

PREDIKSI POTENSI SENYAWA PADA DAUN KEMUNING SEBAGAI ANTI OBESITAS MENGGUNAKAN MULTI-NETWORK CLUSTERING

INDAH PUSPITASARI



**PROGRAM MAGISTER ILMU KOMPUTER
SEKOLAH SAINS DATA, MATEMATIKA, DAN INFORMATIKA
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

- 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.

Perpustakaan IPB University



PERNYATAAN MENGENAI TESIS DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa tesis dengan judul “Prediksi Potensi Senyawa pada Daun Kemuning sebagai Antiobesitas Menggunakan *Multi-Network Clustering*” 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 tesis ini.

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

Bogor, Juli 2026

Indah Puspitasari
G6501221024



RINGKASAN

INDAH PUSPITASARI. Prediksi Potensi Senyawa pada Daun Kemuning sebagai Antiobesitas Menggunakan *Multi-Network Clustering*. Dibimbing oleh WISNU ANANTA KUSUMA dan TOTO HARYANTO.

Penelitian ini menerapkan pendekatan farmakologi jaringan (*network pharmacology*) secara komputasional dengan kerangka kerja *Multi-Network Clustering* (MNC) untuk menganalisis jaringan protein dan domain yang berkaitan dengan potensi antiobesitas daun kemuning (*Murraya paniculata*). Sebanyak 16 senyawa hasil analisis LC–MS dari Fatriani et al. (2024) diseleksi berdasarkan galat massa ± 5 ppm dan *drug-likeness* menggunakan SwissADME. Target protein diprediksi menggunakan SuperPred dan diintegrasikan dengan data gen terkait obesitas dari OMIM. Setelah pemetaan, standardisasi UniProt ID, penyaringan, dan deduplikasi, diperoleh 559 protein unik. Data PPI, DDI, dan PDA dari STRING, 3DID, dan Pfam kemudian dikonstruksi dalam bentuk matriks dan diintegrasikan dalam kerangka MNC. Algoritma MNC menggunakan MCL sebagai inisialisasi dan melakukan optimasi fungsi objektif melalui pembaruan λ dan H hingga konvergen pada iterasi ke-468. MNC menghasilkan 13 kluster dibandingkan 63 kluster pada MCL, dengan peningkatan ukuran rata-rata dan kerapatan modul masing-masing sebesar 27,26% dan 11,08%. Validasi dan pembobotan multi-kriteria mengidentifikasi Cluster_2 dan Cluster_4 sebagai kluster terkuat. Analisis sentralitas mengidentifikasi *ESR1*, *EP300*, dan *CREBBP* sebagai protein hub utama. *Citric acid* dan *murraol* teridentifikasi sebagai kandidat senyawa yang berpotensi berinteraksi dengan target tersebut, sedangkan *EP300* dan *CREBBP* memiliki tujuh domain fungsional Pfam yang mendukung perannya dalam regulasi transkripsi dan metabolisme yang berkaitan dengan obesitas. Hasil ini menunjukkan bahwa integrasi PPI, DDI, dan PDA melalui MNC dapat digunakan untuk mengidentifikasi kandidat target dan senyawa anti-obesitas dari *M. paniculata*.

Kata kunci: farmakologi jaringan, *interaksi protein-domain*, *multi-network clustering*, *Murraya paniculata*, obesitas



SUMMARY

INDAH PUSPITASARI. Predicting The Antiobesity Potential of Bioactive Compounds from *Murraya Paniculata* Leaves Using Multi-Network Clustering. Supervised by WISNU ANANTA KUSUMA of 1st SUPERVISOR 1st, TOTO HARYANTO of 2nd SUPERVISOR.

This study applied a computational network pharmacology approach using the Multi-Network Clustering (MNC) framework to analyze the protein and domain networks associated with the antiobesity potential of kemuning leaves (*Murraya paniculata*). A total of 16 compounds identified via LC–MS analysis by Fatriani et al. (2024) were selected based on a mass error of ± 5 ppm and drug-likeness assessed using SwissADME. Target proteins were predicted using SuperPred and integrated with obesity-related gene data from OMIM. Following mapping, UniProt ID standardization, filtering, and deduplication, 559 unique proteins were identified. PPI, DDI, and PDA data from STRING, 3DID, and Pfam were then organized into matrices and integrated into the MNC framework. The MNC algorithm used MCL for initialization and optimized the objective function by updating λ and H until convergence at the 468th iteration. MNC produced 13 clusters compared to 63 clusters in MCL, with increases in average module size and density of 27.26% and 11.08%, respectively. Multi-criteria validation and weighting identified Cluster_2 and Cluster_4 as the strongest clusters. Centrality analysis identified ESR1, EP300, and CREBBP as the main hub proteins. Citric acid and murraol were identified as candidate compounds that could potentially interact with these targets, while EP300 and CREBBP possess seven Pfam functional domains that support their roles in the network.

