




Heri Cahyono

(1) Naskah Heri Cahyono

-  Farmasi
-  Fak. Ilmu Kesehatan
-  LLDIKTI IX Turnitin Consortium Part III

Document Details

Submission ID

trn:oid::1:3544967278

Submission Date

Apr 21, 2026, 8:55 AM GMT+7

Download Date

Apr 21, 2026, 9:02 AM GMT+7

File Name

SACK_SERTA_AKTIVITAS_DAN_TOKSISITAS_WAY2DRUG--_Hery_Cakep_2.pdf

File Size

552.9 KB

30 Pages**5,419 Words****31,894 Characters**




11% Overall Similarity

The combined total of all matches, including overlapping sources, for each database.

Filtered from the Report

- ▶ Bibliography
- ▶ Quoted Text
- ▶ Small Matches (less than 12 words)

Top Sources

- 11%  Internet sources
- 8%  Publications
- 9%  Submitted works (Student Papers)

Integrity Flags

0 Integrity Flags for Review

No suspicious text manipulations found.

Our system's algorithms look deeply at a document for any inconsistencies that would set it apart from a normal submission. If we notice something strange, we flag it for you to review.

A Flag is not necessarily an indicator of a problem. However, we'd recommend you focus your attention there for further review.

Top Sources

- 11% Internet sources
- 8% Publications
- 9% Submitted works (Student Papers)

Top Sources

The sources with the highest number of matches within the submission. Overlapping sources will not be displayed.

1	Internet	www.mdpi.com	3%
2	Internet	files.docking.org	1%
3	Internet	sr.iu.a.u-tokyo.ac.jp	1%
4	Internet	s3-eu-west-1.amazonaws.com	<1%
5	Internet	api.scienceweb.uz	<1%
6	Internet	acikerisim.erdogan.edu.tr	<1%
7	Internet	cache.docking.org	<1%
8	Internet	hmdb.ca	<1%
9	Internet	bpci.kiev.ua	<1%
10	Student papers	Universitas Bengkulu	<1%
11	Internet	assets.researchsquare.com	<1%

12	Internet	repository.usd.ac.id	<1%
13	Internet	www.biorxiv.org	<1%
14	Internet	jurnal.pancabudi.ac.id	<1%
15	Internet	ojs.udb.ac.id	<1%
16	Internet	123dok.com	<1%
17	Publication	Asopari Ilham Nurfadilah, Pratita Anindita Tri Kusuma, Mardianingrum Richa, Ru...	<1%
18	Student papers	Osmania University, Hyderabad	<1%
19	Internet	showme.physics.drexel.edu	<1%
20	Internet	www.journal.unrika.ac.id	<1%

BAB 1

PENDAHULUAN

A. Latar belakang

Kelapa sawit (*Elaeis guineensis*) selama beberapa dekade dikenal sebagai komoditas unggulan penghasil minyak nabati yang mendominasi pasar global. Fokus utama dalam penelitian dan pengembangan umumnya tertuju pada fraksi minyak, pelepah, maupun tandan kosong, sementara bagian lain seperti buah pasir relatif kurang dieksplorasi secara ilmiah (Ariyanti et al., 2024; Firsta & Aulia, 2024). Buah pasir buah berukuran kecil dan tidak berkembang sempurna yang kerap dianggap limbah. Padahal, secara fitokimia, bagian ini diduga memiliki kandungan metabolit sekunder yang berpotensi untuk dikembangkan dalam bidang farmasi.

Seiring meningkatnya kebutuhan akan obat alami yang aman dan berkelanjutan, penelitian terhadap senyawa aktif dari tanaman tropis menjadi semakin penting (Djamaludin et al., 2024). Salah satu pendekatan yang efisien dan modern dalam menjelajahi potensi farmakologis senyawa alami adalah studi *in silico* (Bumulo et al., 2025). Pendekatan ini memungkinkan analisis aktivitas biologis dan prediksi toksisitas ribuan molekul hanya dengan menggunakan struktur kimianya, tanpa perlu uji praklinik yang mahal dan memakan waktu. Dalam konteks ini, database seperti *KNApSAcK* menjadi sumber penting untuk mengidentifikasi senyawa metabolit dari tanaman, sementara platform *Way2Drug* (*PASS Online*) menawarkan sistem prediktif berbasis struktur kimia untuk mengevaluasi kemungkinan aktivitas dan toksisitas senyawa.

Metode *in silico* merupakan pendekatan berbasis komputer yang dimanfaatkan untuk menelaah potensi bioaktivitas, interaksi molekul, serta kemungkinan toksisitas suatu senyawa hanya dengan mengacu pada struktur kimianya. Cara ini dinilai lebih efisien karena mampu menyaring kandidat senyawa aktif sebelum diuji lebih lanjut melalui eksperimen laboratorium yang memerlukan biaya dan waktu lebih besar (Inayah et al., 2024). Sebagai sumber data metabolit, tersedia *KNApSAcK* (Comprehensive Natural Products in Plant Species), yaitu basis data yang menghimpun ribuan senyawa alami dari berbagai

jenis tumbuhan, termasuk spesies tropis. Melalui database ini, peneliti dapat melacak senyawa yang mungkin terkandung pada buah pasir kelapa sawit maupun tanaman sejenis (Fath et al., 2024).

Untuk memprediksi potensi farmakologis, digunakan platform PASS Online yang dikembangkan dalam jaringan Way2Drug. Dengan memasukkan struktur kimia suatu senyawa (misalnya dalam format SMILES), sistem ini akan memberikan estimasi probabilitas berbagai aktivitas biologis, seperti antioksidan, antimikroba, antikanker, atau aktivitas farmakologis lainnya (Fath et al., 2024). Sementara itu, aspek keamanan senyawa dapat ditinjau melalui GUSAR Online, yaitu perangkat prediksi toksisitas yang mengestimasi parameter seperti LD₅₀, potensi kerusakan hati, efek pada sistem kardiovaskular, maupun risiko toksik lainnya berdasarkan data struktur molekul (Ayu Kartika et al., 2024).

Kombinasi penggunaan KNApSAcK sebagai basis data metabolit, serta PASS Online dan GUSAR Online sebagai sistem prediksi aktivitas dan toksisitas, menjadikan pendekatan *in silico* sangat strategis dalam menyingkap potensi bioaktif buah pasir kelapa sawit untuk pengembangan kandidat fitofarmaka yang aman dan berkelanjutan (Fatmawati & Inachya, 2025). Lebih lanjut, beberapa studi transcriptomics pada mesokarp kelapa sawit mengungkapkan ekspresi jalur biosintesis yang unik, terutama pada lintasan pembentukan karotenoid dan asam lemak. Hal ini memperkuat hipotesis bahwa buah pasir meskipun selama ini dianggap limbah justru menyimpan potensi senyawa bioaktif yang belum banyak dikaji secara ilmiah, khususnya di Indonesia (Elvianita et al., 2023).

