

ANALISIS BIBLIOMETRIK TREN DAN KEBAHARUAN STUDI PERMEABILITAS DENGAN *CHEMINFORMATICS* BERBASIS DATAWARRIOR

Tambunan Matthew Valentino*, Mulan Gevika Amara Putri, Ni Ketut Anggun Damayanti, Tiarma Kristiana Sianturi

Informasi Penulis

Program Studi Farmasi, Fakultas
Matematika dan Ilmu Pengetahuan
Alam, Universitas Udayana, Bali,
Indonesia

*Korespondensi

Email:
tambunan.matthewv@gmail.com

ABSTRAK

Cheminformatics merupakan disiplin ilmu yang mencakup metode komputasi dengan data kimia dan menjadi bentuk penelitian terkini dalam ilmu kefarmasian. Studi permeabilitas menjadi salah satu bidang riset *cheminformatics* yang berkembang pesat. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior serta mengevaluasi potensi kebaharuan risetnya, khususnya dalam bidang farmasi. Analisis bibliometrik menggunakan basis data Dimensions, Biblioshiny, dan ResearchRabbit, diperoleh temuan bahwa publikasi terkait studi permeabilitas dengan DataWarrior meningkat, meskipun jumlah sitasi menurun karena kurangnya kebaharuan topik. Penggunaan kata kunci "*cheminformatics*" dalam studi permeabilitas masih sedikit, menandakan keterkaitan kedua bidang yang perlu ditingkatkan. Integrasi data farmakokinetik dan fisikokimia melalui DataWarrior memungkinkan pengembangan metode yang lebih andal dengan peningkatan prediksi kesamaan senyawa melalui deskriptor bawaan sehingga mendukung kepraktisan studi permeabilitas molekuler dan farmakokinetik senyawa baru. Di sisi lain, potensi riset ini mendorong Indonesia untuk meningkatkan kontribusinya dalam publikasi dan sitasi di bidang permeabilitas dan *cheminformatics*.

Kata Kunci: Bibliometrik, Biblioshiny, *Cheminformatics*, DataWarrior, Studi Permeabilitas

BIBLIOMETRIC ANALYSIS OF TRENDS AND NOVELTY IN PERMEABILITY STUDIES USING DATAWARRIOR-BASED CHEMINFORMATICS

ABSTRACT

Cheminformatics is a discipline that employs computational methods on chemical data and has emerged as a cutting-edge approach in pharmaceutical sciences. DataWarrior, an open-source software that integrates big data, offers a variety of features to support cheminformatics studies. This study aims to examine permeability research using DataWarrior-based cheminformatics and evaluate the potential for research innovation, particularly within the field of pharmacy. A bibliometric analysis using the Dimensions, Biblioshiny, and ResearchRabbit databases reveals that publications on permeability studies employing DataWarrior have increased, although the number of citations has declined due to a lack of novelty in the topics. Moreover, the limited use of the keyword "cheminformatics" in permeability studies indicates that the connection between these two fields needs to be strengthened. The integration of pharmacokinetic and physicochemical data via DataWarrior enables the development of more reliable methods by enhancing the prediction of compound similarity through its built-in descriptors, thereby supporting the practicality of molecular permeability and pharmacokinetic studies for new compounds. On the other hand, this research potential for Indonesia to increase its contributions to publications and citations in this field.

Keywords: Bibliometric, Biblioshiny, *Cheminformatics*, DataWarrior, Permeability

PENDAHULUAN

Desain obat dengan *cheminformatics* merupakan bentuk penelitian terkini dalam ilmu kefarmasian. *Cheminformatics* merupakan disiplin ilmu yang mencakup metode komputasi dengan data kimia yang diaplikasikan dalam pemecahan permasalahan kimia, seperti penemuan obat baru (Bajorath 2024). *Cheminformatics* mengembangkan pemahaman terhadap hubungan struktur kimia dan aktivitasnya (Hska) dengan desain obat berbasis struktur. *Cheminformatics* berperan dalam penemuan obat berbasis komputasi (Namitha dan Velmurugan 2022). *Cheminformatics* berperan dalam studi permeabilitas senyawa obat dalam mengeliminasi kegagalan pengembangan obat (Nursamsiar *et al.* 2016). Pendekatan *in silico* pada *cheminformatics* dilakukan untuk memprediksi parameter permeabilitas terhadap membran biologis tertentu, misalnya prediksi aturan lima Lipinski (Widiyana 2021).

Studi *cheminformatics* dapat dilakukan dengan berbagai perangkat lunak. DataWarrior merupakan perangkat lunak *open-source* untuk analisis data berbasis kimia yang dikembangkan oleh Actelion Pharmaceuticals Ltd. DataWarrior sebelumnya adalah bagian dari sistem manajemen informasi penemuan obat yaitu OSIRIS. DataWarrior dikembangkan sebagai perangkat lunak independen untuk memenuhi peningkatan sifat fisika, kimia, dan biologis senyawa pada bidang kefarmasian (Sander *et al.* 2015). DataWarrior saat ini mengintegrasikan *big data* sebagai fitur prediksi sifat fisikokimia molekul obat, kalkulasi kimia informatika, analisis data multivariat, dan visualisasi interaktif dengan plot dinamis (Sander *et al.* 2015). DataWarrior telah digunakan dalam berbagai penelitian pada lingkup akademik, pemerintah, dan industri sejak pengembangannya pada tahun 2014 (López-López *et al.* 2019).