Keywords: multi-network clustering, *Murraya paniculata*, obesity, protein-domain interactions, network pharmacology



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 2026
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.

PREDIKSI POTENSI SENYAWA PADA DAUN KEMUNING SEBAGAI ANTI OBESITAS MENGGUNAKAN MULTI-NETWORK CLUSTERING

INDAH PUSPITASARI

Tesis
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Magister pada
Program Studi Ilmu Komputer

**PROGRAM MAGISTER ILMU KOMPUTER
SEKOLAH SAINS DATA, MATEMATIKA, DAN INFORMATIKA
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

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.

Penguji Luar Komisi Pembimbing pada Ujian Tesis:
Dr. Eng. Annisa, S. Kom., M.Kom.



Judul Tesis : Prediksi Potensi Senyawa pada Daun Kemuning sebagai
Antiobesitas Menggunakan *Multi-Network Clustering*
Nama : Indah Puspitasari
NIM : G6501221024

@Hak cipta milik IPB University

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Prof. Dr. Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.T., M.T.

Pembimbing 2:
Dr. Toto Haryanto, S.Kom., M.Si.

Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Dr. Toto Haryanto, S.Kom., M.Si.
NIP 198211172014041001

Dekan Sekolah Sains Data, Matematika, dan
Informatika:
Prof. Dr. Ir. Agus Bueno, M.Si., M.Kom.
NIP. 196607021993021001

Tanggal Ujian:
3 Agustus 2026

Tanggal Pengesahan:

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Subhanahu wa Ta'ala atas segala karunia dan rahmat-Nya, sehingga karya ilmiah yang berjudul “Prediksi Potensi Senyawa pada Daun Kemuning sebagai Antiobesitas Menggunakan *Multi-Network Clustering*” ini dapat diselesaikan dengan baik. Penelitian ini telah dilaksanakan sejak bulan Januari 2025 hingga Maret 2026. Penyelesaian karya ilmiah ini tentu tidak terlepas dari bimbingan, bantuan, dan dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih dan penghargaan yang sebesar-besarnya kepada pihak-pihak yang telah berjasa selama masa studi dan penelitian ini.

Ucapan terima kasih yang tulus penulis sampaikan kepada Prof. Dr. Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.T., M.T. dan Dr. Toto Haryanto, S.Kom., M.Si. selaku dosen pembimbing, atas segala waktu, kesabaran, arahan, serta masukan yang sangat konstruktif sepanjang proses penyusunan tesis ini. Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada Dr. Aziz Kustiyo, S.Si., M.Kom., selaku moderator ujian, dan Dr. Eng. Annisa, S.Kom., M.Kom. selaku penguji luar komisi pembimbing, atas evaluasi serta saran berharga yang diberikan dalam pengujian kelayakan tesis. Selanjutnya, ucapan terima kasih ditujukan kepada seluruh bapak dan ibu dosen program studi yang telah membagikan ilmu pengetahuannya selama masa perkuliahan, serta kepada seluruh staf dan tenaga kependidikan (tendik) yang telah banyak membantu memfasilitasi kelancaran urusan administrasi akademik penulis hingga tahap akhir.

Rasa terima kasih yang mendalam dan penuh cinta penulis persembahkan kepada suami tercinta, Muhammad Aldin Salman, atas segala kesabaran, pengertian, doa, dan dukungan emosional luar biasa yang selalu menjadi sumber kekuatan terbesar bagi penulis. Ucapan terima kasih yang tak terhingga juga penulis sampaikan kepada Ayahanda Sutrisno dan Ibunda Muniroh, kakak tercinta Alya, serta Ali dan seluruh keluarga besar atas curahan doa, kasih sayang, dan dukungan moral maupun material yang tiada henti. Terima kasih pula kepada seluruh rekan sejawat dan teman-teman satu angkatan yang senantiasa saling membantu, bertukar pikiran, serta memberikan semangat juang selama proses perkuliahan dan penyelesaian penelitian ini berlangsung.