Di sisi lain, kajian ilmiah lokal yang secara spesifik menyoroiti buah pasir kelapa sawit masih sangat terbatas, berbeda dengan penelitian intensif terhadap minyak sawit, pelepah, ataupun tandan kosong. Minimnya literatur ini menciptakan celah pengetahuan penting terkait karakterisasi kimiawi dan bioaktivitas senyawa dari buah pasir. Oleh karena itu, penelitian ini menjadi

relevan dan strategis, tidak hanya untuk memperkaya basis data senyawa tropis, tetapi juga untuk mendukung pengembangan fitofarmaka berbasis sumber daya lokal yang berkelanjutan.

B. Rumusan Masalah

1. Apa saja metabolit sekunder yang terkandung dalam buah pasir kelapa sawit menurut data *KNApSAcK*?
2. Bagaimana potensi aktivitas biologis dan efek toksisitas dari senyawa-senyawa tersebut berdasarkan prediksi *PASS* dan *GUSAR Online* (Way2drug)?

C. Tujuan Khusus Penelitian

1. Mengidentifikasi metabolit sekunder buah pasir kelapa sawit melalui database *KNApSAcK*.
2. Menganalisis potensi aktivitas biologis dan efek toksisitas senyawa teridentifikasi dengan *PASS Online* dan *GUSAR Online* (Way2drug).

D. Manfaat Penelitian

1. Secara ilmiah, penelitian ini berkontribusi pada pemetaan senyawa bioaktif dari bagian tanaman kelapa sawit yang belum banyak diteliti.
2. Secara praktis, hasil studi ini dapat menjadi dasar awal untuk pengembangan kandidat fitofarmaka berbasis buah pasir kelapa sawit.
3. Secara strategis, memperkuat pemanfaatan sumber daya hayati lokal untuk inovasi di bidang farmasi berkelanjutan.

E. Ruang Lingkup Penelitian dan Batasan Penelitian

Penelitian ini difokuskan pada identifikasi metabolit sekunder yang terdapat pada buah pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*) menggunakan database *KNApSAcK*, serta analisis prediksi aktivitas biologis dan toksisitas senyawa tersebut menggunakan platform *PASS Online* dan *GUSAR Online* (Way2Drug). Analisis dilakukan secara *in silico* tanpa melibatkan uji

laboratorium *in vitro* maupun *in vivo*. Analisis dilakukan secara *in silico* tanpa melibatkan uji laboratorium *in vitro* maupun *in vivo*.

Batasan penelitian meliputi:

1. Hanya senyawa yang tercatat dalam KNApSAcK yang dianalisis.
2. Aktivitas biologis yang diprioritaskan adalah yang memiliki nilai $Pa \geq 0,7$.
3. Toksisitas akut dianalisis pada lima rute paparan yang tersedia di GUSAR.
4. Tidak dilakukan pengujian toksisitas kronis atau efek jangka panjang.

Variabel penelitian terdiri dari:

1. Variabel independen: jenis metabolit sekunder, struktur kimia (SMILES), dan sumber data.
2. Variabel dependen: prediksi aktivitas biologis (Pa), nilai LD_{50} , dan indeks prioritas.
3. Variabel kontrol: kriteria $Pa \geq 0,7$ dan $LD_{50} \geq 1000$ mg/kg.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

A. Buah Pasir Kelapa Sawit (*Elaeis guineensis*)



Gambar 2.1 Buah Pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*)

Sumber: Heri cahyono, 2025

1. Klasifikasi

Kingdom	: Plantae
Divisi	: Embryophyta
Kelas	: Angiospermae
Ordo	: Monocotyledonae
Famili	: Arecaceae
Subfamili	: Cocoideae
Tribu	: Cocoseae
Subtribu	: Elaidinae
Genus	: <i>Elaeis</i>
Spesies	: <i>Elaeis guineensis</i> (Adrian et al., 2024)

2. Botani dan Morfologi

buah kelapa sawit terdiri dari beberapa bagian utama yang sangat menentukan potensi hasil minyak yang dapat diekstraksi. Bagian terluar adalah eksokarp, berupa kulit tipis dan keras, diikuti oleh mesokarp yang merupakan daging buah paling tebal dan mengandung minyak sawit kasar (*crude palm oil/CPO*) sekitar 20–24% dari berat buah (Bakewell-Stone, 2023). Buah pasir berukuran sangat kecil, dengan panjang hanya sekitar 1–2 cm dan diameter kurang dari 1 cm. Warna kulit buah biasanya serupa dengan buah sawit normal, yakni merah jingga atau merah keunguan saat matang, tetapi permukaannya bisa tampak lebih kusam (Alhaji et al., 2024). Daging buah (mesokarp) sangat tipis dan sering kali hampir tidak terlihat, sehingga kandungan minyaknya pun sangat sedikit. Biji (kernel) di dalamnya berukuran relatif besar dibandingkan ukuran buah secara keseluruhan, menjadikan rasio daging terhadap biji sangat rendah. Buah ini juga sering tumbuh dalam jumlah sedikit per tandan, sehingga berat total tandan pun jauh di bawah standar, biasanya kurang dari 1 kg.

10 Buah kelapa sawit (*Elaeis guineensis*) terdiri dari tiga lapisan utama: eksokarp (kulit luar yang tipis), mesokarp (bagian tengah yang berdaging dan kaya minyak), dan endokarp (cangkang keras yang melindungi biji atau kernel). Mesokarp ini adalah bagian terpenting karena mengandung sekitar 20–24% minyak dari total berat buah, sehingga menjadi sumber utama minyak sawit kasar (CPO). Secara struktur, buah sawit tersusun sebagai buah bertipe perikarp, di mana eksokarp melindungi mesokarp yang berisi minyak, sementara endokarp membungkus bijinya (Goh et al., 2025). Namun, ada kelainan morfologi yang dikenal sebagai buah pasir. Buah ini ukurannya jauh lebih kecil dari buah normal hanya sekitar 1–2 cm panjangnya dan kurang dari 1 cm diameternya. Mesokarpnya pun sangat tipis, nyaris tidak terlihat, sehingga kandungan minyaknya sangat rendah. Buah pasir biasanya hanya muncul sedikit dalam setiap tandan,

dan tandan yang mengandung buah pasir memiliki berat total yang jauh di bawah standar (kurang dari 1 kg). Akibatnya, kehadiran buah pasir menurunkan produktivitas perkebunan secara keseluruhan.

