

Prosiding Seminar Nasional  
**ADIWIDYA7**  
Pascasarjana

Perspektif Berbagai Bidang Ilmu dalam  
Menghadapi Perkembangan Inovasi Teknologi  
di Era Industri 4.0

Bandung, 1 November 2019





# KATA PENGANTAR

*Bimillahirrohmanirrahim  
Assalamualaikum Wr. Wb.*

Alhamdulillah segala puja dan puji syukur kami haturkan kehadirat Allah SWT atas segala rahmat dan nikmat-Nya sehingga buku Prosiding Seminar Nasional Adiwidya 7 Pascasarjana ITB ini, akhirnya berhasil diterbitkan. Prosiding ini, merupakan kumpulan makalah yang disajikan di dalam rangkaian acara *Call for Paper* (CFP) yang mengambil tema: **“Perspektif Berbagai Bidang Ilmu dalam Menghadapi Perkembangan Inovasi Teknologi di Era Industri 4.0”** yang diselenggarakan pada tanggal 01 November 2019 di Aula Sipil (AISI), kampus ITB Bandung.

CFP ini merupakan salah satu rangkaian agenda acara Adiwidya 7 yang disinergikan dengan agenda Seminar Nasional dan Diskusi Panel (Sendipa). Adiwidya merupakan suatu wadah yang dapat menjadi sarana untuk menerbitkan hasil karya mahasiswa pascasarjana dalam bentuk prosiding paper penelitian dan dapat menjadi media pencerdasan masyarakat umum terkait isu revolusi industri 4.0. Harapan kami dari Adiwidya 7 ini dapat menumbuhkan kesadaran masyarakat dunia dan masyarakat Indonesia pada khususnya mengenai revolusi industri 4.0 untuk kemajuan peradaban suatu bangsa.

Tujuan dari kegiatan ini dalam rangka, menghidupkan budaya akademisi dan literasi bagi mahasiswa, juga dengan harapan dapat meningkatkan kontribusi para mahasiswa pascasarjana dalam upaya menciptakan dan melakukan inovasi dalam bidang sains dan teknologi di era industri 4.0 ini untuk membawa Negara Kesatuan Republik Indonesia menjadi negara yang maju di kancah internasional.

Terima kasih kami ucapkan kepada seluruh penulis yang telah menyumbangkan karyanya, juga kepada seluruh panitia Adiwidya 7 KAMIL pascasarjana ITB secara umum yang sudah bekerja keras merencanakan, mempersiapkan dan melaksanakan acara seminar ini dengan penuh keikhlasan. Juga khususnya kepada tim *Call for Paper* (CFP) yang sudah bekerja keras agar naskah dapat terbit memenuhi kaidah penulisan ilmiah dan ejaan bahasa Indonesia yang disempurnakan dan dari sisi tampilan yang disajikan secara menarik.

Kami mohon maaf, jika dalam penerbitan prosiding ini terdapat kekurangan dan kekeliruan, kepada Allah kami mohon ampun. Kami berharap, semoga prosiding ini memberikan banyak manfaat untuk masyarakat.

Bandung, 20 Maret 2020  
Adiwidya 7 2019,

Moh. Ali  
Ketua Pelaksana




## SUSUNAN DEWAN REDAKSI

Editor Kepala : Aditya Firman Ihsan  
Editor Pelaksana : Jasmine Chanifah Uzdah Bachtiar  
Dewan Editor : Nurul Aisyah Salman, Jessica Olifia  
Asisten Editor : Baiq Ulfana Syabila, Abdurrahman Adam

Layout : Ummi Nur Asyifah Bahmi, Putri Faradilla, Hafi Auliya Nurhayati  
Desain sampul : Hesti Rosita Dwi Putri  
Staf Redaksi : A. Iin Nindy Karlinda K., Arfa Izzati, Arif Efendi, Atika Rahmawati, Helfa Rahmadyani, Jehan Faradika, Nanik Aryani Putri, Togi Haidat Manggara, Zulhendra  
Distribusi : Yeni Saro Manalu, Mutiara Qalbi Pebrian

