

PENAPISAN SENYAWA HERBAL SEBAGAI AGEN ANTIPENUAAN MENGGUNAKAN ALGORITMA RANDOM FOREST

TAN, MARIA PUTRI ARIYANI



**PROGRAM SARJANA ILMU KOMPUTER
SEKOLAH SAINS DATA, MATEMATIKA, DAN INFORMATIKA
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

- 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 sebagai Agen Antipenuaan menggunakan Algoritma Random Forest” 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 2025

Tan, Maria Putri Ariyani
G6401211049

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



ABSTRAK

TAN, MARIA PUTRI ARIYANI. Penapisan Senyawa Herbal sebagai Agen Antipenuaan menggunakan Algoritma Random Forest. Dibimbing oleh WISNU ANANTA KUSUMA dan IMAS SUKAESIH SITANGGANG.

Proses penuaan merupakan proses biologis alami yang ditandai dengan penurunan fungsi fisiologis secara bertahap serta peningkatan risiko penyakit terkait usia. Pada era modern, kesadaran masyarakat akan pentingnya memperhatikan tanda-tanda penuaan untuk menjaga kesehatan dan kualitas hidup, semakin meningkat. Hal ini mendorong upaya pengembangan bahan aktif yang tidak hanya efektif tetapi juga aman, seperti senyawa herbal. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi senyawa herbal yang memiliki potensi sebagai agen antipenuaan melalui analisis interaksi antara senyawa dan target protein menggunakan algoritma Random Forest. Tahapan penelitian meliputi akuisisi data, pra-proses data, pembagian data, pemodelan, evaluasi model, dan prediksi senyawa herbal. Data protein terkait antipenuaan diperoleh dari basis data OMIM, sedangkan data senyawa diambil dari basis data BindingDB, PubChem, dan IJAH Analytics. Algoritma Random Forest dioptimasi dengan proses hyperparameter tuning untuk menghasilkan model yang optimal. Evaluasi model dilakukan menggunakan metrik *accuracy*, *precision*, *recall*, *F1-score*, dan *AUROC*. Hasil pemodelan terbaik diperoleh dengan kombinasi deskriptor AAC dan metode penyeimbangan SMOTEENN, menghasilkan *accuracy* sebesar 96,74%, *precision* 97,36%, *recall* 97,27%, *F1-score* 97,32%, dan *AUROC* 96,59%. Model optimal ini berhasil memprediksi 130 senyawa herbal untuk antipenuaan.

Kata kunci: antipenuaan, interaksi obat-target, Random Forest, senyawa herbal

ABSTRACT

TAN, MARIA PUTRI ARIYANI. Screening Herbal Compounds as Antiaging Agents using Random Forest Algorithm. Supervised by WISNU ANANTA KUSUMA and IMAS SUKAESIH SITANGGANG.

Aging is a natural biological process characterized by a progressive decline in physiological functions and an increased risk of age-related diseases. In the modern era, public awareness of the importance of delaying aging signs to maintain health and quality of life has grown significantly. This has driven the search for active ingredients that are not only effective but also safe, such as herbal compounds. This study aims to identify potential herbal anti-aging agents through interaction analysis between compounds and target proteins using the Random Forest algorithm. The research workflow consisted of data acquisition, preprocessing, splitting, modeling, model evaluation, and compound prediction. Protein targets related to aging were obtained from the OMIM database, while compound data were sourced from BindingDB, PubChem, and IJAH Analytics. The Random Forest algorithm was optimized through hyperparameter tuning. Model performance was evaluated using metrics including accuracy, precision, recall, F1-score, and AUROC. The best performance was achieved using a combination of



AAC descriptors and the SMOTEENN balancing method, yielding an accuracy of 96,74%, precision of 97,36%, recall of 97,27%, F1-score of 97,32%, and AUROC of 96,59%. Using this optimal model, 130 herbal compounds were successfully predicted to have anti-aging potential.

Keywords: antiaging, drug-target interaction, herbal compounds, Random Forest

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.



@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.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2025
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.



@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.



PENAPISAN SENYAWA HERBAL SEBAGAI AGEN ANTIPENUAAN MENGGUNAKAN ALGORITMA RANDOM FOREST

TAN, MARIA PUTRI ARIYANI

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

**PROGRAM SARJANA ILMU KOMPUTER
SEKOLAH SAINS DATA, MATEMATIKA, DAN INFORMATIKA
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@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 sebagai Agen Antipenuaan
menggunakan Algoritma Random Forest

Nama : Tan, Maria Putri Ariyani

NIM : G6401211049

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Prof. Dr. Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.T., M.T.
19711110 200501 1 005

Pembimbing 2:

Prof. Dr. Imas Sukaesih Sitanggang, S.Si, M.Kom.
19750130 199802 2 001

Diketahui oleh

Ketua Program Studi Ilmu Komputer:

Dr. Sony Hartono Wijaya, S.Kom., M.Kom.
1981080 9200812 1 002

Tanggal Ujian:
16 Juni 2025

Tanggal Lulus:



