



INTISARI

Virtual Screening (VS) konvensional menghadapi tantangan skalabilitas yang signifikan untuk aplikasi genomik karena memerlukan persiapan data dan interaksi pengguna yang intensif. Penelitian ini bertujuan mengatasi kendala tersebut dengan membangun *pipeline* komputasi terotomatisasi, yang mengubah data urutan asam amino protein (FAA) menjadi representasi struktural tiga dimensi siap-tambat (PDBQT), dan mengimplementasikan sistem *Whole Genome Virtual Screening* (WGVS) *All-in-All* protein-ligan berskala genom secara paralel. Tujuan akhirnya adalah memvalidasi korelasi antara skor prediksi afinitas *in silico* dari sistem otomatis dengan parameter aktivitas biologis *in vitro*. *Pipeline* yang dikembangkan dalam bahasa pemrograman Python ini mencakup modul konversi FAA ke PDBQT dan sistem penambatan buta (*blind docking*) berskala genom. Hasil validasi eksperimental, melalui uji inhibisi qPCR terhadap enzim Polimerase, menunjukkan korelasi yang signifikan antara skor penambatan dengan pola penghambatan. Senyawa dengan skor terkuat (*Salicylic Acid*: -11,8) menunjukkan penghambatan total, skor sedang (*Tannic Acid*: -6,8) menunjukkan inhibisi moderat (Ct 18), dan skor terlemah (*Phenol*: -5,5) menunjukkan inhibisi sangat lemah. Analisis visual pose penambatan memperkuat temuan ini: inhibitor yang fungsional mengikat pada *active site*, sementara senyawa non-inhibitor mengikat pada *allosteric site*. Kesimpulan menunjukkan bahwa *pipeline* DSDP berhasil memberikan akurasi prediksi yang tinggi dan mampu membedakan jenis pengikatan, menjadikannya alat yang efisien untuk penemuan senyawa kandidat obat dari data genomik.

Kata Kunci: *Virtual Screening*, Genom, Pemodelan Protein, Penambatan Buta.



ABSTRACT

Traditional Virtual Screening (VS) approaches lack the scalability required for genomic applications due to the extensive manual creation of protein structures and ligands. This study addresses this limitation by creating an automated computational pipeline for converting protein amino acid sequence data (FAA) into docking-ready three-dimensional structural representations (PDBQT) and deploying an All-in-All protein-ligand Whole Genome Virtual Screening (WGVS) system. The major objective is to validate the relationship between the system's in silico affinity prediction scores and quantifiable in vitro biological activity metrics. The pipeline, written in Python, includes a module for FAA-to-PDBQT conversion and a genome-scale blind docking mechanism for parallel processing. A qPCR inhibition experiment on the Polymerase enzyme revealed a substantial association between docking scores and inhibition patterns. The molecule with the highest score (Salicylic Acid: -11.8) exhibited entire inhibition, the medium scorer (Tannic Acid: -6.8) showed moderate inhibition (Ct 18), and the lowest scorer (Phenol: -5.5) showed very weak inhibition. Visual inspection of the docking poses supported these findings: functioning inhibitors bound to the active site, while the non-inhibitor bound to an allosteric site. The results show that the DSDP pipeline achieved high prediction accuracy and the ability to discriminate binding modes, making it an effective tool for identifying therapeutic candidates from genomic data.

Keywords: Virtual Screening, Genome-Scale, Protein Modeling, Blind Docking