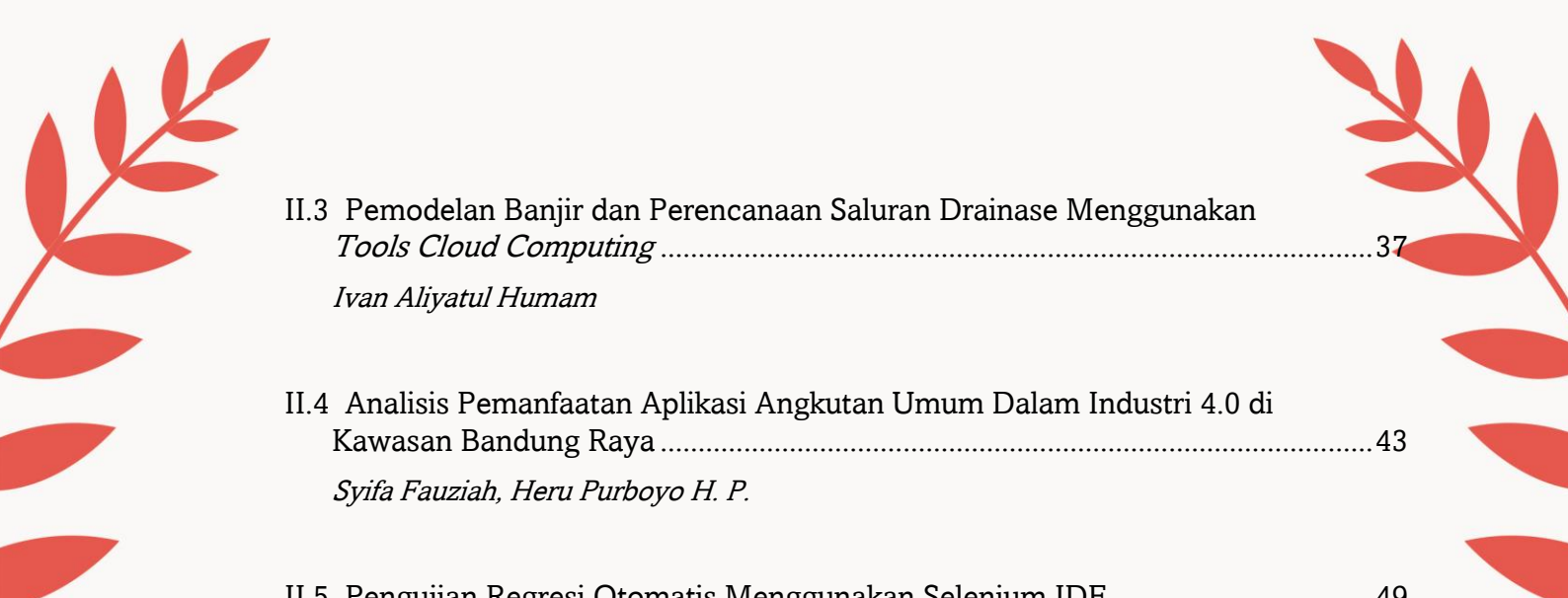
Alamat Redaksi : KAMIL Pasca Sarjana ITB  
Gedung Kayu lt.2, Kompleks Masjid Salman ITB, Jalan Ganesha  
No.10 Bandung 40132






