



**PENENTUAN KADAR ALKALOID PADA EKSTRAK DAUN TANAMAN
MENGUNAKAN METODE NIR DAN KEMOMETRIK**

SKRIPSI

Oleh

**Nurul Aini
NIM 112210101062**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS JEMBER
2016**



**PENENTUAN KADAR ALKALOID PADA EKSTRAK DAUN TANAMAN
MENGUNAKAN METODE NIR DAN KEMOMETRIK**

SKRIPSI

Oleh

**Nurul Aini
NIM 112210101062**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS JEMBER
2016**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Allah SWT, Tuhan Yang Esa;
2. Ayah dan Ibu tercinta yang telah memotivasi dan mendoakan penulis;
3. Mas, mbak dan Saudara-saudara yang telah memberikan doanya;
4. Ibu Lestyo Wulandari, S.Farm., Apt., M.Farm. selaku Dosen Pembimbing Utama dan Ibu Yuni Retnaningtyas, S.Si., Apt., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan bantuan, bimbingan dan perhatian hingga terselesaikannya skripsi ini dan Ibu Nia Kristiningrum, S.Farm., Apt., M.Farm dan Bapak Dian Agung P, S.Farm., M.Farm., Apt. yang telah meluangkan waktu untuk menguji dan memberikan saran hingga terselesaikannya skripsi ini.
5. Teman-teman farmasi angkatan 2011, terima kasih atas dukungan dan semangat yang telah diberikan;
6. Para Pahlawan tanpa tanda jasa penulis di SDN Lenteng Timur 1, SMPN 1 Lenteng, SMAN 2 Sumenep dan Fakultas Farmasi Universitas Jember;
7. Almamater Fakultas Farmasi Universitas Jember.

MOTO

“Jika kamu bersungguh-sungguh, kesungguhan itu untuk kebaikanmu sendiri.”
(*QS Al-ankabut: 6*)

“Sesuatu yang belum dikerjakan seringkali tampak mustahil, kita baru yakin kalau kita telah berhasil melakukannya dengan baik.”
(Evelyn Underhill)

Seberapa besar kesuksesan Anda bisa diukur dari seberapa kuat keinginan Anda, setinggi apa mimpi-mimpi Anda, dan bagaimana Anda memperlakukan kekecewaan dalam hidup Anda.
(*Robert Kiyosak*)

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : Nurul Aini

NIM : 112210101062

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Penentuan Kadar Alkaloid Pada Ekstrak Daun Tanaman Menggunakan Metode NIR dan Kemometrik” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 10 Mei 2016

Yang menyatakan,

(Nurul Aini)

NIM. 112210101062

SKRIPSI

**PENENTUAN KADAR ALKALOID PADA EKSTRAK DAUN TANAMAN
MENGUNAKAN METODE NIR DAN KEMOMETRIK**

Oleh

Nurul Aini

NIM 112210101062

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Lestyo Wulandari S.Si., Apt., M.Farm.

Dosen Pembimbing Anggota : Yuni Retnaningtyas, S.Si., M.Si., Apt.

PENGESAHAN

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Penentuan Kadar Alkaloid Pada Ekstrak Daun Tanaman Menggunakan Metode NIR Dan Kemometrik” telah diuji dan disahkan pada:

Hari, tanggal : Selasa, 10 Mei 2016

Tempat : Fakultas Farmasi Universitas Jember

Tim Pembimbing:

Dosen Pembimbing Utama,

Lestyo Wulandari S.Si., Apt., M.Farm.
NIP 197604142002122001

Dosen Pembimbing Anggota,

Yuni R., S.Si., M.Si., Apt.
NIP 197806092005012004

Tim Penguji :

Dosen Penguji I,

Nia Kristiningrum S.Farm., Apt., M.Farm.
NIP 198204062006042001

Dosen Penguji II,

Dian Agung P, S.Farm., M.Farm., Apt.
NIP 198410082008121004



Mengesahkan
Dekan Fakultas Farmasi Universitas Jember

Lestyo W., S.Si., Apt., M.Farm.

NIP 197604142002122001

RINGKASAN

Penentuan Kadar Alkaloid pada Ekstrak Daun Tanaman Menggunakan Metode NIR dan Kemometrik: Nurul Aini, 112210101062; 2016; 85 halaman; Fakultas Farmasi, Universitas Jember.

Alkaloid adalah senyawa metabolit sekunder terbanyak yang memiliki atom nitrogen, yang ditemukan dalam jaringan tumbuhan dan hewan. Sebagian besar senyawa alkaloid bersumber dari tumbuh-tumbuhan. Alkaloid dapat ditemukan pada berbagai bagian tanaman, seperti bunga, biji, daun, ranting, akar dan kulit batang. Alkaloid memiliki efek farmakologi yang kuat pada sistem mamalia serta organisme lain sehingga alkaloid mempunyai efek terapi yang penting. Atropin, morfin, kuinin dan vinkristin merupakan contoh alkaloid yang memiliki efek terapi seperti sebagai antimalaria dan kanker. Oleh karena itu penentuan jumlah alkaloid sangat penting terkait dengan kualitas tanaman obat. Pada penelitian ini dilakukan penetapan kadar alkaloid pada ekstrak daun tanaman menggunakan metode spektroskopi infra merah dekat dan kemometrik. Hasil nilai kadar dari analisis secara kuantitatif yang didapatkan akan dibandingkan dengan hasil nilai kadar pada analisis menggunakan spektrofotometri UV-Vis sebagai pembanding

Penetapan kadar dengan metode spektroskopi inframerah dekat dan kemometrik ini memerlukan suatu analisis data multivariat (kemometrik) untuk mengekstrak informasi spektrum yang diperlukan dari spektrum inframerah dan menggunakan informasi spektrum tersebut untuk aplikasi kualitatif dan kuantitatif dengan menggunakan perangkat lunak *The Unscrambler X 10.2*. Teknik yang digunakan dari metode kemometrik untuk pembuatan model kalibrasi (analisis kuantitatif) dan model klasifikasi (analisis kualitatif) dalam penelitian ini masing-masing adalah *Partial Least Square* (PLS) dan *Linear Discriminant Analysis* (LDA),

Support Vector Machines (SVM) dan *Soft Independent Modelling of Class Analogies* (SIMCA). Penetapan kadar ini kemudian divalidasi dengan metode validasi silang (*cross validation*) *Leave-One-Out* dan *2-Fold-Cross-Validation* untuk menguji validitas model regresi.

Metode pembandingan yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode spektrofotometri UV-Vis dengan prinsip kolorimetri menggunakan larutan BCG dan dapar fosfat pH 4,7 dengan standar kafein. Berdasarkan hasil penelitian, model PLS dengan spektroskopi NIR memberikan hasil terbaik dengan nilai R^2 kalibrasi sebesar 0,9941739; R^2 validasi sebesar 0,9937574; RMSEC sebesar 1,8891197 dan RMSECV sebesar 1,95626. Validasi model juga memberikan nilai yang baik dengan R^2 LOOCV sebesar 0,9957413 dan R^2 *2-Fold-Cross-Validation* sebesar 0,9885431. Model klasifikasi LDA dan SVM yang digunakan pada pengkategorian antara matriks dengan sampel yang mengandung alkaloid memiliki akurasi sebesar 100%. Sedangkan pada model SIMCA pengkategorian antara matriks dengan sampel yang mengandung alkaloid memiliki akurasi 87% yang menunjukkan bahwa model SIMCA belum bisa mengelompokkan kategori sampel dengan benar.

