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 3.1.1.2 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |
| 3.1.1.4. *Deployment* Model dan Peningkatan Performa Model | | |
| Hasil |  | Model dan *backend-*nyaberhasil diluncurkan dengan performa yang telah ditingkatkan |
| Sumber Daya dan Beban |  | 1 *machine learning engineer*: 80 jam |
| Durasi |  | 14 hari |
| No. Task Pendahulu |  | 3.1.1.3 |
| Penanggung Jawab |  | *Project manager* |

|  |  |
| --- | --- |
| **Monitoring** | |
| 4.1 – 4.13 *Progress Report Week* 3 - *Week* 15 | |
| Hasil | Laporan kemajuan proyek |
| Sumber Daya dan Beban | 1 *project manager*: 40 jam |
| Durasi | 84 hari |
| No. Task Pendahulu | 2.3 |
| Penanggung Jawab | *Project manager* |

|  |  |
| --- | --- |
| ***Closing*** | |
| 5.1. Presentasi Akhir Proyek | |
| Hasil | Presentasi laporan akhir proyek ke *stakeholder* |
| Sumber Daya dan Beban | Tim proyek: 3 jam |
| Durasi | 1 hari |
| No. Task Pendahulu | 4.1-4.13 |
| Penanggung Jawab | *Project manager* |

**Lampiran 3.** DesainUser Interface

A screenshot of a website

Description automatically generated

# Daftar Pustaka

Alaimo, S., Bonnici, V., Cancemi, D., Ferro, A., Giugno, R., & Pulvirenti, A. (2015). DT-Web: A web-based application for drug-target interaction and drug combination prediction through domain-tuned network-based inference. *BMC Systems Biology*, *9*(3), 1–11. https://doi.org/10.1186/1752-0509-9-S3-S4

Bonner, S., Barrett, I. P., Ye, C., Swiers, R., Engkvist, O., Bender, A., Hoyt, C. T., & Hamilton, W. L. (2022). A review of biomedical datasets relating to drug discovery: a knowledge graph perspective. *Briefings in Bioinformatics*, *23*(6), 1–19. https://doi.org/10.1093/bib/bbac404

Chen, L., Tan, X., Wang, D., Zhong, F., Liu, X., Yang, T., Luo, X., Chen, K., Jiang, H., & Zheng, M. (2020). TransformerCPI: Improving compound-protein interaction prediction by sequence-based deep learning with self-attention mechanism and label reversal experiments. *Bioinformatics*, *36*(16), 4406–4414. https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btaa524

Cobanoglu, M. C., Liu, C., Hu, F., Oltvai, Z. N., & Bahar, I. (2013). Predicting drug-target interactions using probabilistic matrix factorization. *Journal of Chemical Information and Modeling*, *53*(12), 3399–3409. https://doi.org/10.1021/ci400219z

Gaudelet, T., Day, B., Jamasb, A. R., Soman, J., Regep, C., Liu, G., Hayter, J. B. R., Vickers, R., Roberts, C., Tang, J., Roblin, D., Blundell, T. L., Bronstein, M. M., & Taylor-King, J. P. (2021). Utilizing graph machine learning within drug discovery and development. *Briefings in Bioinformatics*, *22*(6), 1–22. https://doi.org/10.1093/bib/bbab159

Jiang, M., Li, Z., Zhang, S., Wang, S., Wang, X., Yuan, Q., & Wei, Z. (2020). Drug-target affinity prediction using graph neural network and contact maps. *RSC Advances*, *10*(35), 20701–20712. https://doi.org/10.1039/d0ra02297g

Jiang, M., Wang, S., Zhang, S., Zhou, W., Zhang, Y., & Li, Z. (2022). Sequence-based drug-target affinity prediction using weighted graph neural networks. *BMC Genomics*, *23*(1), 1–17. https://doi.org/10.1186/s12864-022-08648-9

Liang, Y., Xia, L. Y., Yang, Z. Y., & Zhang, H. (2019). Improved Prediction of Drug-Target Interactions Using Self-Paced Learning with Collaborative Matrix Factorization. *Journal of Chemical Information and Modeling*, *59*(7), 3340–3351. https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00408

Mukherjee, S., Ghosh, M., & Basuchowdhuri, P. (2022). DeepGLSTM: Deep Graph Convolutional Network and LSTM based approach for predicting drug-target binding affinity. *Proceedings of the 2022 SIAM International Conference on Data Mining, SDM 2022*, 729–737. https://doi.org/10.1137/1.9781611977172.82

Nguyen, T., Le, H., Quinn, T. P., Nguyen, T., Le, T. D., & Venkatesh, S. (2021). GraphDTA: Predicting drug target binding affinity with graph neural networks. *Bioinformatics*, *37*(8), 1140–1147. https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btaa921

Quan, Z., Guo, Y., Lin, X., Wang, Z. J., & Zeng, X. (2019). GraphCPI: Graph Neural Representation Learning for Compound-Protein Interaction. *Proceedings - 2019 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine, BIBM 2019*, 717–722. https://doi.org/10.1109/BIBM47256.2019.8983267

Wang, S., Shan, P., Zhao, Y., & Zuo, L. (2021). GanDTI: A multi-task neural network for drug-target interaction prediction. *Computational Biology and Chemistry*, *92*(December 2020), 107476. https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2021.107476

Yamanishi, Y., Kotera, M., Moriya, Y., Sawada, R., Kanehisa, M., & Goto, S. (2014). DINIES: Drug-target interaction network inference engine based on supervised analysis. *Nucleic Acids Research*, *42*(W1), 39–45. https://doi.org/10.1093/nar/gku337

Yang, Z., Zhong, W., Zhao, L., & Yu-Chian Chen, C. (2022). MGraphDTA: Deep multiscale graph neural network for explainable drug-target binding affinity prediction. *Chemical Science*, *13*(3), 816–833. https://doi.org/10.1039/d1sc05180f

Yao, Z. J., Dong, J., Che, Y. J., Zhu, M. F., Wen, M., Wang, N. N., Wang, S., Lu, A. P., & Cao, D. S. (2016). TargetNet: a web service for predicting potential drug–target interaction profiling via multi-target SAR models. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, *30*(5), 413–424. https://doi.org/10.1007/s10822-016-9915-2

Zhang, S., Jiang, M., Wang, S., Wang, X., Wei, Z., & Li, Z. (2021). Sag-dta: Prediction of drug–target affinity using self-attention graph network. *International Journal of Molecular Sciences*, *22*(16). https://doi.org/10.3390/ijms22168993

Zhang, Y., Hu, Y., Han, N., Yang, A., Liu, X., & Cai, H. (2023). A survey of drug-target interaction and affinity prediction methods via graph neural networks. *Computers in Biology and Medicine*, *163*(May), 107136. https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2023.107136

Zhao, M., Yuan, M., Yang, Y., & Xu, S. X. (2022). CPGL: Prediction of Compound-Protein Interaction by Integrating Graph Attention Network With Long Short-Term Memory Neural Network. *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, *20*(3), 1935–1942. https://doi.org/10.1109/TCBB.2022.3225296

Zhijian, L., Shaohua, J., Yigao, L., & Min, G. (2022). *GDGRU-DTA: Predicting Drug-Target Binding Affinity based on GNN and Double GRU*. 25–37. https://doi.org/10.5121/csit.2022.120703