3. Signifikansi Ekonomi dan Keberlanjutan

Indonesia merupakan produsen kelapa sawit terbesar dunia dengan kontribusi ekonomi yang signifikan. Industri kelapa sawit tidak hanya menghasilkan minyak untuk konsumsi, tetapi juga berbagai produk turunan untuk industri kosmetik, farmasi, dan oleokimia. Studi terbaru (2024) Tokotrienol dan Tokoferol (dua bentuk vitamin E) dari minyak sawit menunjukkan aktivitas antioksidan yang lebih kuat daripada tokoferol biasa. Tokotrienol diketahui memiliki efek neuroprotektif (melindungi saraf), mempercepat penyembuhan patah tulang, sifat antikanker, serta mendukung kesehatan jantung dan membantu menurunkan kadar kolesterol (Alhaji et al., 2024).

Sektor perkebunan, yang sebagian besar didominasi oleh kelapa sawit, menyumbang sekitar 4% terhadap Produk Domestik Bruto (PDB) Indonesia dan mencakup hampir sepertiga dari kontribusi sektor pertanian, kehutanan, dan perikanan. Nilai ekspor minyak sawit beserta produk turunannya terus meningkat, dari US\$1,08 miliar pada tahun 2000 menjadi US\$31 miliar pada 2023. Selain mendukung perekonomian melalui ekspor, industri ini juga berperan dalam penghematan devisa negara lewat program biodiesel mandatori, yang mampu mengurangi impor solar fosil dan menghemat sekitar US\$8 miliar per tahun. Di tingkat global, industri kelapa sawit tumbuh pesat dengan nilai pasar mencapai lebih dari US\$50 miliar pada 2021 dan diperkirakan meningkat dengan laju pertumbuhan tahunan gabungan (CAGR) minimal 4%, sehingga diproyeksikan mencapai US\$65 miliar pada 2027. Lebih dari 7 juta petani kecil di dunia menggantungkan hidupnya pada budidaya kelapa sawit, di mana Indonesia dan Malaysia mempekerjakan hampir 5 juta petani dan pekerja secara

langsung, serta melibatkan sekitar 6 juta orang lainnya secara tidak langsung (Voora et al., 2023).

4. Biomassa Sampingan sebagai Sumber Nutrasetikal

Penelitian terkini menunjukkan bahwa limbah perkebunan kelapa sawit seperti pelepah, daun, dan buah pasir mengandung senyawa metabolit sekunder yang berpotensi sebagai sumber nutrasetikal. Komponen bioaktif dalam limbah sawit termasuk karotenoid, tokoferol, tokotrienol, dan koenzim Q yang memiliki potensi sebagai suplemen kesehatan (Nuralang et al., 2025).

Tandan kosong kelapa sawit (TKKS) merupakan limbah lignoselulosa yang kaya akan lignin, dengan kandungan mencapai 25,83%. Kandungan lignin yang tinggi ini mendorong pertumbuhan jamur yang mampu menghasilkan enzim lignolitik, seperti laccase. Berdasarkan studi terbaru tahun 2025, proses biodegradasi TKKS menggunakan jamur *Pleurotus ostreatus* dan *Volvariella volvacea* selama 21 hari menunjukkan efisiensi yang signifikan dalam menurunkan kadar komponen lignoselulosa. Kandungan lignin dapat direduksi dari 18% menjadi sekitar 10–11%, selulosa dari 57% menjadi 47–52%, dan hemiselulosa dari 20% menjadi 18–19%. Produk hasil dekomposisi ini memiliki nilai tambah karena dapat dimanfaatkan secara berkelanjutan, antara lain sebagai pupuk organik, pakan ternak, maupun bahan baku briket ramah lingkungan (John et al., 2024).

B. Aktivitas Farmakologi Berbasis Studi Terbaru

- a. Aktivitas Antioksidan: Studi metabolomik mengidentifikasi senyawa seperti prolin, metil palmitat, dan octadecylamine sebagai komponen kunci dalam adaptasi tanaman terhadap cekaman oksidatif. Prolin dan asam D-glukoronik amida dikonfirmasi sebagai biomarker potensial untuk membedakan respons tanaman terhadap stres kekeringan (Adrian et al., 2024).

- b. Efek Toksikologis: Studi terbaru menggunakan *Drosophila melanogaster* menunjukkan bahwa paparan minyak sawit pada konsentrasi 10% dan 30% mengakibatkan pemendekan umur, penurunan performa lokomotor, dan peningkatan peroksidasi lipid (Carlow et al., 2018).

C. Database dan Platform *In Silico* Terkini

1. *KNApSAcK Database*

KNApSAcK (KNnowledge Annotation of Plant's Secondary Metabolites Alignment and Cross Knowledge) merupakan database komprehensif yang berisi hubungan spesies-metabolit untuk tumbuhan. Update terakhir (Desember 2024) menunjukkan database ini mencakup 63.715 entri metabolit, 159.095 pasangan metabolit-spesies, dan 24.749 spesies. Database ini menyediakan informasi sistematis tentang hubungan senyawa metabolit berdasarkan pengetahuan tradisional dan modern (Nasution & Ahyaningsih, 2024).

2. *PASS Online*

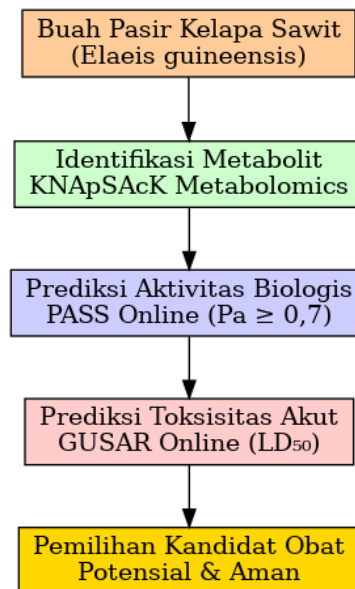
PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) Online versi 2024 merupakan platform berbasis web yang dapat memprediksi 9.274 jenis aktivitas biologis dengan akurasi rata-rata 93,4%. Sistem ini menggunakan basis data SAR yang didasarkan pada 1.482.930 senyawa dengan 6.019.343 catatan struktur-aktivitas pairwise. *PASS 2024* menyediakan 2.024 aktivitas yang direkomendasikan dengan akurasi rata-rata di atas 97,2%. Platform ini telah digunakan dalam lebih dari 1.200 publikasi ilmiah hingga Januari 2021. Sistem *PASS* menghasilkan dua nilai prediksi: P_a (*Probability to be Active*) dan P_i (*Probability to be Inactive*), dengan aktivitas $P_a > 0,7$ dianggap memiliki probabilitas aktivitas sangat tinggi (Jairajpuri et al., 2021).