Analisis bibliometrik merupakan metode identifikasi tren publikasi untuk menginformasikan tingkat perkembangan keilmuan tertentu melalui metadata penelitian secara kuantitatif (Herawati 2022). Analisis bibliometrik dimanfaatkan untuk menemukan pola penelitian terkini dan potensi kebaharuan riset (Lutfitasari *et al.* 2024). DataWarrior memiliki fitur

yang beragam untuk keperluan studi *cheminformatics* sehingga memiliki topik riset desain obat yang luas. Penelitian ini merupakan analisis bibliometrik yang mempelajari studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior melalui publikasi yang dapat diakses pada basis data Dimensions menggunakan perangkat lunak Biblioshiny dan ResearchRabbit. Penelitian ini berfokus pada penemuan topik penelitian terkait serta potensi kebaharuan riset *cheminformatics* berbasis DataWarrior, khususnya pada bidang farmasi.

METODE

Penelitian ini dilakukan dengan memperoleh metadata penelitian terkait studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior melalui basis data Dimensions (<https://app.dimensions.ai/>). Filter dilakukan terhadap tahun terbit antara tahun 2015 dan 2024 sebab akses bebas DataWarrior tersedia sejak tahun 2014. Filter lain tidak digunakan dalam penelitian ini. Pencarian artikel penelitian melalui basis data dilakukan dengan kueri: '("cheminformatics") AND ("permeability" OR "membrane permeability") AND ("data warrior")'; 2016 or 2017 or 2018 or 2019 or 2020, or 2021 or 2022 or 2023 or 2024 or 2015 or 2014'

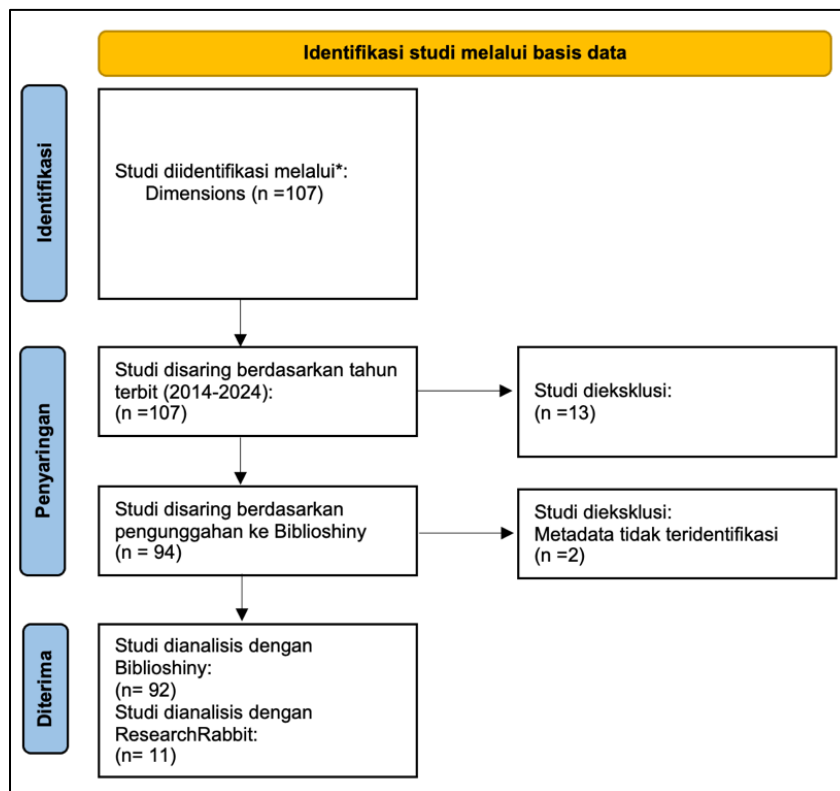
Artikel yang diperoleh dengan faktor inklusi tersebut sebanyak 94 artikel. Metadata artikel penelitian diunduh dengan format.csv untuk dilakukan analisis bibliometrik. Proses penelusuran dan penyaringan studi ditunjukkan pada Gambar 1.

Analisis bibliometrik dilakukan dengan pemograman Biblioshiny by Bibliometrix (versi 4.2.1) sebagai *packages* dalam perangkat lunak R (<https://www.bibliometrix.org/>) (Aria and Cuccurullo 2017). Artikel yang berhasil terunggah melalui Biblioshiny adalah 92 artikel dan 2 artikel tidak berhasil diunggah karena metadata tidak teridentifikasi. Biblioshiny digunakan untuk menganalisis jumlah publikasi, jumlah sitasi, negara asal afiliasi, dan kata kunci. Pengaturan khusus dilakukan pada pembuatan diagram tertentu. Peta keterkaitan diatur dengan algoritma kluster berupa Leading Eigenvalues. Peta evolusi tema diatur dengan algoritma kluster berupa

Leiden. Pengaturan lainnya disesuaikan dengan pengaturan bawaan pada Biblioshiny.

Analisis komprehensif dilakukan terhadap sepuluh penelitian dengan sitasi terbanyak dan penelitian oleh Sander *et al.* (2015) sebagai penelitian awal dengan DataWarrior. Analisis dilakukan menggunakan ResearchRabbit (<https://researchrabbitapp.com/>) untuk

memprediksi relevansi dan kebaharuan topik penelitian. ResearchRabbit digunakan dengan memasukkan artikel yang akan dianalisis komprehensif melalui Zotero. Analisis dilakukan dengan melihat koneksi antarpenelitian pada menu *Similar Work* dan *Earlier Work*. Hasil analisis bibliometrik divisualisasikan dalam bentuk diagram atau plot yang sesuai.



