UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**Pemanfaatan KNIME TeachOpenCADD dengan Integrasi Machine Learning dan Virtual Screening serta
Molecular Docking untuk Identifikasi Kandidat Inhibitor mTOR**
Akhmad Fauzan, apt. Navista Sri Octa Ujiantari, M.Sc., Ph.D.; Prof.Dr.rer.nat.apt. Adam Hermawan,M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

PENGESAHAN SKRIPSI ii
HALAMAN PERNYATAAN iii
HALAMAN PERSEMBAHAN iv
KATA PENGANTAR v
DAFTAR ISI vii
DAFTAR GAMBAR ix
DAFTAR TABEL xi
DAFTAR SINGKATAN xii
INTISARI xv
ABSTRACT xvi
BAB I 1
A. Latar Belakang 1
B. Rumusan Masalah 7
C. Tujuan Penelitian 7
D. Urgensi Penelitian 7
E. Manfaat Penelitian 8
BAB II 10
A. Telaah Pustaka 10
1. Epidemiologi, Manifestasi Klinik, Patologi, dan Tatalaksana Kanker Renal 10
2. Target Kanker mTOR dan Resistensi 15
3. Temsirolimus sebagai Kueri *Fingerprint* 20
4. *Machine Learning* dan *Ligand-based Virtual Screening* 22
1. *Supervised Machine Learning* 25
A. Classification 27
B. Regression 33
2. *Unsupervised Machine Learning* 35
1. Partitioning Clustering 39
2. Hierarchical Clustering 40
a. *Data Mining* dan Filtrasi 45

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**Pemanfaatan KNIME TeachOpenCADD dengan Integrasi Machine Learning dan Virtual Screening serta
Molecular Docking untuk Identifikasi Kandidat Inhibitor mTOR**
Akhmad Fauzan, apt. Navista Sri Octa Ujiantari, M.Sc., Ph.D.; Prof.Dr.rer.nat.apt. Adam Hermawan,M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

b. Virtual Screening 46
5. Molecular Docking 49
6. Analisis ADMET 54
B. Kerangka Konsep & Penelitian 56
C. Landasan Teori 56
D. Hipotesis 58
BAB III 59
A. Definisi Operasional Variabel Penelitian 59
B. Bahan Penelitian 59
C. Alat Penelitian 60
D. Waktu dan Tempat Penelitian 61
E. Jalannya Penelitian 62
D. Analisis *Molecular Docking* 75
E. Analisis ADMET 77
F. Analisis Data 78
G. Alur Penelitian 80
BAB IV 81
A. MLVS (*Machine Learning Virtual Screening*) 82
B. Molecular Docking 116
BAB V 135
DAFTAR PUSTAKA 137