



KOVALEN: Jurnal Riset Kimia

<https://bestjournal.untad.ac.id/index.php/kovalen>



Klasifikasi dan Autentifikasi Tanaman Seurapoh (*Chromolaena odorata* Linn) Menggunakan Metode Kombinasi Spektroskopi Inframerah dan Kemometrik

[Classification and Authentication of Seurapoh Plant (*Chromolaena odorata* Linn) Using a Combination of Infrared Spectroscopy and Chemometric Methods]

Taufiq Karma[✉], Pasyamei Rembune Kala, Shofi, Zafirah

Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan, Universitas Abulyatama, Jl. Blangbintang Lama No.KM, RW.5, Lampoh Keude, Kec. Kuta Baro, Kabupaten Aceh Besar, Aceh

Abstract. This study classifies the Seurapoh plant (*Chromolaena odorata* Linn) collected from various locations across Aceh Province. The analysis aims to determine the influence of geographic differences on the origin of Seurapoh plants by performing classification and authentication. Seurapoh leaf samples in this study were obtained from several locations, including Aceh Besar, Sabang, Southwest Aceh, South Aceh, Aceh Jaya, Bireun, Bener Meriah, and Central Aceh. Classification of Seurapoh leaf extracts was carried out using Principal Component Analysis (PCA), while authentication was conducted using Linear Discriminant Analysis (LDA). The PCA score plot analysis results indicate that it can explain a total data variance of 62%. Based on the PCA score plot, samples generally form three distinct groups: Group 1 consists of samples from the highland region of Gayo, specifically Central Aceh (TA) and Bener Meriah (BM); Group 2 consists of samples from the coastal areas of Aceh, namely Southwest Aceh (ABD), South Aceh (AS), Aceh Jaya (AJ), and Bireun (Br); and Group 3 comprises samples from geothermal manifestation areas of Seulawah Agam and Jaboi. The classifications derived from PCA analysis were subsequently authenticated using LDA. The LDA analysis results indicate that the LDA model, based on cross-validation, accurately predicts the origin locations of Seurapoh leaf samples with a 100% accuracy rate.

Keywords: *Chromolaena odorata* Linn, FTIR, PCA, LDA, chemometric

Abstrak. Pada penelitian ini dilakukan klasifikasi tanaman seurapoh (*Chromolaena odorata* Linn) yang diperoleh dari beberapa lokasi yang berbeda di Provinsi Aceh. Analisis ini bertujuan mengetahui pengaruh perbedaan kondisi geografis asal tanaman seurapoh dengan melakukan klasifikasi dan autentifikasi. Sampel daun seurapoh pada penelitian ini di peroleh dari beberapa lokasi, yaitu Aceh Besar, Sabang, Aceh Baray daya, Aceh Selatan, Aceh Jaya, Bireun, Bener Meriah dan Aceh Tengah. Klasifikasi ekstrak daun seurapoh dilakukan dengan menggunakan *Principal Component Analysis* (PCA) dan autentifikasi dilakukan menggunakan teknik LDA. Hasil dari analisa penunjukkan skor plot PCA mampu menjelaskan varian data total sebesar 72%. Berdasarkan skor plot PCA juga ditunjukkan bahwa sampel-sampel membentuk 3 kelompok yaitu kelompok 1 terdiri dari sampel yang berasal dari Kawasan dataran tinggi gayo yaitu Aceh Tengah (TA) dan Bener Meriah (BM). Kelompok 2 terbentuk dari sampel-sampel yang berasal dari Kawasan pesisir Aceh yaitu Abdiya (ABD), Aceh Selatan (AS), Aceh Jaya (AJ) dan Bireun (Br). Sedangkan kelompok 3 terdiri dari sampel yang berasal dari Kawasan manifestasi geothermal Seulawah Agam dan manifestasi geothermal jaboi. Hasil klasifikasi yang diperoleh dari analisa PCA selanjutnya di autentifikasi dengan menggunakan LDA, hasil analisa LDA menunjukkan bahwa model LDA dari hasil validasi silang dapat memprediksi lokasi asal sampel daun seurapoh dengan tepat dengan tingkat akurasi 100%.

Kata kunci: *Chromolaena odorata* Linn, FTIR, PCA, LDA, kemometrik.

Diterima: 27 Oktober 2024, Disetujui: 8 Januari 2025

Sitasi: Karma, T., Kala, R.P., Shofi., dan Zafirah. (2024). Klasifikasi dan Autentifikasi Tanaman Seurapoh (*Chromolaena odorata* Linn) Menggunakan Metode Kombinasi Spektroskopi Inframerah dan Kemometrik. *KOVALEN: Jurnal Riset Kimia*, 10(3): 251-260.

✉ Corresponding author
E-mail: taufiqkarma94@gmail.com

<https://doi.org/10.22487/kovalen.2024.v10.i3.17460>



2477-5398/ © 2024 Karma et al.
This is an open-access article under the CC BY-SA license.