Gambar 1. Diagram Alir Strategi Pencarian Pustaka (Disesuaikan dari Page *et al.* 2021)

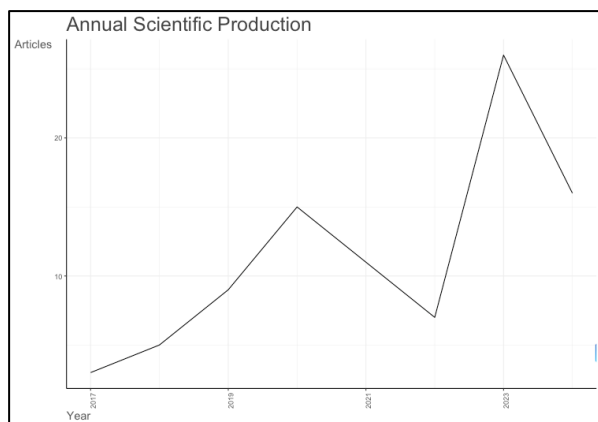
HASIL DAN PEMBAHASAN

Kuantitas Publikasi dan Sitasi

DataWarrior tersedia secara *open-source* mulai pada tahun 2014 dan telah digunakan dalam berbagai penelitian (López-López *et al.* 2019). Perkembangan jumlah publikasi mendeskripsikan penggunaan DataWarrior dalam penelitian studi permeabilitas secara periodik. Jumlah penelitian studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior pada basis data Dimensions menunjukkan tren peningkatan jumlah publikasi. Publikasi paling banyak diterbitkan pada tahun

2023 sebanyak 26 artikel. Penurunan jumlah publikasi antara tahun 2020—2022 dan 2023—2024 tidak memengaruhi tren positif dari penelitian *cheminformatics* dengan DataWarrior. Peningkatan tren ini selaras dengan peningkatan tren secara umum pada topik *cheminformatics* (Banerjee *et al.* 2024). Namun, jumlah publikasi yang tersedia masih cukup kecil dibandingkan jumlah publikasi *cheminformatics* yang mencapai lebih kurang 4.000 artikel pada tahun 2023 (Banerjee *et al.* 2024). Hal tersebut menunjukkan DataWarrior mulai digunakan secara luas dalam penelitian *cheminformatics* studi permeabilitas.

Perkembangan jumlah publikasi ditunjukkan pada Gambar 2.



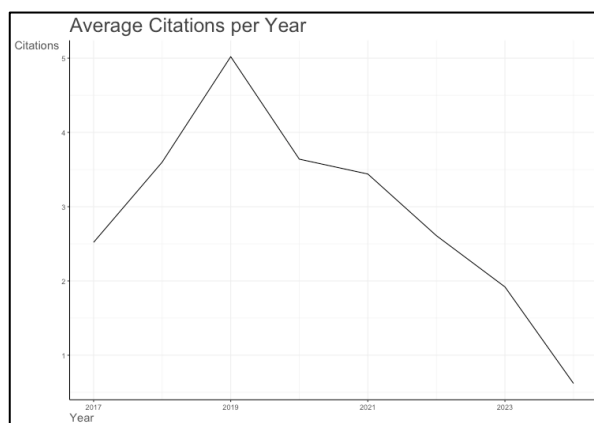
Gambar 2. Perkembangan Jumlah Publikasi Studi Permeabilitas Dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior

Jumlah sitasi terhadap publikasi studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior menunjukkan tren penurunan setelah tahun 2019. Perkembangan jumlah sitasi mendeskripsikan tren penggunaan DataWarrior sebagai perangkat lunak *cheminformatics* pada penelitian terkini. Jumlah sitasi ini berbanding terbalik dengan jumlah publikasi yang cenderung meningkat. Penurunan sitasi dan peningkatan publikasi disebabkan oleh *citation trap* sehingga publikasi yang terbit akhir tahun ditampilkan pada waktu lebih singkat pada pencarian teratas pada basis data (Ma *et al.* 2019). Penyebab lain dari penurunan sitasi ini adalah metodologi yang tidak adaptif terhadap kebaruan riset dan topik riset yang kurang menarik (Sjögarde and Didegah 2022). Hal tersebut menunjukkan perlunya kebaruan riset studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior untuk meningkatkan jumlah sitasi terhadap penelitian ini. Perkembangan jumlah sitasi ditunjukkan pada Gambar 3.

Negara Asal Studi

Fokus penelitian dapat ditinjau berdasarkan frekuensi luaran publikasi ilmiah dari negara tersebut (Latifah *et al.* 2023). Analisis terhadap publikasi studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior menunjukkan sedikit negara dengan afiliasi riset yang berfokus pada topik ini. Diagram kontribusi negara menunjukkan frekuensi luaran publikasi

ilmiah yang tinggi di India (141 artikel), Pakistan (63 artikel), dan Nigeria (36 artikel). Hal tersebut menunjukkan ketertarikan penelitian studi permeabilitas dengan *cheminformatics* di negara-negara tersebut. Jumlah penelitian yang kontinu di negara-negara tersebut disebabkan oleh signifikansi penggunaan DataWarrior di negara tersebut serta kemudahan dalam pertukaran data dan hasil analisis (Sabah *et al.* 2018). Jumlah luaran publikasi ilmiah berdasarkan negara ditunjukkan pada Tabel 1.



Gambar 3. Perkembangan Jumlah Sitasi Publikasi Studi Permeabilitas Dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior

Tabel 1. Sepuluh Negara dengan Luaran Publikasi Studi Permeabilitas Dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior Terbanyak

No.	Nama Negara	Banyak Publikasi
1.	India	141
2.	Pakistan	63
3.	Nigeria	36
4.	Tiongkok	26
5.	Mesir	26
6.	Brazil	14
7.	Amerika Serikat	13
8.	Arab Saudi	12
9.	Jerman	10
10.	Iran	10

Kolaborasi antarpemiliter di dalam dan luar negara merupakan pendorong tingginya publikasi di negara-negara tersebut (Mahala and Singh 2021). Hal ini dapat ditinjau dari negara dengan jumlah sitasi yang besar. India, Republik Ceko, dan Tiongkok merupakan tiga negara dengan sitasi tertinggi. Hal tersebut menunjukkan kualitas publikasi yang dihasilkan serta peluang kolaborasi

yang baik (Li *et al.* 2025). Indonesia belum termasuk dalam negara-negara penghasil publikasi dan sumber sitasi tertinggi sehingga memiliki peluang besar untuk melaksanakan riset di bidang studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior. Jumlah sitasi publikasi ilmiah berdasarkan negara ditunjukkan pada Tabel 2.

