

Abstrak

Pemilihan molekul dalam *drug discovery* memiliki kemiripan dengan masalah dalam portofolio saham. Oleh karena itu, metode portofolio saham dapat diterapkan dalam masalah pemilihan molekul ini. Penelitian ini menggunakan nilai *bio-activity* IC50 untuk menghambat pertumbuhan protein PTP1B pada penyakit diabetes mellitus dengan metode optimasi portofolio. Algoritma SPEA2 digunakan untuk menentukan himpunan pareto-optimal untuk permasalahan optimasi *multi-objective*. Terdapat beberapa parameter yang digunakan seperti ukuran populasi, ukuran arsip, maksimum generasi, probabilitas *crossover* dan probabilitas mutasi. Solusi yang didapat dari algoritma SPEA2 selanjutnya akan dibentuk *Efficient Frontier* yang berbentuk sebuah grafik dua dimensi dimana tiap sumbunya menggambarkan nilai *diversity* dan nilai probabilitas keberhasilan dari portofolio. Data yang digunakan dalam penelitian ini diperoleh dari www.ebi.ac.uk/chembl sebanyak 1452 buah data. Pengujian dilakukan sebanyak 3 kali dengan masing – masing pengujian digunakan jumlah molekul yang berbeda, yaitu 5 molekul, 10 molekul dan 20 molekul. Dalam setiap pengujian juga menggunakan jumlah generasi yang berbeda yaitu sebanyak 100, 200 dan 300. Hasil yang didapatkan menunjukkan bahwa semakin besar jumlah generasi tidak mempengaruhi hasil grafik. Karena pada beberapa pengujian, pada jumlah generasi tertentu sudah didapatkan hasil yang cukup optimal karena tidak terjadi perubahan yang signifikan. Jumlah molekul juga mempengaruhi nilai *diversity* dan nilai *expected return*, dimana semakin besar jumlah molekul yang digunakan, nilai *expected return* dan *diversity* yang dihasilkan juga semakin besar. Rentang nilai *diversity* dan nilai *expected return* juga dipengaruhi oleh jumlah molekul.

Kata kunci : portofolio, *drug discovery*, SPEA2, *efficient frontier*