

Aplikasi Kemometrik dalam Evaluasi Obat Herbal : Kajian Literatur 2015-2025

Hema Novita Rendati^{1*}, Risa Susanti², Novia Fahrina Purnama Sari¹, Lukman Mahdi¹, Yuniarti Suryatinah²

¹Program Studi Farmasi, Universitas Lambung Mangkurat, Banjarbaru, Kalimantan Selatan, Indonesia

²Program Studi Pendidikan Profesi Apoteker, Universitas Lambung Mangkurat, Banjarbaru, Kalimantan Selatan, Indonesia

*email: hemanovita@ulm.ac.id

ABSTRACT

Recent advances in analytical technology have made chemometrics an increasingly essential approach to herbal therapy. Techniques such as HPLC, GC-MS, FTIR, UV-Vis, and NMR generate extensive, complex chemical fingerprint data, making it challenging to analyze with standard univariate methods. Chemometrics can discern trends, differentiate among natural variations in samples, and provide a more objective foundation for quality standardization through multivariate analysis. This review examines 52 selected works from 2015 to 2025 that investigate the application of chemometrics to verify, detect adulteration, classify species, and assess the activity and quality of herbal constituents. PCA, PLS, LDA, SIMCA, PLS-DA, OPLS-DA, and HCA are some of the methods that have been shown to work well for distinguishing real from fake substances, identifying closely related species, and quickly and reliably forecasting the amount of active compounds. Combining chemical fingerprinting with multivariate modeling provides a more complete picture of composition and helps the standardization process run more smoothly. In general, chemometrics is a strong, effective, and repeatable method for ensuring that herbal medications are authentic, safe, and of good quality.

Keyword: Chemometrics, Herbal Medicine, Authentication, Classification, fingerprint

Received: November 2025; Accepted: Desember 2025; Published: Desember 2025



©2025. Published by Institute for Research and Innovation Universitas Muhammadiyah Banjarmasin. This is Open Access article under the CC-BY-SA License (<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>).

LATAR BELAKANG

Penggunaan obat herbal telah dikenal sejak lama sebagai bagian penting dari pencegahan maupun penatalaksanaan berbagai penyakit. Masyarakat memiliki tradisi panjang dalam memanfaatkan tanaman dan bahan alami lainnya untuk tujuan penyembuhan. Kekayaan biodiversitas tumbuhan di berbagai wilayah turut mendorong pemanfaatan tanaman, tidak hanya sebagai sumber pangan, tetapi juga sebagai bahan obat (1). Keampuhan terapeutik obat herbal sendiri ditentukan oleh sejumlah faktor yang harus terpenuhi agar efek farmakologis yang dihasilkan tetap konsisten dan dapat diproduksi kembali (*reproducible*) (2).

Mutu obat herbal umumnya dinilai secara kualitatif dan kuantitatif melalui inspeksi sensorik, seperti

pengamatan makroskopis dan mikroskopis, serta penetapan kadar beberapa senyawa penanda tertentu (2). Pendekatan yang hanya berfokus pada satu senyawa penanda dalam evaluasi mutu obat herbal tidak mempertimbangkan kontribusi sinergis berbagai komponen aktif lainnya, sehingga tidak mampu menggambarkan efek holistik yang menjadi karakteristik utama obat herbal. Untuk mengatasi keterbatasan tersebut, beberapa teknik berbasis pendekatan non-target telah dikembangkan. Penyusunan gambaran menyeluruh mengenai profil kimia obat herbal yang dikenal sebagai *fingerprint chemistry* atau sidik jari kimia (3).

Banyak penelitian telah dilakukan untuk mengembangkan dan menerapkan beragam metode analisis dalam evaluasi obat herbal, termasuk *High-Performance Liquid Chromatography* (HPLC) (4), *Gas*

chromatography (GC) (5), spektrofotometri UV-Vis (6), serta spektroskopi FTIR (7). Penerapan teknik-teknik tersebut menghasilkan sejumlah besar variabel dalam bentuk data sidik jari kimia. Kondisi ini tidak hanya membuka peluang untuk mengekstraksi informasi kimia yang lebih bermakna dari data mentah, tetapi juga menunjukkan bahwa pendekatan univariat konvensional sering kali tidak memadai untuk mengolah kompleksitas data tersebut (3).

Seiring majunya teknologi komputasi, analisis multivariat berbasis kemometrika semakin banyak digunakan dalam penelitian terkait kualitas obat herbal. Pendekatan kemometrika menawarkan beragam fungsi, mulai dari analisis kesamaan, eksplorasi pola, hingga algoritma klasifikasi untuk tujuan kualitatif. Selain itu, teknik kalibrasi multivariat memungkinkan penilaian kuantitatif dengan banyak variabel. Penerapan kemometrika pada data sidik jari kimia memungkinkan peneliti mengekstraksi informasi serta pengetahuan tersembunyi dalam sistem kimia melalui pemodelan matematis (8). Oleh karena itu, pendekatan ini berpotensi menjadi strategi yang menjanjikan untuk penilaian mutu obat herbal secara menyeluruh dan holistik.

Dalam ulasan ini, kami menyoroti peran kemometrika sebagai pendekatan analitis untuk mengatasi berbagai tantangan dalam evaluasi obat herbal dengan menekankan penerapannya dalam satu dekade terakhir (2015–2025). Berbeda dengan beberapa tinjauan sebelumnya yang berfokus pada satu aspek evaluasi obat herbal, seperti autentikasi (9) atau klasifikasi (10), ulasan ini mengelompokkan penggunaan kemometrika berdasarkan tujuan analisisnya. Pendekatan tersebut mencakup tiga tujuan utama, yaitu autentikasi dan deteksi adulterasi, klasifikasi sampel, serta penentuan aktivitas dan kualitas obat herbal.

