

Klasifikasi Tiga Varietas Daun Gambir (*Uncaria Gambir* Roxb.) Menggunakan Spektroskopi Inframerah dan Analisis Kemometrik

Elga Zulfani^{1)*}, Dedi Satria²⁾, Nurul Widya³⁾, Ifan Rivaldo⁴⁾
^{1,2)*} Fakultas Farmasi, Universitas Muhammadiyah Sumatera Barat, Padang
^{3,4)*} Departemen Kimia, Universitas Negeri Padang, Padang

email: elgazulfani59@gmail.com¹; dedisatria.umsb@gmail.com²

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk mengklasifikasikan tiga varietas daun gambir (*Uncaria gambir* Roxb.), yaitu varietas Udang, Riau, dan Cubadak, yang tumbuh di Sumatera Barat, menggunakan metode spektroskopi Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) dan analisis kemometrik. Spektrum inframerah diperoleh dalam rentang panjang gelombang 4000–500 cm^{-1} . Analisis kemometrik yang digunakan meliputi *Principal Component Analysis* (PCA), *Partial Least Squares Discriminant Analysis* (PLS-DA), dan *Orthogonal Partial Least Squares Discriminant Analysis* (OPLS-DA). Sebelum analisis kemometrik dilakukan, data diproses terlebih dahulu menggunakan metode *preprocessing* seperti SNV dan MSC untuk meningkatkan akurasi. Hasilnya, PCA mengidentifikasi variabel dominan berdasarkan bilangan gelombang tertentu dengan Q^2 sebesar 0,91. PLS-DA menunjukkan pemisahan antar varietas dengan Q^2 sebesar 0,79 setelah *preprocessing* SNV. Sementara itu, OPLS-DA menghasilkan pemisahan paling jelas di antara tiga varietas dengan Q^2 sebesar 0,748 setelah *preprocessing* SNV. Hasil penelitian menunjukkan bahwa *preprocessing* seperti SNV dan *Multiplicative Scatter Correction* (MSC) meningkatkan akurasi model klasifikasi. Analisis Variabel *Importance for Projection* (VIP) mengidentifikasi bilangan gelombang $<1000 \text{ cm}^{-1}$ sebagai area yang paling signifikan dalam pemisahan varietas. Kombinasi FTIR dan analisis kemometrik terbukti sebagai metode yang cepat, akurat, dan efisien untuk klasifikasi varietas daun gambir. Hasil ini memberikan kontribusi dalam pengembangan metode kontrol kualitas untuk industri gambir.

Kata Kunci: Daun Gambir, Spektroskopi Inframerah, Analisis Kemometrik, PCA, PLS-DA, OPLS-DA

Abstract

This study aims to classify three varieties of gambier leaves (Uncaria gambir Roxb.), namely Udang, Riau, and Cubadak varieties, grown in West Sumatra using Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) and chemometric analysis. Infrared spectra were obtained in the wavelength range of 4000–500 cm^{-1} . The chemometric analyses used include Principal Component Analysis (PCA), Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA), and Orthogonal Partial Least Squares Discriminant Analysis (OPLS-DA). Before chemometric analysis was conducted, the data was first processed using preprocessing methods such as SNV and MSC to improve accuracy. As a result, PCA identified dominant variables based on specific wavelengths with a Q^2 value of 0.91. PLS-DA showed separation between varieties with a Q^2 value of 0.79 after SNV preprocessing. Meanwhile, OPLS-DA achieved the clearest separation among the three varieties with a Q^2 value of 0.748 after SNV preprocessing. The results indicate that preprocessing methods such as SNV and Multiplicative Scatter Correction (MSC) significantly improved the accuracy of the classification models. The Variable Importance for Projection (VIP) analysis identified wavenumbers below 1000 cm^{-1} as the most significant region for variety separation. The combination of FTIR and chemometric analysis proved to be a rapid, accurate, and efficient method for classifying gambier leaf varieties. These findings contribute to the development of quality control methods for the gambier industry.

