

Optimasi parameter AutoDock dan Vina untuk validasi parameter penapisan virtual pada Protease HIV-1 menggunakan basis data a directory of useful decoys = AutoDock and Vina parameter optimization for virtual screening validation of HIV-1 Protease using a directory of useful decoys database

Bram Hik Anugraha, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20330962&lokasi=lokal>

Abstrak

HIV-1 adalah virus yang menginfeksi serta menghancurkan atau mengganggu fungsi sel-sel sistem kekebalan tubuh manusia. HIV-1 memiliki enzim yang penting dan dibutuhkan dalam perakitan dan pematangan virion yaitu protease HIV-1. Protease HIV-1 telah diketahui selama beberapa dekade sebagai target yang potensial sebagai struktur dasar desain obat. Teknologi komputasi dapat digunakan dalam mengembangkan obat baru yang menggunakan metode penapisan virtual. Pada penelitian ini, proses validasi untuk penapisan virtual protease HIV-1 dilakukan dengan program Autodock dan Vina yang terdapat pada program PyRx menggunakan basis data dari A Directory of Useful Decoys (DUD). Parameter penapisan virtual yang divariasikan untuk validasi adalah ukuran Grid Box dan Maximum Number of Evaluation. Parameter validasi yang digunakan untuk menentukan penapisan virtual yang optimum yaitu EF 1%, 10%, dan 20% dan AUC ROC. Penapisan virtual menggunakan program AutoDock yang optimum adalah pada parameter Grid Box 50 x 50 x 50 dan Maximum Number of Energy Evaluations 1.000.000. Penapisan virtual menggunakan program Vina yang optimum adalah parameter Grid Box 22,5 x 22,5 x 22,5 untuk protease HIV-1 menggunakan air.

.....HIV-1 is a virus that infects and destroys or interferes the function of cell of human immune system. HIV-1 has essential enzymes and needed for virion assembly and maturation such as HIV-1 protease. HIV-1 protease has been known for decades as a potential target of drug design as the basic structure. Computation technology that could be used for developing a new drug is virtual screening method. In this research, the validation process on the virtual screening of HIV-1 protease was done with AutoDock and Vina program contained in the PyRx program using database from A Directory of Useful decoys (DUD). Varied virtual screening parameters used for validation were Grid Box's size and Maximum Number of Evaluation. Validation parameters that were used to determine virtual screening optimum parameters are EF 1%, 10%, and 20% and AUC ROC. The optimum virtual screening parameter using AutoDock program was Grid Box 50 x 50 x 50 and the Maximum Number of Energy Evaluations 1,000,000 on HIV-1 protease using water. The optimum virtual screening parameter using Vina program was Grid Box 22.5 x 22.5 x 22.5 in HIV-1 protease using water.