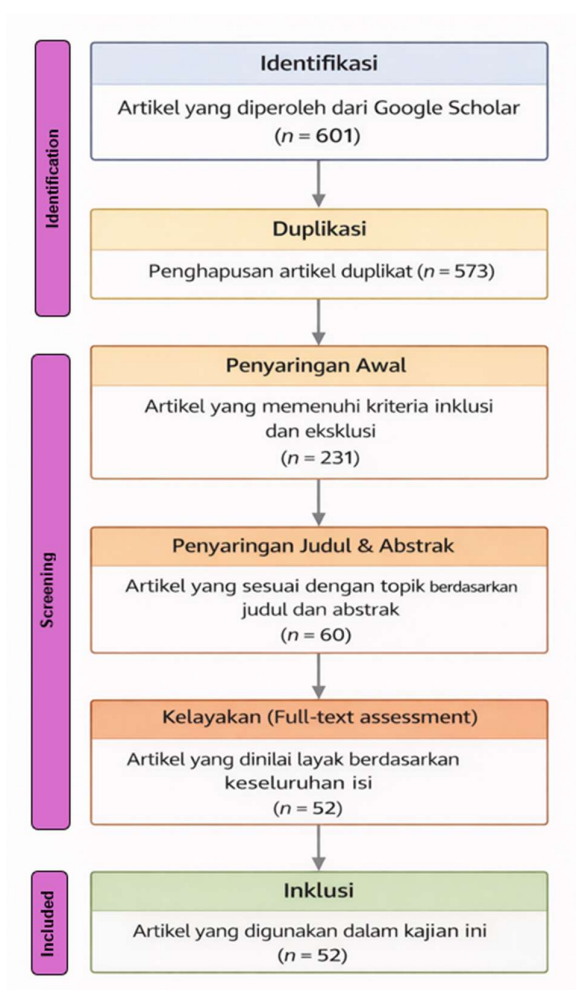
METODE

Penelitian ini menggunakan metode tinjauan literatur yang mencakup publikasi ilmiah dari tahun 2015-2025, yang diperoleh melalui pencarian di basis data Google Scholar. Kata kunci yang digunakan dalam pencarian artikel yaitu kemometrik (*chemometric*); obat herbal (*herbal medicine*); autentikasi (*authentication*); kontrol kualitas (*Quality control*); dan standarisasi (*Standardization*). Kriteria inklusi dalam penelitian ini adalah artikel asli (*original article*) yang dipublikasikan dalam bahasa Indonesia ataupun bahasa Inggris, bentuk jurnal dalam teks lengkap yang relevan dengan topik. Artikel yang dikecualikan meliputi penelitian tanpa analisis kemometrik, studi non-herbal, laporan konferensi yang tidak lengkap, paten, buku, tinjauan literatur, serta publikasi yang tidak menggunakan data analitik berbasis *fingerprint* kimia. Dari total 601 publikasi yang ditelaah, sebanyak 52 artikel memenuhi kriteria inklusi dan eksklusi untuk dianalisis lebih lanjut. Proses seleksi artikel secara rinci dapat dilihat pada Gambar 1.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Berdasarkan literatur yang dianalisis, terlihat bahwa penerapan kemometrik dalam evaluasi obat herbal meningkat sangat signifikan sejak tahun 2020. Grafik peningkatan dapat dilihat pada gambar 2. Peningkatan ini didorong oleh dua faktor utama, yaitu berkembangnya teknologi *analytical fingerprinting* yang menghasilkan data kimia berukuran besar dan kompleks, serta kebutuhan industri dan akademisi terhadap metode penjaminan mutu yang lebih objektif, cepat, dan mampu menangkap variasi komposisi senyawa yang tidak dapat diidentifikasi dengan teknik konvensional. Penerapan kemometrika dapat meningkatkan kualitas sidik jari yang diperoleh

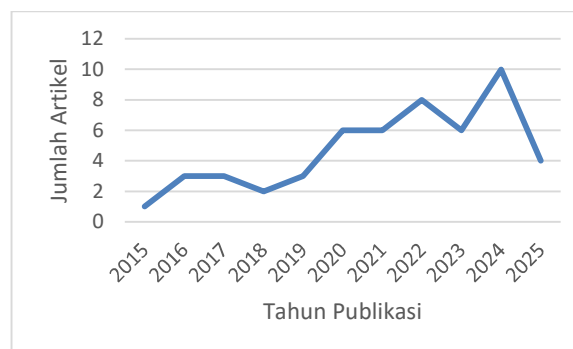
dari profil kromatografi atau spektroskopi kompleks secara signifikan (8).



Gambar 1. Proses seleksi artikel

Berbagai metode analisis telah menerapkan pendekatan analisis sidik jari menggunakan metode kromatografi dan spektrometri atau keduanya secara bersamaan seperti *Gas Chromatography-Mass Spectrometry* (GC-MS) dan *Liquid Chromatography-Mass Spectrometry* (LC-MS) (4,11–13). Penggabungan teknik sidik jari berbasis kromatografi atau spektroskopi dengan analisis multivariat, seperti *partial least squares regression* (PLSR), *principal component analysis* (PCA), dan *discriminant analysis* (DA), telah banyak dimanfaatkan untuk keperluan identifikasi spesies, diferensiasi, serta autentikasi

tanaman obat (4,7,14). Penggunaan kemometrika dalam evaluasi obat herbal dapat dilihat pada tabel 1.



Gambar 2. Jumlah artikel yang diterbitkan tahun 2015-2025

Autentikasi dan Deteksi Adulterasi Obat Herbal

Penentuan keaslian bahan menjadi tahap awal yang krusial dalam menilai mutu suatu obat herbal. Praktik pemalsuan, baik disengaja maupun tidak disengaja, biasanya mencakup substitusi sebagian atau seluruh bahan baku obat asli dengan zat lain yang lebih murah dan bebas atau memiliki sifat terapeutik yang lebih rendah (15). Pemalsuan dapat menyebabkan variasi pada efikasi dan keamanan. Teknik identifikasi, penentuan, dan autentikasi pada obat herbal umumnya dilakukan untuk memenuhi persyaratan pengendalian mutu (3).

Yuliantini (2020) menggunakan metode FTIR dengan pendekatan PCA untuk mengidentifikasi adanya tespong pada serbuk daun ashitaba yang merupakan bahan baku obat tradisional (16). Pendekatan PCA juga diterapkan dalam autentikasi minyak serih menggunakan GC-MS (5). *Principal Component Analysis* (PCA) merupakan pendekatan yang paling sering digunakan dalam menganalisis data fingerprint maupun data kompleks lainnya pada tahap eksplorasi. Teknik ini bekerja dengan mengekstraksi komponen-komponen utama yang paling berpengaruh dan mengabaikan variabel yang bersifat mengganggu,

sehingga hasil interpretasi menjadi lebih akurat. Ketika diterapkan pada data fingerprint, PCA mampu menampilkan variasi antar sampel secara jelas dan langsung (17). Dalam penelitian lain, kombinasi PCA dan DA diterapkan untuk autentikasi kencur (*K. galanga*) dari spesies yang berkerabat dekat seperti temu kunci (*K. pandurata*) dan kunci pepet (*K. rotunda*) menggunakan HPLC. Dalam studi ini, PCA dapat membedakan ketiga spesies, tetapi untuk autentikasi *K. galanga* kurang berhasil, terutama ketika *K. galanga* dipalsukan oleh *K. rotunda*. Model prediksi DA kemudian digunakan untuk memperoleh diskriminasi yang jelas antara ketiga sampel dan autentikasi *Kaempferia galanga* dari *K. pandurata* dan *K. rotunda* (4). *Discriminant Analysis* (DA) merupakan metode klasifikasi yang bekerja berdasarkan indikator yang telah ditetapkan secara jelas, berbeda dengan *component analysis* (CA) yang tidak memerlukan acuan tersebut. Dalam studi penilaian mutu tanaman obat, DA dimanfaatkan untuk membangun fungsi diskriminatif yang dapat membedakan kelompok sampel. Proses ini melibatkan regresi berganda dari

jumlah parameter khas, yang kemudian dipilih melalui pengujian varians menggunakan indeks yang relevan, seperti kadar senyawa aktif. Dengan pendekatan tersebut, sampel yang belum diketahui dapat dikenali dan ditempatkan pada kelompok yang sesuai berdasarkan informasi yang diperoleh dari sampel acuan (17).

Integrasi kemometrika, meliputi *principal component analysis* (PCA), *hierarchical cluster analysis* (HCA), dan *discriminant analysis* (DA), dengan *high performance thin layer chromatography* (HPTLC) juga terbukti mampu mengelompokkan senyawa penanda yang digunakan vitexin dan isovitexin, untuk autentisitas, identitas, dan kualitas varietas *Ficus deltoidea*, sehingga dapat dimanfaatkan sebagai dasar evaluasi mutu. (18). *Hierarchical Cluster Analysis* (HCA) merupakan teknik pengelompokan yang umum digunakan evaluasi kualitas tanaman obat. Teknik ini mengelompokkan item serupa berdasarkan karakteristiknya dan menciptakan diagram pohon yang secara visual mewakili hubungan antar item (8).