Keywords: Gambier Leaf, Infrared Spectroscopy, Chemometric Analysis, PCA, PLS-DA, OPLS-DA

PENDAHULUAN

Gambir (*Uncaria gambir* Roxb.) merupakan salah satu komoditas unggulan Indonesia, khususnya dari wilayah Sumatera Barat. Produk ini banyak dimanfaatkan dalam berbagai bidang, termasuk industri makanan, farmasi, kosmetik, dan tekstil, karena kandungan senyawa aktifnya seperti katekin dan tanin yang memiliki aktivitas antioksidan, antimikroba, dan antiinflamasi. Terdapat tiga varietas utama daun gambir yang dikenal di Sumatera Barat, yaitu varietas Udang, Riau, dan Cubadak. Perbedaan karakteristik fisik dan kimia antar varietas ini menjadi sangat penting dalam menentukan kualitas dan harga jual gambir di pasaran.

Namun, dalam praktiknya, klasifikasi varietas daun gambir masih dilakukan secara konvensional dan bersifat subjektif, bergantung pada pengalaman dan pengamatan visual. Metode ini memiliki banyak keterbatasan, seperti ketidakkonsistenan dalam hasil klasifikasi serta kurangnya efisiensi dari sisi waktu dan biaya. Oleh karena itu, dibutuhkan pendekatan ilmiah berbasis teknologi yang dapat membantu proses identifikasi varietas dengan akurasi dan objektivitas yang tinggi.

Penelitian ini menjadi penting karena menawarkan solusi alternatif berbasis Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) dan analisis statistik multivariat (kemometrik) seperti Principal Component Analysis (PCA), Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA), dan Orthogonal PLS-DA (OPLS-DA) untuk mengklasifikasikan ketiga varietas daun gambir. FTIR merupakan teknik non-destruktif dan cepat yang mampu merekam profil kimia dari suatu sampel berdasarkan panjang gelombang tertentu. Sementara itu, kemometrik memberikan kekuatan analisis statistik untuk mengekstraksi pola dan membedakan kelas sampel berdasarkan data spektrum.

Tujuan utama dari penelitian ini adalah untuk mengembangkan metode klasifikasi tiga varietas daun gambir menggunakan kombinasi FTIR dan analisis kemometrik dengan pendekatan preprocessing data SNV (Standard Normal Variate) dan MSC (Multiplicative Scatter Correction). Dengan demikian, penelitian ini bertujuan menyediakan metode klasifikasi yang lebih objektif, akurat, dan efisien.

Penelitian ini tidak hanya menekankan akurasi klasifikasi, tetapi juga menunjukkan efektivitas preprocessing spektrum dalam meningkatkan ketajaman model prediksi. Kebaruan penelitian terletak pada penggabungan strategi preprocessing SNV dan MSC yang mampu mengoreksi variasi non-kimiawi dalam data FTIR, serta perbandingan kinerja tiga metode kemometrik dalam konteks klasifikasi varietas tanaman lokal.

METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan pendekatan kuantitatif eksperimental dengan tujuan untuk mengembangkan model klasifikasi tiga varietas daun gambir berdasarkan data spektrum FTIR. Jenis penelitian yang dilakukan adalah penelitian laboratorium dengan pendekatan analisis kemometrik.

Penelitian dilakukan dari bulan November 2023 hingga Februari 2024 di Laboratorium Penelitian Universitas Muhammadiyah Sumatera Barat dan Fakultas Farmasi Universitas Andalas.

Sampel yang digunakan adalah daun gambir dari tiga varietas yaitu Udang, Riau, dan Cubadak. Masing-masing varietas diambil dari Kenagarian Pangkalan, Kabupaten Lima Puluh Kota, Sumatera Barat sebanyak ± 3 kg. Sampel dikeringkan, diekstrak menggunakan etanol 96%, dan dikeringkan kembali untuk dianalisis menggunakan FTIR.

