



PENAPISAN SENYAWA HERBAL DENGAN KOMPUTASI GPU PADA BASIS DATA ZINC MELALUI PENDEKATAN PEMBANDINGAN SIMILARITAS

REFIANTO DAMAI DARMAWAN



**DEPARTEMEN ILMU KOMPUTER
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2021**

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Penapisan Senyawa Herbal dengan Komputasi GPU pada Basis Data ZINC melalui Pendekatan Perbandingan Similaritas” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Juni 2021

Refianto Damai Darmawan
G64170001

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



ABSTRAK

REFIANTO DAMAI DARMAWAN. Penapisan Senyawa Herbal dengan Komputasi GPU pada Basis Data ZINC melalui Pendekatan Perbandingan Similaritas. Dibimbing oleh WISNU ANANTA KUSUMA dan HENDRA RAHMAWAN.

Covid-19 adalah sebuah pandemi yang membuat banyak peneliti berlomba mencari solusi untuk kemaslahatan sesama, terutama dalam segi kesehatan, pengobatan, dan penanggulangan penyakit tersebut. Penapisan awal dengan proses *in-silico* berperan penting dalam mengurangi jumlah bahan kimia yang perlu diuji untuk menemukan suatu obat. Penelitian ini bertujuan untuk mencari kandidat senyawa obat terbaik yang ada dalam basis data ZINC sehingga bisa diteliti lebih lanjut secara *in-vitro*. Sebanyak 997.402.117 senyawa kimia dicari kemiripannya dengan beberapa senyawa obat yang sudah teruji untuk melawan virus corona. Komputasi sekuensial akan memakan banyak waktu beberapa bulan untuk menyelesaikannya. Pendekatan *general programming graphic processing unit* digunakan melalui implementasi algoritme perbandingan similaritas secara paralel sehingga dapat mempercepat proses pencarian. Hasil dari penelitian ini menunjukkan bahwa implementasi paralel algoritme ini dapat mempercepat proses komputasi hingga 55 kali, serta beberapa kandidat senyawa herbal yang dapat ditemukan pada bahan-bahan alam, memiliki nilai similaritas yang tinggi dengan obat coronavirus.

Kata kunci: covid-19, perbandingan similaritas, pemrograman GPU, pemrograman paralel.

ABSTRACT

REFIANTO DAMAI DARMAWAN. *Herbal Compound Screening with GPU Computation on ZINC Database through Sequence Alignment Approach*. Supervised by WISNU ANANTA KUSUMA and HENDRA RAHMAWAN.

Covid-19 is a global pandemic that drives many researcher strive to look for its solution, especially in the field of health, medicine, and total countermeasures. Early screening with in-silico processes is crucial to minimize the search space of the potential drugs to cure a disease. This research aims to find potential drugs of covid-19 disease in ZINC database to be further investigated through in-vitro method. About 997.402.117 chemical compounds are searched about its similarity to some of confirmed drugs to combat coronavirus. Sequential computation would take months to accomplish this task. General programming graphic processing unit approach is used to implement similarity comparison algorithm in parallel, in order to speed up the process. The result of this study shows the parallel algorithm implementation can speed-up the computation process up to 55 times faster, and also that some of the chemical compounds have high similarity score and can be found in nature.

Keywords: covid-19, GPU programming, parallel programming, similarity comparison.

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2021
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.



PENAPISAN SENYAWA HERBAL DENGAN KOMPUTASI GPU PADA BASIS DATA ZINC MELALUI PENDEKATAN PEMBANDINGAN SIMILARITAS

REFIANTO DAMAI DARMAWAN

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Ilmu Komputer

**DEPARTEMEN ILMU KOMPUTER
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2021**

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

1 Auriza Rahmad Akbar, S.Komp., M.Kom. (Ketua)



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Judul Skripsi : Penapisan Senyawa Herbal dengan Komputasi GPU pada Basis Data ZINC melalui Pendekatan Perbandingan Similaritas

Nama : Refianto Damai Darmawan

NIM : G64170001

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Dr.Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.T., M.T.

Pembimbing 2:

Dr. Hendra Rahmawan, S.Kom., M.T.



Diketahui oleh

Ketua Departemen Ilmu Komputer:

Dr. Sony Hartono Wijaya, S.Kom., M.Kom.

19810809 200812 1 002



Tanggal Ujian:
16 Juni 2021

Tanggal Lulus:

(tanggal penandatanganan oleh Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam)



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Desember 2020 sampai bulan Juni 2021 ini ialah utilitas GPU untuk optimasi bioinformatika, dengan judul "Penapisan Senyawa Herbal dengan Komputasi GPU pada Basis Data ZINC melalui Pendekatan Perbandingan Similaritas".

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr.Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.Si, M.Kom. dan Dr. Hendra Rahmawan, S.Kom., M.T. yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing akademik, moderator seminar, dan penguji luar Komisi pembimbing. Di samping itu, penghargaan penulis sampaikan kepada Dr.Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.Si, M.Kom. beserta staf Laboratorium Biofarmaka IPB yang telah membantu selama pengolahan data. Ungkapan terima kasih juga disampaikan kepada ayah, ibu, serta seluruh keluarga yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan..