3. *GUSAR dan Way2Drug*

GUSAR (General Unrestricted Structure-Activity Relationships) merupakan platform *online* untuk prediksi toksisitas akut senyawa kimia

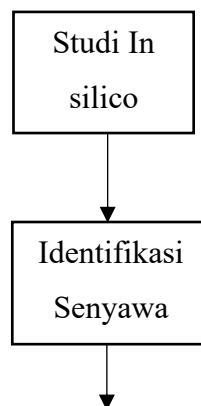
yang terintegrasi dalam platform *Way2Drug*. Platform *Way2Drug* telah mengembangkan berbagai tools termasuk *World Wide Approved Drugs* (WWAD) database yang berisi informasi tentang 3.871 obat yang disetujui di setidaknya satu dari 88 negara. Platform ini menggunakan pendekatan QSAR yang sesuai dengan pedoman OECD. *Way2Drug* juga menyelenggarakan *symposium* tahunan tentang *Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery*, dengan *symposium* ke-30 dilaksanakan pada September 2024 (Djamaludin et al., 2024).

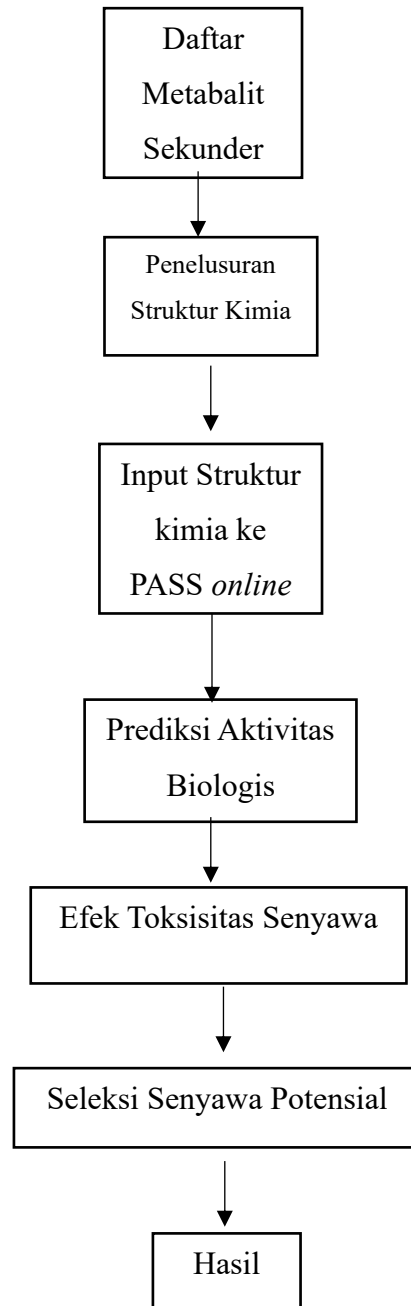
D. Kerangka Teori



Gambar 2.2 Kerangka Teori

E. Kerangka Konseptual Penelitian





Gambar 2.3 Kerangka Konseptual Penelitian

F. Definisi Operasional dan Kriteria Objektif

1. Definisi Operasional

- a. Metabolit sekunder: senyawa yang dihasilkan oleh buah pasir kelapa sawit dan tercatat di KNApSAcK.

- b. Aktivitas biologis (P_a): probabilitas suatu senyawa memiliki aktivitas farmakologis tertentu berdasarkan prediksi PASS Online.
- c. Toksisitas akut (LD_{50}): dosis yang menyebabkan kematian pada 50% populasi hewan uji, diprediksi oleh GUSAR.
- f. Indeks prioritas (IP): skor gabungan dari aktivitas biologis dan toksisitas yang digunakan untuk menentukan senyawa kandidat prioritas.

2. Kriteria Objektif

- a. Senyawa dipilih jika memiliki $P_a \geq 0,7$ untuk minimal dua kategori farmakologi.
- b. Senyawa dipertimbangkan aman jika memiliki LD_{50} oral ≥ 1000 mg/kg. Hanya senyawa yang berada dalam *applicability domain* GUSAR yang dinilai reliabel.

BAB III METODE PENELITIAN

A. Jenis Penelitian

Penelitian ini mengandalkan metode komputasi/informatika untuk mengidentifikasi, memodelkan, dan memprediksi potensi serta keamanan metabolit sekunder tanpa melibatkan uji coba laboratorium secara langsung maupun penggunaan organisme hidup. Pendekatan ini serupa dengan studi-studi *in silico* lain terhadap metabolit sekunder pada berbagai tanaman yang menggunakan basis data, pemodelan molekuler, dan perangkat lunak prediksi bioaktivitas dan toksisitas untuk analisisnya.

B. Lokasi dan Waktu Penelitian

Penelitian dilaksanakan secara *in silico* menggunakan komputer atau Laptop pada September-November 2025.

C. Populasi dan Sampel

Populasi dalam penelitian ini adalah seluruh data senyawa metabolit sekunder yang terkandung dalam buah pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*) sebagaimana tercatat pada database KNApSAcK Metabolomics. Sampel adalah subset dari populasi tersebut yang memenuhi kriteria inklusi dan eksklusi yang telah ditetapkan.

1. Kriteria inklusi:

- a. Senyawa memiliki data struktur kimia lengkap (SMILES) pada database KNApSAcK.
- b. Senyawa teridentifikasi sebagai metabolit sekunder alami dari buah pasir kelapa sawit.
- c. Data senyawa dapat diproses pada PASS Online dan GUSAR Online tanpa error.

2. Kriteria eksklusi:

- a. Senyawa dengan data struktur kimia yang tidak lengkap atau tidak dapat dibaca perangkat lunak.
- b. Senyawa yang tidak teridentifikasi secara spesifik berasal dari buah pasir kelapa sawit.
- c. Senyawa di luar applicability domain model prediksi GUSAR.

Besar sampel ditentukan berdasarkan jumlah senyawa yang memenuhi seluruh kriteria inklusi dan eksklusi.

D. Jenis dan Sumber Data

Jenis data yang digunakan adalah data dokumenter yang diperoleh dari database daring.

1. Data primer: tidak digunakan karena penelitian bersifat in silico.
2. Data sekunder:
 - a. Data struktur kimia senyawa dari KNApSAcK Metabolomics.
 - b. Data prediksi aktivitas biologis dari PASS Online.
 - c. Data prediksi toksisitas akut (LD_{50}) dari GUSAR Online.