Spektrum FTIR diukur dalam rentang panjang gelombang 4000–500 cm^{-1} . Data kemudian dianalisis menggunakan perangkat lunak SIMCA 14.1, dengan preprocessing SNV dan MSC untuk meningkatkan akurasi klasifikasi. Metode analisis yang digunakan adalah PCA, PLS-DA, dan OPLS-DA untuk membedakan varietas berdasarkan data spektrum.

HASIL DAN PEMBAHASAN

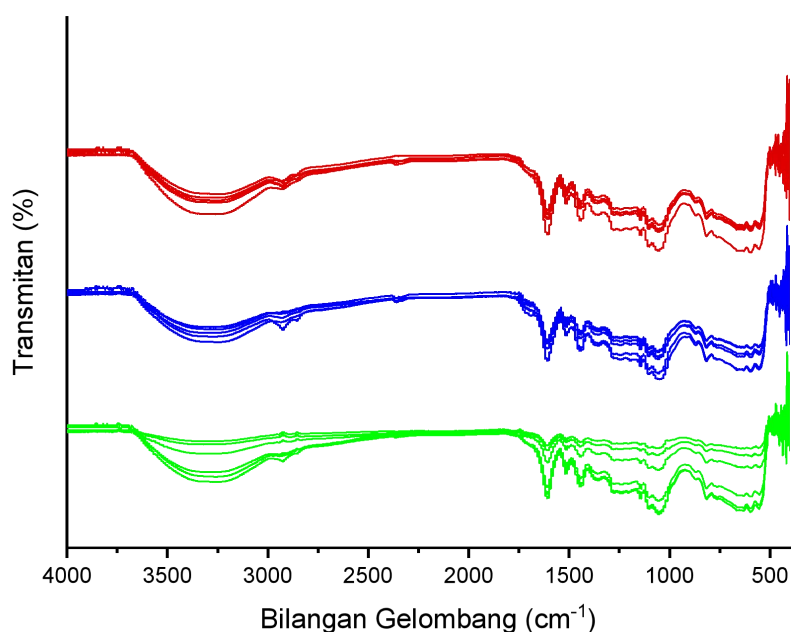
Hasil spektrum inframerah dari tiga varietas daun gambir menunjukkan karakteristik spektral yang unik. Data spektrum inframerah (IR) menunjukkan puncak serapan pada bilangan gelombang tertentu yang menunjukkan adanya regangan (stretching) dari berbagai ikatan kimia. (Puspitasari dkk., t.t.)

Puncak serapan utama ditemukan pada rentang bilangan gelombang sebagai berikut:

Tabel 1. Puncak Serapan Spektrum FTIR

Bilangan Gelombang (cm^{-1})	Jenis Ikatan
3236 - 3205	Regang O-H
1653 - 1611	Regang C=O
1475 - 1459	C-H bending
1292 - 1278	C-O
1035 - 1025	C-O

Pada penelitian ini, spektrum inframerah diukur dalam rentang panjang gelombang 4000-500 cm^{-1} . Setiap spektrum inframerah yang dihasilkan dari pengukuran FTIR menunjukkan puncak-puncak pada bilangan gelombang tertentu yang sesuai dengan vibrasi molekul-molekul kimia tertentu dalam daun gambir. Dari hasil analisis FTIR, pola spektrum tiga varietas daun gambir ditunjukkan pada **Gambar 1**