Model PLS dan LDA dengan spektroskopi NIR yang telah terbentuk dan tervalidasi kemudian diterapkan pada sampel nyata sehingga diperoleh kadar alkaloid dalam sampel nyata. Kadar alkaloid pada sampel nyata yang diperoleh dari spektroskopi inframerah dekat sebesar 22,1960 mg CE/g ekstrak untuk kapsul Stimuno dan 5,5820 mg CE/g untuk kapsul Daun salam. Hasil analisis ini kemudian dibandingkan dengan kadar yang diperoleh dari metode spektrofotometri UV-Vis. Hasil penetapan kadar sampel yang diperoleh dari dua metode berbeda ini kemudian diuji dengan Uji T Dua Sampel Berpasangan dan dapat ditarik kesimpulan bahwa kadar yang diperoleh tidak memiliki perbedaan yang bermakna dengan nilai signifikansi 0,479, sedangkan pengkategorian sampel nyata dengan model LDA memberikan % kemampuan prediksi sebesar 100%.

PRAKATA

Puji syukur atas kehadiran Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan hidayah Nya serta memberikan kami kesehatan dan nikmatnya sehingga dapat menyelesaikan skripsi ini dan Nabi Muhammad SAW serta kitab suci Al-qur'an sebagai panutan hidupku.

Skripsi ini saya persembahkan kepada:

1. Ayah dan Ibu tersayang yang selalu mendoakan setiap waktu dan mendukung baik secara materil, moril dan spiritual kepada saya sehingga dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik;
2. Kedua saudara saya Muttaqin Hardiwansyah dan Fitriyah Hardiyanti yang saya sayangi yang selalu mendoakan dan mendukung saya, juga mbak ipar Ismi Ariusta yang selalu mendoakan saya;
3. Ibu Lestyo Wulandari S.Farm., Apt., M.Farm. selaku Dosen Pembimbing Utama dan Ibu Yuni Retnaningtyas, S.Si., Apt., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan bantuan, bimbingan dan perhatian hingga terselesaikannya skripsi ini Ibu Nia Kristiningrum., S.Farm., Apt., M.Farm. dan Bapak Dian Agung P S.Farm., M.Farm., Apt. yang telah meluangkan waktu untuk menguji dan memberikan saran hingga terselesaikannya skripsi ini;
4. Keluarga besar saya yang juga turut memberi dukungan dan motivasi;
5. Para sahabat trouble maker Liza Fairuz, Dewi Citra Sari, Ani Mubayyinah, Liyas Atika, Fathimah Azahrotul, Rahmah Pravitasari, Dhitya Sagita, Elly Febry yang saling memberikan dukungan, doa dan perhatian tidak cukup untuk diungkapkan dalam lembar ini;
6. Partner senior, mas yang memberikan dukungan dan doanya untuk menyelesaikan skripsi saya, Ach Sahirul Alim yang selalu memberikan semangat dan motivasi kepada saya;

7. Para sahabat pejuang skripsi geng ekstrak tanaman Hilmia Lukman, Fracilia Arinda dan Maulana Fadil yang sangat membantu dan memberika solusi pada skripsi saya;
8. Para sahabat kontrakan ceria Anis Rohmawati dan Yuni winarni yang memberikan dukungan setiap hari;
9. Para sahabat seperjuangan ASMEF 2011, yang telah mengajari saya arti penting persahabatan, persaudaraan dan kekompakan. Teruslah menjadi manusia yang penuh dengan mimpi, motivasi dan semangat untuk meraih mimpi-mimpi kalian. Dan jangan pernah lupa untuk selalu bersyukur dan bersujud kepada Allah SWT;
10. Sahabat masa remaja saya chypears girl : ufa, datin, iil, upiel, maya anis, isty, niar yang selalu mendoakan dan sahabat kepompong winda, jamilah, nia dan eka.
11. Teknisi Laboratorium Kimia Farmasi Bu Wayan dan Mbak Hani yang telah membantu dan memberi masukan selama penelitian.
12. Seluruh staf dan karyawan Fakultas Farmasi Universitas Jember atas seluruh bantuan yang telah diberikan.
13. Semua dosen serta pihak lain yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Penulis juga menerima segala saran dan kritik dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat bermanfaat.

Jember, 10 Mei 2016

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL.....	i
DAFTAR ISI.....	xii
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR TABEL.....	xvi
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Manfaat Penelitian	4
1.5 Batasan Penelitian	4
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Daun	5
2.2 Alkaloid	6
2.3 Deteksi Alkaloid	7
2.4 Simplisia	8
2.5 Ekstrak	8
2.6 Metode Ekstraksi	9
2.7 Spektrofotometri UV-Vis	10
2.7.1 Pengertian Spektrofotometri	10
2.7.2 Prinsip Spektrofotometri	10
2.8 Inframerah Dekat (NIR)	12
2.9 Validasi Silang	16
BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN	18
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	18
3.2 Rancangan Penelitian	18
3.3 Alat dan Bahan Penelitian	18
3.3.1 Alat dan Bahan Penelitian	18

3.3.2 Bahan	19
3.4 Alur Penelitian	20
3.5 Prosedur Penelitian	21
3.5.1 Preparasi Sampel	21
3.5.2 Penentuan Data NIR	23
3.5.3 Penentuan Kadar Alkaloid Total dengan Spektrofotometer UV-Vis Pembuatan Kurva Kalibrasi Kafein	23
3.5.4 Pembentukan Model Klasifikasi dan Kalibrasi	24
3.5.5 Validasi Model PLS dan LDA	25
3.5.6 Aplikasi pada Sampel Ekstrak Nyata (Komersil)	25
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	27
4.1 Pembuatan Ekstrak Sampel	27
4.2 Penetapan Kadar Alkaloid Total dengan Metode Spektrofotometer UV-Vis	29
4.2.1 Penetapan Panjang Gelombang	29
4.2.2 Penetapan Kadar Sampel Training Set & Test Set dengan Metode Spektrofotometri UV-Vis	29
4.2.3 Penetapan Kadar Alkaloid Sampel <i>Training</i> <i>Set & Test Set</i>	31
4.2.4 Pengujian Akurasi Metode Spektrofotometri UV-Vis yang digunakan untuk Penetapan Kadar Kafein ...	32
4.3 Pembentukan Model Kalibrasi & Klasifikasi	33
4.3.1 Pembentukan Model Kalibrasi & Klasifikasi dengan Spektroskopi NIR	35
4.4 Validasi Model PLS, LDA dan SVM	38
4.5 Penerapan Model PLS & LDA terhadap Sampel	43
BAB 5. PENUTUP	45
5.1 Kesimpulan	45
5.2 Saran	45

Daftar Pustaka	46
Lampiran	53



DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 Reaksi Alkaloid dengan Basa Secara umum.....	8
Gambar 3.4 Skema Alur Penelitian	20
Gambar 4.1 Hasil Optimasi Panjang Gelombang Maksimum	30
Gambar 4.2 Data Korelasi Model Kalibrasi Teknik Menggunakan PLS.....	35
Gambar 4.3 Penetapan Model LDA Menggunakan NIR	36
Gambar 4.4 Penetapan Model SVM Menggunakan NIR	37
Gambar 4.5 Hasil Validasi <i>2-fold cross validation</i> Model PLS dengan NIR	39
Gambar 4.6 Hasil Validasi Teknik <i>2-fold cross validation</i> Model LDA dengan NIR	39
Gambar 4.7 Hasil Validasi LOOCV Model PLS dengan NIR	40
Gambar 4.8 Hasil Validasi Teknik LOOCV Model LDA dengan NIR	41
Gambar 4.9 Hasil Validasi Teknik <i>2-fold cross validation</i> Model SVM dengan NIR	42
Gambar 4.10 Hasil Validasi Teknik LOOCV Model SVM dengan NIR	42