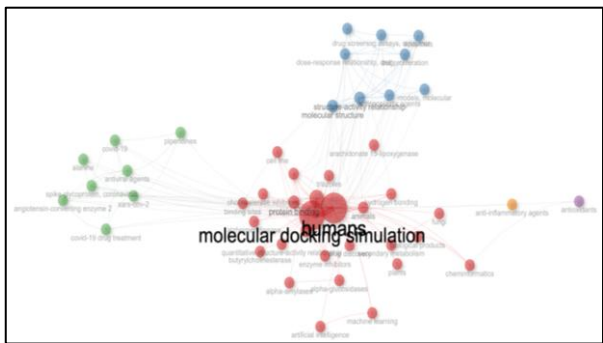
Tabel 2. Sepuluh Negara dengan Sitasi Publikasi Studi Permeabilitas Dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior Terbanyak

No.	Nama Negara	Total Sitasi
1.	India	313
2.	Republik Ceko	96
3.	Tiongkok	92
4.	Mesir	86
5.	Nigeria	78
6.	Iran	77
7.	Korea Selatan	55
8.	Australia	52
9.	Pakistan	52
10.	Bahrain	40

Perkembangan Kata Kunci

Keterkaitan kata kunci (*co-word network*) memvisualisasikan gugus tiap kata kunci pada publikasi terkait dan hubungan antar kata kunci. Keterkaitan kata kunci membentuk lima klaster. Klaster penelitian yang terbesar (ditandai dengan warna merah) menunjukkan intensitas tinggi studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis

DataWarrior merupakan studi *molecular docking simulation* pada manusia. Klaster ini menunjukkan keterkaitan kuat terhadap klaster penemuan obat secara *in silico* (ditandai dengan warna biru) dengan munculnya kata kunci, seperti *drug screening*, *dose-response relationship*, dan *structure-activity relationship*. Klaster terpisah muncul dengan anggota kata kunci tunggal, seperti pada kata kunci *anti-inflammatory agents* (ditandai dengan warna jingga) dan *antioxidants* (ditandai dengan warna ungu). Hal tersebut menunjukkan kebaharuan riset muncul untuk memanfaatkan *cheminformatics* berbasis DataWarrior dalam mempelajari kelompok senyawa spesifik. Keterkaitan kata kunci ditunjukkan pada Gambar 4 dan Tabel 3.



Gambar 4. Peta Keterkaitan Kata Kunci Publikasi Studi Permeabilitas dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior

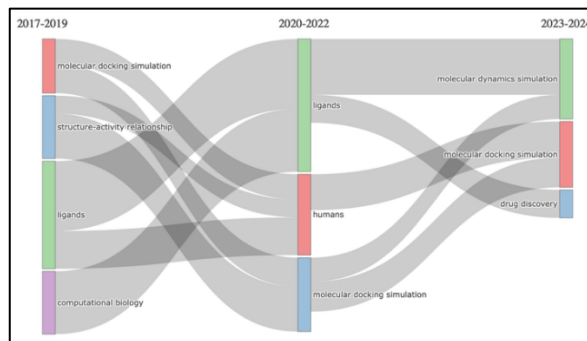
Tabel 3. Ringkasan Keterkaitan Kata Kunci Publikasi Studi Permeabilitas dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior

No.	Klaster	Penulis	Judul	Tahun	Tema
1.	Merah	Willems, H., De Cesco, S., Svensson, F.	Computational Chemistry on A Budget: Supporting Drug Discovery with Limited Resources	2020	Riset berfokus pada studi <i>cheminformatics</i> berbasis DataWarrior untuk aplikasi <i>molecular docking</i> terkait desain obat, interaksi protein-ligan, dan faktor permeabilitas.
		Kadioglu, O., Efferth, T.	A Machine Learning-Based Prediction Platform for P-Glycoprotein Modulators and Its Validation by Molecular Docking	2019	
		Berishvili, V.P.;Perkin, V.O.; Voronkov, A.E.; Radchenko, E.V.; Syed, R; Reddy, C. V. R.; Pillay, V.; Kumar, P.; Choonara, Ye; Kamal A.; Palyulin, V. A.	Time-Domain Analysis of Molecular Dynamics Trajectories Using Deep Neural Networks: Application to Activity Ranking of Tankyrase Inhibitors	2019	
2.	Biru	Farrag, A. M.; Ibrahim, M. H.; Mehany, A. B. M.; Ismail M. M. F.	New Cyanopyridine-Based Scaffold as PIM-1 Inhibitors and Apoptotic Inducers: Synthesis and SARS Study	2020	Riset berfokus pada studi <i>cheminformatics</i> berbasis DataWarrior pemodelan senyawa dan aktivitas.