Tabel 1. Penerapan kemometrika dalam evaluasi obat herbal

Sampel	Metode Analisis	Teknik Kemometrik	Tujuan	Referensi
Daun Kratom (<i>Mitragyna Speciosa</i> Korth.)	FTIR-ATR	PCA PLS-DA	Identifikasi dan Autentikasi	(19)
Kayu sappan (<i>Caesalpinia sappan</i>)	UV-Vis	PCA DA	Uji Adulterasi	(6)
Madu	FTIR	PLS PCR	Uji Adulterasi	(20)
<i>Garcinia dulcis</i>	UV-Vis	PLSR	Uji Adulterasi	(21)
Temu hitam (<i>Curcuma aeruginosa</i> Roxb.)	KLT densitometri	PCA	Uji Adulterasi	(22)
Temulawak (<i>Curcuma xanthorrhiza</i> Roxb.)	TLC	PCA	Uji Adulterasi	(23)
Bawang Putih	FTIR	OPLS-DA	Uji Adulterasi	(24)
<i>Garcinia mangostana</i>	UV-Vis	PLS	Autentikasi dan Adulterasi	(25)
<i>Curcuma xanthorrhiza</i>	1H-NMR	PLS-DA OPLS-DA	Autentikasi	(26)
Kencur (<i>Kaempferia galanga</i>)	HPLC	PCA DA	Autentikasi	(4)
<i>Combretum Indicum</i> Varr. B	UV-Vis	PLSR	Autentikasi	(11)
<i>Patchouli Oil</i>	GC-MS	PCA	Autentikasi	(12)
Minyak Daun Jeruk Nipis (<i>Citrus hystrix</i> D.C.)	FTIR	PCA PLS	Autentikasi	(27)
Minyak Ikan Patin (<i>Pangasius micronemus</i>)	FTIR	PCR PLSR	Autentikasi	(28)

Madu	FTIR-ATR	PCA DA PCR PLS	Autentikasi	(29)
Minyak Daun Cengkih (<i>Syzygium aromaticum</i> (L.) Merr. & L. M. Perry)	GC-MS FTIR	PLS PCA	Autentikasi	(30)
Daun Miana (<i>Coleus</i> sp.)	FTIR	PCA PLS-DA	Autentikasi	(31)
Temu lawak (<i>Curcuma xanthorrhiza</i>)	UV-Vis FTIR	PLS-DA SIMCA	Autentikasi	(32)
Kumis Kucing (<i>Orthosiphon Aristatus</i>)	UV-Vis	PLSR	Autentikasi	(14)
Minyak Serai	GC-MS	PCA	Autentikasi	(5)
Tespong (<i>Oenanthe javanica</i>)	FTIR	PCA	Autentikasi	(16)
Jamu pegal linu	FTIR	PCA PLS	Uji Adulterasi	(33)
Minyak <i>Jowitt</i> <i>Cymbopogon winterianus</i>	FTIR	LDA SVM SIMCA	Klasifikasi sampel	(34)
Rimpang Jahe Emprit (<i>Zingiber officinale</i> var. amarum Roscoe)	Spektroskopi NIR	LDA SVM SIMCA	Klasifikasi sampel	(35)
Daun Gambir (<i>Uncaria Gambir</i> Roxb.)	FTIR	PCA PLS-DA OPLS-DA	Klasifikasi sampel	(36)
Anting-anting (<i>Acalypha indica</i> L.)	TLC	PCA	Klasifikasi sampel	(37)
kumis kucing (<i>Orthosiphon stamineus</i>)	FTIR	CVA	Klasifikasi sampel	(38)
Herba Pegagan (<i>Centella asiatica</i> L.)	FTIR	PCA	Klasifikasi sampel	(39)
Ekstrak Daun Yacon (<i>Smallanthus sonchifolius</i> [Poepp & Endl.] H. Robinson)	HPLC FTIR	PCA	Klasifikasi sampel	(13)
Pegagan (<i>Centella asiatica</i> L.)	TLC FTIR	PCA	Klasifikasi sampel	(40)
<i>Brucea javanica</i> L. Merr	UV-Vis FTIR	PCA	Klasifikasi sampel	(41)
Akar pasak bumi (<i>Eurycoma longifolia</i> Jack.)	FTIR	PCA PLSR	Identifikasi dan klasifikasi sampel	(7)
Daun Komba-komba (<i>Chromolaena odorata</i> L.)	FTIR	PCA	Klasifikasi hasil uji aktivitas	(42)
Tempuyung (<i>Sonchus arvensis</i>)	FTIR	PCA PLS	Penentuan aktivitas	(43)
<i>Sansevieria trifasciata</i>	Kromatografi Kolom Vakum	PCA	Penentuan aktivitas	(44)
Murbei (<i>Morus alba</i> Lour)	FTIR	PCA HCA	Penentuan aktivitas	(45)
Daun temelear (<i>Coptosapelta tomentosa</i> Valeton ex K.Heyne)	FTIR	PCA	Penentuan aktivitas	(46)
Daun gedi hijau (<i>Abelmoschus manihot</i> L.)	UV-Vis FTIR	PLSR	Penentuan aktivitas	(47)
<i>Abelmoschus manihot</i> L.	FTIR	PLSR	Penentuan aktivitas	(48)
Kulit pisang ambon hijau (<i>Musa acuminata</i> Colla)	FTIR	PCA	Penentuan aktivitas	(49)
Bunga Asoka (<i>Ixora Coccinea</i> L.)	FTIR	PCA	Penentuan aktivitas	(50)
Buah Parijoto (<i>Medinilla speciosa</i> Blume)	UV-Vis	PCA	Penentuan aktivitas	(51)
<i>Andrographis paniculata</i> (Burm. F.) Nees (AP)	TLC	MLR	Penentuan aktivitas	(52)
Mangga Gedong Gincu	Spektroskopi NIR	MSC PLS	Penentuan aktivitas	(53)

Akar Tapak Dara (<i>Vinca rosea</i>)	FTIR-ATR	PCA	Penentuan aktivitas	(54)
Minyak nilam (<i>Pogostemon cablin</i> Benth.)	FTIR	LDA PCA HCA	Penentuan aktivitas	(55)
Temu ireng (<i>Curcuma aeruginosa</i>)	FTIR	PCA PLS	Penentuan aktivitas	(56)
Temulawak (<i>Curcuma xanthorrhiza</i> Roxb.)	UV-Vis	PCA CA	Penentuan aktivitas	(57)
Torbangun (<i>Plectranthus amboinicus</i>)	GC-MS	HCA	Penentuan aktivitas	(58)
Daun gedi hijau (<i>Abelmoschus manihot</i> L)	FTIR	PLSR	Penentuan aktivitas	(59)
<i>Ficus deltoidea</i> Jack	HPTLC	PCA HCA DA	Penentuan aktivitas	(18)
Pala	FI-ESI-MS PTR-MS	PCA	Penentuan aktivitas	(60)