# DAFTAR ISI

<b>Chapter I BIOTEKNOLOGI</b> .....	1
I.1 Analisis Bioinformatika interaksi Protein Tirosin Fosfatase A (PtpA) dengan Asam Lemak Trans-2-Eikosenoat .....	1
<i>Baiq Repika Nurul Furqan, Imam Syahputra Yamin</i>	
I.2 <i>Biorefinery</i> Industri Sawit Nasional dalam Upaya Pemanfaatan Limbah Tandan Kosong Sawit (TKS) sebagai Bahan Baku Xilitol .....	5
<i>Abdurrahman Adam, Shelvi Putri Ayu, Muhammad Hanief Auliya Lukman</i>	
I.3 Strategi Sintesis dan Peningkatan Kadar Zat Aktif Pada Tanaman Kumis Kucing ( <i>Orthosiphon aristatus (Blume)</i> Miq. dengan Rekayasa Genetik.....	11
<i>Fahrauk Faramayuda, Sukrasno, Elfahmi</i>	
I.4 Karakterisasi Taksonomi dan Substrat Alami <i>Phythium vexans</i> Sebagai Potensi Sumber Pangan Protein .....	19
<i>Istikoyah, I Nyoman Pugeg Aryantha</i>	
<b>Chapter II ELEKTRO DAN INFORMATIKA</b> .....	27
II.1 Sistem Monitoring Kualitas Produksi PT. XYZ Berbasis <i>Internet of Things</i> .....	27
<i>Mulyani Pratiwi, Teguh Raharjo, Mochammad Aldi Kushendriawan, Kevin Chandra Abimaulana</i>	
II.2 Kecerdasan Buatan untuk Rekognisi Audio Alat Musik Berbasis <i>Ciri Mel Frequency Cepstral Coefficient</i> (MFCC) .....	33
<i>Sinta, Yokanan Wigar Satwika, Miranti Indar Mandasari</i>	



II.3	Pemodelan Banjir dan Perencanaan Saluran Drainase Menggunakan <i>Tools Cloud Computing</i> .....	37
	<i>Ivan Aliyatul Humam</i>	
II.4	Analisis Pemanfaatan Aplikasi Angkutan Umum Dalam Industri 4.0 di Kawasan Bandung Raya .....	43
	<i>Syifa Fauziah, Heru Purboyo H. P.</i>	
II.5	Pengujian Regresi Otomatis Menggunakan Selenium IDE.....	49
	<i>Dwi Ilham Prabowo, Hanson Prihantoro Putro</i>	
II.6	Perbandingan Filter Digital pada <i>Accelerometer</i> untuk Mengoptimalkan Pengukuran Sudut <i>Pitch</i> dan <i>Roll</i> .....	55
	<i>Adidin Aidin Maulana, Hendri Maja Saputra, Abdurrahman Nurhakim</i>	
<b>Chapter III SOCIAL SCIENCE</b> .....		63
III.1	<i>Social Impact in Digital Economic Era to Improving Coffee Production at Temanggung District</i> .....	63
	<i>Fajar Abdurrafi</i>	
III.2	Konseptualisasi Aplikasi Chatbot sebagai Kanal Interaksi Layanan Pemerintah di Era Industri 4.0 .....	71
	<i>Arfive Gandhi</i>	
III.3	Masyarakat Pasca-Literasi sebagai Fenomena Baru Revolusi Digital .....	77
	<i>Aditya Firman Ihsan</i>	
III.4	Menyoal Tawaran Revolusi Industri 4.0 pada Interaksi Manusia dan Teknologi, Sebuah Kajian Kritis .....	85
	<i>Aditya Firman Ihsan, Muhammad Suryo Panotogamo Abi Suroso</i>	



# Analisis Bioinformatika interaksi Protein Tirosin Fosfatase A (PtpA) dengan Asam Lemak Trans-2-Eikosenoat

Baiq Repika Nurul Furqan<sup>1</sup>, Imam Syahputra Yamin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kelompok Keilmuan Biokimia, Departemen Pengajaran Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung

<sup>2</sup>Kelompok Keilmuan Epidemiologi, Departemen Epidemiologi, Fakultas Kesehatan Masyarakat Universitas Indonesia