Bogor, Juni 2021

Refianto Damai Darmawan

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	3
1.5 Ruang Lingkup Penelitian	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Penapisan Senyawa berbasis Ligan	4
2.2 Senyawa Herbal	4
2.3 <i>Graphic Processing Unit</i>	4
2.4 Basis Data ZINC	6
2.5 Algoritme Perbandingan Similaritas	6
III METODE	8
3.1 Tahapan Penelitian	8
3.2 Data Penelitian	8
3.3 Pengolahan <i>Fingerprint</i>	9
3.4 Penentuan Ukuran Blok	11
3.5 Penentuan Jumlah Aliran (<i>Streamsize</i>)	12
3.6 Perbandingan Similaritas	12
3.7 Evaluasi Algoritme	16
3.8 Aplikasi pada Basis Data ZINC	16
3.9 Lingkungan Pengembangan	16
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	18
4.1 Pengolahan <i>Fingerprint</i>	18
4.2 Penentuan Ukuran Blok	20
4.3 Penentuan Jumlah Aliran (<i>Streamsize</i>)	21
4.4 Perbandingan Similaritas	22
4.5 Aplikasi pada Basis Data ZINC	24
V SIMPULAN DAN SARAN	28
5.1 Simpulan	28
5.2 Saran	28
DAFTAR PUSTAKA	29
LAMPIRAN	32
RIWAYAT HIDUP	49

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkannya dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



DAFTAR TABEL

1	Daftar senyawa obat yang digunakan sebagai acuan	8
2	Hasil Tiga teratas perbandingan similaritas pada seluruh basis data ZINC	24

DAFTAR GAMBAR

1	Peran Ligan dalam interaksi virus dan sel (Sethi <i>et al.</i> 2020)	2
2	Ilustrasi desain arsitektur CPU dan GPU	5
3	Contoh file unduhan dari basis data ZINC	6
4	Diagram alir tahapan penelitian	8
5	Data yang diunduh dari basis data ZINC	10
6	Diagram alir proses pengolahan <i>fingerprint</i>	10
7	Contoh representasi <i>fingerprint</i> PubChem	11
8	Pseudocode untuk algoritme sekuensial CPU pengolahan <i>fingerprint</i>	11
9	Pseudocode untuk algoritme paralel CPU pengolahan <i>fingerprint</i>	11
10	Pseudocode untuk algoritme penentuan ukuran blok	12
11	Pseudocode untuk algoritme paralel CPU pengolahan <i>fingerprint</i>	12
12	Ilustrasi penghitungan similaritas tanimoto	13
13	Representasi proses perbandingan secara sekuensial	13
14	Pseudocode untuk algoritme sekuensial CPU perbandingan similaritas	14
15	Representasi proses perbandingan secara paralel	15
16	Pseudocode untuk algoritme paralel CPU perbandingan similaritas	16
17	Grafik waktu pengolahan <i>fingerprint</i> MACCS (paralel CPU)	19
18	Grafik nilai <i>speed-up</i> pengolahan <i>fingerprint</i> MACCS (paralel CPU)	19
19	Grafik waktu pengolahan <i>fingerprint</i> PubChem (paralel CPU)	20
20	Grafik nilai <i>speed-up</i> pengolahan <i>fingerprint</i> PubChem (paralel CPU)	20
21	Grafik nilai ukuran blok dengan waktu pengerjaan algoritme perbandingan similaritas	21
22	Grafik nilai jumlah aliran terhadap waktu pengerjaan algoritme perbandingan similaritas	22
23	Grafik waktu proses perbandingan similaritas dengan <i>fingerprint</i> MACCS (paralel GPU)	23
24	Grafik nilai <i>speed-up</i> perbandingan similaritas dengan <i>fingerprint</i> MACCS (paralel GPU)	23
25	Grafik waktu proses perbandingan similaritas dengan <i>fingerprint</i> PubChem (paralel GPU)	24
26	Grafik nilai <i>speed-up</i> perbandingan similaritas dengan <i>fingerprint</i> PubChem (paralel GPU)	24

DAFTAR LAMPIRAN

	Hasil nilai <i>speed-up</i> pengolahan <i>fingerprint</i> MACCS	33
--	---	----

2	Hasil nilai <i>speed-up</i> pengolahan <i>fingerprint</i> PubChem	34
3	Hasil waktu perbandingan similaritas dengan berbagai ukuran blok	35
4	Hasil waktu perbandingan similaritas dengan berbagai jumlah aliran (<i>stream</i>)	36
5	Hasil nilai <i>speed-up</i> algoritme perbandingan similaritas untuk <i>fingerprint</i> MACCS	39
6	Hasil nilai <i>speed-up</i> algoritme perbandingan similaritas untuk <i>fingerprint</i> PubChem	40
7	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap remdesivir	41
8	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap favipiravir	42
9	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap lopinavir	43
10	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap hydroxychloroquine	44
11	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap chloroquine	45
12	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap nitazoxanide	46
13	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap ivermectin	47
14	Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap oseltamivir	48

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :

- a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.