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 3.1 Simplisia yang digunakan	19
Tabel 3.2 Ekstrak daun yang sudah jadi	19
Tabel 3.3 Identifikasi kode tanaman	22
Tabel 4.1 Hasil Penetapan Kadar Sampel Training Set	31
Tabel 4.2 Hasil Penetapan Kadar Sampel Test Set	32
Tabel 4.3 Hasil Uji Akurasi Alkaloid	33
Tabel 4.4 Nilai kemampuan pengenalan dan prediksi model klasifikasi LDA, SVM dan SIMCA	37
Tabel 4.5 Hasil Perhitungan mg CE/g Ekstrak Sampel Nyata dengan Spektroskopi NIR dengan Metode Pembeding (Metode Spektrofotometri UV-Vis)	43

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 LATAR BELAKANG

Indonesia memiliki ribuan tumbuhan yang tersebar di berbagai daerah, dimana keaneka ragaman hayati yang ada tersebut dapat dimanfaatkan sebagai bahan baku obat modern dan tradisional (Susan, 2006). Kekayaan alam tumbuhan di Indonesia meliputi 30.000 jenis tumbuhan dari total 40.000 jenis tumbuhan di dunia, 940 jenis di antaranya merupakan tumbuhan berkhasiat obat. Dari jumlah tersebut sekitar 9600 spesies diketahui memiliki khasiat obat tetapi yang dibudidayakan baru 20 - 22% (Kementrian Kehutanan RI, 2010).

Dewasa ini, kian berkembang tentang penggunaan aneka ragam jenis tumbuhan sebagai bahan obat-obatan tradisional atau pengobatan alternatif. Perkembangan tersebut tidak saja terjadi di negara-negara berkembang tetapi juga di negara-negara maju. Ada beberapa faktor yang menyebabkan semakin banyak orang yang menaruh perhatian dan menggunakan jenis-jenis tumbuhan sebagai bahan obat tradisional, antara lain penduduk telah mengenal dan menggunakannya secara turun temurun dengan waktu yang sangat lama dan dianggap efek sampingnya kecil (Azzahra, 2015). Bagian tanaman yang sering digunakan sebagai obat adalah daunnya (Depkes, 1989). Daun tumbuhan memiliki bentuk dan ukuran yang bervariasi, mulai dari yang berbentuk duri kecil pada kaktus hingga yang berbentuk lebar pada palm. Sekalipun bentuk dan ukuran daun tampak bervariasi, pada dasarnya daun terdiri dari tiga bagian, yaitu bagian basal yang berkembang menjadi pelepah (vagina), tangkai daun (petiolus) dan helaian daun (lamina) (Latifa, 2015). Fungsi utama daun adalah membuat makanan melalui fotosintesis. Hal ini terjadi dalam helaian daun yang tipis (Cutter, 1989). Pada bagian tanaman, terutama pada sel tanaman yang mengalami fotosintesis, banyak ditemukan senyawa fenolik, flavonoid dan alkaloid (Kumar and Pandey, 2013).

Alkaloid adalah senyawa metabolit sekunder terbanyak yang memiliki atom nitrogen, yang ditemukan dalam jaringan tumbuhan dan hewan. Sebagian besar senyawa alkaloid bersumber dari tumbuh-tumbuhan. Alkaloid dapat ditemukan pada berbagai bagian tanaman, seperti bunga, biji, daun, ranting, akar dan kulit batang (Hartati, 2010).

Dari sudut pandang biologis, alkaloid adalah senyawa kimia biologis aktif dan berbentuk heterosiklik yang mengandung nitrogen dan sebagian dapat memiliki aktivitas farmakologi pada manusia dan hewan lainnya (Azzahra *et al.*, 2015). Alkaloid merupakan kelompok produk alami yang memiliki dampak besar dibidang kesehatan. Alkaloid memiliki efek farmakologi yang kuat pada sistem mamalia serta organisme lain sehingga alkaloid mempunyai efek terapi yang penting. Atropin, morfin, kuinin dan vincristine merupakan contoh alkaloid yang memiliki efek terapi seperti sebagai antimalaria dan kanker. Oleh karena itu penentuan jumlah alkaloid sangat penting terkait dengan kualitas tanaman obat (Shamsa, 2008).

Ada beberapa metode yang dapat digunakan untuk mengidentifikasi adanya senyawa alkaloid di dalam tanaman, diantaranya yaitu penentuan alkaloid menggunakan metode HPLC, fluorimetri, kromatografi ion, kolorimetri, kromatografi gas, dan kromatografi lapis tipis (A. M Levent, 2002; K. Masatoki and T. Hirokazu, 2000; C. Qing-Chun and J. Wang, 2001; X Qing-qin *et al.*, 2002; R. Pagliarussi *et al.*, 2002; Aksara, 2013). Identifikasi alkaloid menggunakan metode spektrofotometri UV-Vis yang didasarkan pada reaksi alkaloid dengan Bromocresol Green (BCG) membentuk produk berwarna kuning (Ajanal *et al.*, 2012).

Teknologi spektroskopi *near infrared* (NIR) merupakan salah satu teknologi yang dapat menggantikan metode konvensional dan telah sukses diaplikasikan pada produk pertanian, farmasi, petrokimia dan lingkungan (Andasuryani *et al.*, 2014). Teknologi infra merah dekat (*near infrared*, NIR) dikembangkan sebagai salah satu metode yang non destruktif, dapat menganalisis dengan kecepatan tinggi, tidak menimbulkan polusi, penggunaan preparat contoh yang sederhana dan tidak memerlukan bahan kimia. Spektroskopi NIR menggunakan gelombang

elektromagnetik dengan panjang gelombang 780 nm - 2500 nm atau bilangan gelombang 12.800 cm^{-1} hingga 4000 cm^{-1} (Schwanninger *et al.*, 2011).

Pengolahan data spektrum infra merah dekat dilakukan menggunakan metode statistik multivariat. Manfaat dari metode statistik multivariat tersebut adalah kemampuannya dalam mengekstrak informasi spektrum yang diperlukan dari spektrum inframerah dan menggunakan informasi spektrum tersebut untuk aplikasi kualitatif dan kuantitatif (Awa *et al.*, 2008). Teknik kemometrik seperti analisis multivariat dapat digunakan untuk memudahkan analisa data (Gad *et al.*, 2012). Keuntungan dari penggunaan teknik kemometrik untuk interpretasi spektrum IR adalah kemampuannya dalam menghubungkan profil spektrum dengan informasi yang terdapat pada sampel (Zou *et al.*, 2005).

Mengacu pada uraian tersebut, maka dalam penelitian ini akan dilakukan penetapan kadar alkaloid pada ekstrak daun tanaman menggunakan metode spektroskopi infra merah dekat dan kemometrik. Hasil nilai kadar dari analisis secara kuantitatif yang didapatkan akan dibandingkan dengan hasil nilai kadar pada analisis menggunakan spektrofotometri UV-Vis sebagai pembanding.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang, dirumuskan permasalahan sebagai berikut :

1. Apakah model PLS dan LDA dapat digunakan untuk menentukan kadar alkaloid total dan menentukan klasifikasi antara ekstrak daun yang mengandung alkaloid dan matriks pada beberapa ekstrak daun tanaman?
2. Apakah kadar alkaloid total pada sampel nyata yang ditetapkan dengan metode NIR-kemometrik dan metode spektrofotometri UV-Vis (pembanding) memiliki perbedaan yang signifikan?

1.3 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah maka dapat ditarik tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Menentukan model PLS dan LDA untuk menentukan kadar alkaloid total dan menentukan klasifikasi antara ekstrak daun yang mengandung alkaloid dan matriks pada beberapa ekstrak daun tanaman.
2. Mengetahui ada atau tidaknya perbedaan yang signifikan antara kadar alkaloid total yang ditetapkan dengan metode NIR-kemometrik dibandingkan dengan metode spektrofotometri UV-Vis (pembanding).