@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.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa karena karunia dan rahmat-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi yang dilaksanakan sejak bulan Agustus 2024 hingga Juni 2025 dengan judul “Penapisan Senyawa Herbal sebagai Agen Antipenuaan menggunakan Algoritma Random Forest”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada:

- a. Kedua orang tua penulis, Bapak Fransiskus Arief Mulyono dan Ibu Yanti Santoso, serta seluruh keluarga penulis yang telah memberikan dukungan dan doa tiada henti kepada penulis.
- b. Prof. Dr. Eng. Wisnu Ananta Kusuma, S.T., M.T. dan Prof. Dr. Imas Sukaesih Sitanggang, S.Si, M.Kom. selaku dosen pembimbing yang telah meluangkan waktu untuk membimbing, mengarahkan, serta memberikan saran dalam penelitian dan penulisan skripsi penulis.
- c. Dr. Toto Haryanto, S.Kom., M.Si. selaku dosen penguji yang telah memberikan saran, kritik, dan masukan untuk penyempurnaan skripsi penulis.
- d. Teman-teman Ilmu Komputer angkatan 58 serta teman-teman dari berbagai departemen yang telah memberikan dukungan dan semangat kepada penulis.
- e. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu yang telah membantu dalam penyelesaian skripsi penulis.

Semoga karya tulis ini bermanfaat dan memberikan kontribusi bagi pihak yang membutuhkan, kemajuan ilmu pengetahuan di bidang bioinformatika, serta perkembangan inovasi kesehatan berbasis herbal di Indonesia.

Bogor, Juni 2025

Tan, Maria Putri Ariyani



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
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	4
2.1 Antipenuaan	4
2.2 Algoritma Random Forest (Breiman 2001)	4
2.3 Deskriptor Molekuler	5
2.4 Deskriptor Protein	6
2.5 SMOTEENN (<i>Synthetic Minority Over-sampling Technique Edited Nearest Neighbors</i>)	8
III METODE	10
3.1 Data Penelitian	10
3.2 Tahapan Penelitian	11
3.3 Lingkungan Pengembangan	15
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	16
4.1 Akuisisi Data Protein dan Senyawa	16
4.2 Akuisisi Data Herbal	16
4.3 Praproses Data	17
4.4 Pembagian Data	19
4.5 Pemodelan	20
4.6 <i>Hyperparameter Tuning</i>	20
4.7 Evaluasi Model	21
4.8 Prediksi Senyawa Herbal	23
V SIMPULAN DAN SARAN	25
5.1 Simpulan	25
5.2 Saran	25
DAFTAR PUSTAKA	26
LAMPIRAN	29
RIWAYAT HIDUP	40

DAFTAR TABEL

1 Kombinasi <i>hyperparameter</i> yang digunakan	14
2 <i>Confusion matrix</i> biner	14
3 Kombinasi <i>hyperparameter</i> optimal	20
4 Perbandingan metrik hasil evaluasi model	21
5 Hasil prediksi senyawa herbal untuk antipenuaan	23
6 Daftar tumbuhan dengan senyawa herbal terkait	24

DAFTAR GAMBAR

1 Ilustrasi algoritma Random Forest (Khan <i>et al.</i> 2021)	5
2 Ilustrasi perhitungan deskriptor <i>amino acid composition</i> (AAC)	7
3 Ilustrasi perhitungan deskriptor <i>dipeptide composition</i> (DC)	7
4 Cara kerja SMOTEENN (Gao <i>et al.</i> 2020)	8
5 Format FASTA pada protein <i>klotho</i>	10
6 Representasi 2D dan SMILES senyawa <i>indoleacetic acid</i>	10
7 Tahapan penelitian	11
8 Ilustrasi penelitian yang dilakukan	12
9 Ilustrasi pembuatan kombinasi antara protein dengan senyawa	16
10 Ilustrasi ekstraksi fitur senyawa <i>indoleacetic acid</i>	17
11 Ilustrasi ekstraksi fitur protein <i>klotho</i>	17
12 DTP dengan deskriptor protein DC	18
13 Proporsi data sebelum dilakukan penyeimbangan	18
14 Proporsi data setelah dilakukan <i>random oversampling</i> dan SMOTE	19
15 Proporsi data setelah dilakukan SMOTEENN	19
16 <i>Confusion matrix</i> pada <i>dataset</i> deskriptor <i>amino acid composition</i> (AAC) tanpa <i>balancing</i>	22
17 <i>Confusion matrix</i> pada <i>dataset</i> deskriptor <i>amino acid composition</i> (AAC) dengan metode <i>balancing</i> SMOTEENN	22
18 Pencarian tumbuhan yang mengandung senyawa herbal terkait antipenuaan pada <i>website</i> IJAH Analytics	23
19 Hasil pencarian tumbuhan pada IJAH Analytics	24

DAFTAR LAMPIRAN

1 Daftar protein antipenuaan yang digunakan	30
2 Kandidat senyawa herbal antipenuaan hasil prediksi model AAC + SMOTEENN dengan probabilitas interaksi $\geq 80\%$	31
3 Kandidat tumbuhan yang mengandung senyawa herbal antipenuaan	36



@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.