LATAR BELAKANG

Aceh merupakan salah satu Provinsi di Indonesia yang memiliki kondisi geografis yang cukup beragam, selain memiliki kawasan pesisir, Aceh juga di kenal dengan adanya kawasan manifestasi geothermal dan dataran tinggi Gayo. Seperti daerah lain di Indonesia, Aceh juga memiliki biodiversitas yang beragam, salah satu tanaman yang familiar dan telah sejak lama dimanfaatkan sebagai obat tradisional di kalangan masyarakat Aceh serta dapat tumbuh di hampir banyak lokasi adalah tanaman Suerapoh (*Chromolaena odorata* Linn) (Abubakar et al., 2021)

Tanaman Suerapoh dilaporkan bahwa tanaman seurapoh merupakan tanaman yang kaya akan kandungan kimia yang memiliki biokativitas yang berpotensi sebagai bahan baku obat (Olawale et al., 2022). Oleh karena itu, tanaman seurapoh memiliki potensi yang baik sebagai bahan baku obat.

Bioaktivitas yang dimiliki oleh tanaman Suerapoh tidak terlepas peran dari metabolit sekunder yang terkandung di dalamnya (Dong et al., 2011), metabolit sekunder merupakan hasil interaksi antara tumbuhan dengan lingkungan, korelasi antara tumbuhan dan lingkungan lebih berpengaruh terhadap kandungan metabolit sekunder dari pada metabolit primer tumbuhan (W. Liu et al., 2018). Jenis tanaman dari spesies tanaman yang sama tumbuh di bawah kondisi lingkungan yang berbeda menunjukkan perbedaan yang signifikan dalam produksi dan akumulasi metabolit sekunder (Sampaio et al., 2016).

Selain itu profil metabolisme sekarang menjadi alat penting dalam memahami respons sistematis suatu organisme terhadap perubahan kondisi lingkungan (Weston et al., 2015). Inilah yang menjadi landasan penelitian

ini dilakukan, dengan tujuan untuk melihat perbedaan tanaman seurapoh yang tumbuh di beberapa lokasi untuk mengetahui sejauh mana faktor lingkungan mempengaruhi tanaman seurapoh.

Tinjauan faktor lingkungan ini perlu dilakukan karena faktor lingkungan seperti biotik dan abiotik adalah faktor penting dalam biosintesis metabolit sekunder, faktor stress abiotik berperan dalam penurunan produksi metabolit sekunder tanaman obat (Li et al., 2020), selama pertumbuhan dan perkembangan tanaman berinteraksi dengan lingkungan abiotik sekitarnya seperti air, tanah, cahaya, suhu dan bahan kimia (Verma & Shukla, 2015), oleh karena itu jika faktor abiotik ini mengalami kondisi tertentu seperti kekeringan atau banjir, cahaya dan suhu ekstrim serta keberadaan unsur kimia beracun didalam tanah akan memicu terjadinya stress pada tanaman obat, hal ini lah yang akan memicu terjadinya variasi dalam proses biosintesis metabolit sekunder tanaman obat (Li et al., 2020).

Untuk mencapai tujuan penelitian, Spektroskopi FTIR berpotensi sebagai metode analisis untuk mengidentifikasi tumbuhan yang berasal dari lingkungan yang berbeda, hal ini berdasarkan pada bukti bahwa spektrum IR merupakan suatu pola *fingerprint* sehingga spektrum yang dihasilkan merupakan ciri dari komposisinya (Sanchez et al., 2018).

Teknik klasifikasi dilakukan dengan menggunakan teknik *Principal Component Analysis* (PCA) (Hayati et al., 2024) sedangkan Teknik determinasi autentifikasi dan pemodelan prediksi lokasi asal tanaman biduri dilakukan dengan menggunakan teknik *Linear Discriminant Analysis* (LDA) (Kalogiouri et al., 2020) dan *support-vector machine* (Wei et al.,

2020). Kedua teknik ini masuk dalam pengenalan pola terawasi, yang dapat digunakan sebagai alat untuk memprediksi sampel baru berdasarkan data awal/*data base* yang telah ada sebelumnya.

Beberapa penelitian sebelumnya telah melaporkan penggunaan spektroskopi Inframerah yang di kombinasikan dengan kemometrik untuk identifikasi dan pengendalian mutu tanaman obat, seperti daun kitolot (*Isotoma longiflora*) (Imelda et al., 2024), minyak kelapa (Hayati et al., 2024), daun biduri (Zahara et al., 2023), teh hijau (Y. Liu et al., 2022), laban (Azhari et al., 2021), calotropis gigantea (Karma et al., 2021), dan jamur obat (Wang et al., 2019).

Penelitian yang mengkombinasikan FTIR - Kemometrik dengan menggunakan sampel tanaman seurapoh belum pernah dilakukan, sehingga peneliti merasa sangat perlu melakukan penelitian ini untuk memperkaya profil data base tanaman obat khususnya di Provinsi Aceh yang dapat digunakan dalam *quality control* bahan baku obat di masa depan.

Pada penelitian ini akan dilakukan identifikasi tanaman Seurapoh dari 8 lokasi di Provinsi Aceh untuk melihat apakah perbedaan kondisi geografis asal akan mempengaruhi tanaman Seurapoh berdasarkan data spektrum Infra merah.

METODE PENELITIAN

Bahan dan Peralatan

Daun tanaman Seurapoh diperoleh dari beberapa kabupaten di Provinsi Aceh, etanol 70%, dan aquades. Peralatan yang digunakan ialah FTIR (*Nicolet iS 10 FT-IR Spectrometer*) dan rotary vacuum evaporator.

