

LAMPIRAN

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.

Lampiran 1 Hasil nilai *speed-up* pengolahan *fingerprint* MACCS

Jumlah Data	Waktu (detik)		<i>Speed-up</i>
	Sekuensial	Paralel	
10	0,110	0,067	1,642
50	0,402	0,118	3,407
100	0,730	0,229	3,188
500	3,980	1,270	3,134
1.000	6,745	2,164	3,117
5.000	35,982	3,643	9,877
10.000	68,594	7,861	8,726
50.000	346,762	23,550	14,723
100.000	711,037	32,199	22,083
300.000	2.070,507	74,681	23,725

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



Lampiran 2 Hasil nilai *speed-up* pengolahan *fingerprint* PubChem

Jumlah Data	Waktu (detik)		<i>Speed-up</i>
	Sekuensial	Paralel	
10	0,262	0,068	3,853
50	0,911	0,145	6,283
100	2,097	0,220	9,532
500	8,436	0,688	12,262
1.000	16,500	1,235	13,360
5.000	87,179	6,367	13,692
10.000	169,011	12,014	14,068
50.000	849,909	55,638	15,276
100.000	1.634,857	110,966	14,733
300.000	4.701,407	307,838	15,272

@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.

Lampiran 3 Hasil waktu perbandingan similaritas dengan berbagai ukuran blok

Ukuran Blok	Rata-rata Waktu (detik)
32	1.2144
64	1.2449
96	1.2180
128	1.1993
160	1.2348
192	1.1982
224	1.1867
256	1.2476
288	1.2296
320	1.2068
352	1.1846
384	1.2158
416	1.1922
448	1.1931
480	1.1949
512	1.2111
544	1.2001
576	1.2305
608	1.1903
640	1.1758
672	1.1806
704	1.1923
736	1.2006
768	1.1900
800	1.2075
832	1.1976
864	1.2431
896	1.2286
928	1.2014
960	1.1899
992	1.2343
1.024	1.2008

@Hak cipta milik IPB University

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.

Lampiran 4 Hasil waktu perbandingan similaritas dengan berbagai jumlah aliran (*stream*)

Jumlah Aliran	Rata-rata Waktu (detik)
1	1.0857
2	0.9925
3	0.9267
4	0.8419
5	0.8283
6	0.8887
7	0.8391
8	0.8501
9	0.8729
10	0.8646
11	0.8466
12	0.8327
13	0.8778
14	0.8506
15	0.8361
16	0.8914
17	0.8703
18	0.8526
19	0.8876
20	0.8599
21	0.8538
22	0.8383
23	0.8796
24	0.8655
25	0.8442
26	0.8842
27	0.8707
28	0.8516
29	0.9023
30	0.8619
31	0.8523
32	0.8933
33	0.8730
34	0.8569
35	0.8495
36	0.8871
37	0.8620
38	0.8518
39	0.8969
40	0.8701
41	0.8552
42	0.8476
43	0.8856
44	0.8583

45	0.8565
46	0.8421
47	0.9209
48	0.8547
49	0.8554
50	0.8915
51	0.8559
52	0.8562
53	0.8991
54	0.8653
55	0.8501
56	0.8409
57	0.8865
58	0.8551
59	0.8514
60	0.8934
61	0.8533
62	0.8543
63	0.8939
64	0.8691
65	0.8594
66	0.8919
67	0.8802
68	0.8556
69	0.8437
70	0.8897
71	0.8695
72	0.8546
73	0.8963
74	0.8634
75	0.8549
76	0.8544
77	0.9230
78	0.8566
79	0.8629
80	0.8953
81	0.8645
82	0.8653
83	0.9017
84	0.8819
85	0.8737
86	0.8952
87	0.8755
88	0.8735
89	0.8525
90	0.8911
91	0.8623
92	0.8713

@Hak cipta milik IPB University

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.

93	0.9020
94	0.8789
95	0.8603
96	0.9039
97	0.8757
98	0.8688
99	0.9189
100	0.8857



- 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.