No.	Klaster	Penulis	Judul	Tahun	Tema
3.	Hijau	Azad, I.; Ahmad, R.;Khan, T.; Saquib, M.; Hassan, F.; Akhter, Y.; Khan, A. R.;Nasibullah, M.	Phenanthridine Derivatives as Promising New Anticancer Agents: Synthesis, Biological Evaluation and Binding Studies	2020	Riset berfokus pada studi <i>cheminformatics</i> berbasis DataWarrior dalam simulasi <i>molecular docking</i> untuk target penyakit infeksi (misalnya, Covid-19).
		Bhoye, M. R.; Shinde A.; Shaikh, A. L. N.; Shisode V.; Chavan A. ; Maliwal, D.; Pissurlenkar, R. R. S.;Mhaske, P. C.	New Thiazolyl-Isoxazole Derivatives as Potential Anti-Infective Agents: Design, Synthesis, In Vitro and In Silico Antimicrobial Efficacy	2024	
		Asha, R. N.;Nayagam, B. R. D.; Bhuvanesh, N.	Synthesis, Molecular Docking, and In Silico ADMET Studies of 4-Benzyl-1-(2,4,6-Trimethyl-Benzyl)-Piperidine: Potential Inhibitor of SARS-CoV2	2021	
		Kalhor, H.; Sadeghi, S.; Abolhasani, H.; Kalhor, R.; Rahimi, H.	Repurposing of the Approved Small Molecule Drugs in Order to Inhibit SARS-CoV-2 S Protein and Human ACE2 Interaction Through Virtual Screening Approaches	2020	
		Gupta, A.; Ahmad, R.; Siddiqui, S.; Yadav, K.; Srivastava, A.; Trivedi, A.; Ahmad, B.; Khan, M. A.; Shrivastava, A. K.; Singh, G. K.	Flavonol Morin Targets Host ACE2, IMP-A, PARP-1 and Viral Proteins of SARS-CoV-2, SARS-CoV and MERS-CoV Critical for Infection and Survival: A Computational Analysis	2021	

Evolusi tema menggambarkan arah perkembangan tema di masa lalu, masa sekarang, dan masa mendatang. Periode awal perkembangan riset berbasis DataWarrior (2017-2019) menunjukkan penggunaan kata kunci *molecular docking simulation*, *structure-activity relationship*, *ligands*, dan *computational biology*. Periode berikutnya (2020-2022) menunjukkan transisi tema dengan kata kunci *ligands* memiliki keterkaitan paling kuat terhadap tema pada periode sebelumnya. Kata kunci *humans* yang pertama kali muncul pada periode ini menunjukkan penelitian *cheminformatics* dengan DataWarrior mulai mengarah pada topik terkait manusia, salah satunya studi permeabilitas. Arah penelitian yang lebih spesifik pada periode terkini (2023-2024), yaitu *molecular dynamics simulation* dan *molecular docking simulations*. Studi dengan kata kunci *ligands* pada periode sebelumnya mulai mengarah pada studi *drug discovery*. DataWarrior akan dikembangkan sebagai tandem dengan instrumen komputasional lain untuk *cheminformatics* khususnya pada studi permeabilitas berbasis

molecular dynamics dan *molecular docking*. Evolusi tema ditunjukkan pada Gambar 5.



Gambar 5. Evolusi Tema pada Periode Tahun 2017-2019, 2020-2022, dan 2023-2024 Terhadap Kata Kunci Publikasi Studi Permeabilitas dengan *Cheminformatics* berbasis DataWarrior

Analisis Komprehensif pada Penelitian Pilihan

Analisis komprehensif dilakukan terhadap 10 penelitian dengan jumlah sitasi tertinggi dan 1 penelitian awal dari DataWarrior. Penelitian dengan jumlah sitasi paling besar terbit pada tahun antara 2018 dan 2023. Deskripsi penelitian-penelitian tersebut ditunjukkan pada Tabel 4.

Tabel 4. Penelitian yang Dilibatkan dalam Analisis Komprehensif

No.	Judul Artikel	Jurnal	Penulis	Tahun
1.	Tackling neuroinflammation and cholinergic deficit in Alzheimer's disease: Multi-target inhibitors of cholinesterases, cyclooxygenase-2 and 15-lipoxygenase	European Journal of Medicinal Chemistry	AlFadly <i>et al.</i>	2019
2.	Exploring the novel heterocyclic derivatives as lead molecules for design and development of potent anticancer agents	Journal of Molecular Graphics and Modelling	Azad <i>et al.</i>	2018
3.	Deciphering the Interactions of Bioactive Compounds in Selected Traditional Medicinal Plants against Alzheimer's Diseases via Pharmacophore Modeling, Auto-QSAR, and Molecular Docking Approaches	Molecules	Ojo <i>et al.</i>	2021
4.	Repurposing of the approved small molecule drugs in order to inhibit SARS-CoV-2 S protein and human ACE2 interaction through virtual screening approaches	Journal of Biomolecular Structure and Dynamics	Kalhor <i>et al.</i>	2022
5.	Computational Chemistry on a Budget: Supporting Drug Discovery with Limited Resources	Journal of Medicinal Chemistry	Willems <i>et al.</i>	2020
6.	Novel C-2 Symmetric Molecules as α -Glucosidase and α -Amylase Inhibitors: Design, Synthesis, Kinetic Evaluation, Molecular Docking and Pharmacokinetics	Molecules	Shahzad <i>et al.</i>	2019
7.	Synthesis of sulfadiazinyl acyl/aryl thiourea derivatives as calf intestinal alkaline phosphatase inhibitors, pharmacokinetic properties, lead optimization, Lineweaver-Burk plot evaluation and binding analysis	Bioorganic & Medicinal Chemistry	Sajid-Ur-Rehman <i>et al.</i>	2018
8.	Artificial intelligence: Machine learning approach for screening large database and drug discovery	Antiviral Research	Parvatikar <i>et al.</i>	2023
9.	Anti-leishmanial click modifiable thiosemicarbazones: Design, synthesis, biological evaluation and in silico studies	European Journal of Medicinal Chemistry	Temraz <i>et al.</i>	2018
10.	Insight into glycogen synthase kinase-3 β inhibitory activity of phyto-constituents from <i>Melissa officinalis</i> : in silico studies	In Silico Pharmacology	Iwaloye <i>et al.</i>	2020
11.	DataWarrior: An open-source program for chemistry aware data visualization and analysis	Journal of Chemical Information and Modeling	Sander <i>et al.</i>	2015