Design Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk menarik kesimpulan tentang pengaruh perbedaan geografis terhadap kandungan kimia tanaman Seurapoh berdasarkan profil spektrum inframerahnya. Sampel daun tanaman Seurapoh yang dianalisa berasal dari beberapa kabupaten di Provinsi Aceh. Kemudian masing-masing sampel di akuisisi spektrum inframerahnya dengan menggunakan instrumen FTIR pada panjang gelombang 4000 – 400 cm^{-1} , spektrum yang diperoleh selanjutnya dianalisa komometrik PCA, LDA dan SVM dengan menggunakan perangkat lunak aplikasi *the Unscrambler 10.4* (Omar et al., 2019).

Preparasi Sampel

Sampel pada penelitian ini adalah daun tumbuhan Seurapoh (*Chromolaena odorata Linn*) yang diperoleh dari 8 lokasi di Provinsi Aceh.

Tabel 1. Sampel tumbuhan Seurapoh

No	Lokasi	Kode Sampel	Keterangan
1	Aceh Besar	AB1	Kawasan Manifestasi Geotermal
		AB2	
		AB3	
2	Aceh Jaya	AJ1	Wilayah Pesisir
		AJ2	
		AJ3	
3	Bireun	B1	Wilayah Pesisir
		B2	
		B3	
4	Aceh Tengah	AT1	Dataran Tinggi
		AT2	
		AT3	
5	Sabang	Sb1	Kawasan Geothermal jaboi
		Sb2	
		Sb3	
6	Bener Meriah	BM1	Dataran Tinggi
		BM2	
		BM3	
7	Abdya	ABD1	Wilayah Pesisir
		ABD2	
		ABD3	
8	Aceh Selatan	S1	Wilayah Pesisir
		S2	
		S3	

Sampel yang diperoleh selanjutnya di cuci dan di keringanginkan selama 10 hari, setelah sampel kering selanjutnya dihaluskan sehingga di peroleh simplisia kering daun *Chromolaena odorata* Linn. Simplia daun *Chromolaena odorata* Linn selanjutnya diekstrak menggunakan teknik maserasi dengan pelarut etanol 70%. Setelah 48 jam dilakukan penyaringan untuk memisahkan filtrak dan residu, filtrat selanjut diuapkan untuk mendapatkan ekstrak pekat dengan menggunakan rotary vacum evaporator.

Akuisisi Spektrum Inframerah

Ekstrak yang diperoleh dari tahap sebelumnya kemudian diakuisisi spektrum inframerahnya menggunakan instrumen FTIR (*Nicolet iS 10 FT-IR Spectrometer*) dengan resolusi 2 Cm^{-1} , sampel diukur pada panjang gelombang $4000 - 400\text{ Cm}^{-1}$. total spektrum FTIR dari ke 8 lokasi adalah 24 spektrum. Data sepketrum yang diperoleh kemudian disimpan dalam format excel (xlsx) untuk di analisis lebih lanjut (Cebi et al., 2021; Karma et al., 2021; Khanban et al., 2022; Sufriadi et al., 2023; Tan et al., 2021).

Akuisisi Spektrum Inframerah

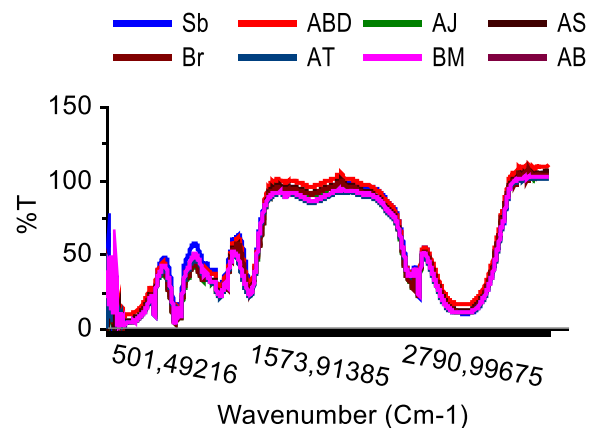
Tahap awal analisa kemometrik adalah dengan perlakuan pendahuluan yaitu preprocessing data yang dilakukan pada setiap sapektrum FTIR dengan metode *Standart Normal Varian* (SNV). pembuatan model *discriminant* untuk mengidentifikasi lokasi asal tanaman Suerapoh dengan menggunakan data pada bilangan gelombang $4000-400\text{ cm}^{-1}$. Metode analisis kemometri yang digunakan yaitu *Principal Component Analysis* (PCA), dan *Linier Discriminant Analysis* (LDA), analisis dilakukan dengan menggunakan bantuan aplikasi *the Unscrambler 10.4* (Adi et al.,

2020; Akbar et al., 2021; Arifah et al., 2022; Nadia et al., 2019)

HASIL DAN PEMBAHASAN

Spektrum FTIR Daun Seurapoh Seurapoh

Identifikasi menggunakan spektroskopi inframerah didasarkan pada fibrasi molekul dengan frekuensi geteran spesifik pada gugus fungsi tertentu (Mellado-Mojica et al., 2016). Sampel daun tumbuhan Seurapoh (*Chromolaena odorata* Linn) yang di ukur dengan Instrumen FTIR adalah sampel sampel daun tumbuhan Seurapoh yang berasal dari beberapa lokasi, akuisisi spektrum inframerah dilakukan pada panjang gelombang $4000\text{ cm}^{-1} - 500\text{ cm}^{-1}$ (Christou et al., 2018). Spektrum FTIR daun tumbuhan Seurapoh ditunjukkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Spektrum FTIR daun Seurapoh