## ABSTRACT

*In silico studies (in bioinformatics) have been carried out using molecular docking techniques to find out the interaction between Protein Tyrosine Phosphatase A which is a virulence protein from Mycobacterium tuberculosis (Mtb) that causes TB disease with trans-2-eicosenoic fatty acid compounds as inhibitors (novel TB drug target). The steps carried out in this study are to get the PtpA structure on the Protein Data Bank (PDB) web with ID 1U2P and resolution 2.5 Å (www.pdb.org). Further analysis is performed with the Docking Blaster software to see whether trans-2-eicosenoic fatty acids have potential as inhibitors of PtpA, the results are then displayed with the Chimera 1.10.2 software. This bioinformatics study, also analyzed using Vina Autodock-MGL tools to see the interaction of trans-2-eicosenoic fatty acids in inhibiting PtpA, then the results were reviewed using the Pymol program. In the screening stage with the Docking Blaster, 5 pockets were obtained which made it possible for the PtpA site to bind to the trans-2-eicosenoic fatty acid compound with the lowest binding energy of -77.51 kJ/mol which indicates that the compound has great potential in inhibiting enzymes PtpA. The docking results also show interactions between ligands (inhibitors) and receptors (enzymes), namely interactions between ligands and receptors through the interaction of hydrogen bonds with polar R groups, namely amino acid residues Thr41, Gly35 and Asp70 and interactions of hydrogen bonds with non-polar residues Pro58 and Arg39 base residues. Therefore, this discovery demonstrates the possibility of exploring trans-2-eicosenoic fatty acids as potential inhibitors of the Mtb modulator protein.*

**Keywords:** bioinformatics, PtpA, Mtb, molecular docking, trans-2-eicosenoic fatty acids.

## ABSTRAK

Telah dilakukan studi *in silico* (secara bioinformatika) menggunakan teknik *molecular docking* untuk mengetahui interaksi antara Protein Tirosin Fosfatase A yang merupakan protein virulensi dari *Mycobacterium tuberculosis (Mtb)* penyebab penyakit TB dengan senyawa Asam lemak trans-2-eikosenoat sebagai inhibitor (target obat baru TB). Beberapa tahap yang dilakukan dalam studi ini mendapatkan struktur PtpA di web *Protein Data Bank (PDB)* dengan ID 1U2P dan resolusi 2,5 Å (www.pdb.org). selanjutnya analisis dilakukan dengan software *Docking Blaster* untuk melihat apakah Asam lemak trans-2-eikosenoat memiliki potensi dalam menghambat PtpA, hasilnya kemudian ditampilkan dengan software *Chimera 1.10.2*. Studi bioinformatika ini, dianalisis juga menggunakan *Vina Autodock-MGL tools*, lalu hasilnya diview menggunakan program *Pymol*. Pada tahap *screening* dengan *Docking Blaster*, didapatkan 5 *pocket* yang memungkinkan untuk tempat PtpA akan berikatan dengan senyawa Asam lemak trans-2-eikosenoat dengan energi ikatan paling rendah -77,51 kJ/mol yang menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki potensi yang besar dalam menghambat enzim PtpA. Hasil *docking* juga menunjukkan interaksi antara ligand (inhibitor) dengan *receptor* (enzim) yakni interaksi antara ligand dan reseptor melalui interaksi ikatan hidrogen dengan gugus R polar yakni residu asam amino Thr41, Gly35 dan Asp70 serta interaksi ikatan hidrogen dengan residu non polar Pro58, dan residu basa Arg39. Oleh sebab itu, penemuan ini menunjukkan kemungkinan untuk mengeksplorasi asam lemak trans-2-eikosenoat sebagai inhibitor yang potensial untuk protein modulator *Mtb*.

