



Dasar -Dasar Bioinformatika Kedokteran



DASAR -DASAR BIOINFORMATIKA KEDOKTERAN



Penulis:
dr. Hotimah Masdan Salim, Ph.D

Editor:
dr. Ilham Putera Alam



Alamat Penerbit :
Dusun Sumurlo RT 17/ RW 06 Nomor 36,
Desa Blendis Kecamatan Gondang
Kabupaten Tulungagung, Jawa Timur,
Indonesia, Kode Pos 66263

Dasar -Dasar Bioinformatika Kedokteran

Penulis:

dr. Hotimah Masdan Salim, Ph.D

Editor:

dr. Ilham Putera Alam



Penerbit:

Tata Mutiara Hidup Indonesia

Dasar -Dasar Bioinformatika Kedokteran

Penulis:

dr. Hotimah Masdan Salim, Ph.D

Editor:

dr. Ilham Putera Alam

ISBN: 978-623-8749-03-4 (PDF)

Cetakan Pertama, September 2024

1 Jil., 68 Halaman., 21 X 29 cm



Redaksi:

Penerbit Tata Mutiara Hidup Indonesia

Telp : 0877 0249 8138

Email : tatamutiarahidupindonesia@gmail.com

Hak Cipta @2024

Hak cipta dilindungi Undang-Undang. Dilarang memperbanyak maupun mengedarkan buku dalam bentuk dan dengan cara apapun tanpa izin tertulis dari penulis dan penerbit.

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur kami panjatkan kehadirat Allah SWT, berkat rahmat dan karuniaNya pada akhirnya kami dapat menyelesaikan tulisan berupa buku yang berjudul **Dasar – Dasar Bioinformatika Kedokteran** dapat diselesaikan. Bioinformatika merupakan cabang ilmu yang berkembang pesat di era teknologi modern. Ilmu ini menggabungkan biologi, ilmu komputer, dan teknologi informasi untuk mengelola dan menganalisis data biologis dalam skala besar. Dalam konteks kedokteran, bioinformatika memberikan kontribusi yang sangat penting untuk penelitian genomik, penemuan obat, dan pengembangan pengobatan presisi. Buku ini akan membahas sejarah bioinformatika, penerapannya dalam kedokteran, serta berbagai basis data yang digunakan dalam penelitian biomedis.

Bioinformatika kedokteran merupakan bidang interdisipliner yang menggabungkan ilmu biologi, teknologi informasi, dan kedokteran untuk mengelola, menganalisis, dan menafsirkan data biologis serta klinis. Dengan perkembangan teknologi genomik dan bioteknologi, bioinformatika memiliki peran penting dalam memahami berbagai aspek kedokteran, seperti diagnosis, prognosis, dan personalisasi pengobatan. Penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada semua pihak yang telah membantu dalam penyelesaian buku ini. Segala kritik dan saran yang bersifat membangun sangat penulis harapkan

Penulis

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR	i
DAFTAR ISI	iv
BAB I.....	1
PENGENALAN BIOINFORMATIKA	1
1.1 Pendahuluan	1
1.2 Sejarah Bioinformatika	2
1.3 Penggunaan Bioinformatika Di Bidang Kedokteran	2
1.4 Basis Data Bioinformatika	3
BAB II <u>PENGENALAN ONLINE DATA BASE</u>	5
BAB III <u>PENGENALAN SITUS NCBI</u>	8
3.1 Pengertian NCBI	8
3.2 DNA-RNA Tools.....	8
3.3 Aplikasi BLAST.....	14
3.4 Pangkalan Database Lain	14
BAB IV ANALISIS BLAST	17
4.1 Pendahuluan	17
4.2 Analisis Data Sekuen DNA dan Protein dengan BLAST	17
4.2.1 Blastn.....	17
4.2.2 Blastp.....	21
4.2.3 Analisis Hasil BLAST	25
BAB V <u>MENDESAIN PRIMER DNA</u>	27
5.1 Pendahuluan	27
5.2 Karakteristik Primer Baik	27
5.3 Design Primer spesifik dengan Primer3Plus	29
BAB VI <u>ANALISIS POHON FILOGENETIK</u>	38
6.1 Pendahuluan	38
6.2 Analisis Filogenetika Molekuler	38
6.4 Hubungan Filogenetik dengan penjejeran (Alignment).....	39
6.5 Kontruksi Pohon Filogenetik	39
6.6 Konsep Pohon Evolusi.....	40
6.6.1 Metode maximum parsimony	42
6.6.2 Metode jarak/distance method	42
6.6.3 Metode neighbor - joining (NJ).....	43
6.6.4 Metode unweighted pair group dengan rata-rata aritmetika (UPGMA).....	44
6.6.5 Pemilihan Outgroup	44
6.6.6 Analisis Bootstrap.....	45
6.7 Konstruksi Pohon Filogenetik dengan MEGA 6	46
BAB VII <u>BIOINFORMATIK DALAM MENGANALISIS COMPOUND TANAMAN HERBAL</u>	48
7.1 Pendahuluan	48
7.2 Teknologi Bioinformatika dalam Analisis Compound Herbal	48
7.2.1 Sekuensing Generasi Berikutnya (Next-Generation Sequencing, NGS).....	48
7.2.2 Metode Molecular Docking.....	48
7.2.3 Analisis Proteomik dan Metabolomik	48
7.3 Basis Data dalam Analisis Compound Tanaman Herbal	48
7.3.1 Basis Data Fitokimia	48
7.3.2 KEGG (<i>Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes</i>)	49