Berdasarkan Gambar 1. dapat dilihat spektrum FTIR daun yang diperoleh dari berbagai lokasi, secara umum semua sampel daun Seurapoh menunjukkan pola absorpsi spektrum yang sama. Pola spektrum ini menunjukkan bahwa semua sampel Seurapoh memiliki gugus fungsi yang sama pula. Dari spektrum tersebut dapat dilihat bahwa adanya absorpsi pada bilangan gelombang $3000 - 3700\text{ cm}^{-1}$ menandakan adanya gugus fungsi O-H dan N-H dari polisakarida dan protein

(Christou *et al.*, 2018), selanjutnya pita pada 2927 dan 2935 cm^{-1} menunjukkan regangan asimetris atau simetris gugus fungsi CH_2 , pita serapan pada bilangan gelombang 1640-1700 cm^{-1} dihasilkan dari vibrasi regangan atau tekukan ikatan yang mungkin diturunkan dari protein dengan gugus fungsi C-H alifatik dan gugus fungsi C=O. sedangkan gugus fungsi C=C alkena berada pada bilangan gelombang 1680-1600 cm^{-1} , C=C aromatic pada bilangan gelombang 1600-1475 cm^{-1} , gugus $-\text{CH}_3$ pada bilangan gelombang 1400-1325 cm^{-1} , dan gugus fungsi C-O pada bilangan gelombang 1100-1000 cm^{-1} (Dogan *et al.*, 2007; Rohman *et al.*, 2011; Rohman & Man, 2010).

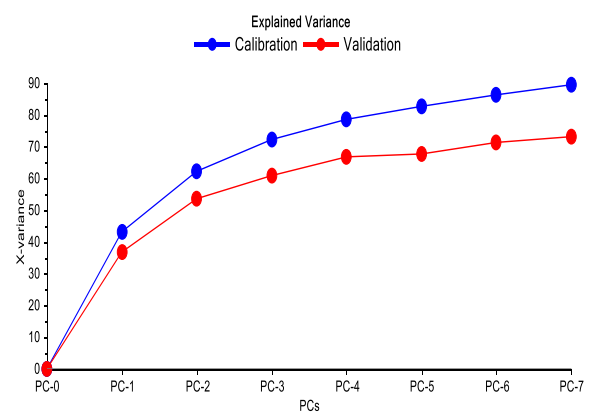
Hasil Analisa Komometrik

Pada analisa kemometri, terlebih dahulu data spektrum FTIR di berikan tindakan pendahuluan atau preprocessing data, pada penelitian ini data spektrum FTIR ekstrak etanol daun *Chromolaena odorata* Linn diberikan perlakuan pendahuluan dengan menggunakan metode *Standart Normal Varian* (SNV). Metode ini digunakan karena dapat mengurangi efek hamburan cahaya yang banyak terjadi pada pengukuran FTIR akibat dari ukuran partikel yang tidak sama pada sampel (Grisanti *et al.*, 2018).

Klasterisasi daun *Seurapoh* menggunakan PCA

Tujuan dari penggunaan teknik PCA adalah untuk mengetahui hubungan antar sampel daun *Seurapoh* yang diambil dari berbagai lokasi dengan cara mengklasifikasikan sampel. PCA merupakan teknik pengelompokan pola tak terawasi yang dapat digunakan untuk mereduksi data dan menggali informasi dengan tujuan menemukan factor yang dapat menjelaskan suatu kencerungan yang ada didalam suatu set data (Gad *et al.*,

2013). Metode PCA dapat digunakan untuk pembuatan model diskriminan satu tanaman yang berkerabat dekat, dalam penelitian ini teknik PCA digunakan untuk mengklasifikasikan tanaman *Seurapoh* untuk melihat perbedaan ekstrak daun *Seurapoh* yang berasal lokasi dengan kondisi geografis yang berbeda. Berdasarkan hasil analisa PCA menggunakan aplikasi The Unscreambler 10.4, dapat dilihat dari Gambar 3 yang menunjukkan total varian PC-1 dan PC-2 adalah sebesar 89%.

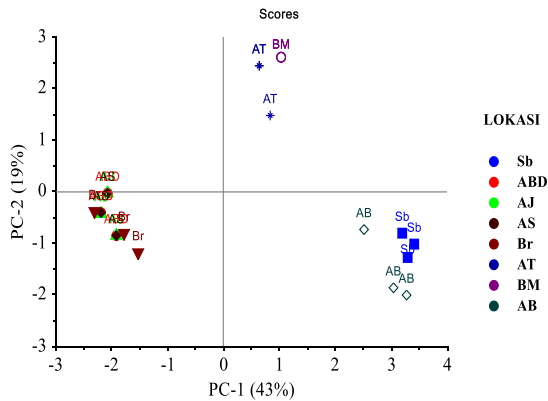


Gambar 2. Hasil Varian data yang mampu dijelaskan melalui PCA

Gambar 2 menyajikan hasil dekomposisi data spektral melalui PCA, sumbu Y menunjukkan nomor *Prncipal Component* (PC), sedangkan sumbu X menunjukkan persentase varians yang dijelaskan oleh PC tersebut. Berdasarkan Gambar.2 ditentukan jumlah principal component (PC) adalah 3 *principal component* (PC). Gambar 3 menunjukkan skor plot PCA dari 3 komponen utama yang terbentuk.