**Kata kunci :** bioinformatika, PtpA, Mtb, molecular docking, asam lemak trans-2-eikosenoat.

### Kontak penulis

Mahasiswa Departemen Kimia Pengajaran Fakultas MIPA ITB  
E-mail : refika.nf007@gmail.com

## 1. Pendahuluan

Penyakit yang masih menjadi masalah utama bagi dunia kesehatan hingga saat ini adalah Tuberkulosis (TB) yang disebabkan oleh *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb*) (Mascarello *et al.*, 2013) yakni mengakibatkan 1,4 juta orang meninggal setiap tahunnya, dan telah menginfeksi secara laten 1/3 populasi dunia (WHO, 2014). TB laten adalah kondisi *Mtb dormant* (tidur) namun masih hidup di dalam tubuh. *Mtb* akan tidur selama tubuh penderita TB laten dapat melawannya dan tidak dapat ditularkan kepada orang lain. Apabila penderita TB laten sedang mengalami penurunan sistem imun, maka *Mtb* akan "bangun" dan berkembang biak yang dikenal dengan TB aktif atau kasus TB (Meena dan Rajni, 2010).

Dalam keadaan TB laten, bakteri *Mtb* dapat menginfeksi dan resisten di dalam sel makrofag. Hal ini disebabkan kemampuan *Mtb* untuk mensekresi beberapa protein virulens salah satunya *Protein tirosin fosfatase A* (PtpA) dan *Protein tirosin fosfatase B* (PtpB) yang mampu memodulasi dan mencegah pembentukan fusi fagosom dengan lisosom (mengganggu sinyal makrofag pada pembentukan fagosom-lisosom) yang bersifat degradatif terhadap bakteri *Mtb* (Williams, *et al.*, 2010). Untuk mengatasi masalah resistensi tersebut, maka diperlukan suatu pencarian target obat baru yang didasarkan pada inhibisi protein yang disekresi oleh *Mtb*, sehingga pematangan fagosom dan degradasi *Mtb* di dalam sel makrofag dapat berlangsung (Bach *et al.*, 2008).

Usaha mencegah infeksi laten TB telah banyak dilakukan dengan pencarian inhibitor bagi PtpA. Studi terkait mengenai senyawa potensial yang dapat menghambat faktor virulensi dari *Mtb* menggunakan pendekatan bioinformatika untuk menemukan senyawa yang dapat menghambat PtpB, yaitu asam lemak *trans-2-eikosenoat* (Dhanjal *et al.*, 2014). Dalam beberapa penelitian, senyawa yang mampu menghambat PtpB juga mampu menghambat PtpA (Mascarello, *et al.*, 2013). Oleh sebab itu, dalam penelitian ini dilakukan analisis bioinformatika interaksi *Protein Tirosin Fosfatase A* (PtpA) dengan Asam Lemak *Trans-2-Eikosenoat* dalam proses inhibisi.

## 2. Metode

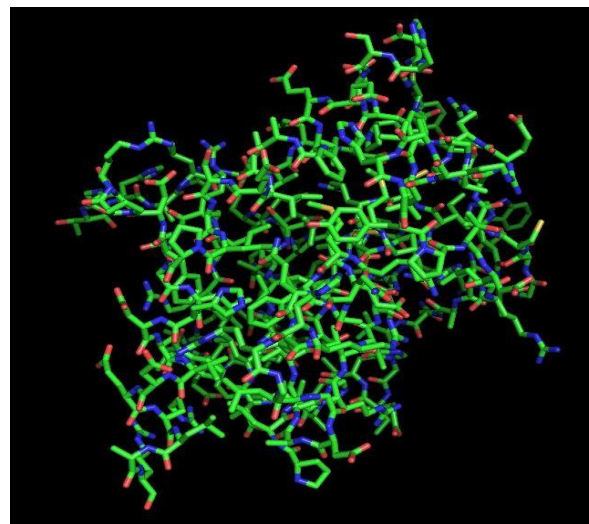
Untuk mengetahui kemungkinan interaksi yang terjadi antara PtpA dengan Asam lemak *eikosenoat*, dilakukan melalui studi *in silico* menggunakan teknik *molecular docking*. Adapun beberapa software yang digunakan di antaranya: Struktur PtpA telah tersimpan didalam *Protein Data Bank (PDB)* dengan ID 1U2P dan resolusi 2,5 Å (www.pdb.org). Setelah ID PtpA (1U2P)

didapatkan, dilakukan analisis dengan software *Docking Blaster* untuk melihat kemungkinan interaksi enzim dengan Asam lemak *eikosenoat*, hasilnya kemudian ditampilkan dengan software *Chimera 1.10.2*. Studi bioinformatika ini, dianalisis juga menggunakan *Vina Autodock-MGL tools*, lalu hasilnya diview menggunakan program *Pymol*.