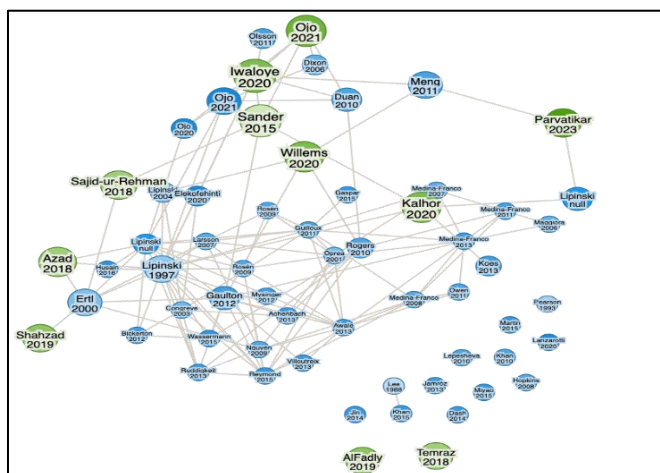
Sebanyak delapan penelitian pilihan memiliki keterkaitan topik penelitian dengan penelitian awal oleh Sander *et al.* (2015). Penelitian Iwaloye *et al.* (2020), Kalhor *et al.* (2022), Ojo *et al.* (2021), dan Sajid-ur-Rehman *et al.* (2018) memiliki hubungan langsung dengan studi Sander *et al.* (2015). Dua studi menggunakan DataWarrior untuk melakukan konversi struktur kimia ke dalam bentuk fail yang kompatibel bagi perangkat lunak lain, seperti ligprep (Schrödinger Suite) (Iwaloye *et al.* 2020; Ojo *et al.* 2021). Dua studi lainnya menggunakan DataWarrior untuk melakukan analisis aturan lima Lipinski dan lipofilisitas ligan (Kalhor *et al.* 2022; Sajid-ur-Rehman *et al.* 2018). Hal ini menunjukkan studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior dapat dilakukan secara langsung pada perangkat lunak tersebut atau dengan diintegrasikan bersama

perangkat lunak lain. Dua studi lain di luar kluster utama digunakan untuk mengelusidasi data farmakokinetik dan fisikokimia senyawa (AlFadly *et al.*, 2019; Temraz *et al.* 2018). Hubungan keterkaitan topik penelitian ditunjukkan pada Gambar 6.

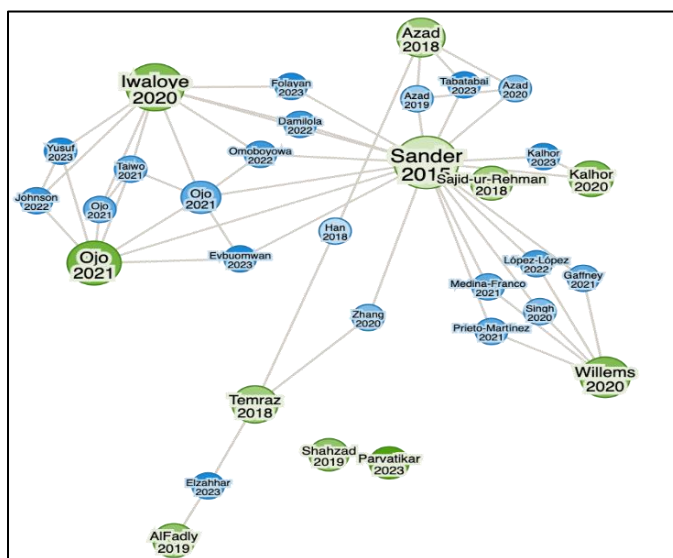
Sebanyak tiga penelitian memiliki keterkaitan dengan penelitian terkini secara signifikan, yaitu studi Iwaloye *et al.* (2020), Ojo *et al.* (2021), dan Willems *et al.* (2020). Studi Prieto-Martínez *et al.* (2021) yang terkait dengan studi Sander *et al.* (2015) dan Willems *et al.* (2020) memiliki pendekatan berbeda dalam menggunakan DataWarrior dibandingkan studi yang terkait dengan Iwaloye *et al.* (2020) dan Ojo *et al.* (2021). Studi Prieto-Martínez *et al.* (2021) menggunakan DataWarrior untuk membentuk suatu deskriptor

baru dari notasi SMILES, yaitu *PathFp* untuk menggambarkan kesamaan senyawa pada tingkat tujuh atom sebagai *bit binary fingerprint*. DataWarrior secara bersama diintegrasikan dengan perangkat lunak OpenBabel untuk membentuk koordinat senyawa baru secara tiga dimensi (Yoshikawa and Hutchison, 2019). Studi Willems *et al.* (2020) sendiri fokus dalam membahas berbagai perangkat lunak *open-source*

yang dapat digunakan dalam studi *cheminformatics*. Studi oleh Shahzad *et al.* (2019) dan Parvatikar *et al.* (2023) tidak memiliki keterkaitan dengan penelitian terkini, tetapi penggunaan DataWarrior pada penelitian tersebut memiliki kesamaan dengan penelitian-penelitian lain, seperti studi oleh Sajid-ur-Rehman *et al.* (2018). Hubungan keterkaitan dengan penelitian terbaru ditunjukkan pada Gambar 7.



Gambar 6. Hubungan Keterkaitan Topik Penelitian Pilihan dengan Penelitian Awal



Gambar 7. Hubungan Keterkaitan Dengan Penelitian Terkini

Keterkaitan topik penelitian menunjukkan studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior lebih umum digunakan untuk membahas keterkaitan sifat fisikokimia senyawa

dengan profil permeabilitas, seperti aturan lima Lipinski. Kebaharuan riset dapat ditinjau dari integrasi perangkat lunak prediktor lain dan perluasan tujuan studi. DataWarrior diintegrasikan

dengan berbagai perangkat lunak, seperti Schrödinger Suite, AutoDock, pkCSM, sehingga memberikan parameter permeabilitas baru yang dapat diolah menggunakan DataWarrior. Studi permeabilitas dengan *cheminformatics* dapat dikembangkan untuk menemukan parameter permeabilitas yang baru terhadap membran biologis yang beragam dapat dilakukan melalui integrasi data-data farmakokinetik dan fisikokimia melalui DataWarrior. Studi dengan meningkatkan prediksi kesamaan senyawa-senyawa prediksi dapat dikembangkan dengan deskriptor bawaan pada DataWarrior dalam melengkapi *library* molekul yang diteliti. Kebaharuan riset *cheminformatics* berbasis DataWarrior ini akan mendukung kepraktisan dalam studi permeabilitas molekuler serta farmakokinetik senyawa baru.