Gambar 3 menunjukkan bahwa sampel yang berasal dari 8 lokasi dapat di kelompokkan kedalam 3 kelompok, kelompok 1 terdiri dari sampel yang berasal dari Kawasan dataran tinggi gayo yaitu Aceh Tengah (TA) dan Bener Meriah (BM). Kelompok 2 terbentuk

dari sampel-sampel yang berasal dari Kawasan pesisir Aceh yaitu Abdiya (ABD), Aceh Selatan (AS), Aceh jaya (AJ) dan Bireun (Br). Sedangkan kelompok 3 terdiri dari sampel yang berasal dari Kawasan manifestasi geothermal Seulawah Agam dan manifestasi geothermal jaboii.



Gambar 3. Skor plot PCA

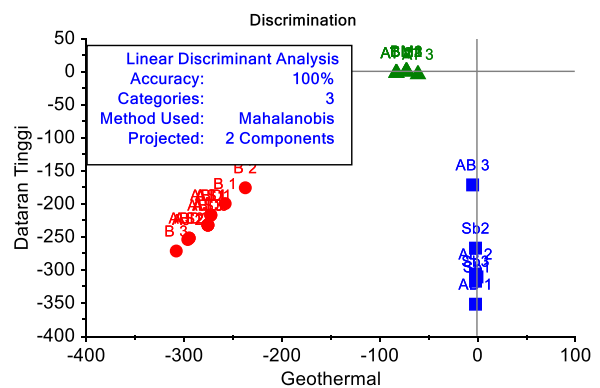
Pengelompokan sampel sebagaimana hasil PCA ini dapat dijelaskan karena Kandungan metabolit sekunder suatu tanaman sangat dipengaruhi oleh factor lingkungan, sintesis metbolit sekunder tanaman dipengaruhi oleh respon tumbuhan terhadap lingkungan (Gargallo-Garriga et al., 2014; Sampaio et al., 2016), tekanan abiotic seperti pengaruh cahaya, suhu, kelembaban, ketersediaan air, nutrisi dan salinitas dalam tanah telah terbukti secara signifikan mempengaruhi kadungan metabolit sekunder dalam tanaman (Khan et al., 2016; Nirit et al., 2009; Sampaio et al., 2016).

Kombinasi FTIR-Kemometrik telah digunakan untuk identifikasi dan autentifikasi berbagai sampel, diantaranya seperti yang dilakukan oleh Sanchez et al., (2018), mengidentifikasi perbedaan daun kopi yang diperoleh dari berbagai tempat dengan kondisi iklim yang berbeda perbedasarkan pada perbedaan spektrum FTIR yang dianalisis

dengan metode PCA, hasilnya menunjukkan bahwa analisis spektrum FTIR dengan PCA berhasil membedakan daun kopi yang diambil dari tempat dengan kondisi iklim yang berbeda. Dalam penelitian yang lain spektrum FTIR yang dianalisa dengan metode statistic multivariat PCA dan analisis kluster dapat digunakan untuk untuk membedakan tanaman *Fagus sylvatica L* dari habitat pertumbuhan yang berbeda (Rana et al., 2008), dalam penelitian lain disebutkan bahwa Penelitian ini menunjukkan bahwa spektroskopi FTIR yang dikombinasikan dengan metode kemometrik cocok untuk membedakan asal geografis *G. rigescens* yang berbeda (Zhao et al., 2015).

Autentifikasi daun *Seurapoh* menggunakan Linier Diskriminan Analysis (LDA)

Berdasarkan hasil klasifikasi lokasi asal daun kSeurapoh yang dilakukan dengan PCA, selanjutnya dilakukan autentifikasi untuk melihat kekhasan setiap kelompok sampel dengan menggunakan LDA. Hasil analisa LDA ditunjukkan pada Gambar 4.



Gambar 4. Skorplot LDA

Hasil LDA pada Gambar 4 menunjukkan bahwa model prediksi LDA menunjukkan tingkat akurasi 100%, model LDA berdasarkan hasil validasi silang berhasil memprediksi kelompok asal sampel daun seurapoh dengan

benar. Tabel 2 menunjukkan *confusion matrix* dari skor plot LDA diatas.

Tabel 2. *Confusion matrix*

	Actual	Geo thermal	Pesisir	Dataran Tinggi
Predicted		1	2	3
Geo thermal	1	6	0	0
Pesisir	2	0	12	0
Dataran Tinggi	3	0	0	6

Berdasarkan table *confusion matrix* diatas, dapat dilihat bahwa autentifikasi dengan menggunakan LDA dapat dilakukan dengan sangat baik, hal ini ditunjukkan dengan tidak adanya sampel yang salah diprediksi kelompoknya, model LDA yang digunakan dapat menunjukkan tingkat akurasi yang cukup baik. Tabel 3 berikut menunjukkan hasil perhitungan LDA yang memberikan pengaruh terhadap membentuk table *confussion matrik* diatas.

Dalam memahami table diatas, perlu diingat bahwa pada proses pembuatan model LDA, digunakan sampel yang sama baik dalam pembentukan (pembuatan) model maupun dalam pengujian (validasi silang), table diatas menunjukkan tingkat kemiripan sampel dengan data base LDA, semakin nilai hasil perhitungan mendekati nilai 0 (nol) maka sampel tersebut semakin mirip, berdasarkan tingkat kemiripan inilah kemudian dapat ditentukan sampel pengujian masuk kedalam kelompok data base LDA yang mana.