Kombinasi PCA dengan PLS mampu mengidentifikasi adanya kandungan BKO metamizol dan deksametason dalam jamu pegal linu secara simultan menggunakan FTIR (33). *Partial Least Squares* (PLS) merupakan metode dekomposisi spektral yang banyak digunakan untuk analisis kuantitatif. PLS termasuk salah satu teknik kemometrika yang paling efektif untuk penetapan kadar karena mampu mengatasi berbagai tantangan umum dalam data spektroskopi, seperti interaksi antar variabel, tumpang tindih pita serapan, dan kolinearitas. Dalam pendekatan ini, informasi spektral dikombinasikan dengan data konsentrasi untuk menghasilkan model dekomposisi yang dapat memprediksi nilai analit secara akurat (61). Teknik PLS juga diterapkan pada autentikasi *G. dulcis* terhadap adulterasi *G. Mangostana* dengan metode spektrofotometri UV-Vis (21). Jenis PLS lain seperti *Partial Least Squares-Discriminant Analysis* (PLS-DA) dan *Orthogonal Partial Least Square-Discriminant Analysis* (OPLS-DA) juga diaplikasikan dalam pengenalan pola sebagai teknik sidik jari metabolit untuk autentikasi *C. xanthorrhiza* dari *Zingiber montanum* menggunakan spektroskopi 1H-NMR. Pada studi ini, model PLS-DA dengan 7 komponen utama berhasil membedakan sampel bubuk *C. xanthorrhiza* asli dari yang dipalsukan menggunakan *Zingiber*

montanum. Teknik OPLS-DA juga menunjukkan performa klasifikasi yang sangat baik untuk membedakan kedua kelompok tersebut. model ini dibangun dengan 2 komponen prediktif dan 4 komponen orthogonal. Dalam studi ini, model OPLS-DA memberikan hasil yang lebih baik dibandingkan PLS-DA. Perbedaan ini kemungkinan disebabkan oleh karakteristik algoritmik OPLS-DA yang memisahkan variasi prediktif dan non-prediktif. Dalam OPLS-DA, variabel laten diekstraksi baik dari matriks X maupun Y, sehingga menghasilkan pemisahan kelas yang lebih jelas. Sebaliknya, PLS-DA hanya membangun variabel laten berdasarkan kovariansi antara matriks X dan Y, sehingga pemisahan kelas cenderung kurang optimal dibandingkan OPLS-DA (26). Penelitian lain mengaplikasikan *Partial Least Square* (PLS) yang dikombinasikan dengan *Principal Component Regresi* (PCR) untuk identifikasi pemalsuan pada madu hutan asli Kalimantan dengan metode FTIR. PLS dan kalibrasi PCR digunakan untuk mengukur kandungan sukrosa pada frekuensi 1423 – 1825 cm⁻¹

dengan nilai koefisien determinasi (R²) yang tinggi sebesar 0,9960 dengan nilai kalibrasi (RMSEC) 0,0898 %v/v (20). *Principal Component Regression* (PCR) merupakan metode regresi yang menggabungkan PCA dengan regresi linear. Pendekatan ini dirancang

untuk menyederhanakan struktur data berdimensi besar dengan memanfaatkan komponen utama sebagai variabel prediktor, tanpa menghilangkan informasi yang relevan. Berbeda dengan PLS yang langsung mengaitkan variasi spektral dengan perubahan konsentrasi analit pada rentang frekuensi tertentu, PCR melakukan analisis faktor dalam satu langkah, di mana data spektral dan konsentrasi diproses bersama untuk menghasilkan model regresi (62).

Teknik lain yang juga digunakan dalam autentikasi obat herbal ialah SIMCA (*Soft Independent Modeling of Class Analogy*). Model klasifikasi SIMCA untuk autentikasi diawali dengan menyusun model PCA untuk masing-masing kelas menggunakan himpunan sampel kalibrasi. Setelah model terbentuk, SIMCA menghasilkan tabel klasifikasi yang menunjukkan apakah suatu sampel termasuk dalam satu kelas tertentu, berada pada lebih dari satu kelas, atau bahkan tidak sesuai dengan kelas mana pun (63). Analisis SIMCA dapat mendeteksi perbedaan antara kunyit murni dan sampel yang telah dipalsukan pada rentang inframerah hingga konsentrasi 0,005% b/b, sementara analisis SIMCA hanya dapat mengautentikasi dengan tepat pada rentang UV-Vis hingga konsentrasi 1 µg/g (32).

Klasifikasi Sampel

Pendekatan kemometrik paling sering digunakan untuk memahami variasi alami bahan herbal, misalnya akibat perbedaan lokasi budidaya, umur panen, kondisi tanah, atau metode pascapanen. Rafi (2015) melakukan klasifikasi geografis teh jawa (*Orthosiphon stamineus*) dari dengan Spektroskopi FTIR yang dikombinasikan dengan *canonical variate analysis* (CVA) (38). *Canonical Variate Analysis* (CVA) merupakan salah satu analisis multivariat yang digunakan untuk menganalisis serta

mengklasifikasikan kelompok dalam suatu himpunan sampel. Metode ini bekerja dengan memaksimalkan pemisahan antar kelompok sambil meminimalkan variasi di dalam kelompok, sehingga menghasilkan fungsi kanonik yang mampu membedakan kelompok secara optimal. Dengan demikian, CVA dapat digunakan untuk mengklasifikasikan sampel baru yang belum diketahui ke dalam kelompok yang telah ditentukan sebelumnya (8).

Penelitian lain melakukan determinasi kandungan dan klasifikasi *E. longifolia Jack.* yang berbeda ketinggian tempat tumbuhnya dengan pendekatan PCA dan PLSR. Teknik PCA berguna untuk mereduksi variable awal menjadi beberapa komponen utama yang mewakili sebagian besar variasi informasi. Teknik ini mengelompokkan sampel berdasarkan kemiripan pola spektranya, sehingga sampel yang berasal dari area tumbuh yang sama cenderung membentuk kluster yang berdekatan. PCA divisualisasikan melalui plot skor yang akan menampilkan pemisahan kluster yang jelas antara sampel dari area tumbuh berbeda (7). Teknik ini juga diaplikasikan untuk membandingkan profil komponen daun *Centella asiatica L.* berdasarkan lokasi geografis dan variasi pelarut (40) dan mengklasifikasikan ekstrak buah *B. javanica* berdasarkan tingkat kematangannya (41).

Putra (2023) menerapkan analisis multivariat LDA (*Linear Discriminant Analysis*), SVM (*Support Vector Machines*), dan SIMCA (*Soft Independent Modeling of Class Analyze*) untuk menentukan kandungan fenolik total dan menentukan model klasifikasi pada jahe emprit yang di tanam di dataran sedang dan dataran tinggi dengan metode spektroskopi NIR. *Linear Discriminant Analysis* (LDA) bekerja dengan mencari kombinasi linier variabel yang mampu memisahkan kelompok sampel secara optimal. *Support Vector Machines* (SVM) menentukan batas

pemisah terbaik antara kelas dengan cara memaksimalkan margin dari titik data terdekat. Sementara SIMCA (*Soft Independent Modeling of Class Analogy*) mengembangkan model PCA terpisah untuk setiap kelas sehingga setiap kelompok digambarkan berdasarkan pola varians internalnya. Model dari ketiga teknik tersebut kemudian di validasi dengan metode LOOCV (*Leave-One-Out-Cross Validation*) dan validasi Eksternal. Validasi tersebut menunjukkan model LDA dan SIMCA mampu mengklasifikasikan sampel sesuai dengan kategori yang sebenarnya dengan nilai akurasi 100%. Sementara model SVM hanya memiliki nilai akurasi 60% (35).