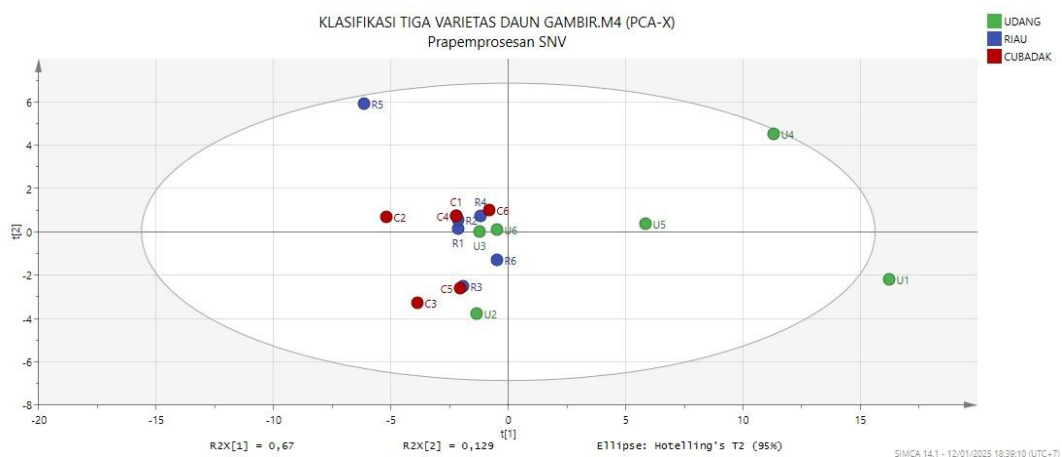


Gambar 1. Tumpang Tindih Spektrum FTIR Tiga Varietas Daun Gambir 6 kali Pengulangan dengan Sampel yang Berbeda

Keterangan :

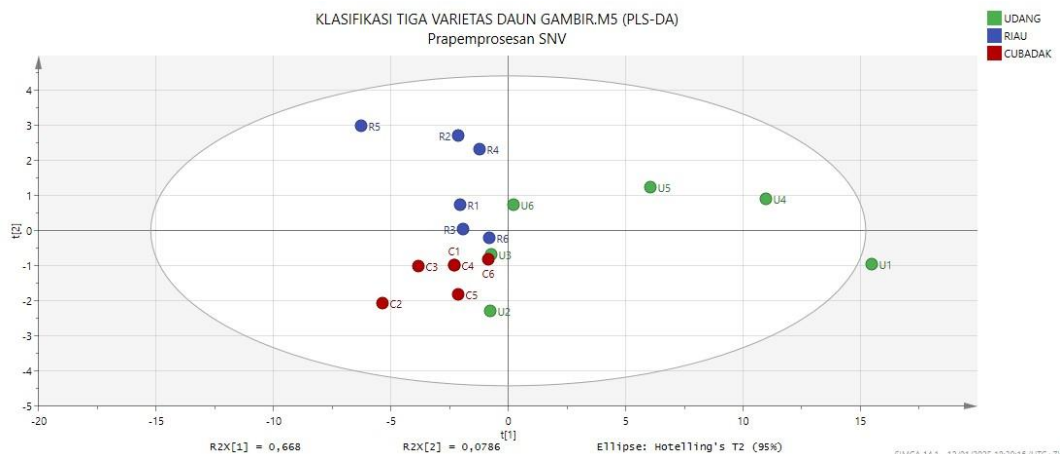
- : Varietas Udang Daun Gambir
- : Varietas Riau Daun Gambir
- : Varietas Cubadak Daun Gambir

Analisis kemometrik digunakan untuk memaksimalkan kemampuan diskriminatif data spektrum FTIR yang kompleks. Metode Principal Component Analysis (PCA) digunakan untuk mengeksplorasi struktur data secara unsupervised. Dalam penelitian ini, PCA mampu memisahkan kelompok varietas daun gambir secara signifikan, menunjukkan bahwa karakteristik kimia antar varietas cukup berbeda. Nilai Q^2 sebesar 0,91 menunjukkan model PCA memiliki prediktivitas yang baik, meskipun belum optimal untuk klasifikasi akhir.