Hasil penelitian yang diperoleh menunjukkan bahwa model LDA efektif dalam autentifikasi dan berhasil memprediksi kelompok sampel daun seurapoh, hasil penelitian ini juga sejalan dengan penelitian lain yang menggunakan metode LDA untuk analisa keaslian susu kuda, dimana dengan

menggunakan LDA dapat secara efektif membedakan beberapa sampel susu kuda (Arifah et al., 2022), dalam penelitian yang lain teknik LDA dilaporkan berhasil dalam memprediksi lokasi asal minyak zaitun (Laouni et al., 2023).

Tabel 3. Hasil prediksi model LDA

Sam pel	Model LDA			Predicted
	Geothermal	Pesisir	Dataran Tinggi	
Sb1	-0,3260746	-1195,624	-311,2393	Geothermal
Sb2	-1,095699	-1235,411	-267,8294	Geothermal
Sb3	-1,513228	-1301,281	-316,4568	Geothermal
ABD1	-271,3326	-0,829568	-217,8815	Pesisir
ABD2	-293,5427	-0,840032	-251,88	Pesisir
ABD3	-275,5172	-2,590028	-231,6509	Pesisir
AJ 1	-271,3326	-0,829568	-217,8815	Pesisir
AJ 2	-295,0703	-1,059788	-253,6911	Pesisir
AJ 3	-275,5174	-2,590009	-231,6512	Pesisir
AS1	-271,3326	-0,829568	-217,8815	Pesisir
AS2	-293,5426	-0,840027	-251,8799	Pesisir
AS3	-275,5173	-2,590015	-231,6511	Pesisir
B 1	-256,6988	-1,119407	-199,9905	Pesisir
B 2	-237,2969	-5,044211	-176,5127	Pesisir
B 3	-307,4271	-2,837782	-271,8556	Pesisir
AT 1	-82,02133	-761,6342	-1,666665	Dataran Tinggi
AT 2	-82,02135	-761,6342	-1,666668	Dataran Tinggi
AT 3	-60,5477	-659,4626	-4,166668	Dataran Tinggi
BM1	-71,88571	-946,1838	-0,8333332	Dataran Tinggi
BM2	-71,88569	-946,1837	-0,8333343	Dataran Tinggi
BM3	-71,8857	-946,1837	-0,8333325	Dataran Tinggi
AB 1	-1,781204	-1063,111	-353,2062	Geothermal
AB 2	-1,54971	-984,9554	-306,248	Geothermal
AB 3	-3,734085	-942,5757	-171,6205	Geothermal

KESIMPULAN

Teknik PCA dapat mengklasifikasi sampel daun seurapoh berdasarkan spektrum FTIR dengan cukup baik. Autentifikasi ekstrak daun seurapoh dengan teknik analisa LDA menunjukkan bahwa model LDA dapat memprediksi lokasi asal sampel daun seurapoh dengan tepat dengan tingkat akurasi 100%.

Dari hasil penelitian ini diketahui bahwa kombinasi kemometrik - FTIR dapat dijadikan sebagai metode untuk analisa lokasi asal tanaman surapoh.

UCAPAN TERIMAKASIH

Peneliti mengucapkan terima kasih kepada Kementerian Pendidikan, Kebudayaan, Riset dan Teknologi, Direktorat Akademik Pendidikan Tinggi Vokasi, Direktorat Jenderal Pendidikan Vokasi yang telah membiayai penelitian melalui skema Penelitian Dosen Pemula (PDP) tahun 2024.

DAFTAR PUSTAKA

- Abubakar, A., Yusuf, H., Syukri, M., Nasution, R., Karma, T., Munawar, A. A., & Idroes, R. (2021). Chemometric classification of geothermal and non-geothermal ethanol leaf extract of seurapoh (*Chromolaena odorata* Linn) using infrared spectroscopy. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, *667*(1), 12070.
- Adi, D. S., Hwang, S. W., Pramasari, D. A., Amin, Y., Cipta, H., Damayanti, R., Dwianto, W., & Sugiyama, J. (2020). Anatomical properties and near infrared spectra characteristics of four shorea species from Indonesia. *HAYATI Journal of Biosciences*, *27*(3), 247–257. <https://doi.org/10.4308/hjb.27.3.247>
- Akbar, Z., Idroes, R., Ginting, B., Karma, T., Rahimah, S., Helwani, Z., & Yusuf, M. (2021). Identification of Gayo arabic coffee beans and powder using the FTIR-PCA combination method. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, *1087*(1), 12059.
- Arifah, M. F., Nisa, K., Windarsih, A., & Rohman, A. (2022). The application of FTIR spectroscopy and chemometrics for the authentication analysis of horse milk. *International Journal of Food Science*, *2022*.
- Azhari, S., Ningsih, D. S., Nuraskin, C. A., Karma, T., Idroes, G. M., Suhendra, R., Tallei, T. E., Rahimah, S., & Idroes, R. (2021). Identification of Geothermal and Non-Geothermal Laban Plant (*Vitex Pinnata*) With a Combination of Infrared Spectroscopy–Principal Component Analysis Methods. *1st Aceh International Dental Meeting (AIDEM 2019), Oral Health International Conference On Art, Nature And Material Science Development 2019*, 85–89.
- Cebi, N., Arici, M., & Sagdic, O. (2021). The famous Turkish rose essential oil: Characterization and authenticity monitoring by FTIR, Raman and GC–MS techniques combined with chemometrics. *Food Chemistry*, *354*, 129495. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129495>
- Christou, C., Agapiou, A., & Kokkinofa, R. (2018). Use of FTIR spectroscopy and chemometrics for the classification of carobs origin. *Journal of Advanced Research*, *10*, 1–8. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jar.2017.12.001>
- Dogan, A., Siyakus, G., & Severcan, F. (2007). FTIR spectroscopic characterization of irradiated hazelnut (*Corylus avellana* L.). *Food Chemistry*, *100*(3), 1106–1114.
- Dong, J., Ma, X., Wei, Q., Peng, S., & Zhang, S. (2011). Effects of growing location on the contents of secondary metabolites in the leaves of four selected superior clones of *Eucommia ulmoides*. *Industrial Crops and Products*, *34*(3), 1607–1614. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2011.06.007>
- Gad, H. A., El-Ahmady, S. H., Abou-Shoer, M. I., & Al-Azizi, M. M. (2013). Application of Chemometrics in Authentication of Herbal Medicines: A Review. *Phytochemical Analysis*, *24*(1), 1–24. <https://doi.org/10.1002/pca.2378>
- Gargallo-Garriga, A., Sardans, J., Pérez-Trujillo, M., Rivas-Ubach, A., Oravec, M., Vecerova, K., Urban, O., Jentsch, A., Kreyling, J., Beierkuhnlein, C., Parella, T., & Peñuelas, J. (2014). Opposite metabolic responses of shoots and roots to drought. *Scientific Reports*, *4*, 6829. <https://doi.org/10.1038/srep06829>
- Grasel, F. dos S., Ferrão, M. F., & Wolf, C. R. (2016). Development of methodology for identification the nature of the polyphenolic extracts by FTIR associated with multivariate analysis. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, *153*, 94–101. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2015.08.020>
- Grisanti, E., Totska, M., Huber, S., Krick