1.4 Manfaat penelitian

1. Memberikan pengetahuan tentang metode analisis alkaloid yang lebih sederhana, cepat, dan mudah.
2. Bagi mahasiswa peneliti dapat mengasah kemampuan, kreativitas dan keahlian di bidang kimia analisis.
3. Memberikan informasi tentang identifikasi senyawa alkaloid total pada tanaman melalui spektrum inframerah dengan menggunakan metode analisis kemometrik.

1.5 Batasan penelitian

Batasan masalah dalam penelitian ini adalah sampel nyata yang digunakan adalah ekstrak daun yang tidak termasuk dalam *training set* maupun *test set*

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Daun

Daun merupakan salah satu organ tumbuhan yang tumbuh dari batang, umumnya berwarna hijau (mengandung klorofil) dan terutama berfungsi sebagai penangkap energi dari cahaya matahari melalui fotosintesis. Daun merupakan organ terpenting bagi tumbuhan dalam melangsungkan hidupnya karena tumbuhan adalah organisme autotrof obligat, ia harus memasok kebutuhan energinya sendiri melalui konversi energi cahaya menjadi energi kimia (Latifa, 2015).

Daun dibagi menjadi dua bagian, yaitu daun dengan bagian yang lengkap dan daun dengan bagian yang tidak lengkap. Daun lengkap adalah apabila bagian-bagian tertentu pada sehelai daunnya mempunyai pelepah atau upih daun (vagina), tangkai daun (petiolus) dan lembaran daun (lamina). Sebagian besar tumbuhan hanya mempunyai bagian-bagian di atas antara satu sampai dua bagian saja, sehingga disebut daun tidak lengkap (Sutedjo, 1989).

Daun tumbuhan memiliki bentuk dan ukuran yang bervariasi, mulai dari yang berbentuk duri kecil pada kaktus hingga yang berbentuk lebar pada palm. Sekalipun bentuk dan ukuran daun tampak bervariasi, pada dasarnya daun terdiri dari tiga bagian, yaitu bagian basal yang berkembang menjadi pelepah (vagina), tangkai daun (petiolus) dan helaian daun (lamina). Daun yang memiliki ketiga bagian tersebut dinamakan daun lengkap. Pada sebagian besar tumbuhan, daun hanya terdiri dari satu atau dua bagian saja yakni helai daun saja, tangkai dan helai daun, pelepah dan helai daun, atau tangkai daun saja. Daun-daun yang demikian dinamakan sebagai daun tak lengkap (Latifa, 2015).

Fungsi utama daun adalah membuat makanan melalui fotosintesis. Hal ini terjadi dalam helaian daun yang tipis. Pada kebanyakan dikotil, helaian daun menempel pada batang dengan tangkai daun (petiola). Sistem pembuluh pada

batang meluas sampai ke tangkai daun, dan tulang daun ke dalam helaian daun itu sendiri (Cutter, 1989).

2.2 Alkaloid

Alkaloid merupakan salah satu metabolisme sekunder yang terdapat pada tumbuhan, yang bisa dijumpai pada bagian daun, ranting, biji, dan kulit batang. Alkaloid mempunyai efek dalam bidang kesehatan berupa pemicu sistem saraf, menaikkan tekanan darah, mengurangi rasa sakit, antimikroba, obat penenang, obat penyakit jantung dan lain-lain lain (Aksara *et al.*, 2013).

Alkaloid kebanyakan bersifat basa. Sifat tersebut tergantung adanya pasangan elektron pada nitrogen. Kebiasaan alkaloid tergantung pada pasangan elektron bebas pada atom nitrogen mereka. Alkaloid dikelompokkan menjadi :

a. Alkaloid sejati

Alkaloid sejati adalah racun, senyawa tersebut menunjukkan aktivitas fisiologi yang luas, hampir tanpa terkecuali bersifat basa; lazim mengandung nitrogen dalam cincin heterosiklik; diturunkan dari asam amino; biasanya terdapat dalam tanaman sebagai garam asam organik.

b. Protoalkaloid

Protoalkaloid merupakan asam amino yang relatif sederhana dan nitrogen asam amino tidak terdapat dalam cincin heterosiklik. Protoalkaloid diperoleh berdasarkan biosintesis dari asam amino yang bersifat basa. Contoh meskalin, ephedin, dan N,N- dimetiltriptamin.

c. Pseudoalkaloid

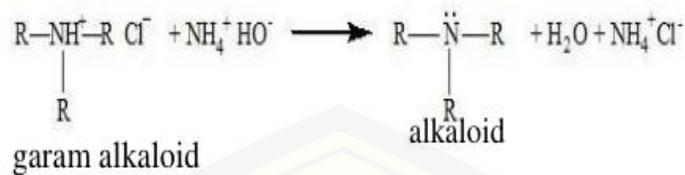
Pseudoalkaloid tidak diturunkan dari prekursor asam amino. Senyawa biasanya bersifat basa. Ada dua seri alkaloid yang penting dalam kelas ini, yaitu alkaloid stereoidal dan purin (Azzahra *et al.*, 2015).

Alkaloid umumnya memiliki aktivitas farmakologi terutama pada mamalia seperti manusia. Bahkan saat ini banyak alkaloid dari sumber alami yang sering digunakan sebagai obat dan obat-obatan alkaloid baru masih terus berkembang untuk

penggunaan klinis. Kebanyakan alkaloid dengan aktivitas biologis pada manusia mempengaruhi sistem saraf, terutama sebagai neurotransmitter kimia misalnya asetilkolin, epinefrin, norepinefrin, asam gamma aminobutirat (GABA), dopamin dan serotonin. Alkaloid berfungsi sebagai model untuk sintesis kimia analog dengan sifat yang lebih baik. Contoh penting adalah hiosiamin dan skopolamin (*Atropa belladonna* dan *Datura*) sebagai model untuk bahan parasimpatomimetik sintetis (Azzahra *et al.*, 2015).

2.3 Deteksi Alkaloid

Isolasi senyawa alkaloid telah banyak dilakukan oleh para peneliti. Salah satunya adalah dengan menggunakan metode spektrofotometri sederhana dengan cara pengekstrasian senyawa alkaloid dari bagian tubuh suatu tanaman obat dan pereaksi yang digunakan adalah bromocresol green (BCG). Metode ini dapat mendeteksi seberapa besar kandungan alkaloid total pada suatu bahan dengan menggunakan larutan standar. Larutan standar yang digunakan adalah kafein, dimana standar kafein digunakan sebagai pengidentifikasi total alkaloid dalam tanaman obat itu sendiri. Metode tersebut berdasarkan pada reaksi alkaloid dengan bromocresol green (BCG), dan membentuk sebuah olahan berwarna kuning. Metode itu memaparkan sebuah keuntungan dari sensitifitas dan stabilitas (Latifaningsih, 2012). BCG hanya dapat bereaksi dengan kelas tertentu pada alkaloid (alkaloid yang memiliki nitrogen dalam struktur) alkaloid yang memiliki struktur amina atau amida tidak bereaksi dengan reagen ini (Ajanal *et al.*, 2012). Preparasi deteksi alkaloid yaitu dengan memipet sejumlah tertentu ekstrak sampel ditambahkan dapar fosfat pH 4,7 agar terbentuk garam alkaloid kemudian ditambahkan BCG agar pH larutan menjadi basa, perlakuan tersebut dilakukan agar garam alkaloid membentuk basa bebas alkaloid. Reaksi alkaloid dengan basa secara umum dapat dilihat pada pereaksi berikut (Titis *et al.*, 2013) :



Gambar 2.1. Reaksi Alkaloid dengan basa secara umum (Titis *et al.*, 2013)

2.4 Simplisia

Simplisia adalah bahan alamiah yang dipergunakan sebagai obat yang belum mengalami pengolahan apapun juga dan kecuali dinyatakan lain berupa bahan yang dikeringkan (Dirjen POM, 1999).