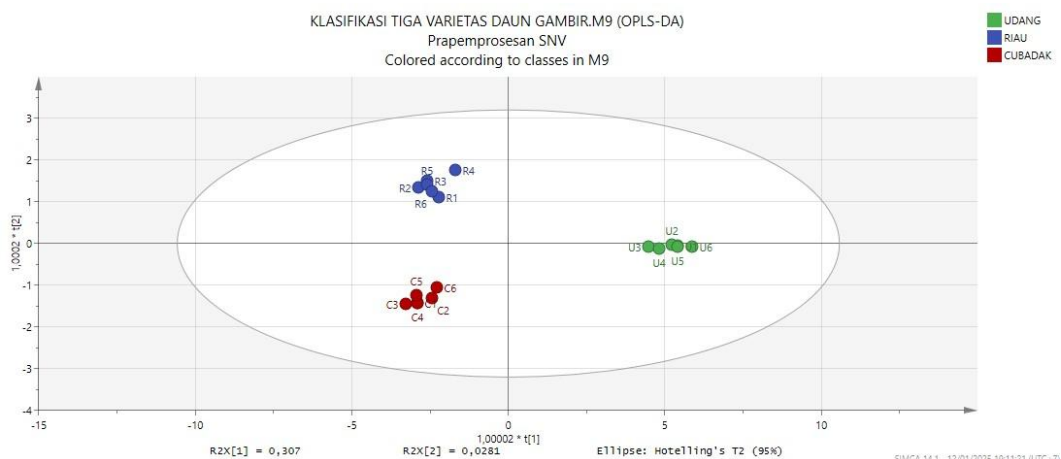
Gambar 2. Score Plot PCA dengan Prapemrosesan SNV

Selanjutnya, Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA) digunakan sebagai metode pengelompokan untuk mengklasifikasikan sampel berdasarkan label varietas. Model PLS-DA yang dibangun menggunakan preprocessing SNV menghasilkan pemisahan kelas yang lebih jelas dibandingkan PCA, dengan nilai Q^2 sebesar 0,79. Nilai ini menunjukkan bahwa model cukup mampu menjelaskan dan memprediksi variansi yang berkaitan dengan klasifikasi varietas.



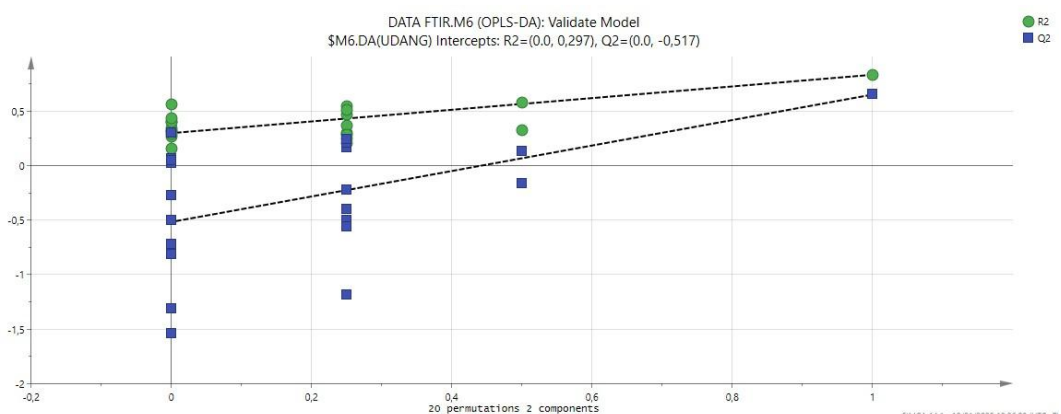
Gambar 3. Score Plot PLS-DA dengan Prapemrosesan SNV

Untuk meningkatkan performa klasifikasi, dilakukan analisis Orthogonal PLS-DA (OPLS-DA), yang memisahkan variasi yang berkaitan dan tidak berkaitan dengan kelas target. Model OPLS-DA memberikan hasil paling optimal dengan Q^2 sebesar 0,748, dengan visualisasi score plot yang menunjukkan pemisahan kelompok varietas secara tegas dan konsisten. Hal ini menunjukkan bahwa OPLS-DA lebih efektif dalam mengisolasi informasi yang relevan untuk klasifikasi.



Gambar 4. Score Plot OPLS-DA dengan Prapemrosesan SNV

Analisis Variable Importance for Projection (VIP) juga dilakukan untuk mengetahui bilangan gelombang mana yang paling berkontribusi dalam klasifikasi. Hasil VIP menunjukkan bahwa bilangan gelombang di bawah 1000 cm^{-1} memiliki kontribusi terbesar dalam membedakan ketiga varietas. Wilayah ini diasosiasikan dengan gugus fungsi fenolik dan alkohol yang diduga menjadi marker utama diferensiasi kimia antar varietas gambir.



