

Optimasi parameter autodock dan vina untuk validasi penapisan virtual pada HIV-1 reverse transcriptase menggunakan basis data a directory of useful decoys = Autodock and vina parameters optimization for virtual screening validation of HIV-1 reverse transcriptase using a directory of useful decoys database

Syahril, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20331019&lokasi=lokal>

Abstrak

HIV-1 adalah virus penyebab utama AIDS. Salah satu enzim yang vital untuk HIV-1 adalah Reverse Transcriptase (RT). HIV-1 RT berperan mengubah single- stranded RNA genom virus menjadi prekursor DNA provirus beruntai ganda. RT adalah enzim yang pertama dijadikan target terapi obat dan hingga kini digunakan dalam pengobatan pasien terinfeksi HIV. Masalah terbesar terapi obat HIV adalah virus bermutasi sangat cepat, menyebabkan resistensi. Untuk alasan ini, ada kebutuhan konstan untuk obat baru. Kemajuan teknologi komputasi pada saat ini dapat dijadikan alternatif untuk pencarian obat baru salah satunya melalui metode penapisan virtual. Pada penelitian ini, dilakukan validasi parameter optimum untuk penapisan virtual pada HIV-1 RT menggunakan basis data A Directory of Useful Decoys (DUD) serta program penambatan Autodock 4.2 dan Vina yang terdapat pada piranti lunak PyRx v0.8. Parameternya meliputi pemilihan grid box dan maximum number of energy evaluation. Metode validasi yang digunakan untuk menentukan parameter optimum adalah Enrichment Factor (EF) 1%, 10%, dan 20% serta menghitung Area Under Curve (AUC) Receiver Operating Characteristic (ROC). Penapisan virtual dengan Autodock 4.2 memiliki parameter optimum pada grid box 70 x 70 x 70 dan maximum number of energy evaluation 1.000.000, sedangkan penapisan virtual dengan Vina pada grid box 18,75 x 18,75 x 18,75 Å.

HIV-1 virus is the main cause of AIDS. One of the HIV-1 vital enzymes is Reverse Transcriptase (RT). HIV-1 RT is responsible for converting single- stranded viral RNA genome into double-stranded proviral DNA precursors. RT is the first enzyme as drug therapy target and still be use until now for treatment of HIV infected patients. The main problem in HIV drug therapy is the rapid virus mutation that causing resistance. For this reason, there was a constant need for new drugs. Advances in computation technology could be used as an alternative method for new drugs discovery. In this research, optimum parameter validation for virtual screening in HIV-1 RT using database A Directory of Useful decoys (DUD) and tethering program AutoDock 4.2 and Vina program in PyRx v0.8 software. Variate Parameters were include the selection of the grid box and the maximum number of energy evaluations. Validation method to determine optimum parameters was done using the Enrichment Factor (EF) 1%, 10%, and 20% and calculation Area Under Curve (AUC) of Receiver Operating Characteristic (ROC) curve. Virtual screening using AutoDock 4.2 optimum parameters were the grid box 70 x 70 x 70 and the maximum number of energy evaluations 1,000,000, while AutoDock Vina optimum parameters were on the grid box 18,75 x 18,75 x 18,75 Å.