

BAB 5

SIMPULAN DAN SARAN

5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, dapat disimpulkan bahwa pendekatan *network pharmacology* yang digabungkan dengan analisis *centrality* serta *molecular docking* mampu mengidentifikasi protein target kunci serta senyawa bioaktif potensial dari Pare (*Momordica charantia*) dan Kelabat (*Trigonella foenum-graecum*) yang berkaitan terhadap penyakit diabetes mellitus tipe 1. Analisis *centrality* (Degree, Betweenness, Closeness, dan Eigenvector) berhasil menentukan protein-protein yang memiliki peran penting dalam jaringan interaksi protein terkait diabetes mellitus tipe 1.

Hasil *molecular docking* menggunakan AutoDock menunjukkan bahwa beberapa senyawa bioaktif dari pare dan kelabat memiliki afinitas ikatan yang baik terhadap protein target utama, yang ditunjukkan oleh nilai *binding affinity* yang lebih rendah (lebih negatif) seperti pada ligand ergosta-5,6-epoksida dengan nilai -9.097 kcal/mol dan disusul oleh Decortinone dengan nilai -8.155 kcal/mol. Jika diurutkan dari atas didapati 5 senyawa terbaik yaitu ergosta-5,6-epoksida, Decortinone, beta-Sitosterol, ursolic acid derivative, Apigenin 7-glucoside. Hasil ini menyatakan bahwa senyawa-senyawa tersebut berpotensi dikembangkan sebagai kandidat anti-diabetes secara *in silico*, serta mendukung pemanfaatan bahan alam sebagai sumber kandidat obat alternatif untuk mengatasi diabetes mellitus tipe 1.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil dan keterbatasan penelitian ini, beberapa saran yang dapat diberikan untuk penelitian selanjutnya adalah sebagai berikut:

- Perlu dilakukan validasi lanjutan menggunakan metode *molecular dynamics simulation* untuk mengevaluasi stabilitas kompleks ligan-protein secara dinamis.
- Peneliti selanjutnya disarankan berkolaborasi dengan ahli farmakologi untuk menambahkan uji *in vitro* dan *in vivo* untuk memverifikasi aktivitas biologis senyawa bioaktif yang telah diidentifikasi sebelumnya secara *in silico*.

- Penggunaan database senyawa dan protein yang lebih banyak serta integrasi dengan analisis ekspresi gen dapat meningkatkan akurasi pemilihan target dan senyawa potensial.
- Pengembangan metode analisis jaringan yang lebih kompleks, seperti *community detection* atau *multi-layer network analysis*, dapat memberikan pemahaman yang lebih luas terhadap mekanisme molekuler diabetes mellitus.