Penentuan Aktivitas dan Kualitas Obat Herbal

Penentuan aktivitas dan kualitas ekstrak herbal banyak dikaitkan dengan keberadaan senyawa aktif yang sangat memengaruhi aktivitas biologis dari obat herbal tersebut. Sejumlah penelitian menunjukkan bahwa pendekatan multivariat mampu menggantikan proses kuantifikasi konvensional yang biasanya memerlukan analisis laboratorium yang panjang dan berbiaya tinggi. Dengan memadukan data spektral atau kromatogram dengan metode regresi seperti PLS atau PCR, peneliti dapat membangun model prediksi kadar senyawa aktif secara lebih cepat dan efisien (8). Ringkasan dapat dilihat pada tabel 3.

Studi yang dilakukan oleh Aisyah (2020) menggunakan metode metabolomik yang tidak tertarget digunakan untuk mengevaluasi profil senyawa pada bagian daun tanaman mutan dari iradiasi sinar gamma dan kontrol. Kandungan senyawa planlet mutan dan kontrol dianalisis dengan GC-MS. Data GC-MS dianalisis dengan kemometrik dengan menggunakan *hierarchical cluster analysis* (HCA). Senyawa yang terdeteksi pada planlet kontrol dan mutan torbangun menunjukkan keragaman tinggi dan

terdapat tiga senyawa yang memiliki perbedaan persentase kandungan tinggi berdasarkan analisa *Heatmap* dan HCA yaitu kenaikan kandungan senyawa DDMP dan stigmasterol, serta penurunan kandungan *hydroxymethylfurfurole* pada mutan torbangun (58).

Studi lain membandingkan karakteristik pektin yang diekstraksi dari kulit pisang dengan variasi pelarut (asam klorida dan asam sitrat) dan waktu ekstraksi (5, 10, dan 15 menit) menggunakan metode microwave, serta melakukan komparasi pektin hasil ekstraksi terhadap pektin komersial dengan metode analisis FTIR dan kemometrik. Hasil PCA tersebut menunjukkan bahwa karakteristik data FTIR pada sampel pektin yang diekstraksi dengan jenis pelarut yang sama menunjukkan kemiripan. Namun, kedua kelompok tersebut masih berbeda dari pektin komersial. Hal ini diduga karena adanya perbedaan kemurnian dan intensitas vibrasi pektin yang terukur dengan spektroskopi FTIR (49).

Sejalan dengan penelitian tersebut, teknik PCA juga digunakan untuk pengelompokan ekstrak berdasarkan variasi pelarut. Dua komponen utama pertama dari PCA telah mampu menjelaskan sekitar 95% variasi data. Selanjutnya, model *Partial Least Squares* digunakan untuk menilai gugus fungsional yang berkaitan dengan aktivitas antioksidan. Analisis PLS mengindikasikan bahwa keberadaan gugus –OH dan C–O, yang umum ditemukan pada senyawa fenolik, menjadi faktor utama yang mendukung potensi antioksidan ekstrak daun *S. arvensis* (43).

Rafid (2024) mengevaluasi aktivitas antibakteri ekstrak, fraksi, dan subfraksi *Sansevieria trifasciata* Prain. terhadap *Staphylococcus aureus* dan *Pseudomonas aeruginosa* dengan menggunakan metode mikrodilusi. Data kemampuan hambat yang diperoleh kemudian dianalisis secara multivariat untuk melihat pola hubungan antar sampel, dan hasilnya

divisualisasikan melalui pendekatan kemometrika. Dalam analisis PCA, nilai absorbansi dari masing-masing perlakuan diubah menjadi himpunan data multivariat yang mewakili kedekatan karakter fisika-kimianya. Melalui proses ini, PCA mampu memperlihatkan pengelompokan sampel berdasarkan kesamaan pola absorbansinya, sehingga hubungan antar ekstrak, fraksi, maupun subfraksi dapat dipetakan dengan lebih jelas (44).

Selain pengelompokan sampel, teknik PCA juga dapat digunakan untuk penetapan hubungan antar variabel yang mengacu pada besar sudut antar vektor dalam loading plot PCA (*Principal Component Analysis*). Jika dua vektor berada pada sudut kurang dari 90° , hal ini menunjukkan bahwa kedua variabel memiliki hubungan yang searah atau berkorelasi positif. Ketika sudut yang terbentuk mendekati 90° , keterkaitan di antara keduanya menjadi sangat lemah atau hampir tidak ada. Sebaliknya, sudut yang lebih besar dari 90° hingga mendekati 180° mengindikasikan adanya hubungan yang saling berlawanan, sehingga variabel tersebut berkorelasi secara negatif. Pada analisis kandungan fitokimia dan aktivitas antioksidan ekstrak

bunga asoka yang diekstraksi menggunakan pelarut etanol 70% dan etil asetat, hasil kemometrika tersebut menunjukkan bahwa pelarut etanol bisa lebih efektif dalam menangkap radikal bebas DPPH dibandingkan senyawa yang diekstraksi dengan etil asetat (50).

Penilaian mutu pala (*Myristica fragrans*) telah dilakukan dengan memanfaatkan profil senyawa volatil dan nonvolatil melalui analisis *Flow-injection electrospray ionization mass spectrometry* (FI-ESI-MS) dan *Proton transfer reaction mass spectrometry* (PTR-MS) yang dipadukan dengan PCA. Hasil penelitian menunjukkan bahwa intensitas komponen volatil seperti trimiristin dan minyak atsiri memiliki korelasi kuat dengan komponen nonvolatil, meskipun kecenderungannya menurun seiring meningkatnya massa molekul fraksi nonvolatil. Melalui pendekatan ini, prediksi klasifikasi mencapai hampir 100% akurasi, sehingga pala berkualitas tinggi dan rendah dapat dipisahkan secara jelas (60). Gambaran mengenai karakteristik dan peran masing-masing teknik kemometrika yang telah dibahas, disajikan pada tabel 2.

Tabel 2. Gambaran Metode Kemometrik dalam Evaluasi Obat Herbal

Teknik Kemometrika	Tujuan Utama Analisis	Aplikasi dalam Evaluasi Obat Herbal	Kelebihan	Kekurangan
PCA (<i>Principal Component Analysis</i>)	Eksplorasi data dan reduksi dimensi	Visualisasi variasi fingerprint, autentikasi awal, klasifikasi eksploratif	Tidak memerlukan data referensi, efektif menangani data kompleks dan multivariat	Tidak bersifat prediktif, pemisahan kelas bisa kurang optimal
HCA (<i>Hierarchical Cluster Analysis</i>)	Pengelompokan sampel	Klasifikasi berdasarkan kemiripan profil kimia dan fingerprint	Representasi visual hubungan antar sampel jelas	Sensitif terhadap metode jarak dan linkage, tidak prediktif

