

1. Pendahuluan

Latar Belakang

Dalam pembuatan obat, awalnya para kimiawan memilih molekul hanya berdasarkan kinerja dari masing – masing molekul. Namun, pemilihan molekul yang hanya berdasarkan dari kinerjanya memiliki risiko tersendiri. Solusinya adalah dengan memilih molekul yang berbeda. Namun, pemilihan molekul yang berbeda juga memiliki risiko yaitu *budget* yang dikeluarkan akan lebih besar karena setiap molekul memiliki harga yang berbeda – beda [1].

Masalah pemilihan molekul ini mirip dengan masalah portofolio keuangan sehingga metode optimasi portofolio dapat diterapkan untuk menangani masalah ini. Agar portofolio yang dihasilkan optimal, maka nilai *expected return* harus dimaksimalkan untuk suatu tingkat risiko tertentu ataupun dengan meminimalkan risiko untuk suatu tingkat *expected return* tertentu.

Dalam tugas akhir ini, masalah pemilihan molekul yang menghambat pertumbuhan protein PTP1B pada penyakit diabetes mellitus diselesaikan menggunakan optimasi portofolio dengan algoritma Strength Pareto Evolutionary Algorithm 2 (SPEA2). Dalam menyelesaikan masalah ini, nilai *diversity* atau keberagaman molekul dan *expected return* yang direpresentasikan dengan probabilitas kesuksesan suatu molekul akan dimaksimalkan. Jumlah molekul dalam portofolio menjadi *constraint* dalam tugas akhir ini.

Perumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas, permasalahan dalam penelitian ini adalah :

- 1) Bagaimana memilih molekul – molekul yang tepat untuk menghambat molekul PTP1B dengan menerapkan metode optimasi portofolio dengan mempertimbangkan *diversity* dan nilai aktivitas molekul dari gabungan molekul tersebut?
- 2) Bagaimana mengimplementasikan algoritma SPEA2 untuk masalah optimasi portofolio pada *drug discovery*?

Tujuan

Berdasarkan perumusan masalah diatas, tujuan dari penelitian ini adalah :

- 1) Menemukan kumpulan molekul yang tepat untuk menghambat molekul PTP1B penyebab penyakit diabetes mellitus dengan menerapkan metode optimasi portofolio dimana nilai *diversity* dan nilai aktivitas molekul dari gabungan molekul dipertimbangkan.
- 2) Mampu mengimplementasikan algoritma SPEA2 untuk masalah optimasi portofolio pada *drug discovery*.

Batasan Masalah

Batasan masalah dalam tugas akhir ini adalah :

- 1) Jumlah molekul dalam satu portofolio
- 2) Data yang digunakan berasal dari www.ebi.ac.uk/chembl
- 3) Data yang dipilih adalah data dengan nilai molekul activity lebih dari 10000 nM