- Calderon, C., Hohmann, M., Lingenfelter, D., & Otto, M. (2018). Dynamic localized SNV, Peak SNV, and partial peak SNV: Novel standardization methods for preprocessing of spectroscopic data used in predictive modeling. *Journal of Spectroscopy*, 2018(1), 5037572.
- Hayati, R., Munawar, A. A., Lukitaningsih, E., Earlia, N., Karma, T., & Idroes, R. (2024). Combination of PCA with LDA and SVM classifiers: A model for determining the geographical origin of coconut in the coastal plantation, Aceh Province, Indonesia. *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 9, 100552. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.csee.2023.100552>
- Imelda, E., Khairan, K., Lubis, R. R., Karma, T., & Idroes, R. (2024). Impact of environmental and geographical position on the chemometric classification of ethanol extracts from *Isotoma longiflora* leaves. *Global Journal of Environmental Science and Management*, 10(1), 155–168.
- Kalogiouri, N. P., Aalizadeh, R., Dasenaki, M. E., & Thomaidis, N. S. (2020). Application of High Resolution Mass Spectrometric methods coupled with chemometric techniques in olive oil authenticity studies-A review. *Analytica Chimica Acta*, 1134, 150–173.
- Karma, T., Muslem, Idroes, G. M., Athaillah, Suhendra, R., Suhartono, E., Helwani, Z., Idroes, R., Khairan, Azhari, S., & Ningsih, D. S. (2021). Identification of Giant Calotrope (*Calotropis Gigantea*) in Alue Naga and Ulee Lheu Coast Using Combination Method of Infrared Spectroscopy and Principal Component Analysis. *Proceedings of the 1st Aceh International Dental Meeting*, 106–110. <https://doi.org/https://doi.org/10.2991/ahsr.k.210201.024>
- Khan, M. N., Mobin, M., Abbas, Z. K., & AlMutairi, K. A. (2016). Impact of varying elevations on growth and activities of antioxidant enzymes of some medicinal plants of Saudi Arabia. *Acta Ecologica Sinica*, 36(3), 141–148.
- Khanban, F., Bagheri Garmarudi, A., Parastar, H., & Toth, G. (2022). Evaluation of FT-IR spectroscopy combined with SIMCA and PLS-DA for detection of adulterants in pistachio butter. *Infrared Physics & Technology*, 127, 104369. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.infrared.2022.104369>
- Laouni, A., El Orche, A., Elhamdaoui, O., Karrassi, K., El Karbane, M., & Bouatia, M. (2023). A Preliminary Study on the Potential of FT-IR Spectroscopy and Chemometrics for Tracing the Geographical Origin of Moroccan Virgin Olive Oils. *Journal of AOAC INTERNATIONAL*, 106(3), 804–812. <https://doi.org/10.1093/jaoacint/qsac136>
- Li, Y., Kong, D., Fu, Y., Sussman, M. R., & Wu, H. (2020). The effect of developmental and environmental factors on secondary metabolites in medicinal plants. *Plant Physiology and Biochemistry*, 148, 80–89.
- Liu, W., Wang, D., Hou, X., Yang, Y., Xue, X., Jia, Q., Zhang, L., Zhao, W., & Yin, D. (2018). Effects of Growing Location on the Contents of Main Active Components and Antioxidant Activity of *Dasiphora fruticosa* (L.) Rydb. by Chemometric Methods. *Chemistry and Biodiversity*, 15(7). <https://doi.org/10.1002/cbdv.201800114>
- Liu, Y., Huang, J., Li, M., Chen, Y., Cui, Q., Lu, C., Wang, Y., Li, L., Xu, Z., Zhong, Y., & Ning, J. (2022). Rapid identification of the green tea geographical origin and processing month based on near-infrared hyperspectral imaging combined with chemometrics. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 267, 120537. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120537>
- Mellado-Mojica, E., Seeram, N. P., & López, M. G. (2016). Comparative analysis of maple syrups and natural sweeteners: Carbohydrates composition and classification (differentiation) by HPAEC-PAD and FTIR spectroscopy-chemometrics. *Journal of Food Composition and Analysis*, 52, 1–8. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jfca.2016.07.001>
- Nadia, Y., Ramli, M., Muslem, M., Japnur, A., Rusyana, A., Idroes, G., Suhendra, R., Muhammad, Sasmita, N., Tallei, T., & Idroes, R. (2019). Simple combination method of FTIR spectroscopy and chemometrics for qualitative identification of cattle bones. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 364, 12040. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/364/1/012040>
- Nirit, B., Kravchik, M., & Dudai, N. (2009). Salinity-induced changes in essential oil, pigments and salts accumulation in sweet