PLS (<i>Partial Least Squares</i>)	Analisis kuantitatif	Prediksi kadar senyawa aktif, penilaian kualitas dan aktivitas biologis	Mampu menangani kolinearitas dan data spektral kompleks	Membutuhkan model kalibrasi yang representatif
PCR (<i>Principal Component Regression</i>)	Analisis kuantitatif	Prediksi kandungan senyawa berbasis data spektrum	Mengurangi dimensi data sebelum regresi	Hubungan dengan variabel respon tidak selalu optimal dibandingkan PLS
DA (<i>Discriminant Analysis</i>)	Klasifikasi terawasi	Autentikasi dan diferensiasi spesies tanaman obat	Pemisahan kelas jelas jika asumsi terpenuhi	Sensitif terhadap distribusi data dan outlier
SIMCA (<i>Soft Independent Modeling of Class Analogy</i>)	Klasifikasi berbasis kelas	Autentikasi dan deteksi adulterasi bahan herbal	Cocok untuk one-class modeling, efektif dalam kontrol mutu	Membutuhkan model terpisah untuk setiap kelas
PLS-DA (<i>Partial Least Squares-Discriminant Analysis</i>)	Klasifikasi terawasi	Autentikasi, deteksi adulterasi, pengenalan pola metabolit	Akurasi tinggi dan mampu menangani data multivariat kompleks	Risiko overfitting jika validasi tidak memadai
OPLS-DA (<i>Orthogonal Partial Least Squares-Discriminant Analysis</i>)	Klasifikasi terawasi lanjutan	Pemisahan kelas pada data fingerprint kompleks	Interpretasi model lebih baik, pemisahan variasi prediktif dan non-prediktif	Model lebih kompleks dan memerlukan validasi ketat

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil telaah literatur, kemometrika terbukti memberikan kontribusi penting dalam berbagai aspek evaluasi obat herbal. Pendekatan ini tidak hanya mampu memanfaatkan kompleksitas data *fingerprint*, tetapi juga menyediakan metode kuantitatif dan kualitatif yang jauh lebih andal dibandingkan teknik konvensional. PCA, PLS, LDA, SIMCA, PLS-DA, OPLS-DA, dan metode multivariat lainnya secara konsisten menunjukkan performa yang baik dalam autentikasi bahan, klasifikasi spesies, hingga penilaian aktivitas biologis dan kandungan senyawa aktif. Pengembangan metode fingerprinting yang lebih sensitif serta algoritma kemometrik yang lebih adaptif diharapkan dapat semakin memperkuat akurasi dan efisiensi proses pengendalian mutu di bidang fitofarmaka.

UCAPAN TERIMAKASIH

Terima kasih kepada seluruh author yang telah berkontribusi dalam penulisan artikel ini.

DAFTAR PUSTAKA

1. Kumontoy GD, Deeng D, Mulianti T. PEMANFAATAN TANAMAN HERBAL SEBAGAI OBAT TRADISIONAL UNTUK KESEHATAN MASYARAKAT DI DESA GUAAN KECAMATAN MOOAT KABUPATEN BOLAANG MONGONDOW TIMUR. *J Holistik*. 2023;16(3):1–16.
2. Latif R, Nawaz T. Medicinal plants and human health: a comprehensive review of bioactive compounds , therapeutic effects , and applications. *Phytochem Rev*. 2025;7.
3. Wang H, Chen Y, Wang L, Liu Q, Yang S, Wang C. Advancing herbal medicine: enhancing product quality and safety through robust quality control practices. *Front Pharmacol*. 2023;1–16.
4. Septyanti C, Batubara I, Rafi M. HPLC Fingerprint Analysis Combined with Chemometrics for Authentication of *Kaempferia galanga* from Related Species. *Indones J Chem*. 2016;16(3):308–14.

5. Pratiwi HK, Any Guntarti, Nurani LH, Ginandjar IG. Authentication of Lemongrass Oil By Gas Chromatography-Mass Spectroscopy (GC-MS) Combination Chemometrics. *Indones J Pharm Sci Technol.* 2022;9(3).
6. BATUBARA I, HUSNA S, RAFI M, SUMARYADA T, UCHIYAMA S, JULIANDI B, et al. A Combination of UV-Vis Spectroscopy and Chemometrics for Detection of Sappanwood (*Caesalpinia sappan*) Adulteration from Three Dyes. *Sains Malaysiana.* 2022;51(3):775–81.
7. Triyasmono L, Ulfah A, Rizki MI, Anwar K. FTIR and Chemometrics Application on Determination of Total Flavonoid Content of Pasak Bumi Root Extract (*Eurycoma longifolia* Jack .). *J Pharmascience.* 2020;07(02):129–38.
8. Banjac MK, Kovacevic S, Podunavac-Kuzmanovic S. Ongoing Multivariate Chemometric Approaches in Bioactive Compounds and Functional Properties of Foods—A Systematic Review. *Processes.* 2024;12(583):1–18.
9. Liu C, Zuo Z, Xu F, Wang Y. Authentication of Herbal Medicines Based on Modern Analytical Technology Combined with Chemometrics Approach: A Review. Vol. 53, *Critical Reviews in Analytical Chemistry.* 2023.
10. Huang Y, Wu Z, Su R, Ruan G, Du F, Li G. Current application of chemometrics in traditional Chinese herbal medicine research. *J Chromatogr B Anal Technol Biomed Life Sci.* 2016;1026.
11. Hadi S, Agustin EA, Irawati, Wahyuni L. Authentication Of *Combretum Indicum* Varr . B Flower Against Varr . M With Combined Chemometrics Of Uv-Vis Spectrophotometric. *Sci Midwifery J.* 2022;10(3):1994–2000.
12. Nurani LH, Guntarti A, Milanie RD, Gandjar IG, Rais IR, Prasasti D, et al. AUTHENTICATION OF PATCHOULI OIL FROM VARIOUS GROWING REGIONS USING GC-MS METHOD WITH CHEMOMETRIC COMBINATION ON THE PRODUCTS IN THE MARKET. *J Farm Sains dan Prakt.* 2024;10(1):90–6.
13. Aziz Z, Yuliana ND, Simanjuntak P, Rafi M, Syamsudin. FTIR and HPLC-Based Metabolomics of *Yacon* Leaves Extracts (*Smallanthus sonchifolius* [*Poepp & Endl.*] H . *Robinson*) from Two Locations in Indonesia. *Indones J Chem.* 2020;20(3):567–78.
14. Rafi M, W NS, Wahyuni WT, Arif Z, Heryanto R. Autentikasi Kumis Kucing (*Orthosiphon Aristatus*) Menggunakan Kombinasi Spektrum Ultraviolet-Tampak Dan Partial Least Square Regression. *Indones J Chemom Pharmaceutical Anal.* 2021;1(2):93–101.
15. Muyumba NW, Mutombo SC, Sheridan H, Nachtergael A, Duez P. Quality control of herbal drugs and preparations : The methods of analysis , their relevance and applications. *Talanta Open.* 2021;4:1–11.
16. Yuliantini A, Amala WR, Muttaqin FZ, Asnawi A. DETEKSI TESPONG (*Oenanthe javanica*) PADA BAHAN BAKU DAUN ASHITABA (*Angelica keiskei*) MENGGUNAKAN METODE FTIR YANG DIKOMBINASIKAN DENGAN PCA. *Indones Nat Res Pharm J.* 2020;5(2):114–23.
17. Jing D, Deguang W, Linfang H, Shilin C, Minjian Q. Application of chemometrics in quality evaluation of medicinal plants. *J Med Plants Res.* 2011;5(17):4001–8.
18. Azemin A, Mohd KS, Juahir H, Mat N, Ismail Z. Discriminating Factors for *Ficus deltoidea* Jack Varieties by HPTLC coupled with Chemometrics. *J Agrobiotech.* 2017;8(2):86–95.
19. Ragil, Aninda D, Pitri R, Sailendra PR, Masriani M, Heryanto R. Chemical Fingerprint Berbasis Spektroskopi Inframerah (ATR-FTIR) Dipadukan dengan Kemometrik untuk Kontrol Kualitas Daun Kratom (*Mitragyna Speciosa* Korth.). *Chim Nat Acta.* 2024;12(1):41–8.
20. Prabowo S, Prayitno YA, Yuliani. Chemical Profile and Observing Honey Adulteration Using Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy and Multivariate Calibration. *J Food Pharmaceutical Sci.* 2020;8(1):215–25.
21. Hadi S, Nastiti K. Autentikasi *G . dulcis* terhadap Adulterasi *G . Mangostana* dengan Metode Spektrofotometri Kombinasi Kemometrik. *J Ilm Medicam.* 2024;10(1):75–82.
22. Emawati E, Yesinta, Usman AN, Asnawi A. DETEKSI ADULTERAN DALAM SEDIAAN JAMU TEMU HITAM (*Curcuma aeruginosa* Roxb.) MENGGUNAKAN METODE ANALISIS SIDIK JARI KLT VIDEO DENSITOMETRI. *Pharm J Farm Indones.* 2018;15(02):158–70.
23. Muttaqin FZ, Aida N, Asnawi A. DETEKSI ADULTERAN PADA BAHAN BAKU SEDIAAN TEMULAWAK (*Curcuma xanthorrhiza* ROXB) INSTAN SECARA TLC FINGERPRINT ANALYSIS. *Pharm J Farm Indones.* 2018;15(01):38–49.
24. Elvira AR, Putri AR, Muchlashi LA. Detection of Garlic Powder Adulteration Using FTIR Spectroscopy and Chemometrics: A Case Study in an Indonesia Marketplace. *J Food Pharmaceutical Sci.* 2024;12(3):169–78.
25. Hadi S, Nastiti K. Autentikasi *G.mangostana* terhadap Adulterasi *G. tinctoria* dengan Metode Spektrofotometri UV-VIS Kombinasi Khemometrik. *J Pendidik MIPA.* 2022;12(September):410–8.
26. Windarsih A, Nisa K, Indrianingsih AW, Darsih C, Handayani S, Wulanjati MP, et al. The use of 1 H-NMR spectroscopy and chemometrics of pattern