Gambar 5. Evaluasi pemodelan OPLS - DA menggunakan Plot Permutasi

Secara keseluruhan, kombinasi preprocessing SNV dengan metode OPLS-DA terbukti memberikan akurasi klasifikasi terbaik dalam penelitian ini. Hasil ini menegaskan pentingnya pemilihan strategi preprocessing dan metode statistik multivariat dalam analisis bahan alam berbasis data spektral.

PENUTUP

Penelitian ini menunjukkan bahwa kombinasi teknik FTIR dan analisis kemometrik efektif dalam mengklasifikasikan tiga varietas daun gambir secara akurat dan efisien. Metode OPLS-DA dengan preprocessing SNV terbukti memberikan pemisahan varietas yang paling jelas dan signifikan.

Hasil penelitian ini dapat dijadikan referensi untuk pengembangan sistem kontrol kualitas dalam industri gambir dan menunjukkan bahwa pendekatan multivariat sangat bermanfaat dalam pengolahan data spektral bahan alam.

Disarankan agar penelitian selanjutnya mengembangkan klasifikasi lebih lanjut pada produk turunan gambir dan memperluas jumlah sampel untuk validasi model.

DAFTAR KEPUSTAKAAN

- Aisyah, L. S., Jasmansyah, J., Purbaya, S., & Resnawati, T. (2019). Isolasi dan Uji Aktivitas Antibakteri Senyawa Fenol Ekstrak Etil Asetat Rimpang Jahe Merah (*Zingiber officinale* Roscoe var. *sunti*). *Jurnal Kartika Kimia*, *2*(1), 44–50. <https://doi.org/10.26874/jkk.v2i1.23>
- Amset, P. :, Batusangkar, I., Press, I. B., Pitria, N., & Kurnia, L. (2022). *Edusainstika : Jurnal Pembelajaran MIPA 6 Edusainstika : Jurnal Pembelajaran MIPA Pengaruh Self-Concept dan Self-Confidence Terhadap Kemampuan Berfikir Kreatif Matematis Siswa* (Vol. 2, Nomor 1).
- Arel, A. (2016). Pembuatan Gambir Galamai (Black Cube) Menggunakan Oven Microwave. *Scientia : Jurnal Farmasi dan Kesehatan*, *5*(1), 1. <https://doi.org/10.36434/scientia.v5i1.60>
- Bernal, F. A., Orduz-Díaz, L. L., & Coy-Barrera, E. (2016). Application of parafac and OPLS-DA analyses on HPLC fingerprints for the characterization of *Hibiscus sabdariffa* calyxes. *Química Nova*, *39*(2), 160–166. <https://doi.org/10.5935/0100-4042.20160007>
- Blessing, E., & Hubert, A. K. (2023). *Normalization and Standardization: Methods to preprocess data to have consistent scales and distributions*. <https://www.researchgate.net/publication/377123133>
- Departemen Kesehatan Republik Indonesia. (2017). *Parmameter Standar Umum Ekstrak Tumbuhan Obat . Farmakope Herbal Indonesia Edisi II*. 527–528.
- Deswati, T. A. N. P. S. (2022). *Manfaat Antioksidan dari Tanaman Gambir (Uncaria gambir Roxb) untuk Kesehatan, Kosmetik, dan Pangan (Literature Review)*.
- Dewadi, F., Buana, U., & Karawang, P. (2023). *Konsep dasar kimia analitik* (Nomor May).
- Dirjen, S. K., Riset, P., Pengembangan, D., Dikti, R., Ambarwari, A., Adrian, Q. J., & Herdiyeni, Y. (2017). Terakreditasi SINTA Peringkat 2 Analisis Pengaruh Data Scaling Terhadap Performa Algoritme Machine Learning untuk Identifikasi Tanaman. *masa berlaku mulai*, *1*(3), 117–122.
- Elfiky, A. M. , S. E. , K. A. R. , & I. R. S. (2022). Integration of NIR spectroscopy and chemometrics for authentication and quantitation of adulteration in sweet marjoram (*Origanum majorana* L.). *Microchemical Journal*, *183*.
- Elva Amurita Zebua, Tety Desrita Handayani, & Nathasa Wiesdania Sihite. (2023). *Potensi Pengolahan Tanaman Gambir (Uncaria Gambir Roxb.) Dan Evaluasi Mutu Gambir Yang Dihilangkan Di Desa Mado Laoli, Kota Gunungsitoli*. *8*(3).
- Hemmateenejad, B., Mobaraki, N., & Baumann, K. (2024). Robust Multiplicative Scatter Correction Using Quantile Regression. *Journal of Chemometrics*. <https://doi.org/10.1002/cem.3589>
- Hernani, Tatang, H., & Sari, I. (2020). *Teknologi Pengolahan Dan Pengembangan Produk Olahan Daun Gambir* (Vol. 4, Nomor 1).

