

1. Pendahuluan

1.1 Latar Belakang

Setiap organisme mempunyai peranannya sendiri dalam menyerang sistem tubuh manusia. Salah satu contohnya adalah PTP1B. PTP1B atau *Protein tyrosine phosphatase 1B* merupakan sebuah jenis protein yang menjadi salah satu penyebab dari penyakit Diabetes Melitus. Langkah yang dapat diambil untuk mengobati penyakit Diabetes Melitus adalah dengan membuat obat yang di dalamnya terkandung molekul yang bisa menghambat pertumbuhan PTP1B [1].

Pada awalnya pemilihan molekul penghambat ini hanya didasari oleh probabilitas kesuksesan dari masing-masing molekul tersebut. Namun, hal ini dinilai tidak cukup, bahkan berisiko. Untuk mengatasi permasalahan tersebut pendekatan alternatif yang dilakukan adalah dengan melihat nilai *diversity* dari masing – masing molekul. Hal ini dimaksudkan agar untuk setiap kandidat molekul terpilih mengalami kegagalan, molekul lain yang memiliki keberagaman akan memberi peluang lain [2].

Masalah pemilihan molekul tersebut mirip dengan masalah pemilihan saham pada portfolio keuangan. Pada portfolio keuangan, komposisi saham ditentukan berdasarkan nilai *expected return* tertinggi untuk suatu tingkat risiko tertentu pada suatu portfolio. Pemilihan portfolio dengan mempertimbangkan 2 fungsi objektif ini dapat diselesaikan dengan metode *multi-objective optimization* [2].

Pada tugas akhir ini akan diimplementasikan portfolio pada keuangan untuk menyelesaikan masalah pemilihan kandidat molekul yang menghambat pertumbuhan PTP1B. Dalam menyelesaikan masalah ini ada dua fungsi objektif yang harus dimaksimalkan yaitu, *expected return* yang direpresentasikan sebagai probabilitas kesuksesan molekul dan *diversity* atau keberagaman molekul. Dengan menggunakan konsep *multi-objective* akan dihasilkan kemungkinan solusi yang dapat dipilih dengan mempertimbangkan kedua fungsi tersebut. salah satu algoritma untuk yang dapat menyelesaikan permasalahan *multi-objective optimization* adalah NSGA-II. Algoritma ini akan membentuk kumpulan solusi dengan melihat tingkat dominansi antar solusi. Sehingga tidak ada solusi yang saling mendominasi satu dengan yang lainnya.

1.2 Topik dan Batasannya

Berdasarkan latar belakang yang telah dijelaskan sebelumnya, pada Tugas Akhir ini akan dibahas tentang bagaimana cara menentukan komposisi kandidat molekul penghambat PTP1B dengan menggunakan metode optimasi portfolio pada keuangan dengan menerapkan algoritma NSGA-II dalam menyelesaikan permasalahan *multi-objective optimization*. Kemudian Bagaimana pengaruh jumlah molekul dalam satu portfolio terhadap probabilitas kesuksesan dan diversity dari portfolio tersebut. Adapun batasan masalah yang digunakan pada tugas akhir ini adalah:

1. Dataset yang digunakan diambil dari www.ebi.ac.uk
2. Jumlah molekul dalam satu portofolio telah ditentukan.
3. Hanya data molekul dengan nilai *activity* lebih dari 10000 nM yang dapat digunakan.
4. Penggunaan *Molecular Fingerprint* berdasarkan *library rdkit* pada *python* yang merupakan hasil transformasi dari SMILES yang disediakan pada dataset.
5. Harga untuk setiap molekul diasumsikan sama

1.3 Tujuan

Penelitian ini bertujuan untuk menghasilkan komposisi kandidat molekul penghambat pertumbuhan PTP1B dengan nilai *expected return* tertinggi untuk suatu tingkat *diversity* tertentu dengan menerapkan metode *Multi-Objective Optimization* pada portfolio keuangan menggunakan algoritma NSGA-II. Selanjutnya dilakukan analisis untuk membuktikan pengaruh jumlah molekul dalam satu portfolio terhadap probabilitas kesuksesan dan *diversity* dari portfolio tersebut.

1.4 Organisasi Tulisan

Urutan penulisan dalam tugas akhir ini adalah sebagai berikut : bagian 2 menunjukkan studi literatur yang terkait dengan penelitian ini. Bagian 3 menjelaskan sistem yang akan dibangun mulai dari *preprocessing* data sampai dengan mengolah data menggunakan NSGA-II. Bagian 4 menjelaskan Analisa mengenai penelitian yang dilakukan. Bagian 5 menjelaskan kesimpulan yang didapat dan penelitian yang mungkin bisa dikerjakan untuk selanjutnya.