- recognition for authentication of *Curcuma xanthorrhiza* adulterated with *Zingiber montanum*. IOP Conf Ser Mater Sci Eng. 2021;
27. Jeffry J, Guntarti A, Salamah N. Authentication of Kaffir Lime Leaf Oil (*Citrus hystrix* D . C .) in Products Using FTIR Combined with Chemometrics. Pharm Sci Res. 2025;12(1):48–59.
 28. Putri AR, Rohman A, Riyanto S, Setyaningsih W. Autentikasi Minyak Ikan Patin (*Pangasius micronemus*) menggunakan Metode Spektroskopi FTIR yang dikombinasikan dengan Kemometrika. Indones J Chemom Pharmaceutical Anal. 2020;1(1):0–5.
 29. Prayitno YA, Emmawati A, Prabowo S, Candra KP, Rahmadi A. AUTENTIKASI CEPAT MADU HUTAN KALIMATAN TIMUR DENGAN ATR-FTIR SPEKTROSKOPI KOMBINASI ANALISIS KEMOMETRIKA. J Teknol dan Ind Pangan. 2021;32(2):181–9.
 30. Guntarti A, Nurani LH, Lestari P, Edityaningrum CA, Irham LM, Rohman A. AUTHENTICATION OF CLOVE LEAF OIL IN PRODUCTS (*Syzygium aromaticum* (L .) Merr . & L . M . Perry) USING GC-MS AND FTIR METHODS COMBINED WITH CHEMOMETRIC. Malaysian J Anal Sci. 2024;28(3):664–80.
 31. Syahrini R, Umar AH, Matasik LC. Fingerprint Metabolite of Miana (*Coleus* sp .) Leaf Infusion and Juice: Authentication Based on FTIR Spectroscopy and Multivariate Analysis. agriTECH. 2024;44(4):313–21.
 32. Izzati MN, Syafitri UD, Rafi M. Authentication of Java Turmeric (*Curcuma xanthorrhiza*) from Turmeric (*Curcuma longa*) Using a Combination of UV-VIS-IR Spectrum and Chemometrics. J Jamu Indones. 2025;10:1–10.
 33. Rahayu WS, Buono EC, Raharjo AS. Analisis Cepat Kandungan Metamizole dan Deksametason pada Jamu Pegal Linu dengan Metode FTIR Kombinasi dengan Kemometrik. Pharm J Farm Indones. 2024;20(02):178–82.
 34. Jazila YN, Kristiningrum N, Wulandari L. Penentuan Kadar Sitronelal Total dan Pengembangan Model Klasifikasi FTIR-Kemometrik Minyak Jowitt *Cymbopogon winterianus* dari Berbagai Ketinggian Daerah Tanam. J Jamu Indones. 2023;8:18–22.
 35. Putra HP, Ulfa EU, Wulandari L. Penentuan Kandungan Fenolik Total dan Model Klasifikasi Serbuk Rimpang Jahe Emprit (*Zingiber officinale* var . *Amarum Roscoe*) di Dataran Sedang dan Tinggi. Pharm J Farm Indones. 2023;20(02):141–6.
 36. Zulfani E, Satria D, Widya N, Rivaldo I. Klasifikasi Tiga Varietas Daun Gambir (*Uncaria Gambir* Roxb .) Menggunakan Spektroskopi Inframerah dan Analisis Kemometrik. Menara Ilmu J Penelit dan Kaji Ilm. 2025;19(2):536–43.
 37. Hidayaty A., Hayati E. ANALISIS SIDIK JARI KROMATOGRAFI LAPIS TIPIS SECARA KEMOMETRIK DAUN TUMBUHAN ANTING-ANTING (*Acalypha Indica* L.) BERDASARKAN LOKASI TUMBUH. Alchemy J Chem. 2024;12(1):59–67.
 38. Rafi M, Purwakusumah ED, Ridwan T, Barus B, Sutandi A, Darusman LK. Geographical classification of Java Tea (*Orthosiphon stamineus*) from Java Island by FTIR Spectroscopy Combined with Canonical Variate Analysis. J Sains dan Mat. 2015;23(1):25–31.
 39. Burhan A, Hikma N, Khairuddin, Syahrini R, Marwati M. PROFIL KOMPONEN SENYAWA HERBA PEGAGAN (*Centella asiatica* L .) DARI BEBERAPA TEMPAT TUMBUH DI DAERAH SULAWESI SELATAN DENGAN ANALISIS SIDIK JARI MENGGUNAKAN FTIR. J Ilm Farm Farmasyifa. 2022;5(2):203–11.
 40. Burhan A, Syahrir M, Aristianti, Magefirah AU, Nurisyah, Hasniar, et al. PROFILE COMPOUNDS OF CENTELLA ASIATICA L. BASED ON GEOGRAPHIC LOCATION AND VARIATION OF SOLVENTS USING FTIR. Egypt J Chem. 2023;66(6):405–10.
 41. Banon C, Triawan DA, Adfa M, Sihite MSA, Nurwidiyani R, Rahmi W. Classification of Makasar Fruit Extract (*Brucea javanica* L. Merr.) Based on The Level of Ripeness Using a Combination of FTIR and UV-Vis Spectroscopy with Chemometrics. J Kim Sains dan Apl. 2023;26(12):483–8.
 42. Anwar I, Malina R, Ria FF. Acute Toxicity Determination and Compound Changing with Chemometric Procedures from Komba-Komba Leaf (*Chromolaena odorata* L .). J Mandala Pharmacon Indones. 2023;9(2):324–34.
 43. Rafi M, Rismayani W, Sugiarti RM, Syafitri UD, Tri W, Rohaeti E. FTIR-based Fingerprinting Combined with Chemometrics for Discrimination of *Sonchus arvensis* leaf Extracts and Correlation with Their Antioxidant Activity. Indones J Pharm. 2021;32(2):132–40.
 44. Rafid A, Sida NA, Kasmawati H, Anwar I. Potensi Antibakteri *Sansevieria trifasciata* Prain Menggunakan Mikrodilusi dan Analisis Kemometrik. J Penelit Biol. 2024;11(1):78–86.
 45. Umar AH, Syahrini R, Burhan A, Maryam F, Amin A, Marwati, et al. DETERMINASI DAN ANALISIS FINGER PRINT TANAMAN MURBEI (*Morus alba* Lour) SEBAGAI BAHAN BAKU OBAT TRADISIONAL DENGAN METODE SPEKTROSKOPI FT-IR DAN KEMOMETRIK. PHARMACON.