Menurut Material Medika (MMI, 1995), simplisia dapat digolongkan dalam tiga kategori, yaitu:

1. Simplisia nabati adalah simplisia yang berupa tanaman utuh, bagian tanaman atau eksudat tanaman. Eksudat adalah isi sel yang secara spontan keluar dari tanaman atau isi sel yang dengan cara tertentu dipisahkan dari tanamannya dan belum berupa zat kimia.
2. Simplisia hewani adalah simplisia yang berupa hewan atau bagian hewan zat-zat berguna yang dihasilkan oleh hewan dan belum berupa zat kimia murni.
3. Simplisia pelikan (mineral) adalah simplisia yang berupa bahan-bahan pelican (mineral) yang belum diolah atau telah diolah dengan cara sederhana dan belum berupa zat kimia.

2.5 Ekstrak

Ekstrak adalah sediaan pekat yang diperoleh dengan mengekstraksi zat aktif dari simplisia nabati atau simplisia hewani menggunakan pelarut yang sesuai, kemudian semua atau hampir semua pelarut diuapkan dan massa atau serbuk yang diperlakukan sedemikian hingga memenuhi baku yang telah ditetapkan (Depkes RI, 1995).

Sebagian besar ekstrak dibuat dengan mengekstraksi bahan baku obat secara perkolasi. Seluruh perkolat biasanya dipekatkan dengan cara destilasi dengan pengurangan tekanan, agar bahan utama obat sesedikit mungkin terkena panas (Depkes RI, 1995). Ekstrak adalah sediaan kering, kental atau cair dibuat dengan menyari simplisia nabati atau hewani menurut cara yang cocok, di luar pengaruh cahaya matahari langsung, ekstrak kering harus mudah digerus menjadi serbuk. Cairan penyari yang digunakan air, etanol dan campuran air etanol (Depkes RI, 1979).

2.6 Metode Ekstraksi

Ekstraksi adalah suatu proses yang dilakukan untuk memperoleh kandungan senyawa kimia dari jaringan tumbuhan maupun hewan (Depkes RI, 1979).

Beberapa metode ekstraksi:

1. Cara dingin
 - a. Maserasi, adalah proses pengestrakan simplisia dengan menggunakan pelarut dengan beberapa kali pengocokan atau pengadukan pada temperatur ruangan (kamar).
 - b. Perkolasi, adalah ekstraksi dengan pelarut yang selalu baru sampai sempurna (exhaustive extraction) yang umumnya dilakukan pada temperatur ruangan.
2. Cara panas
 - a. Refluks, adalah ekstraksi dengan pelarut pada temperatur titik didihnya, selama waktu tertentu dan jumlah pelarut terbatas yang relatif konstan dengan adanya pendingin balik.
 - b. Soxhlet, adalah ekstraksi menggunakan pelarut yang selalu baru yang umumnya dilakukan dengan alat khusus sehingga terjadi ekstraksi kontinu dengan jumlah pelarut relatif konstan dengan adanya pendingin balik.
 - c. Digesti, adalah maserasi kinetik (dengan pengadukan kontinu) pada temperatur yang lebih tinggi dari temperatur ruangan, yaitu secara umum dilakukan pada temperatur 40-50° C.

- d. Infus, adalah ekstraksi dengan pelarut air pada temperatur penangas air (bejana infus tercelup dalam penangas air mendidih, temperatur terukur 96- 98° C) selama waktu tertentu (15-20 menit)
- e. Dekok, adalah infus pada waktu yang lebih lama dan temperatur sampai titik didih air (Direktorat Jendral Pengawas Obat dan Makanan Departemen Kesehatan Republik Indonesia, 2000).

2.7 Spektrofotometri UV-Vis

2.7.1 Pengertian Spektrofotometri

Pada awalnya, spektroskopi adalah ilmu yang mempelajari tentang radiasi sinar tampak yang berinteraksi dengan molekul pada panjang gelombang tertentu dan menghasilkan suatu spektra, yang merupakan hasil interaksi antara energi radian dengan panjang gelombang atau frekuensi. Kemudian pengertian ini dikembangkan tidak hanya untuk radiasi sinar tampak, tapi juga jenis radiasi elektromagnetik yang lain seperti sinar X, ultraviolet, inframerah, gelombang mikro, dan radiasi frekuensi radio. Ilmu yang berhubungan dengan pengukuran spektra tersebut dinamakan spektrofotometer. Spektrofotometri UV-Vis adalah alat yang digunakan untuk mengukur serapan yang dihasilkan dari interaksi kimia antara radiasi elektromagnetik dengan molekul atau atom dari suatu zat kimia pada daerah UV-Vis (FI edisi IV, 1995).

2.7.2 Prinsip Spektrofotometri UV-Vis

Spektrofotometer UV-Vis adalah teknik analisis spektroskopik yang memakai sumber radiasi elektromagnetik ultraviolet (190-380 nm) dan sinar tampak (380-780 nm) dengan memakai instrument spektrofotometer. Spektrofotometer UV-Vis merupakan metoda analisa yang penggunaannya cukup luas, baik untu analisa kualitatif maupun kuantitatif. Untuk analisa kuantitatif yang diperhatikan adalah :

- a) Membandingkan λ maksimum.

- b) Membandingkan serapan (A), daya serap (a), $E_{\frac{1\%}{1cm}}$
- c) Membandingkan spektrum serapannya

Prinsip dari spektrofotometri UV-Vis adalah mengukur jumlah cahaya yang diabsorpsi atau ditransmisikan oleh molekul-molekul di dalam larutan. Ketika panjang gelombang cahaya ditransmisikan melalui larutan, sebagian energi cahaya tersebut akan diserap (diabsorpsi). Besarnya kemampuan molekul-molekul zat terlarut untuk mengabsorpsi cahaya pada panjang gelombang tertentu dikenal dengan istilah absorbansi (A), yang setara dengan nilai konsentrasi larutan tersebut dan panjang berkas cahaya yang dilalui (biasanya 1 cm dalam spektrofotometri) ke suatu point dimana persentase jumlah cahaya yang ditransmisikan atau diabsorpsi diukur dengan phototube (Susanti, 2010).

Teknik spektroskopi adalah salah satu teknik analisis fisiko-kimia yang mengamati tentang interaksi antara atom atau molekul dengan radiasi elektromagnetik (REM). Radiasi elektromagnetik panjang gelombang 380 nm 780 nm merupakan radiasi yang dapat diterima oleh panca indera mata manusia, sehingga dikenal sebagai cahaya tampak (visibel), sedangkan di luar rentang panjang gelombang cahaya tampak, REM sudah tidak dapat ditangkap oleh panca indera. Ada tiga macam distribusi elektron di dalam suatu senyawa organik secara umum yang selanjutnya dikenal sebagai orbital elektron pi (π), sigma (σ) dan elektron tidak berpasangan (n) (Mulja & Suharman, 1995).

Serapan cahaya oleh molekul dalam daerah sinar tampak tergantung pada energi elektronik molekul. Penyerapan sejumlah energi menghasilkan transisi elektron dari orbital tingkat dasar ke orbital yang berenergi lebih tinggi dalam keadaan tereksitasi yang dikenal sebagai orbital elektron anti bonding (Mulja & Suharman, 1995).