Semoga segala bentuk kerja sama dan dukungan yang telah diberikan menjadi berkah dan mendapatkan balasan yang setimpal. Terima kasih atas perhatian dan bantuan yang telah diberikan. Penulis berharap karya ilmiah ini dapat bermanfaat bagi pihak-pihak yang membutuhkan serta turut berkontribusi bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juli 2026

Indah Puspitasari



DAFTAR ISI

DAFTAR ISI	x
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xii
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	3
1.5 Ruang Lingkup	3
II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Obesitas dan Mekanisme Antiobesitas	5
2.2 Daun Kemuning (<i>Murraya paniculata</i>) dan Senyawa Bioaktif	6
2.3 Jaringan Protein dan Interaksi Molekuler	8
2.4 Multi-Network Clustering (MNC)	9
2.5 Identifikasi <i>Hub Protein</i> dan Mekanisme Molekuler	10
2.6 Penelitian Terdahulu dan Research Gap	10
III METODE	12
3.1 Rancangan Penelitian	12
3.1.1 Akuisisi data	12
3.1.2 Konstruksi jaringan	13
3.1.3 Optimisasi MNC	14
3.1.4 Validasi dan analisis	16
3.2 Kebutuhan Pengembangan	19
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	21
4.1 Pemilihan Senyawa Bioaktif dan Profil Farmakokinetik	21
4.2 Identifikasi dan Integrasi Protein Target	22
4.3 Data Struktural (Domain dan Interaksi Antar-Domain)	23
4.4 Pembentukan Jaringan Berlapis (Multi-Layer Network)	23
4.5 Optimisasi dan Konvergensi Algoritma Multi-Network Clustering (MNC)	24
4.5.1 Inisialisasi jaringan dan <i>Markov Clustering</i> (MCL)	24
4.5.2 Status Konvergensi Optimasi Multi-Network Clustering (MNC)	25
4.5.3 Berkas keluaran utama (Output Files)	26
4.5.4 Proyeksi tingkat domain (Hdomain)	27
4.6 Validasi dan analisis Multi-Network Clustering (MNC)	27
4.6.1 Pengukuran koherensi multilayer jaringan	27
4.6.2 Signifikansi statistik fungsional	28
4.6.3 Tingkat akurasi terhadap basis data CORUM	30
4.6.4 Skor prioritas terintegrasi	30
4.6.5 Analisis sentralitas dan Perbandingan	31
4.6.6 Prediksi farmakologis	33

V	SIMPULAN DAN SARAN	37
5.1	Simpulan	37
5.1	Saran	37
	DAFTAR PUSTAKA	38
	LAMPIRAN	42

@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.



DAFTAR TABEL

1. Klasifikasi taksonomi <i>Murraya paniculata</i>	7
2. Tabel <i>research gap</i>	10
3. Prosedur iteratif algoritma <i>multi-network clustering</i>	16
4. Ringkasan pemilihan senyawa bioaktif	21
5. Kandidat senyawa terpilih yang lolos uji ADME (SwissADME)	22
6. Rekapitulasi target protein <i>SuperPred</i> dan <i>OMIM</i>	22
7. Contoh sebagian pemetaan protein target ke domain Pfam	23
8. Contoh interaksi antar-domain (<i>Domain-Domain Interaction</i> , DDI)	23
9. Ringkasan parameter topologi jaringan interaksi	24
10. Rekapitulasi koherensi multilayer dan penyaringan kluster	28
11. Hasil validasi kluster fungsional terhadap basis data CORUM	30
12. Hasil perhitungan skor prioritas dan interpretasi kluster potensial	31
13. Peringkat target protein (<i>protein hubs</i>) pada kandidat kluster kuat	32
14. Klasifikasi tiga kandidat target protein teratas (<i>top target proteins</i>)	32
15. Perbandingan kuantitatif performa (Initial MCL vs. MNC)	33
16. Hasil pemetaan senyawa bioaktif terhadap protein target dan domain fungsional terkait obesitas	34
17. Hasil Analisis Sifat Farmakokinetik dan <i>drug-likeness</i> Senyawa Fitokimia <i>Murraya paniculata</i>	35
18. Ringkasan modul farmakologis tervalidasi <i>Murraya paniculata</i> terhadap Obesitas	36

DAFTAR GAMBAR

1. Tanaman <i>Murraya paniculata</i>	7
2. Rancangan penelitian	12
3. Matriks keanggotaan awal (<i>Hinitial</i>) hasil <i>Markov Clustering</i>	14
4. Visualisasi topologi dan matriks ketetangaan lapisan PPI, DDI, dan PDA	24
5. Analisis struktur kluster hasil inisialisasi MCL, mencakup distribusi jumlah protein per kluster dan peta keanggotaan biner (<i>Hinitial</i>)	25
6. Konvergensi algoritma MNC. (A) Perubahan nilai fungsi objektif selama proses iterasi. (B) Perubahan nilai fungsi objektif antariterasi ($\Delta\text{Objective}$) yang menunjukkan proses menuju kondisi konvergensi	26
7. Sebaran jumlah domain pada kluster	27
8. Sepuluh istilah GO:BP dan jalur KEGG teratas (signifikansi tertinggi)	29

DAFTAR LAMPIRAN

1. Daftar senyawa awal (Fatriani, 2024)	42
---	----