Lampiran 5 Hasil nilai *speed-up* algoritme perbandingan similaritas untuk *fingerprint* MACCS

Jumlah Data	Waktu (detik)		<i>Speed-up</i>
	Sekuensial	Paralel	
10	0,008	0,192	0,041
50	0,022	0,182	0,121
100	0,037	0,193	0,190
500	0,166	0,207	0,803
1.000	0,307	0,196	1,562
5.000	1,511	0,297	5,081
10.000	3,010	0,392	7,687
50.000	15,922	1,023	15,570
100.000	31,126	1,723	18,062
300.000	91,684	4,813	19,048

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



Lampiran 6 Hasil nilai *speed-up* algoritme perbandingan similaritas untuk *fingerprint* PubChem

Jumlah Data	Waktu (detik)		<i>Speed-up</i>
	Sekuensial	Paralel	
10	0,016	0,167	0,094
50	0,077	0,192	0,402
100	0,160	0,216	0,742
500	0,577	0,186	3,101
1.000	1,118	0,209	5,349
5.000	5,891	0,305	19,291
10.000	10,826	0,480	22,551
50.000	57,994	1,283	45,209
100.000	116,079	2,091	55,505
300.000	346,162	6,349	54,523

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

Lampiran 7 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap remdesivir

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000029134440	0.77992278	Brivanib Alaninate
ZINC000013684256	0.75675678	Brivanib
ZINC000044351074	0.73966944	Diastereomeric Mix
ZINC000053147179	0.73913043	Puromycin
ZINC000049771447	0.73828125	Pad
ZINC000053684280	0.73828125	Cpad
ZINC000053683811	0.73170733	Tyrosyladenylate
ZINC000016051386	0.72972971	Tryptophanyl-5'amp
ZINC000003927238	0.72908365	Bamirastine
ZINC000029571783	0.72384935	Deaminofomycin
ZINC000003924220	0.72314047	Soraprazan
ZINC000053684179	0.72156864	Mant-Adp
ZINC000049775188	0.72118961	Nikkomycin X
ZINC000049946796	0.71984434	Benzamideadeninedinucleoside

@Hak cipta milik IPB University

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

Lampiran 8 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap favipiravir

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000005116994	0.7500000000	5-Hydroxypyrazinamide
ZINC000001081066	0.7478260994	2-Carboxypyrazine
ZINC000000500059	0.7264957428	Pyrazine Carboxylic Acid Hydrazide
ZINC000001481960	0.7226890922	Acipimox
ZINC000021673450	0.6821705699	Morinamide
ZINC000000002005	0.6725663543	Pza
ZINC000014448311	0.6465517282	2-Methoxy-3,5-Dimethylpyrimidine
ZINC000000405269	0.6465517282	Methoxymethylpyrazine
ZINC000012660678	0.6375839114	Xanthopterin
ZINC000001840969	0.6347826123	2-Methoxy-5-Methylpyrazine
ZINC000026673320	0.6347826123	2-Methoxy-6-Methylpyrazine
ZINC000000164508	0.6240000129	2-Acetyl-3-Methylpyrazine
ZINC000014491514	0.6209150553	1h,3h
ZINC000002575506	0.6198347211	2-Ethoxy-3-Methylpyrazine

@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.

Lampiran 9 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap lopinavir

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000096903141	0.827380955	Scutianine D
ZINC000028637921	0.821428597	Paecilodepsipeptide A
ZINC000049889244	0.821428597	Gliotide
ZINC000095607016	0.821428597	Paecilodepsipeptide C
ZINC000095607009	0.815476179	Paecilodepsipeptide B
ZINC000100822468	0.808383226	Vignatic Acid A
ZINC000230078061	0.808383226	Adouetine Y
ZINC000100822463	0.808383226	Vignatic Acid A
ZINC000085908661	0.808383226	Adouetine Y
ZINC000095561271	0.808139562	Pullularin C
ZINC000095563846	0.808139562	Pullularin A
ZINC000044387723	0.803571403	Sanjoinine G1
ZINC000096903019	0.802395224	Scutianine B
ZINC000004214064	0.801242232	Oxiramide

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



Lampiran 10 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap hydroxychloroquine

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000001530652	1.000000000	Hydroxychloroquine
ZINC000001843038	0.993377506	Cletoquine
ZINC0000019144231	0.933774828	Chloroquine
ZINC000001873617	0.927152335	Desethylchloroquine
ZINC000006036375	0.920529782	Bidesethyl Chloroquine
ZINC000001666887	0.915584445	Chloroquine- Pyrolidinyl
ZINC000005751278	0.909677445	Chloroquine Mustard
ZINC000045357215	0.891719758	Phenylequine
ZINC000003882239	0.853503167	Aminoquinol
ZINC000040380706	0.847561001	Dehydroxy Tebaquine
ZINC000103292547	0.832335352	Dehydroxyfluoro Tebaquine
ZINC000028470572	0.830303013	Metaquine
ZINC000027309019	0.827380955	Flourotebuquine
ZINC000033505730	0.823170721	Piclopastine

@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.