Keterbatasan Penelitian

Penelitian ini terbatas pada pengambilan metadata penelitian dari satu basis data, yaitu Dimensions. Penggunaan basis data yang beragam berpotensi memberikan analisis bibliometrik yang lebih komprehensif. Cakupan studi permeabilitas berbasis *cheminformatics* dapat ditingkatkan melalui penyusunan kueri yang lebih spesifik serta penambahan kata kunci serupa sehingga mampu menjaring artikel dalam jumlah dan variasi yang lebih luas.

KESIMPULAN

Penelitian ini membuktikan bahwa studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior memiliki potensi besar untuk menciptakan metode penelitian yang lebih andal dan inovatif di bidang farmasi. Studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior mengalami peningkatan jumlah publikasi setiap tahun meskipun mengalami penurunan jumlah sitasi. India, Pakistan, Nigeria, Republik Ceko, dan Tiongkok menjadi negara pelopor dengan jumlah studi dan jumlah sitasi yang tinggi. Penelitian terkait studi permeabilitas dengan *cheminformatics* berbasis DataWarrior berfokus pada pemanfaatan DataWarrior sebagai tandem pada *molecular docking* dan *molecular dynamics*. Kebaharuan riset ditinjau dari integrasi DataWarrior dengan perangkat lunak prediktor lain seperti Schrödinger Suite, AutoDock, dan pkCSM yang memungkinkan penemuan parameter

permeabilitas baru melalui pengolahan data farmakokinetik dan fisikokimia. Dengan demikian, penelitian ini mendemonstrasikan potensi kebaruan riset serta mendorong kolaborasi yang lebih kuat antara studi permeabilitas dan *cheminformatics*, khususnya untuk mengoptimalkan riset di bidang farmasi.

DAFTAR PUSTAKA

- AlFadly ED, Elzahhar PA, Tramarin A, Elkazaz S, Shaltout H, Abu-Serie MM, Janockova, J, Soukup O, Ghareeb DA, El-Yazbi AF, Rafeh RW, Bakkar NMZ, Kobeissy F, Iriepa I, Moraleda I, Saudi MNS, Bartolini M, Belal ASF, 2019, Tackling neuroinflammation and cholinergic deficit in Alzheimer's disease: Multi-target inhibitors of cholinesterases, cyclooxygenase-2 and 15-lipoxygenase, *European Journal of Medicinal Chemistry* 167: 161–186, doi: 10.1016/j.ejmech.2019.02.012.
- Aria M, Cuccurullo C, 2017, bibliometrix: An R-tool for comprehensive science mapping analysis, *Journal of Informetrics* 11(4): 959–975, doi: 10.1016/j.joi.2017.08.007.
- Azad I, Nasibullah M, Khan T, Hassan F, Akhter Y, 2018, Exploring the novel heterocyclic derivatives as lead molecules for design and development of potent anticancer agents, *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 81: 211–228, doi: 10.1016/j.jmgm.2018.02.013.
- Bajorath J, 2024, Milestones in chemoinformatics: global view of the field, *Journal of Cheminformatics* 16(1), doi: 10.1186/s13321-024-00922-0.
- Banerjee A, Roy K, Gramatica P, 2024, A bibliometric analysis of the Cheminformatics/QSAR literature (2000–2023) for predictive modeling in data science using the SCOPUS database, *Molecular Diversity*, doi: 10.1007/s11030-024-11056-8.
- Herawati P, Utami SB, Karlina N, 2022, Analisis bibliometrik: Perkembangan penelitian dan publikasi mengenai koordinasi program menggunakan VOSviewer, *Jurnal Pustaka Budaya* 9(1): 1–8.