Data bersifat kuantitatif (nilai P_a , nilai LD_{50}) dan kualitatif (jenis aktivitas biologis). Sumber data ini dipilih karena kredibilitasnya tinggi, berbasis publikasi ilmiah, dan relevan dengan tujuan penelitian.

E. Instrumen Penelitian

1. Alat

a. Hardware

Hardware yang akan digunakan pada penelitian ini adalah laptop dengan spesifikasi prosesor AMD Athlon silver 3050U, RAM 4 GB, SSD 245 GB.

b. Software

1. Google Chrome v125 digunakan untuk mengakses berbagai platform analisis online. Google Chrome dapat diunduh secara gratis di <https://www.google.com/chrome/>.

14

15

2. KNApSAcK Metabolomics Search Engine versi 2024.12 digunakan untuk mengekstraksi informasi metabolit dari buah pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*). Dapat diakses secara gratis di <https://www.knapsackfamily.com/Metabolomics/>.
3. PASS Online build 2025.05 digunakan untuk memprediksi lebih dari 4.000 aktivitas biologis senyawa uji. Dapat diakses secara gratis di <http://www.way2drug.com/passonline/>.
4. GUSAR Online build 2025.05 digunakan untuk memprediksi nilai LD₅₀ senyawa pada lima rute paparan. Dapat diakses secara gratis di <http://www.way2drug.com/gusar/>.
5. Microsoft Excel 365 digunakan untuk merekapitulasi dan mengolah data hasil analisis. Dapat diunduh di <https://www.microsoft.com/microsoft-365/excel>.

2. Bahan

Bahan senyawa uji yang digunakan dalam penapisan virtual ini berasal dari buah pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*). Data senyawa dan metabolit yang terkandung di dalamnya akan diambil dari database KNApSAcK untuk dianalisis lebih lanjut menggunakan PASS Online dan GUSAR Online

E. Teknik Pengumpulan Data

1. Ekstraksi Metabolit dari *KNApSAcK*

- a. Buka *KNApSAcK* Core System → pilih radio button “Organism”.
- b. Ketik *Elaeis guineensis* → klik “List” untuk menampilkan semua metabolit terkait (Panel 6 manual).
- c. Unduh tabel hubungan spesies-metabolit (format *.txt*).
- d. Gunakan skrip Python *KnapsackSearch* (GitHub release v1.4) untuk mengotomasi ekspor *SMILES* dan InChI (Bumulo et al., 2025).

2. Prediksi Spektrum Aktivitas Biologis (PASS Online)

- a. Unggah file *.smi* kolektif ke PASS Online dengan mode default ($P_a > 0.3$, $P_i < 0.7$).
- b. Catat nilai P_a (probability to be active) untuk setiap aktivitas.
- c. Kelompokkan aktivitas prioritas ($P_a \geq 0.7$) sesuai klasifikasi ATC WHO.
- d. Hitung persentase metabolit yang memprediksi aktivitas antioksidan, antiinflamasi, antimikroba, antikanker, dan antidiabetik (Bumulo et al., 2025).

3. Prediksi Toksisitas (GUSAR)

- a. Impor SMILES sekali-unggah ke modul “Acute Rat Toxicity” GUSAR (Askerova, 2023).
- b. Pilih skenario lima rute paparan: oral, i.p., i.v., s.c..
- c. Rekam nilai LD_{50} (\log_{10} mmol/kg) dan status *applicability domain* (AD).
- d. Tandai senyawa di luar AD sebagai “prediksi tidak reliabel” (Djamaludin et al., 2024).

4. Analisis Data

- a. Gabungkan hasil PASS dan GUSAR dalam spreadsheet master.
- b. Buat indeks prioritas (IP) = $(\sum P_a_{\text{high}}/5) - (\text{Skor toksisitas})$. (Djamaludin et al., 2024).

G. Teknik Analisis Data

Analisis data dilakukan secara deskriptif kuantitatif dan deskriptif kualitatif.

1. Deskriptif kuantitatif: menghitung distribusi nilai P_a , jumlah aktivitas biologis dengan $P_a \geq 0,7$, serta nilai LD_{50} pada berbagai rute paparan.
2. Deskriptif kualitatif: mengidentifikasi jenis aktivitas biologis potensial dan relevansinya terhadap pengembangan obat.

Pemilihan metode ini didasarkan pada tujuan penelitian untuk memetakan potensi farmakologi dan keamanan metabolit sekunder buah pasir kelapa sawit tanpa melakukan pengujian eksperimental. (Bumulo et al., 2025).

BAB IV

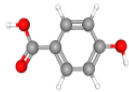
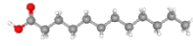
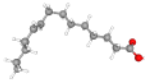
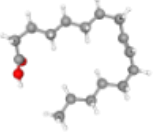
HASIL DAN PEMBAHASAN

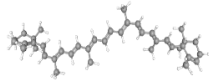
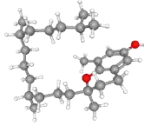
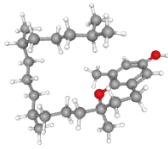
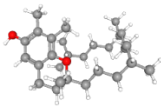
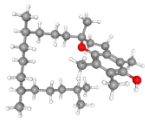
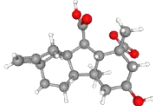
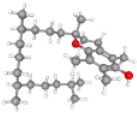
A. Hasil

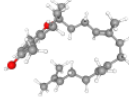
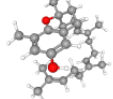
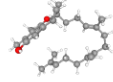
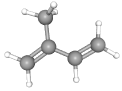
1. Senyawa hasil identifikasi dari KNApSAcK

Penelusuran basis data KNApSAcK Metabolomics terhadap buah pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*) berhasil mengidentifikasi 15 metabolit sekunder utama. Senyawa-senyawa tersebut berasal dari golongan asam fenolat dan asam lemak jenuh maupun tak jenuh.