Referensi

1. Pevsner, J. (2015). *Bioinformatics and Functional Genomics*. John Wiley & Sons.
2. Bourne, P. E., & Weissig, H. (2014). *Structural Bioinformatics*. John Wiley & Sons.
3. Tang, H., & Liu, C. (2020). The role of bioinformatics in personalized medicine. *Nature Reviews Drug Discovery*, 19(1), 23-30.
4. Khoury, M. J., & Ioannidis, J. P. (2014). Big data meets public health. *Science*, 346(6213), 1054-1055.

Referensi

1. Pevsner, J. (2015). *Bioinformatics and Functional Genomics*. John Wiley & Sons.
2. Bourne, P. E., & Weissig, H. (2014). *Structural Bioinformatics*. John Wiley & Sons.
3. Tang, H., & Liu, C. (2020). The role of bioinformatics in personalized medicine. *Nature Reviews Drug Discovery*, 19(1), 23-30.
4. Wang, Z., Gerstein, M., & Snyder, M. (2009). RNA-Seq: a revolutionary tool for transcriptomics. *Nature Reviews Genetics*, 10(1), 57-63.
5. Bragazzi, N. L., et al. (2020). Artificial intelligence in precision medicine and oncology: Towards the biocomputing era. *Frontiers in Public Health*, 8, 128.

Referensi

1. Pevsner, J. (2015). *Bioinformatics and Functional Genomics*. John Wiley & Sons.
2. Tang, H., & Liu, C. (2020). The role of bioinformatics in personalized medicine. *Nature Reviews Drug Discovery*, 19(1), 23-30.
3. Wang, Z., Gerstein, M., & Snyder, M. (2009). RNA-Seq: a revolutionary tool for transcriptomics. *Nature Reviews Genetics*, 10(1), 57-63.
4. Baker, M. (2012). Big biology: The 'omes puzzle. *Nature*, 486(7401), 14-16.
5. Bragazzi, N. L., et al. (2020). Artificial intelligence in precision medicine and oncology: Towards the biocomputing era. *Frontiers in Public Health*, 8, 128.

Refrensi

1. Brock, T. D. and M. T. Madigan. 1991. Biology of Microorganisms. Pratice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey
2. Claveri, JM & Notredame, C. 2007. Bioinformatics for Dummies. 2nd Edition.
3. Wiley Publishing. Indiana Canada.
4. Jonathan Pevsner. 2015. Bioinformatics and Functional Genomics

Refrensi

1. Brock, T. D. and M. T. Madigan. 1991. Biology of Microorganisms. Pratice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey
2. Claveri, JM & Notredame, C. 2007. Bioinformatics for Dummies. 2nd Edition.
3. Wiley Publishing. Indiana Canada.

4. Jonathan Pevsner. 2015. Bioinformatics and Functional Genomics

Refrensi

1. Claverie, J.M. & C. Notredame. 2003. Bioinformatics For Dummies. 2nd ed. Wiley Publishing, Inc. New York. p10-68. p215-338.
2. Glick, B.R. & J.J. Pasternak. 2003. Molecular Biology: Principles and Application of Recombinant DNA. ASM Press. Washington, D.C.
3. Saiki, R.K. 1990. Amplification of genomic DNA. In: Innis, M.A, Gelfand, D. H, Sninsky, J.J White (eds) PCR Protocol: A Guide to Methode and Applications. Academic Press, San Diego, CA. p13-20
4. Sambrook, J. & D.W. Russel. 2001. Molecular Cloning A Laboratory Manual Vol. 2. 3rd ed. Spring Harbor Laboratory Press. New York. p10.1- 10.49