## 3. Hasil dan Pembahasan

Studi *in silico* adalah salah satu upaya yang dilakukan untuk menemukan obat baru berdasarkan analisis bioinformatika yaitu studi *docking*. Beberapa metode biasa digunakan untuk simulasi *docking*, yaitu pengamatan visualisasi berdasarkan interaksi ligan dan protein. Hal yang sering diamati adalah besarnya energi ikatan dan adanya ikatan hidrogen antara ligan dan protein. Studi ini diharapkan bisa menemukan kandidat obat antituberkulosis yang lebih efektif dan efisien serta memiliki efek samping yang relatif lebih aman dari obat tuberkulosis yang sudah ada (Rinaldhi, 2012).

Pada penelitian ini, dilakukan studi *docking* untuk mengetahui interaksi antara enzim PtpA dengan ketiga senyawa isomer Asam lemak *eikosenoat*. Dari *Protein Data Bank (PDB)* didapatkan struktur PtpA dengan kode ID 1U2P dan resolusi 2,5 Å. File struktur Kristal PtpA yang didapatkan dari *PDB* ditampilkan menggunakan program *Pymol 7.4.4*, sehingga didapatkan struktur kristal PtpA (Gambar 1).

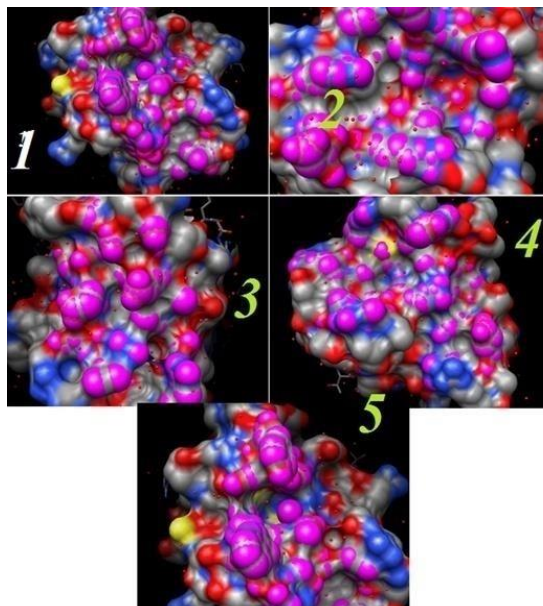


**Gambar 1.** Struktur kristal PtpA bentuk *stick* dengan tampilan *Pymol*

Pada tahap *screening* dengan *Docking Blaster*, didapatkan 5 *pocket* yang memungkinkan untuk tempat PtpA akan berikatan dengan senyawa Asam lemak *eikosenoat*. Kelima *pocket* tersebut ditampilkan menggunakan program *Chimera 1.10.2*. (Gambar 2).



Dari kelima *pocket* tersebut, setelah dilakukan *running docking* dengan *Docking Blaster*, kemudian dari 30 juta senyawa dalam *data base ZINC* didapatkan 2500 senyawa kandidat yang potensial dalam menghambat PtpA, hasilnya menunjukkan adanya ditemukan senyawa *Asam lemak trans-2-eikosenoat*.



Gambar 2. Gambar 5 *pocket* dari PtpA dengan program *Docking Blaster*.

Adapun beberapa senyawa dengan nilai energi ikatan paling rendah menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki potensi yang besar dalam menghambat enzim PtpA (Tabel 1).