2.8 Inframerah Dekat (NIR)

Teknologi infra merah dekat (*near infrared*, NIR) dikembangkan sebagai salah satu metode yang non destruktif, dapat menganalisis dengan kecepatan tinggi, tidak menimbulkan polusi, penggunaan preparat contoh yang sederhana dan tidak memerlukan bahan kimia. NIR Spektroskopi menggunakan gelombang elektromagnetik dengan panjang gelombang 780 nm - 2500 nm atau bilangan gelombang 12.800 cm^{-1} hingga 4000 cm^{-1} (Schwanninger *et al.*, 2011).

Prinsip teori spektroskopi NIR adalah bekerja berdasarkan adanya vibrasi molekul yang berkorespondensi dengan panjang gelombang yang terdapat pada daerah IR dekat pada spektrum elektromagnetik. Vibrasi inilah yang dimanfaatkan dan diterjemahkan untuk mengetahui karakteristik kandungan kimia dari bahan (Karlinasari *et al.*, 2012). Hasil analisis dengan menggunakan spektroskopi NIR biasanya berupa signal kromatogram yang merupakan hubungan intensitas IR terhadap panjang gelombang. Untuk identifikasi pola spektrum sampel akan dibandingkan dengan pola spektrum standar (Samson *et al.*, 2013).

Spektrum IR memiliki informasi sktruktur molekular yang terdiri atas gerak rotasi dan vibrasi. Banyaknya gerakan molekular dari molekul poliatom akan membentuk serangkaian pita serapan yang spesifik untuk masing-masing molekul. Hal ini membuat spektroskopi IR menjadi metode analisis kualitatif yang sangat berguna, tetapi sulit dilakukan akibat adanya kemiripan dari setiap respon spektrum. Analisis kuantitatif spektrum IR juga sangat sulit karena adanya tumpang tindih spektrum serapan dari molekul-molekul dalam sampel. Untuk dapat mengekstraksi informasi dari data spektrum IR tersebut, diperlukan suatu metode kemometrik berupa analisis multivariat (Stchur *et al.*, 2012).

Kemometrika adalah disiplin ilmu kimia yang menggunakan matematika, statistik dan logika formal yang digunakan untuk merancang atau memilih prosedur ekperimental yang optimal serta untuk memberikan informasi kimia maksimum yang relevan dengan menganalisis data kimia. Kemometrik memanfaatkan ciri serapan FTIR yang khas dari setiap molekul untuk mengklasifikasi contoh atau untuk

membuat model kalibrasi multivarian (dengan melibatkan data referensi) yang dapat digunakan dalam prediksi hasil pengukuran suatu contoh (Alimah, 2014).

Kemometrika di dalam analisis NIR terdiri atas tiga aspek, yaitu pra-pengolahan data spektra, membangun model kalibrasi untuk analisis kuantitatif dan transfer model. Salah satu analisis kemometrik yang terpenting adalah membentuk model kalibrasi melalui metode pengenalan pola untuk mengidentifikasi kemiripan dan pola utama data. Selanjutnya, model ini digunakan untuk memprediksi sampel yang tidak diketahui (Africia, 2007).

Saat ini kemometrika memungkinkan untuk menganalisis data multivariat. Data multivariat merupakan suatu data yang memiliki banyak variabel dan dari setiap variabel tersebut dapat saling berkorelasi. Keuntungan dari analisis multivariat adalah informasi yang didapat akan lebih banyak karena analisis multivariat mempertimbangkan banyak variabel secara bersamaan, dibandingkan jika hanya mempertimbangkan masing-masing variabel secara individual. Selain itu, keuntungan lainnya adalah bahwa analisis multivariat dapat mereduksi noise, lebih selektif dalam suatu pengukuran, dan bisa mendeteksi adanya sampel palsu (Bro, 2003).

Fungsi kemometrika dalam spektroskopi digunakan untuk meningkatkan kualitas data. Kemometrika memungkinkan adanya pengukuran data multivariat, yang mana beberapa variabel (absorbansi dalam banyak bilangan gelombang) diukur untuk suatu sampel yang dituju (Miller and Miller, 2000).

Kemometrik merupakan salah satu bentuk analisis kalibrasi multivariat. Teknik kalibrasi multivariat ini antara lain berupa Proyeksi struktur laten (*Partial Least Square*, PLS), Analisis diskriminan (*Discriminant Analysis*, DA), analisis komponen utama (*Principal Component Analysis*, PCA), *Support Vector Machines* (SVM) dan *Soft Independent Modelling of Class Analogies* (SIMCA).

1. *Partial Least Square* (PLS)

PLS merupakan salah satu teknik kalibrasi multivariat yang sangat luas digunakan dalam analisis kuantitatif data spektroskopi dan elektrokimia (Abdollahi *et al.*, 2003). Model kalibrasi dengan menggunakan PLS dapat digunakan untuk

memprediksi komposisi suatu bahan, menggantikan metode konvensional yang membutuhkan waktu lama di laboratorium (Evi *et al.*, 2012). PLS lebih umum digunakan dalam kalibrasi multivariat karena mutu model kalibrasi yang dihasilkan dan kemudahan penerapannya. Regresi PLS merupakan sebuah teknik analisis multivariat yang sangat canggih, oleh sebab itu penggunaannya meningkat pada spektroskopi inframerah kuantitatif. Ketika sebuah spektrum dari sampel yang tidak diketahui dianalisis, PLS mencoba untuk merekonstruksi spektrum dari spektra pemuat dalam memprediksi konsentrasi sampel yang tidak diketahui (Pare dalam Assifa, 2014).

2. *Linear Discriminant Analysis (LDA)*

Pendekatan *DA* berbeda dengan pendekatan *SIMCA*, dimana *DA* menganggap bahwa sampel harus menjadi bagian dari salah satu kategori yang dianalisis. *DA* secara luas digunakan dalam permasalahan yang melibatkan hanya dua kategori (Camo, 2005).

Keberhasilan *LDA* dalam pengkategorian objek dapat diuji dengan beberapa cara. Cara yang paling sederhana adalah dengan menggunakan model klasifikasi yang telah dibuat untuk mengklasifikasikan objek dan menentukan apakah hasil pengklasifikasian tersebut benar atau tidak. Objek yang diklasifikasi merupakan bagian dari set data yang digunakan untuk membentuk model. Metode yang lebih baik adalah dengan membagi data asli menjadi dua kelompok yang dipilih secara randomisasi. Kelompok pertama disebut *training set* dan digunakan untuk menentukan fungsi diskriminan linier. Objek pada kelompok kedua disebut *test set* dan digunakan untuk mengevaluasi kinerja fungsi diskriminan linier dan keberhasilan *LDA* dapat diketahui (Miller dan Miller, 2010).

3. *Principal Component Analysis (PCA)*

PCA secara umum dikenal sebagai teknik interpretasi multivariat. *PCA* adalah teknik untuk menentukan komponen utama yang merupakan kombinasi linier dari variabel asli. *PCA* digunakan sebagai alat statistik melalui penggunaan komponen-komponen yang diturunkan dalam sebuah model regresi untuk memprediksi variabel

respon yang tidak teramati menggunakan komponen utama. Komponen utama bertujuan untuk menjelaskan sebanyak mungkin keragaman data dengan kombinasi linier yang ditemukan yang saling bebas satu sama lain dan didalam arah keragaman paling besar. Tiap-tiap komponen utama merupakan kombinasi linier dari semua variabel. Komponen utama pertama menjelaskan variasi terbesar dari data diikuti dengan komponen utama kedua dan seterusnya (Varmuza, 2001).

Komponen-komponen utama ini dipilih sedemikian rupa sehingga PC_1 memiliki variasi terbesar dalam set data, sedangkan PC_2 tegak lurus terhadap komponen utama pertama dan memiliki variasi terbesar berikutnya (Miller dan Miller, 2010). Kedua komponen utama ini pada umumnya digunakan sebagai bidang proyeksi untuk pemeriksaan visual data multivariat. Jika jumlah varian dari PC_1 dan PC_2 lebih besar dari 70%, maka *score plot* memperlihatkan visualisasi dua dimensi yang baik (Varmuza, 2001).