Refrensi

1. Claverie, J.M. & C. Notredame. 2003. Bioinformatics For Dummies. 2nd ed. Wiley Publishing, Inc. New York. p10-68. p215-338.
2. Glick, B.R. & J.J. Pasternak. 2003. Molecular Biology: Principles and Application of Recombinant DNA. ASM Press. Washington, D.C.
3. Saiki, R.K. 1990. Amplification of genomic DNA. In: Innis, M.A, Gelfand, D. H, Sninsky, J.J White (eds) PCR Protocol: A Guide to Methode and Applications. Academic Press, San Diego, CA. p13-20
4. Sambrook, J. & D.W. Russel. 2001. Molecular Cloning A Laboratory Manual Vol. 2. 3rd ed. Spring Harbor Laboratory Press. New York. p10.1- 10.49

Refrensi

1. Wang, Y., Xiao, J., Suzek, T. O., Zhang, J., Wang, J., & Bryant, S. H. (2009). PubChem: a public information system for analyzing bioactivities of small molecules. *Nucleic Acids Research*, 37(suppl_2), W623-W633.
2. Kanehisa, M., Furumichi, M., Tanabe, M., Sato, Y., & Morishima, K. (2017). KEGG: new perspectives on genomes, pathways, diseases and drugs. *Nucleic acids research*, 45(D1), D353-D361.
3. Li, Y., Wang, S., & Wang, J. (2015). Docking-based virtual screening: current progress and future directions. *Current medicinal chemistry*, 22(20), 2323-2347.
4. Wishart, D. S., Feunang, Y. D., Marcu, A., Guo, A. C., Liang, K., Vazquez-Fresno, R., ... & Scalbert, A. (2018). HMDB 4.0: the human metabolome database for 2018. *Nucleic acids research*, 46(D1), D608-D617.

Refrensi

1. Szklarczyk, D., Gable, A. L., Lyon, D., Junge, A., Wyder, S., Huerta-Cepas, J., ... & Bork, P. (2019). STRING v11: protein–protein association networks with increased coverage,

- supporting functional discovery in genome-wide experimental datasets. *Nucleic acids research*, 47(D1), D607-D613.
2. Wishart, D. S., et al. (2018). DrugBank 5.0: a major update to the DrugBank database for 2018. *Nucleic acids research*, 46(D1), D1074-D1082.
 3. Shoichet, B. K. (2004). Virtual screening of chemical libraries. *Nature*, 432(7019), 862-865.
 4. Yang, H., Qin, C., Li, Y. H., Tao, L., Zhou, J., Yu, C. Y., ... & Chen, Z. (2016). Therapeutic target database update 2016: enriched resource for bench to clinical drug target and targeted pathway information. *Nucleic acids research*, 44(D1), D1069-D1074.

7.3.3 PubChem dan ChEMBL.....	49
7.4 Aplikasi Bioinformatika dalam Pengembangan Obat dari Tanaman Herbal	49
7.4.1 Identifikasi dan Validasi Target Obat.....	49
7.4.2 Screening Virtual untuk Penemuan Obat Baru	49
7.4.3 Pengobatan Presisi dengan Senyawa Herbal	49
7.5 Pencarian Senyawa Alami Dan Analisis Potensi Sebagai Kandidat Obat Baru.....	49
BAB VIII PROJEK BIOINFORMATIK	63
8.1 Protein-Protein Interaction (PPI).....	63
8.1.1 Pengertian	63
8.1.2 Metode Analisis PPI.....	63
8.1.3 Aplikasi PPI dalam Pengembangan Obat	63
8.2 Hasil Protein-Protein Interaction.....	63
8.2.1 Pemetaan Jaringan PPI	63
8.2.2 Contoh Kasus: Kanker dan PPI.....	64
8.2.3 Visualisasi Hasil PPI.....	64
8.3 Drug Target Interaction.....	64
8.3.1 Pengertian Drug Target Interaction.....	64
8.3.2 Metode Analisis DTI.....	64
8.3.3 Aplikasi DTI dalam Penemuan Obat.....	65
8.4 Drug Discovery	65
8.4.1 Tahapan Proses Penemuan Obat	65
8.4.2 Peran Bioinformatika dalam Drug Discovery	65
8.4.3 Drug Repositioning	66
8.5 Tantangan dalam Pengembangan Penemuan Obat.....	66
8.5.1 Kompleksitas Interaksi Molekuler	66
8.5.2 Biaya dan Waktu yang Dibutuhkan.....	66
8.5.3 Prediksi Efek Samping	66
8.5.4 Keterbatasan Data	66