- basil (*Ocimum basilicum*) in relation to alterations of morphological development. *Annals of Applied Biology*, 156, 167–177. <https://doi.org/10.1111/j.1744-7348.2009.00376.x>
- Olawale, F., Olofinisan, K., & Iwaloye, O. (2022). Biological activities of *Chromolaena odorata*: A mechanistic review. *South African Journal of Botany*, 144, 44–57.
- Omar, J., Slowikowski, B., & Boix, A. (2019). Chemometric approach for discriminating tobacco trademarks by near infrared spectroscopy. *Forensic Science International*, 294, 15–20. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2018.10.016>
- Rana, R., Müller, G., Naumann, A., & Polle, A. (2008). *FTIR spectroscopy in combination with principal component analysis or cluster analysis as a tool to distinguish beech (Fagus sylvatica L.) trees grown at different sites*.
- Rohman, A., Erwanto, Y., & Man, Y. B. C. (2011). Analysis of pork adulteration in beef meatball using Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. *Meat Science*, 88(1), 91–95.
- Rohman, A., & Man, Y. B. C. (2010). Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for analysis of extra virgin olive oil adulterated with palm oil. *Food Research International*, 43(3), 886–892.
- Sampaio, B. L., Edrada-Ebel, R., & Da Costa, F. B. (2016). Effect of the environment on the secondary metabolic profile of *Tithonia diversifolia*: A model for environmental metabolomics of plants. *Scientific Reports*, 6(July), 1–11. <https://doi.org/10.1038/srep29265>
- Sanchez, P. M., Pauli, E. D., Scheel, G. L., Rakocevic, M., Bruns, R. E., & Scarminio, I. S. (2018). Irrigation and light access effects on *Coffea arabica* L. leaves by FTIR-chemometric analysis. *Journal of The Brazilian Chemical Society*, 29(1), 168–176.
- Sufriadi, E., Idroes, R., Meilina, H., Munawar, A. A., Lelifajri, & Indrayanto, G. (2023). Partial Least Squares-Discriminant Analysis Classification for Patchouli Oil Adulteration Detection by Fourier Transform Infrared Spectroscopy in Combination with Chemometrics. *ACS Omega*, 8(13), 12348–12361. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c000>
- 80
- Tan, C. S., Leow, S. Y., Ying, C., Tan, C. J., Yoon, T. L., Jingying, C., & Yam, M. F. (2021). Comparison of FTIR spectrum with chemometric and machine learning classifying analysis for differentiating *guan-mutong* a nephrotoxic and carcinogenic traditional chinese medicine with *chuan-mutong*. *Microchemical Journal*, 163, 105835. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105835>
- Verma, N., & Shukla, S. (2015). Impact of various factors responsible for fluctuation in plant secondary metabolites. *Journal of Applied Research on Medicinal and Aromatic Plants*, 2(4), 105–113.
- Wang, Y.-Y., Li, J.-Q., Liu, H.-G., & Wang, Y.-Z. (2019). Attenuated total reflection-Fourier transform infrared spectroscopy (ATR-FTIR) combined with chemometrics methods for the classification of *Lingzhi* species. *Molecules*, 24(12), 2210.
- Wei, X., Zhu, S., Zhou, S., Zheng, W., & Li, S. (2020). Identification of soybean origin by terahertz spectroscopy and chemometrics. *IEEE Access*, 8, 184988–184996.
- Weston, L. a., Skoneczny, D., Weston, P. a., & Weidenhamer, J. D. (2015). Metabolic profiling: an overview - new approaches for the detection and functional analysis of biologically active secondary plant products. *Journal of Allelochemical Interactions*, 1(2), 15–27.
- Zahara, H., Karma, T., & Yusuf, M. (2023). Klasifikasi Daun Biduri (*Calotropis gigantea* L.) Dari Lokasi Berbeda Menggunakan Spektroskopi Inframerah Dan Kemometrik. *Lantanida Journal*, 11(2), 107–117.
- Zhao, Y., Zhang, J., Jin, H., Zhang, J., Shen, T., & Wang, Y. (2015). Discrimination of *Gentiana rigescens* from Different Origins by Fourier Transform Infrared Spectroscopy Combined with Chemometric Methods. *Journal of AOAC INTERNATIONAL*, 98(1), 22–26. <https://doi.org/10.5740/jaoacint.13-395>