- Isromarina, R., Rosa, E., & Rusli, D. (2019). Aktivitas Antibakteri Ekstrak Daun Gambir (*Uncaria Gambir* (Hunter) Roxb) Terhadap Bakteri *Vibrio cholerae* ATCC 14033. *Jurnal Ilmiah Bakti Farmasi*, 2019, 4(1), 21–26.
- Kusumawati., Putri, E., Agus, D., & Munawar, A. (2021). *Model Prediksi Kadar Air Buah Cabai Rawit Domba (Capsicum frutescens L.) Menggunakan Spektroskopi Ultraviolet Visible Near Infrared Prediction Model of Water Content of Domba Cayenne Pepper Fruit (Capsicum frutescens L.) Using Ultraviolet Visible Near Infrared Spectroscopy*. 4(1), 15–22.
<https://doi.org/10.37637/ab.v4i1.615>
- Kristina, N. (2016). *Keragaman morfologi dan kadar katekin tanaman gambir berdaun merah yang tersebar pada berbagai ketinggian tempat di Sumatera Barat*. 2(Fauza 2005), 43–48. <https://doi.org/10.13057/psnmbi/m020109>
- M. Ade I, N. Afina, N. Ainun, A. Ha. A. (2019). Isolasi dan Identifikasi Kafein dari Kopi dengan Instrumen Spektrofotometer UV-Vis dan FTIR. *Review Jurnal*.
- Movasaghi, Z., Rehman, S., & Rehman, I. U. (2008). Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy of biological tissues. Dalam *Applied Spectroscopy Reviews* (Vol. 43, Nomor 2, hlm. 134–179).
<https://doi.org/10.1080/05704920701829043>
- Murdika, U., Alif, M., Mulyani, Y., Elektro, J. T., Lampung, U., Lampung, B., Sumantri, J., & No, B. (t.t.). *Identifikasi Kualitas Buah Tomat dengan Metode PCA (Principal Component Analysis) dan Backpropagation*.
- Nainggolan, P. (2013). *Teknologi Perbenihan Tanaman Gambir (Uncaria gambir RoxB.) Balai Pengkaj. Teknol. Pertan. Sumatera Utara*. <https://doi.org/pp.1-26,2013>
- Ningsih, E., & Rahayuningsih, S. (2019). Extraction, Isolation, Characterisation and Antioxidant Activity Assay of Catechin Gambir (*Uncaria gambir* (Hunter). Roxb. *Al-Kimia*, 7(2). <https://doi.org/10.24252/al-kimia.v7i2.7800>
- Nugroho, I., Putri, N., Evelyn, J., Adji, P., Nur, S. R., Sekarningrum, N. A., Negeri, U., & Abstract, S. (t.t.). Tinjauan Kritis Kemampuan Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) dalam Analisis dan Karakterisasi Senyawa Obat. *Jurnal Ilmiah Wahana Pendidikan*, 2024(15), 332–344.
<https://doi.org/10.5281/zenodo.13777154>
- Puspitasari, L., Mareta, S., & Thalib, A. (t.t.). Karakterisasi Senyawa Kimia Daun Mint (*Mentha sp.*) dengan Metode FTIR dan Kemometrik. Dalam *Jl. Moh Kahfi II* (Vol. 14, Nomor 1).
- Puspitasari, L., Mareta, S., & Thalib, A. (2021). Karakterisasi Senyawa Kimia Daun Mint (*Mentha sp.*) dengan Metode FTIR dan Kemometrik. *Sainstech Farma*, 14(1), 5–11.
- Rachman, I. B., Rusdi, H. O., Ciptawati, E., Eviana, D., & Puteri, K. (2020). *Analisis Termodinamika dan Spektroskopi Inframerah Reaksi Substitusi Nukleofilik Tersier Butil Klorida dan Hidroksida Secara Komputasi Thermodynamic and Infrared Spectroscopy Analysis of Tert-butyl Chloride and Hydroxide Nucleophilic Substitution Reaction*. November, 81–88.
- Rauf, A., Rahmawaty, & Siregar, A. Z. (2015). The Condition of *Uncaria Gambir* Roxb. as One of Important Medicinal Plants in North Sumatra Indonesia. *Procedia Chemistry*, 14, 3–10. <https://doi.org/10.1016/j.proche.2015.03.002>
- Shafirany, M. Z., Susilawati, Y., & Musfiroh, I. (2019). Aplikasi Kemometrik dalam Penentuan Mutu Tumbuhan Obat. *Pharmauho: Jurnal Farmasi, Sains, dan Kesehatan*, 4(2). <https://doi.org/10.33772/pharmauho.v4i2.6257>
- Sri Rahayu, W., Cahyo Buono, E., & Singgih Raharjo, A. (2024). Analisis Cepat Kandungan Metamizole dan Deksametason pada Jamu Pegal Linu dengan Metode FTIR Kombinasi dengan Kemometrik Rapid Analysis of Metamizole and Dexamethasone in Traditional