4. *Support Vector Machines* (SVM)

SVM merupakan pendekatan baru untuk klasifikasi dimana telah dikemukakan pada awal tahun 1990. SVM disebut sebagai metode pembatas. SVM tidak membentuk model kategori tetapi membentuk pembatas antara dua kategori. SVM diterapkan sebagai pengklasifikasian dua kategori, dimana SVM akan membedakan antara dua kategori tersebut (Brereton, 2007). SVM akan membentuk *Optimal Separating Hyperplane* (OSH) dalam membatasi dua kategori. OSH ini didefinisikan sebagai sesuatu yang dapat memberikan jarak pembatas secara maksimal terhadap dua kategori (*margin*). Objek atau sampel yang berada pada garis tepi OSH disebut *support vector* (Stanimirova *et al.*, 2010).

5. *Soft Independent Modelling of Class Analogies* (SIMCA).

SIMCA merupakan salah satu metode klasifikasi yang terdapat dalam *The Unscrambler*. Model SIMCA dibentuk berdasarkan pembuatan model PCA dalam *training set*. Sampel yang tidak diketahui kemudian dibandingkan dalam model SIMCA dan pengkategorian dinilai berdasarkan analogi pada sampel percobaan

(Camo,2005). SIMCA digunakan untuk pengkategorian objek kedalam lebih dari satu kategori secara simultan (Brereton, 2007).

SIMCA menentukan jarak kategori, kemampuan pemodelan dan diskriminasi. Jarak kategori dapat dihitung sebagai jarak geometrik dari model komponen komponen utama. Pendekatan lain menganggap bahwa tiap kategori dibatasi dengan jarak wilayah yang mewakili persentase tingkat kepercayaan (biasanya 95%). Kemampuan diskriminasi mengukur seberapa baik variabel membedakan antara dua kategori (Berrueta *et al.*, 2007).

2.9 Validasi Silang

Metode validasi silang (*cross validation*) adalah metode untuk menguji validitas model regresi dengan menggunakan data uji diluar data yang digunakan dalam *fitting* regresi (Pranowo *et al.*, 2006). Validasi silang merupakan teknik untuk menilai suatu hasil analisis statistik seberapa jauh dapat diimplementasikan ke dalam set data independen. Hal ini terutama digunakan untuk tujuan prediksi, yaitu untuk memperkirakan seberapa akurat model prediksi yang dibuat untuk dapat diimplementasikan.

Satu putaran validasi silang melibatkan partisi sampel data ke dalam himpunan bagian komplementer, lalu melakukan analisis terhadap satu subset (disebut *training set*), dan memvalidasi analisis terhadap subset lain (disebut *test set*). Untuk mengurangi variabilitas, beberapa putaran validasi silang dapat dilakukan dengan menggunakan partisi yang berbeda, dan hasil validasi adalah rata-rata selama putaran.

Menurut (Kohavi, 1995), beberapa tipe dan cara validasi silang yaitu (a) *leave-one-out*, (b) *K-fold cross validation*, dan (c) *2-fold cross validation*. Penjelasan dari masing-masing tipe tersebut adalah sebagai berikut :

a. *Leave-one-out*

Seperti diketahui dari namanya, *leave-one-out* (LOOCV) yang berarti meninggalkan satu untuk validasi silang, yaitu dengan melibatkan sampel pengamatan tunggal dari sampel asli digunakan sebagai *training set*. Hal ini dilakukan berulang pada setiap observasi dalam sampel yang digunakan sekaligus sebagai data validasi. LOOCV akan menjadi sama dengan *k-fold*, bila jumlah *k*-lipatannya sama dengan jumlah sampel asli pengamatan.

b. *K-fold cross validation*

Di dalam validasi silang *k-fold*, seluruh sampel asli dibagi secara acak ke dalam *k*-sub sampel. dari sebanyak *k*-sub sampel, sebuah sub sampel tunggal dipertahankan sebagai validasi data untuk pengujian model, dan sisanya *k*-1 sub sampel digunakan sebagai *training set*. Proses validasi silang yang kemudian berulang *k*-kali (lipatan), dengan masing-masing *k*-sub sampel digunakan tepat satu kali sebagai validasi data. Hasil *k*-kali dari lipatan kemudian didapat rata-rata (atau dikombinasi) untuk menghasilkan estimasi tunggal. Keuntungan dari metode ini adalah seluruh sampel pengamatan digunakan secara acak dan berulang sebagai data pelatihan dan validasi.

c. *2-fold cross validation*

Tipe ini merupakan variasi *k-fold cross validation* yang paling sederhana. Pada pelaksanaannya, metode ini biasanya dilakukan dengan membagi data sampel menjadi dua bagian yang sama yaitu *training set* yang digunakan untuk membuat model, sedangkan bagian yang lain untuk *test set* yang berfungsi untuk memvalidasi model yang telah terbentuk.

BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Kimia Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Jember mulai bulan Maret 2015.

3.2 Rancangan Penelitian

Penelitian yang dilakukan adalah penetapan kadar alkaloid dalam beberapa daun tanaman yang diekstraksi, sampel yang digunakan diperoleh dari ekstraksi daun tanaman dan ekstrak yang sudah jadi yang tersedia di laboratorium. Ekstraksi daun tanaman dilakukan dengan metode ultasonikasi yang dilanjutkan dengan metode maserasi. Kadar alkaloid ditentukan menggunakan spektrofotometer UV-Vis dengan metode kolorimetri menggunakan standar kafein. Analisis profil alkaloid dilakukan dengan analisis kemometrik yaitu PLS dan LDA. Dari model yang terbentuk kemudian dievaluasi menggunakan validasi silang dengan metode *Leave-One-Out-Cross Validation* (LOOCV) dan *2-fold-Cross Validation*. Model terpilih selanjutnya digunakan untuk menetapkan kadar alkaloid dalam sampel nyata. Kadar yang diperoleh kemudian dibandingkan dengan data kadar spektrofotometri UV-Vis.

3.3 Alat dan Bahan Penelitian

3.3.1 Alat Yang Digunakan

Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini adalah spektrofotometer UV-Vis (Shimadzu), perangkat spektrofotometer infra merah (Bruker Alpha) dengan asesoris ATR (*attenuated total reflectance*), perangkat lunak OPUS, perangkat lunak *The Unscrambler X 10.2* (Camo), *ultrasonicator* (Elmasonic), *rotavapour*, oven, timbangan analitik digital, blender, *beaker glass*, gelas ukur, erlenmeyer, batang pengaduk, corong, cawan porselin, botol vial, sendok ekstrak, tabung reaksi, vortex.

3.3.2 Bahan

Bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah simplisia daun yang digunakan sebagai training set dan test set (Tabel 3.1) yang berasal dari UPT Materia Medika, Kota Batu, Malang. Ekstrak daun yang digunakan sebagai sampel nyata (Tabel 3.2), .etanol 96% teknis, aerosil (pharmaceutical grade), akuades, kloroform (Merck), dan kafein (Sigma-Aldrich), Bromocresol Green (Sigma-Aldrich).