Tabel 4.1 hasil identifikasi dari KNApSAcK

Nama Senyawa	Smiles	Rumus Kimia	Rumus Struktur 3D
4-Hydroxybenzoic acid	<chem>O=C(O)c1ccc(O)cc1</chem>	C7H6O3	
Lauric acid	<chem>CCCCCCCCCCCC(=O)O</chem>	C12H24O2	
Myristoleic acid	<chem>CCCC/C=C/CCCCCC CC(=O)O</chem>	C14H26O2	
Palmitoleic acid	<chem>CCCCC/C=C/CCCCCC CCC(=O)O</chem>	C16H30O2	

2 alpha-Carotene	<chem>CC1=CCCC(C)(C)[C@H]1/C=C/C(C)=C/C=C/C(C)=C/C=C/C(C)=C/C=C/C1=C(C)CCCC1(C)C</chem>	C40H56	
13 delta-Tocopherol	<chem>Cc1cc(O)cc2c1O[C@](C)(CCC[C@H](C)CC[C@H](C)CCCC(C)C)CC2</chem>	C27H46O2	
3 Beta-Tocopherol	<chem>Cc1cc(O)c(C)c2c1O[C@](C)(CCC[C@H](C)CCC[C@H](C)CCCC(C)C)CC2</chem>	C28H48O2	
11 Gamma-Tocopherol	<chem>Cc1c(O)cc2c(c1C)OC(C)(CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C)CC2</chem>	C28H48O2	
2 alpha-Tocopherol	<chem>Cc1c(C)c2c(c(C)c1O)C[C@@](C)(CCC[C@H](C)CCC[C@H](C)CCC(C)C)O2</chem>	C29H50O2	
7 Gibberellin A110	<chem>C=C1C[C@]23C[C@H]1CC[C@H]2C1(C)C[C@H](O)C[C@@](C)(C(=O)O)[C@H]1[C@@H]3C(=O)O</chem>	C20H28O5	
2 alpha-Tocotrienol	<chem>CC(C)=CCC/C(C)=C/CC/C(C)=CCCC1(C)C Cc2c(C)c(O)c(C)c(C)c2O1</chem>	C29H50O2	

3	beta-Tocotrienol	<chem>CC(C)=CCC/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC[C@]1(C)CCc2c(C)c(O)cc(C)c2O1</chem>	C28H42O2	
3	delta-Tocotrienol	<chem>CC(C)=CCC/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC[C@]1(C)CCc2cc(O)cc(C)c2O1</chem>	C27H40O2	
8	gamma-Tocotrienol	<chem>CC(C)=CCC/C(C)=C/CC/C(C)=C/CC[C@]1(C)CCc2cc(O)c(C)c(C)c2O1</chem>	C28H42O2	
	Isoprene	<chem>C=CC(=C)C</chem>	C5H8	

2. Aktivitas Biologis Senyawa Hasil Analisis PASS Online

Tabel 4.2 Aktivitas Biologis Senyawa Hasil Analisis PASS Online

Metabolit	Aktivitas 1 (skor)	Aktivitas 2 (skor)	Aktivitas 3 (skor)
4-hydroxybenzoic acid	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,989)</i>	<i>Reductant (0,983)</i>	<i>Antioxidant (0,973)</i>
Lauric acid	<i>CYP2J substrate (0,974)</i>	<i>CYP2J2 substrate (0,973)</i>	<i>Mucomembranous protector (0,958)</i>

Myristoleic acid	<i>Membrane integrity agonist (0,807)</i>	<i>CYP2C12 substrate (0,804)</i>	<i>Antiseborrheic (0,803)</i>
Palmitoleic acid	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,989)</i>	<i>Reductant (0,983)</i>	<i>Antioxidant (0,973)</i>
alpha-Carotene	<i>Reductant (0,965)</i>	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,941)</i>	<i>Antioxidant (0,913)</i>
delta-Tocopherol	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,954)</i>	<i>Peroxidase inhibitor (0,950)</i>	<i>CYP2C12 substrate (0,942)</i>
beta-Tocopherol	<i>Reductant (0,972)</i>	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,957)</i>	<i>Antioxidant (0,951)</i>
gamma-Tocopherol	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,970)</i>	<i>Antioxidant (0,967)</i>	<i>CYP2C12 substrate (0,955)</i>
alpha-Tocopherol	<i>CYP2J substrate (0,965)</i>	<i>Phosphatidylcholine-retinol O-acyltransferase inhibitor (0,961)</i>	<i>All-trans-retinyl-palmitate hydrolase inhibitor (0,958)</i>

Gibberellin A110	<i>Reductant (0,755)</i>	<i>Beta-carotene 15,15-monooxygenase inhibitor (0,750)</i>	<i>Formaldehyde transketolase inhibitor (0,751)</i>
alpha-Tocotrienol	<i>Reductant (0,979)</i>	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,977)</i>	<i>Antioxidant (0,953)</i>
beta-Tocotrienol	<i>Peroxidase inhibitor (0,944)</i>	<i>CYP2C12 substrate (0,933)</i>	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,917)</i>
delta-Tocotrienol	<i>Reductant (0,950)</i>	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,936)</i>	<i>Antioxidant (0,925)</i>
gamma-Tocotrienol	<i>Peroxidase inhibitor (0,950)</i>	<i>CYP2C12 substrate (0,940)</i>	<i>Lipid peroxidase inhibitor (0,936)</i>
Isoprene	<i>Antineoplastic (0,820)</i>	<i>Testosterone 17β-dehydrogenase NADP inhibitor (0,828)</i>	<i>Antieczematic (0,809)</i>

3. Prediksi Toksisitas Akut (GUSAR)

Tabel 4.3 Prediksi Toksisitas Akut (GUSAR)

Metabolit Sekunder	Rat IP LD ₅₀ (mg/kg)	Rat IV LD ₅₀ (mg/kg)	Rat Oral LD ₅₀ (mg/kg)	Rat SC LD ₅₀ (mg/kg)	Rat IP Klasifikasi	Rat IV Klasifikasi	Rat Oral Klasifikasi	Rat SC Klasifikasi
4-hydroxybenzoic acid	1081,000 in AD	276,300 in AD	2291,000 in AD	1255,000 in AD	Class 4 in AD	Class 3 in AD	Class 5 in AD	Class 5 in AD
Lauric acid	1802,000 out of AD	1218,000 in AD	2799,000 in AD	3003,000 in AD	Class 4 in AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 5 in AD
Myristoleic acid	6488,000 out of AD	642,100 in AD	4505,000 in AD	3182,000 in AD	Non Toxic out of AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 5 in AD
Palmitoleic acid	7353,000 out of AD	744,100 in AD	4906,000 in AD	3151,000 in AD	Non Toxic out of AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Non Toxic in AD
alpha-Carotene	783,100 in AD	42,870 in AD	5783,000 in AD	791,500 in AD	Class 4 in AD	Class 2 in AD	Non Toxic in AD	Class 4 in AD
delta-Tocopherol	1161,000 in AD	32,050 in AD	2600,000 in AD	453,400 in AD	Class 5 in AD	Class 3 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
beta-Tocopherol	1332,000 in AD	33,280 in AD	3803,000 in AD	231,000 in AD	Non Toxic in AD	Class 3 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD

1	gamma-Tocopherol	1294,000 in AD	35,490 in AD	3618,000 in AD	287,500 in AD	Non Toxic in AD	Class 3 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
1	alpha-Tocopherol	1890,000 in AD	44,590 in AD	4790,000 in AD	189,900 in AD	Non Toxic in AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
9	Gibberellin A110	867,500 in AD	13,300 in AD	555,500 in AD	200,500 in AD	Class 5 in AD	Class 3 in AD	Class 4 in AD	Class 4 in AD
1	alpha-Tocotrienol	1890,000 in AD	44,590 in AD	4790,000 in AD	189,900 in AD	Non Toxic in AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
4	beta-Tocotrienol	540,700 in AD	81,980 in AD	2769,000 in AD	596,800 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
4	delta-Tocotrienol	528,300 in AD	71,860 in AD	2537,000 in AD	565,800 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
5	gamma-Tocotrienol	493,100 in AD	85,840 in AD	2777,000 in AD	474,900 in AD	Class 4 in AD	Class 4 in AD	Class 5 in AD	Class 4 in AD
1	Isoprene	400,200 in AD	18,810 in AD	862,900 in AD	359,700 out of AD	Class 4 in AD	Class 3 in AD	Class 4 in AD	Class 4 out of AD

B. Pembahasan

Hasil identifikasi metabolit sekunder melalui basis data KNApSAcK terhadap buah pasir kelapa sawit (*Elaeis guineensis*) mengungkap profil fitokimia yang beragam dan signifikan secara biologis. Sebanyak 15 senyawa berhasil teridentifikasi dengan distribusi kelas kimia yang mencakup asam

fenolat (*4-hydroxybenzoic acid*), asam lemak jenuh dan tak jenuh (*lauric acid*, *myristoleic acid*, *palmitoleic acid*), karotenoid (alpha-carotene), vitamin E dalam bentuk tokoferol (delta-, beta-, gamma-, alpha-tocopherol) dan tokotrienol (alpha-, beta-, delta-, gamma-tocotrienol), diterpenoid (Gibberellin A110), serta senyawa terpen volatil (isoprene). Keragaman struktural ini mengindikasikan kompleksitas metabolisme sekunder pada jaringan buah pasir kelapa sawit yang berpotensi memberikan aktivitas biologis multifungsi.

Analisis prediksi aktivitas biologis menggunakan PASS Online menunjukkan dominasi yang konsisten pada aktivitas antioksidan dan inhibisi peroksidasi lipid, khususnya pada karotenoid dan vitamin E dengan skor probabilitas (Pa) yang tinggi. Alpha-carotene memperlihatkan aktivitas *reductant* (0,965), *lipid peroxidase inhibitor* (0,941), dan *antioxidant* (0,913), sementara alpha-tocotrienol mencapai skor tertinggi sebagai *reductant* (0,979) dan *lipid peroxidase inhibitor* (0,977). Temuan ini selaras dengan literatur kontemporer yang menegaskan peran karotenoid sebagai scavenger radikal bebas yang efektif dan tokotrienol sebagai agen antioksidan yang superior dibandingkan tokoferol dalam berbagai sistem biologis. Penelitian terbaru pada minyak kelapa sawit *hybrid interspecific* menunjukkan bahwa kandungan gamma-tocotrienol dapat mencapai 598 mg/kg pada fraksi olein dan 450 mg/kg pada stearin, dengan aktivitas antioksidan yang terbukti melawan stres oksidatif dan penyakit degeneratif (Crupi et al., 2023).

Pola aktivitas yang menarik juga terlihat pada asam lemak rantai menengah hingga panjang, dimana lauric acid menunjukkan aktivitas sebagai *CYP2J substrate* (0,974) dan *mucomembranous protector* (0,958), sedangkan *myristoleic acid* berperan sebagai *membrane integrity agonist* (0,807) dan *antiseborrheic* (0,803). Karakteristik ini mendukung hipotesis bahwa asam lemak dari buah pasir kelapa sawit tidak hanya berfungsi sebagai komponen struktural membran, tetapi juga sebagai agen bioaktif yang dapat modulating jalur metabolik spesifik dan memberikan efek protektif pada jaringan mukosa,

sebagaimana dikonfirmasi oleh studi terbaru mengenai aktivitas antimikroba dan anti-inflamasi asam laurat. Asam lemak tak jenuh panjang seperti palmitoleic acid menunjukkan aktivitas *lipid peroxidase inhibitor* yang kuat (0,989) dan *reductant* (0,983), yang sejalan dengan penelitian pada ikan puffer yang membuktikan efektivitas antimikroba asam lemak tak jenuh melalui disrupti membran sel bakteri (Sadat et al., 2022).

Prediksi toksisitas akut melalui GUSAR memberikan gambaran profil keamanan yang menggembirakan untuk aplikasi nutrasetikal. Mayoritas senyawa menunjukkan klasifikasi OECD kelas 4-5 pada rute oral dengan nilai LD₅₀ yang relatif tinggi, seperti *alpha-tocopherol* (4790 mg/kg, Class 5) dan *palmitoleic acid* (4906 mg/kg, Class 5), mengindikasikan margin keamanan yang luas untuk konsumsi oral. Temuan ini didukung oleh penelitian keamanan vitamin E yang menunjukkan bahwa dosis harian 15 mg (RDA) hingga 1000 mg masih dalam batas aman untuk sebagian besar populasi dewasa (Kaye et al., 2025). Namun, beberapa senyawa menunjukkan status "out of AD" pada rute tertentu, khususnya asam lemak tak jenuh pada rute intraperitoneal, yang memerlukan interpretasi hati-hati dan validasi eksperimental lebih lanjut.

Komponen *phenolic acid* seperti *4-hydroxybenzoic acid* menunjukkan aktivitas antioksidan yang sangat kuat dengan skor Pa 0,989 sebagai *lipid peroxidase inhibitor*, 0,983 sebagai *reductant*, dan 0,973 sebagai antioxidant. Aktivitas ini konsisten dengan penelitian terbaru yang menunjukkan bahwa asam fenolat memiliki kapasitas antioksidan superior dibandingkan antioksidan sintetik seperti BHT, dengan nilai IC₅₀ yang lebih rendah pada uji DPPH dan ABTS (Weremczuk-Jeżyna et al., 2023). Studi metabolomik pada tanaman land kale mengidentifikasi bahwa caffeic acid dan ferulic acid, yang memiliki struktur serupa dengan *4-hydroxybenzoic acid*, menunjukkan korelasi kuat ($r = -0.971$) antara kandungan asam fenolat dengan aktivitas antioksidan (Fachriyah et al., 2024).