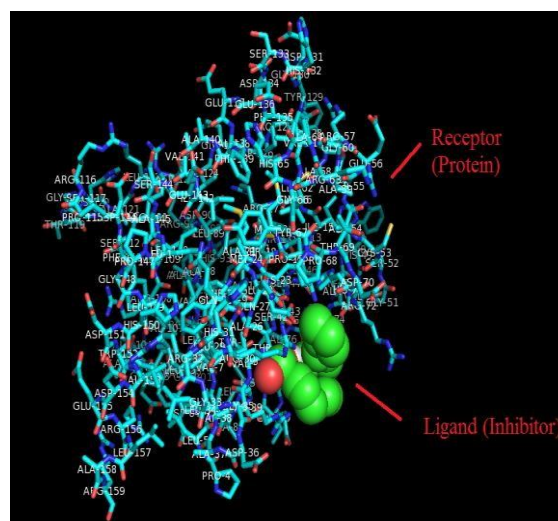
Tabel 1 Senyawa yang berpotensi menghambat PtpA

No	Nama Senyawa	Energi ikatan (kJ/mol)
1	Trans-2-eicosenoic fatty acid	-77,51
2	(2S)-2-(methylamino) butanedioic	-76,38
3	(2R)-2-amino-3-[(S)-hydroxysulfinyl]propanoic	-69,34
4	(2R,3S)-2-amino-3-hydroxybutanedioic	-69,19
5	(2S,3R)-2,3-diaminobutanedioic	-68,07
6	(2S,3R)-2-amino-3-hydroxybutanedioic	-67,95
7	(2R)-2-(methylamino)butanedioic	-63,1
8	(2R)-3-hidroxy-2-(sulfamoylamino)propanoic	-62,44
9	(2S,3R)-3-amino-2-hydroxypentanedioic	-61,99
10	2-(2-propanoylaminoacetyl)aminoacetic	-61,07
11	2-[2-(2-aminoacetyl)aminoacetyl]aminoacetic	-60,64

12	(2R,3R)-3-amino-2-hydroxypentanedioic	-60,24
13	(tert-butoxycarbonylamino)methanesulfinic	-59,88

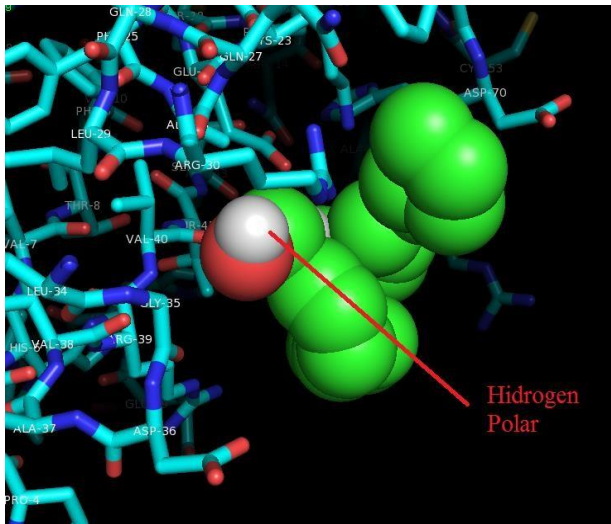
Berdasarkan senyawa dari kelima *pocket* hasil *Docking Blaster* (Gambar 2), telah didapatkan senyawa target yakni *asam lemak trans-2-eikosenoat*, sehingga dilanjutkan dengan studi *docking* menggunakan *software* lain untuk melihat interaksinya yaitu program *Autodock MGL Tools* dan *Autodock Vina* yang hasilnya kemudian ditampilkan kembali menggunakan program *Pymol 7.4.4*.

Hasil *docking* menunjukkan interaksi antara enzim PtpA (molekul kecil berwarna hijau) dengan *Asam lemak trans-2-eikosenoat* (molekul besar warna-warni) secara kasar, yakni adanya interaksi ikatan hidrogen dari ligan *Asam lemak trans-2-eikosenoat* dengan reseptor enzim PtpA (Gambar 3).