- Herbal Preparations for Rheumatoid Arthritis Treatment with FTIR-Chemometric. Dalam *Pharmaceutical Journal of Indonesia* (Vol. 20, Nomor 02).
- Sukaesih, D. A. (2021). Characterization of Catechin From Green Tea Leaf (*Camellia Sinensis* (L.) Kuntze) and Antibacterial Activity Tests. *Skripsi*.
- Sundalian, M., Husein, G., Nugraha, A., Tinggi, S., & Indonesia, F. (2023). *Analisis Kemometrik Profil Spektrum...* (Vol. 6, Nomor 1).
- Syelly, R., Laksana, I., Komputer, T., Tinggi Teknologi Payakumbuh, S., & Khatib Sulaiman, J. (2020). Rancang Bangun Sistem Pakar Model Identifikasi untuk Klasifikasi Varietas Unggul Tanaman Gambir Menggunakan Genetic Programming Development Identification Model Classify Uncaria Gambir Variety Base on Genetic Programming. *Jurnal Agriekstensi*, 19(1).
- Wahyudi, A. A. (2021). *Karakterisasi Komposit Tio2 Karbon Aktif Tandan Pisang Menggunakan Ftir Dan Sem-Edx Ach Alirifqi Wahyudi No Mhs: 14612171* Program Studi Kimia.
- Widyaningrum, W., Yohanes Aris Purwanto, Slamet Widodo, Supijatno, & Iriani, E. S. (2022). Portable/Handheld NIR sebagai Teknologi Evaluasi Mutu Bahan Pertanian secara Non-Destruktif. *Jurnal Keteknik Pertanian*, 10(1), 59–68. <https://doi.org/10.19028/jtep.010.1.59-68>
- Windarsih, A., Rohman, A., Bakar, N. K. A., & Erwanto, Y. (2023). Metabolomics Approach using LC-Orbitrap High Resolution Mass Spectrometry and Chemometrics for Authentication of Beef Meats from Different Origins in Indonesia. *Sains Malaysiana*, 52(10), 2869–2887. <https://doi.org/10.17576/jsm-2023-5210-11>