Lampiran 11 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap chloroquine

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000019144226	1.0000000000	Chloroquine
ZINC000001873617	0.9929078221	Desethylchloroquine
ZINC000006036375	0.9858155847	Bidesethyl Chloroquine
ZINC000001666887	0.9791666865	Chloroquine- Pyrolidinyl
ZINC000005751278	0.9724137783	Chloroquine Mustard
ZINC000045357215	0.9523809552	Phenylequine
ZINC000001530654	0.9337748289	Hydroxychloroquine
ZINC000001843038	0.9271523356	Cletoquine
ZINC000003882239	0.9115646482	Aminoquinol
ZINC000040380706	0.9025974274	Dehydroxy Tebaquine
ZINC000103292547	0.8853503466	Dehydroxyfluoro Tebaquine
ZINC000028470572	0.8838709593	Metaquine
ZINC000027309019	0.8797468543	Flourotebuquine
ZINC000002018210	0.8750000000	Iomethin

@Hak cipta milik IPB University

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

Lampiran 12 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap nitazoxanide

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000005924265	0.897058844	Tizoxanide
ZINC000029124339	0.883928597	Tizoxanide Glucuronide
ZINC000000002257	0.727272748	Zolamine
ZINC000004217523	0.693779885	Tenonitrozole
ZINC000013889772	0.691588759	Neticonazole
ZINC000004194760	0.684873938	Salazosulfathiazole
ZINC000040917958	0.684210538	Gw804482x
ZINC000004217102	0.679487168	Nifuralide
ZINC000053294263	0.679012358	Bitopertin
ZINC000049889260	0.678571403	Lyngbyapeptin A
ZINC000001846293	0.671361506	Zoliprofen
ZINC000000007363	0.671171188	Irampanel
ZINC000001846054	0.671052634	Tioxamast
ZINC000000968328	0.669527888	Rosiglitazone

@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.

Lampiran 13 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap ivermectin

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000169300893	1.000000000	Avermectin B1 Monosaccharide
ZINC000169366782	0.980392158	Avermectin B2 Monosaccharide
ZINC000169302726	0.980198025	27-Betamethoxy Milbemycin A4
ZINC000169302721	0.980198025	27-Alphamethoxy Milbemycin A4
ZINC000169302690	0.980198025	27-Hydroxy Milbemycin A4
ZINC000169302679	0.970297038	27-Hydroxy Milbemycin A3
ZINC000169361193	0.960396051	Ivm Aglycone
ZINC000169292347	0.960396051	Nemadectin
ZINC000169339191	0.950980365	Milbemycin Alpha25
ZINC000169302778	0.950495064	Milbemycin A4
ZINC000169345978	0.940594077	Milbemycin Beta9
ZINC000169302773	0.940594077	Milbemycin A3
ZINC000169339190	0.932692289	Milbemycin Alpha11
ZINC000169302674	0.923809528	27-Oxomilbemycin A4

@Hak cipta milik IPB University

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

Lampiran 14 Daftar senyawa yang memiliki nilai similaritas tinggi terhadap oseltamivir

ID Kandidat Obat	Nilai Similaritas	Nama Lain
ZINC000003929509	0.9494949579	oseltamivir carboxylic acid
ZINC000013370140	0.7592592835	Antillatoxin
ZINC000150548865	0.7500000000	Deoxyaurilide
ZINC000169367251	0.7304347754	Bistratene B
ZINC000169290233	0.7264957428	Aspochalasin J
ZINC000028971343	0.7247706652	Cespitulactam E
ZINC000169345618	0.7155172229	Thailandepsin B
ZINC000169371244	0.7142857313	Aspochalasin I
ZINC000095615787	0.7105262876	Aurilide
ZINC000169291254	0.7079645991	Spiruchostatin A
ZINC000169296555	0.7068965435	Spiruchostatin B
ZINC000040424526	0.7058823705	Pyriperine B
ZINC000044032035	0.7039999962	Renieramycin G
ZINC000169306815	0.7027027011	Zampanolide

@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.