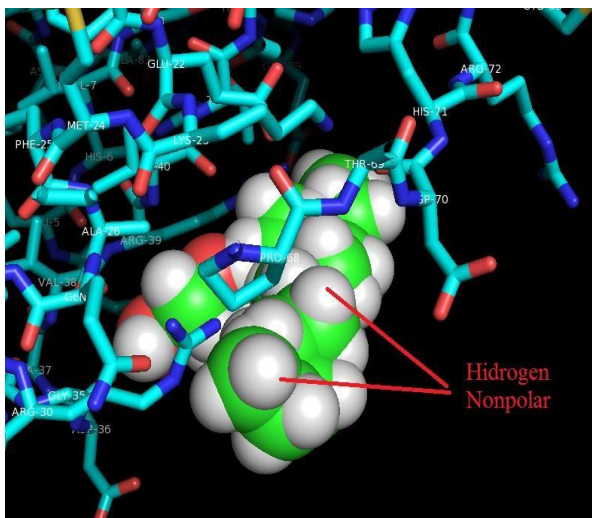


Gambar 3. Interaksi enzim PtpA dengan *Asam lemak trans-2-eikosenoat*.

Hasil dari *docking* menggunakan *Autodock Vina-MGL Tools* juga menunjukkan interaksi antara ligan dan reseptor melalui interaksi ikatan hidrogen dengan gugus R polar yakni residu asam amino *Thr41*, *Gly35* dan *Asp70* (Gambar 4) serta interaksi ikatan hydrogen dengan residu nonpolar *Pro58*, dan residu basa *Arg39* (Gambar 5).



**Gambar 4.** Interaksi ikatan hidrogen dengan residu polar ligan-reseptor.



**Gambar 5.** Interaksi ikatan hidrogen dengan residu non polar dan basa ligan-reseptor

#### 4. Kesimpulan

Berdasarkan data hasil dan pembahasan, maka dapat disimpulkan bahwa studi bioinformatik interaksi inhibisi PtpA oleh senyawa asam lemak trans-2-eikosenoat berhasil ditunjukkan dengan energi ikatan paling rendah sebesar -77,51 kJ/mol dari hasil *docking blaster* dan adanya interaksi antara ligan dan reseptor melalui interaksi ikatan hidrogen dengan gugus R polar yakni residu asam amino Thr41, Gly35 dan Asp70 serta interaksi ikatan hidrogen dengan residu non polar Pro58, dan residu basa Arg39.

#### Ucapan Terima Kasih

Ucapan terimakasih dipersembahkan untuk dosen pembimbing yang telah memberikan bantuan dana penelitian dan membimbing dengan sangat baik.

#### Daftar Pustaka

- Bach, H., Pavavinasasundaram, K.G., Wong, D., Hmama, Z., dan Av-Gay, Y. (2008). Mycobacterium tuberculosis Virulence Is Mediated by PtpA Dephosphorylation of Human Vacuolar Protein Sorting 33B. *Cell Host Microbe*, 3, 316-22.
- Dhanjal, J.K., Sonam, G., Sudhanshu, S., Ajeet, S.K., dan Abhinav, G. (2014). Structural Insights into Mode of Action of Novel Natural Mycobacterium Protein Tyrosine Phosphatase B Inhibitors. *BMC Genomics*, 15, 1-9.
- Mascarello, A.M., Mori, L.D., Chiaradia-Delatorre, A.C.O., Menegatti, F.D., Monache, F., Ferrari, R.A., Yunes, R.J., Nunes, H., Terenzi, B., Botta, B., dan Botta, M. (2013). Discovery of *Mycobacterium tuberculosis* Protein Tyrosine Phosphatase B (PtpB) Inhibitors from Natural Products. *PLoS ONE*, 8, e77081.
- Meena. L.S., dan Rajni. (2010). Survival Mechanisms of Pathogenic *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv. *FEBS Journal*, 277, 2416-2427.
- Williams, B.G., dan Dye, C. (2010). The population and control of tuberculosis. *Science*, 328, 856-861.
- World Health Organization (WHO). 2014. *Global Tuberculosis Control*.