- 2016;5(1):78–90.
46. Hikma N, Burhan A, Megawati, Ulfah N, Awaluddin A. Analisis Profil Metabolit Ekstrak Etanol Daun Temelekar (*Coptosapelta tomentosa* Valetton ex K. Heyne) dengan Metode Spektroskopi FT-IR yang Dikombinasi dengan Kemometrik. *Pharm J Farm Indones*. 2023;20(02):137–40.
 47. Rumoro JD, Sudew S, Siamp JP. ANALISIS TOTAL FENOLIK DAUN GEDI HIJAU (*Abelmoschus manihot* L.) DENGAN MENGGUNAKAN SPEKTROSKOPI FTIR DAN KEMOMETRIK. *PHARMACON*. 2019;8:758–66.
 48. Fangohoy JM, Sudewi S, Yudistira A. PREDIKSI MODEL PENETAPAN KADAR FLAVONOID TOTAL PADA EKSTRAK *Abelmoschus manihot* L. MENGGUNAKAN SPEKTROSKOPI IR YANG DIKOMBINASIKAN DENGAN KEMOMETRIK. *PHARMACON*. 2019;8:480–7.
 49. Indrawati R, Nitte OL, Yuniati Y. Karakterisasi Pektin yang Diekstraksi dari Kulit Pisang Ambon Hijau (*Musa acuminata* Colla) dengan Spektroskopi FT-IR dan Analisis Kemometrik. *ALCHEMY J Penelit Kim*. 2024;20(1):1–11.
 50. Widiyansyah RA, Setyowati E, Khudzaifi M. Analisis Kemometrika Kandungan Fitokimia Dan Aktivitas Antioksidan Ekstrak Bunga Asoka (*Ixora Coccinea* L.). *Innov J Soc Sci Res*. 2025;5(4):9477–92.
 51. Ameliya, Setyowati E, Besan EJ. ANALISIS KEMOMETRIKA KANDUNGAN FITOKIMIA DENGAN AKTIVITAS ANTIACNE EKSTRAK BUAH PARIJOTO (*Medinilla speciosa* Blume). *Nusant Hasana J*. 2025;5(2):282–94.
 52. Bagus IG, Marangyana I, Ugrasena PY, Monika NLGM. Analisis Multi Linear Regression (MLR) pada Fingerprint Kromatografi Andrografolid untuk Memprediksi Efek Anti Kanker. *J Mandala Pharmacon Indones*. 2022;8(1).
 53. Sari HP, Purwanto YA, Budiastira IW. Pendugaan Kandungan Kimia Mangga Gedong Gincu Menggunakan Spektroskopi Inframerah Dekat. *AGRITECH*. 2016;36(3):294–301.
 54. Agustina R, Iswahyudi, Samsul E, Febriani NL, Prabowo WC, Arifuddin M, et al. Aktivitas Hemaglutinasi dan Identifikasi Ekstrak Berbasis Green Solvent dari Akar Tapak Dara (*Vinca rosea*) dan Daun Kadamba (*Mitragyna speciosa* Korth. Havil) Menggunakan FTIR-Kemometrik. *J Sains dan Kesehat*. 2022;4(5):511–22.
 55. Astuti P, Khairan K, Marthoenis M, Hasballah K. Identification of Several Fractions of Patchouli Alcohol from Patchouli Oil (*Pogostemon cablin* Benth) using Combination Method of Infrared Spectroscopy and Principal Component Analysis. *Sains Malaysiana*. 2022;51(10):3203–14.
 56. Septaningsih DA, Darusman LK, Afendi FM, Heryanto R. Liquid Chromatography Mass Spectrometry (LC-MS) Fingerprint Combined with Chemometrics for Identification of Metabolites Content and Biological Activities of *Curcuma aeruginosa*. *Indones J Chem*. 2018;18(1):43–52.
 57. Widyastuti I, Luthfah HZ, Hartono YI, Islamadina R, Adelin, Can T, et al. Aktivitas Antioksidan Temulawak (*Curcuma xanthorrhiza* Roxb.) dan Profil Pengelompokannya dengan Kemometrik. *Indones J Chem Sci*. 2021;02(1):28–41.
 58. Aisyah SI, Rusmiyati H, Sukma D, Damanik R, Nurcholis W. Analisis Komparatif Kandungan Metabolit pada Daun Mutan Tanaman Torbangun (*Plectranthus amboinicus* (Lour.) Spreng.). *J Ilmu dan Teknol Pertan*. 2020;4(1):10–6.
 59. Warongan MN, Sudewi S, Yudistira A. ANALISIS FINGERPRINT DAUN GEDI HIJAU (*Abelmoschus manihot* L.) UNTUK MEMREDIKSI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN MENGGUNAKAN KOMBINASI SPEKTROSKOPI IR DENGAN PARTIAL LEAST SQUARE REGRESSION. *PHARMACON*. 2017;6(4):157–64.
 60. Ruth SM Van, Silvis ICJ, Alewijn M, Liu N, Jansen M, Luning PA. No more nutmegging with nutmeg: Analytical fingerprints for distinction of quality from low-grade nutmeg products. *Food Control*. 2019;98(October 2018):439–48.
 61. Abdi H, Williams LJ. Partial least squares methods: partial least squares correlation and partial least square regression. *Methods Mol Biol*. 2013;930:549–79.
 62. Artigue H, Smith G. The principal problem with principal components regression The principal problem with principal components regression. *Cogent Math Stat*. 2019;6(1).
 63. Harnly J. Botanical Authentication Using One-Class Modeling. *J AOAC Int*. 2023 Jul;106(4):1077–86.