Diterpenoid Gibberellin A110 memperlihatkan profil aktivitas yang unik dengan skor tertinggi sebagai *reductant* (0,755), *beta-carotene 15,15-monooxygenase inhibitor* (0,750), dan *formaldehyde transketolase inhibitor* (0,751). Meskipun *gibberellin traditionally* dikenal sebagai hormon pertumbuhan tanaman, penelitian terbaru menunjukkan bahwa gibberellin memiliki potensi bioaktif pada sistem mamalia melalui modulasi jalur antioksidan dan regulasi gen (Castro-Camba et al., 2022). Gibberellin dapat meningkatkan pertahanan antioksidan melalui perubahan ekspresi gen, sintesis protein, dan pemeliharaan keseimbangan ionik (Setiawan et al., 2024).

Senyawa volatil isoprene menunjukkan aktivitas *antineoplastic* (0,820), *testosterone 17 β -dehydrogenase NADP inhibitor* (0,828), dan *antieczematic* (0,809). Meskipun isoprene dikenal sebagai metabolit endogen yang diproduksi secara alami dalam tubuh manusia dengan laju 0,34 mikromol per kg berat badan per jam, paparan eksogen dalam konsentrasi tinggi dapat menimbulkan risiko karsinogenik. Namun, pada konsentrasi rendah seperti yang terdapat dalam ekstrak alami, isoprene dapat memberikan efek antioksidan dan anti-inflamasi (Liang et al., 2023).

Integrasi data ini dengan bukti ilmiah terkini menguatkan potensi buah pasir kelapa sawit sebagai sumber antioksidan alami. Studi metabolomik pada stres kekeringan kelapa sawit telah mengidentifikasi peningkatan produksi metabolit sekunder termasuk senyawa isoprenoid dan asam amino yang berperan dalam mekanisme adaptif (Qureshi, 2022). Sementara itu, penelitian komprehensif mengenai tokotrienol menunjukkan aktivitas hipocolesterolemik melalui inhibisi HMG-CoA reductase dan modulasi jalur inflamasi via penekanan NF- κ B, yang konsisten dengan prediksi PASS pada isomer tokotrienol dalam sampel ini. Red palm oil yang mempertahankan kandungan bioaktif alami menunjukkan kandungan karotenoid dan tokotrienol yang tinggi, dengan potensi aplikasi sebagai bahan fortifikasi pangan (Szewczyk et al., 2021).

Penelitian terbaru pada protein nabati menunjukkan bahwa kombinasi senyawa bioaktif dapat memberikan efek sinergis dalam aktivitas antioksidan, dimana hemp protein yang kaya akan asam lemak dan senyawa fenolat menunjukkan aktivitas ABTS dan DPPH tertinggi (9,37 TE/g dan 9,01 TE/g). Hal ini mendukung hipotesis bahwa kombinasi metabolit sekunder dalam buah pasir kelapa sawit dapat memberikan efek antioksidan yang lebih kuat dibandingkan senyawa tunggal (Sawicki et al., 2024).

Aspek keamanan konsumsi juga didukung oleh penelitian toksikologi vitamin E yang menunjukkan bahwa suplementasi hingga 800 IU per hari masih aman untuk populasi dengan kondisi khusus seperti nefropati diabetik. Namun, perlu diperhatikan bahwa dosis tinggi vitamin E (>1000 mg/hari) dapat mengganggu fungsi imun dan meningkatkan risiko perdarahan (Kaye et al., 2025).

Secara keseluruhan, karakteristik metabolit sekunder yang teridentifikasi menunjukkan konvergensi antara prediksi *in silico* dan validasi eksperimental dari literatur, memperkuat hipotesis bahwa buah pasir kelapa sawit memiliki potensi sebagai bahan baku nutrasetikal dengan fokus pada aktivitas antioksidan, hipolipemik, dan proteksi jaringan. Profil toksisitas yang relatif aman pada rute oral mendukung prospek pengembangan lebih lanjut, meskipun studi validasi *in vitro* dan *in vivo* tetap diperlukan untuk konfirmasi aktivitas biologis dan penentuan dosis efektif yang optimal. Kombinasi senyawa bioaktif yang beragam dalam buah pasir kelapa sawit memberikan peluang untuk pengembangan produk fungsional dengan spektrum aktivitas biologis yang luas dan profil keamanan yang baik untuk konsumsi jangka panjang.

BAB V

KESIMPULAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil Penelitian data yang telah didapat Berbasis penelusuran KNAPSAcK, prediksi PASS, dan estimasi toksisitas GUSAR, buah pasir kelapa sawit ditarik kesimpulan sebagai berikut :

1. Identifikasi menemukan 15 senyawa dari beberapa kelas utama: asam fenolat (4-hidroksibenzoat), asam lemak jenuh/tak jenuh (laurat, miristoleat, palmitoleat), karotenoid (alfa-karoten), vitamin E tokoferol/tokotrienol (empat isomer masing-masing), diterpenoid (gibberellin A110), dan terpen volatil (isoprena).
2. Prediksi aktivitas PASS menunjukkan antioksidan dan inhibitor peroksidasi lipid dengan skor Pa tinggi pada karotenoid dan vitamin E; seperti alfa-tokotrienol sebagai reduktan 0,979 dan inhibitor peroksidasi lipid 0,977, serta pola serupa pada tokoferol/tokotrienol lainnya.
3. Estimasi toksisitas GUSAR menunjukkan mayoritas senyawa berada pada Kelas 4–5 OECD untuk rute oral dengan LD₅₀ relatif tinggi, misalnya alfa-tokoferol 4790 mg/kg dan palmitoleat 4906 mg/kg, dengan interpretasi berbasis status applicability domain tiap rute. sehingga layak dipertimbangkan sebagai sumber kandidat nutraseutikal/fitofarmaka dengan catatan perlu validasi eksperimental lanjutan.

B. Saran

Berdasarkan analisis dan pembahasan, penulis mengajukan beberapa saran yang dapat dipergunakan sebagai bahan pertimbangan:

1. Disarankan melakukan validasi eksperimental terhadap temuan in silico melalui konfirmasi senyawa kunci dengan LC-MS/GC-MS serta pengujian aktivitas antioksidan berjenjang (DPPH, ABTS, FRAP, ORAC) dan

penghambatan peroksidasi lipid (TBARS), agar hasil prediksi PASS dan identifikasi KNApSAcK memiliki dasar empiris yang kuat.

2. Disarankan menyusun kerangka pemilihan kandidat berbasis indeks prioritas dengan kriteria dan bobot yang jelas (Pa aktivitas utama, penalti toksisitas “oral in AD”, dan konsolidasi aktivitas serumpun) serta melakukan analisis sensitivitas ambang Pa, sehingga keputusan kandidat teratas menjadi terukur dan dapat direplikasi.