- Iwaloye O, Elekofehinti OO, Oluwarotimi EA, Kikiowo B, Fadipe TM, 2020, Insight into glycogen synthase kinase-3 β inhibitory activity of phyto-constituents from *Melissa officinalis*: in silico studies, *In Silico Pharmacology* 8(1): 2, doi: 10.1007/s40203-020-00054-x.
- Kalhor H, Sadeghi S, Abolhasani H, Kalhor R, Rahimi H, 2022, Repurposing of the approved small molecule drugs in order to inhibit SARS-CoV-2 S protein and human ACE2 interaction through virtual screening approaches, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics* 40(3): 1299–1315, doi: 10.1080/07391102.2020.1824816.
- Latifah SR, Winoto Y, Khadijah ULS, 2024, Analisis Bibliometrik: Perkembangan Tren Penelitian Literasi Digital Di Perguruan Tinggi Dalam Database Scopus (2014-2023), *IQRA: Jurnal Ilmu Perpustakaan Dan Informasi* 18(2): 230–256.
- Li C, Li Y, Ding Z, 2025, Development of sci-tech journals in China stimulated by the China sci-tech journal excellence action plan, *Learned Publishing* 38(1), doi: 10.1002/leap.1654.
- López-López E, Naveja JJ, Medina-Franco JL, 2019, DataWarrior: an evaluation of the open-source drug discovery tool, *Expert Opinion on Drug Discovery* 14(4): 335–341, doi: 10.1080/17460441.2019.1581170.
- Lutfitasari A, Nur Damayanti F, Santosa B, Mulyanti L, Khasanah U, 2024, Bibliometric analysis of research trends and novelties for pneumonia in children, *Jurnal Keperawatan Indonesia* 27(2): 70–82, doi: 10.7454/jki.v27i2.1111.
- Ma C, Li Y, Guo F, Si K, 2019, The citation trap: Papers published at year-end receive systematically fewer citations, *Journal of Economic Behavior & Organization* 166: 667–687, doi: 10.1016/j.jebo.2019.08.007.
- Mahala A, Singh R, 2021, Research output of Indian universities in sciences (2015–2019): a scientometric analysis, *Library Hi Tech* 39(4): 984–1000, doi: 10.1108/LHT-09-2020-0224.
- Namitha KN, Velmurugan V, 2022, Review of bioinformatic tools used in Computer Aided Drug Design (CADD), *World Journal of Advanced Research and Reviews* 14(2): 453–465, doi: 10.30574/wjarr.2022.14.2.0394.
- Nursamsiar, Toding AT, Awaluddin A, 2016, Studi *in silico* senyawa turunan analog kalkon dan pirimidin sebagai antiinflamasi: Prediksi absorpsi, distribusi, dan toksisitas, *PHARMACY: Jurnal Farmasi Indonesia* 13(1): 92–100, doi: 10.30595/pji.v13i1.891.
- Ojo OA, Ojo AB, Okolie C, Nwakama MAC, Iyobhebhe M, Evbuomwan IO, Nwonuma CO, Maimako RF, Adegboyega AE, Taiwo OA, Alsharif KF, Batiha GES, 2021, Deciphering the interactions of bioactive compounds in selected traditional medicinal plants against alzheimer's diseases via pharmacophore modeling, auto-qsar, and molecular docking approaches, *Molecules* 26(7): 1996, doi: 10.3390/molecules26071996.
- Page MJ, McKenzie JE, Bossuyt PM, Boutron I, Hoffmann TC, Mulrow CD, Shamseer L, Tetzlaff JM, Akl EA, Brennan SE, Chou R, Glanville J, Grimshaw JM, Hróbjartsson A, Lalu MM, Li T, Loder EW, Mayo-Wilson E, McDonald S, McGuinness LA, ... Moher D, 2021, The PRISMA 2020 statement: an updated guideline for reporting systematic reviews, *BMJ* 372: n71, doi: 10.1136/bmj.n71.
- Parvatikar PP, Patil S, Khaparkhuntikar K, Patil S, Singh PK, Sahana R, Kulkarni RV, Raghu AV, 2023, Artificial intelligence: Machine learning approach for screening large database and drug discovery, *Antiviral Research* 220: 105740, doi: 10.1016/j.antiviral.2023.105740.
- Prieto-Martínez FD, Fernández-de Gortari E, Medina-Franco JL, Michel Espinoza-Fonseca L, 2021, An in silico pipeline for the discovery of multitarget ligands: A case study for epipolypharmacology based on DNMT1/HDAC2 inhibition, *Artificial Intelligence in the Life Sciences* 1: 100008, doi: 10.1016/j.aailsci.2021.100008.
- Sabah F, Hassan SU, Muazzam A, Iqbal S, Soroya SH, Sarwar R, 2019, Scientific collaboration networks in Pakistan and their impact on institutional research performance: A case study based on Scopus publications, *Library Hi Tech* 37(1): 19–29, doi: 10.1108/LHT-03-2018-0036.

Sajid-ur-Rehman, Saeed A, Saddique G, Ali Channar P, Ali Larik F, Abbas Q, Hassan M, Raza H, Fattah TA, Seo SY, 2018, Synthesis of sulfadiazinyl acyl/aryl thiourea derivatives as calf intestinal alkaline phosphatase inhibitors, pharmacokinetic properties, lead optimization, Lineweaver-Burk plot evaluation and binding analysis, *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 26(12): 3707–3715, doi: 10.1016/j.bmc.2018.06.002.

Sander T, Freyss J, von Korff M, Rufener C, 2015, DataWarrior: An open-source program for chemistry aware data visualization and analysis, *Journal of Chemical Information and Modeling* 55(2): 460–473, doi: 10.1021/ci500588j.

Shahzad D, Saeed A, Larik FA, Channar PA, Abbas Q, Alajmi MF, Arshad MI, Erben MF, Hassan M, Raza H, Seo SY, El-Seedi HR, 2019, novel c-2 symmetric molecules as α -glucosidase and α -amylase inhibitors: design, synthesis, kinetic evaluation, molecular docking and pharmacokinetics, *Molecules* 24(8):1511, doi: 10.3390/molecules24081511.

Sjögårde P, Didegah F, 2022, The association between topic growth and citation impact of

research publications, *Scientometrics* 127(4): 1903–1921, doi: 10.1007/s11192-022-04293-x.

Temraz MG, Elzahhar PA, Bekhit, AEDA, Bekhit, AA, Labib HF, Belal ASF, 2018, Anti-leishmanial click modifiable thiosemicarbazones: Design, synthesis, biological evaluation and in silico studies, *European Journal of Medicinal Chemistry* 151: 585–600, doi: 10.1016/j.ejmech.2018.04.003

Widiyana AP, 2021, Desain komputasi dari turunan senyawa kuinazolin-4(3H)-on sebagai inhibitor siklooksigenase-2 (COX-2), *Jurnal Farmasi Sains dan Praktis* 7(2): 163–170.

Willems H, de Cesco S, Svensson F, 2020, Computational chemistry on a budget: supporting drug discovery with limited resources, *Journal of Medicinal Chemistry* 63(18): 10158–10169, doi: 10.1021/acs.jmedchem.9b02126.

Yoshikawa N, Hutchison GR, 2019, Fast, efficient fragment-based coordinate generation for Open Babel, *Journal of Cheminformatics* 11(1): 49, doi: 10.1186/s13321-019-0372-5.