

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
PERNYATAAN.....	iv
PRAKATA.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
DAFTAR ISTILAH	xv
DAFTAR SINGKATAN.....	xvii
DAFTAR ASAM AMINO	xviii
INTISARI... ..	xix
ABSTRACT.	xx
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	5
1.3 Batasan Masalah.....	6
1.4 Kebaruan Penelitian.....	6
1.5 Tujuan Penelitian.....	7
1.6 Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	8
2.1 Penelitian tentang Analisis Karakteristik <i>Epitope</i> Konformasi Sel B	8
2.1.1 Aspek-aspek yang dianalisis.....	8
2.1.2 Hasil Analisis Karakteristik Epitop	10
2.1.3 Karakteristik residual.....	11
2.1.4 Karakteristik epitop pada level <i>patch</i>	14
2.1.5 Karakteristik epitop pada level interaksi Ag-Ab	15
2.2 Metode Prediksi Epitop Konformasi Sel B	16
2.3 Penanganan <i>Class Imbalance</i>	23
2.4 Pengukuran Kinerja Metode Prediksi Epitop Konformasi.....	25
2.5 Metode <i>state of the art</i>	26
BAB III LANDASAN TEORI.....	28
3.1 Sistem Kekebalan Vertebrata	28
3.2 Sel B pada Struktur <i>Ab-Ag Complex</i>	30
3.3 Data Struktur 3D Protein <i>Antigen-Antibodi Complex</i>	31

3.4	Representasi Ciri Epitop Sel B Konformasi.....	35
3.4.1	Ciri <i>Log-odds ratio</i>	35
3.4.2	Ciri <i>Accessible Surface Area (ASA)</i> dan <i>Relative Surface Area (RSA)</i>	36
3.4.3	<i>Contact Number</i> dan <i>Half Sphere Exposure</i>	37
3.4.4	Metode <i>Quadrant Sphere Exposure (QSE)</i>	39
3.4.5	Ciri <i>AAIndex</i>	40
3.5	<i>Boostrap Aggregation (Bagging)</i>	40
3.6	Algoritme <i>Hierarchical Density Based Spatial Clustering of Applications with Noise (HDBSCAN)</i>	41
3.7	Validasi Kluster	43
3.8	Metode <i>Synthetic Minority Over-sampling Technique (SMOTE)</i> ..	47
3.9	Support Vector Machine.....	47
3.10	Decission Tree	50
3.11	<i>Graph</i>	52
3.12	<i>K-fold Cross Validation (k-cv)</i>	52
3.13	Metode Pengukuran Kinerja.....	53
BAB IV	METODOLOGI PENELITIAN	56
4.1	Kerangka Penelitian.....	56
4.2	<i>Data Preparation</i>	59
4.2.1	Pengumpulan data protein <i>Ag-Ab complex</i> dan pemisahan rantai Ag dari <i>Ag-Ab complex</i>	59
4.2.2	Identifikasi residu terekspos pada antigen.....	66
4.2.3	Pelabelan residu interaksi	73
4.2.4	Ekstraksi ciri	77
4.2.5	Dataset yang terbentuk	92
4.3	Metode CluSMOTE untuk mengatasi <i>class imbalance</i> pada pengembangan model prediksi epitop konformasi level residu	93
4.4	Pengujian Model.....	95
4.4.1	Validasi Model	95
4.4.2	Pengukuran kinerja	96
4.5	Karakteristik Dataset	97
BAB V	PENGEMBANGAN MODEL PREDIKSI EPITOP SEL B KONFORMASI	99
5.1	Model Prediksi Epitop Sel B Konformasi Level Residu.....	100
5.1.1	Metode CluSMOTE.....	101
5.1.2	Metode CluSMOTE <i>Bagging</i> (CluSMOTEBag).....	104
5.2	Model Prediksi Epitop Sel B Konformasi <i>Level Patch</i>	105
5.2.1	Ekstraksi fitur spasial pada residu-residu hasil klasifikasi yang diprediksi berlabel epitop.....	106
5.2.2	Pembentukan pasangan residu bertetangga	107

5.2.3	Pembentukan sub-sub kluster pada daftar pasangan residu	113
5.2.4	Memilih <i>patch</i> dari sub-sub kluster yang terbentuk.	115
BAB VI KINERJA MODEL PREDIKSI EPITOP SEL B KONFORMASI.....		118
6.1	Percobaan dan Hasil Ujicoba Model Prediksi Level Residu.....	118
6.1.1	Hasil ujicoba dan validasi internal pada model prediksi dengan metode CluSMOTE.....	119
6.1.2	Hasil ujicoba dan validasi internal pada model prediksi dengan metode CluSMOTEBag	124
6.1.3	Hasil ujicoba dan validasi eksternal model prediksi CluSMOTE DT.....	125
6.1.4	Hasil ujicoba dan validasi eksternal model prediksi CluSMOTE Bag DT	127
6.1.5	Analisis Hasil Ujicoba Metode CluSMOTE	128
6.1.6	Hasil ujicoba dan analisis berdasarkan penentuan parameter M_{pts} pada HDBSCAN.....	130
6.1.7	Perbandingan kinerja model dengan model <i>state of the art</i>	131
6.2	Percobaan dan Hasil Ujicoba Model Prediksi Level <i>Patch</i>	133
6.2.1	Kinerja model prediksi level <i>patch</i> dengan CluSMOTE DT pada Dataset SEPPA 3.....	134
6.2.2	Kinerja model prediksi level <i>patch</i> dengan CluSMOTEBag pada Dataset SEPPA 3.....	139
6.3	Pembahasan Model Prediksi Epitop Konformasi.....	144
BAB VII KESIMPULAN DAN SARAN		146
7.1	Kesimpulan.....	146
7.2	Saran	147
DAFTAR PUSTAKA.....		149
LAMPIRAN.....		163