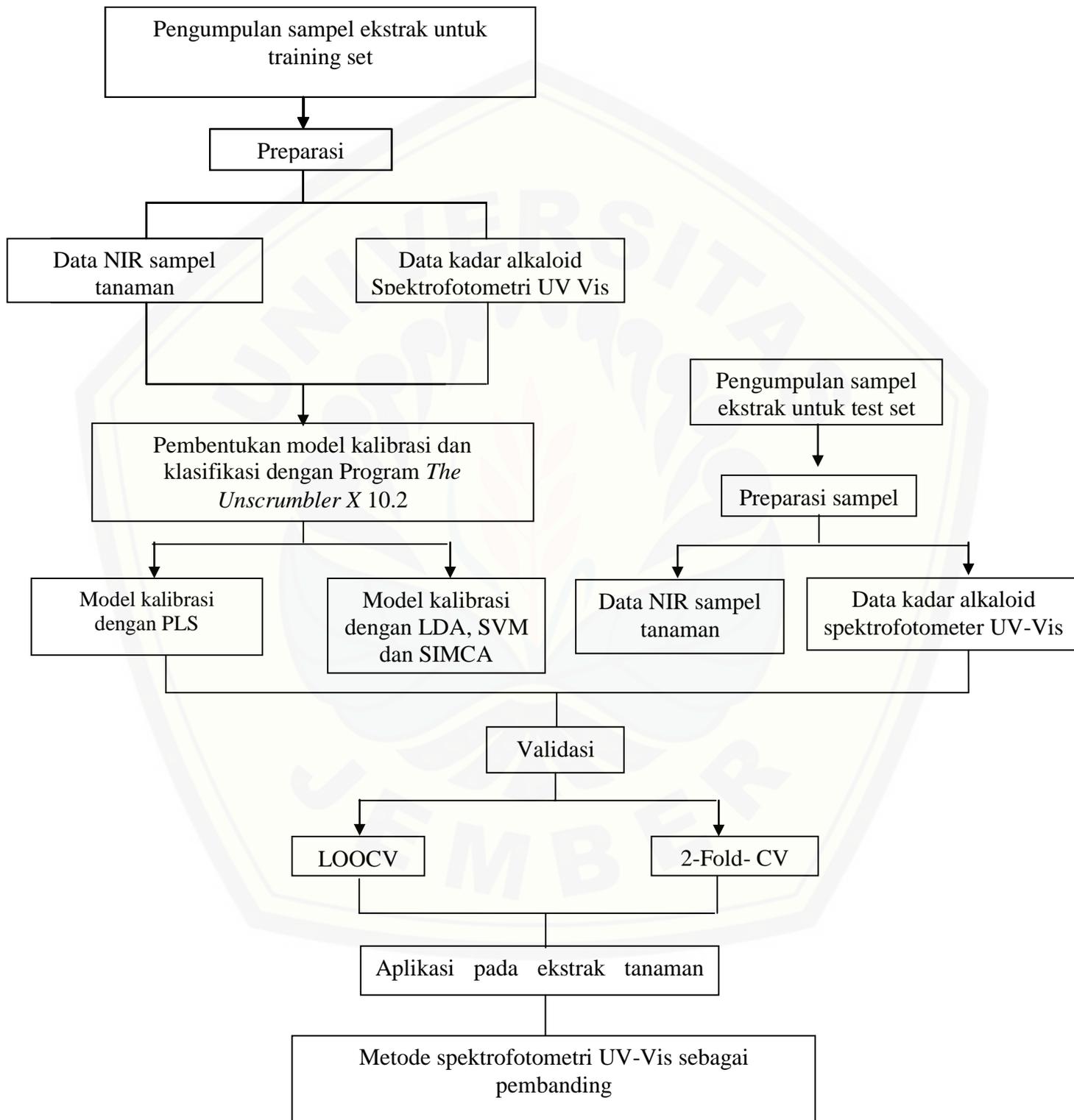
Tabel 3.1. Simplisia yang digunakan

No	Spesies Tanaman	Nama Ilmiah
1.	Daun Kembang bulan	<i>Tithonia diversifolia</i>
2.	Daun Kunir putih	<i>Kaempferia rotunda</i> L.
3.	Daun Mangga	<i>Mangifera indica</i> L.
4.	Daun Buncis	<i>Phaseolus vulgaris</i> L.
5.	Daun Pepaya	<i>Carica papaya</i> L.
6.	Daun Mengkudu	<i>Morinda citrifolia</i> L.
7.	Daun Binahong	<i>Anredera cordifolia</i> (Ten) Steenis
8.	Daun Patikan kebo	<i>Euphorbiae hirtae</i>
9.	Daun Belimbing wuluh	<i>Averrhoa bilimbi</i> L.
10.	Daun Katuk	<i>Sauropus androgynus</i> Merr.
11.	Daun Sirih	<i>Piper betle</i>
12.	Daun Jambu biji	<i>Psidium guajava</i> L.
13.	Daun lamtoro	<i>Leucaena glauca</i> Benth
14.	Daun Sirsak	<i>Annona muricata</i> Linn.
15.	Daun Pandan	<i>Pandanus amaryllifolius</i> Roxb.

Tabel 3.2. Ekstrak daun yang sudah jadi

No	Ekstrak	Nama Ilmiah
1.	Daun kluwih	<i>Artocarpus camansi</i>
2.	Daun kenitu varian bulat besar	<i>Chrysophyllum cainito</i>
3.	Daun kenitu varian bulat kecil	<i>Chrysophyllum cainito</i>
4.	Daun kenitu varian hijau lonjong	<i>Chrysophyllum cainito</i>
5.	Daun kenitu varian ungu	<i>Chrysophyllum cainito</i>
6.	Daun kopi robusta	<i>Coffea canephora</i>
7.	Daun kopi arabika	<i>Coffea arabica</i>

3.4 Alur Penelitian



3.5 Prosedur Penelitian

3.5.1 Preparasi Sampel

a. Pengumpulan Sampel *Training set* dan *Test set*

Sampel diperoleh dari ekstrak daun yang sudah tersedia di laboratorium-laboratorium Fakultas Farmasi Universitas Jember dan dari pembuatan ekstrak daun kembang bulan, daun kunir putih, daun mangga, daun pepaya, daun mengkudu, daun binahong, daun patikan kebo, daun katuk, daun sirih, daun jambu biji, daun lamtoro, daun sirsak, dan daun pandan.

Pemilihan teknik pengambilan sampel merupakan upaya penelitian untuk mendapat sampel yang representatif (mewakili), sehingga dapat diperoleh informasi yang cukup untuk menggambarkan populasinya. Teknik pengambilan sampel yang digunakan adalah sampel dengan maksud (*purposive sampling*). Pengambilan sampel dilakukan hanya atas dasar pertimbangan peneliti saja yang menganggap unsur-unsur yang dikehendaki telah ada dalam anggota sampel yang diambil (Rozaini, 2003).

Langkah awal dalam proses sampling adalah survei. Survei dilakukan di laboratorium-laboratorium Fakultas Farmasi Universitas Jember. Survei dilakukan dengan mendata ekstrak daun yang tersedia dan menentukan ekstrak manakah yang akan digunakan berdasarkan jumlah masing-masing ekstrak. Pengambilan sampel matriks juga dilakukan secara *purposive*, dimana matriks yang dipilih adalah zat yang umum terdapat dalam ekstrak dan pengering yang umum digunakan serta tersedia di laboratorium, yaitu akuades dan aerosil.

Peneliti tidak melakukan identifikasi masing-masing sampel tanaman, sehingga untuk selanjutnya nama tanaman menggunakan identitas kode tanaman (Tabel 3.3).

Tabel 3.3. Identitas kode tanaman

No	Kode	Nama Tanaman
1.	A	Kopi arabika muda
2.	B	Kopi arabika tua
3.	C	Blimbing
4.	D	Binahong
5.	E	Buncis
6.	F	Jambu biji
7.	G	Katuk
8.	H	Kembang bulan
9.	I	Kluwih
10.	J	Kunir
11.	K	Lamtoro
12.	L	Mangga
13.	M	Menkudu
14.	N	Pandan
15.	O	Pare
16.	P	Pepaya
17.	Q	Putri malu
18.	R	Sambiloto
19.	S	Sirih
20.	T	Sirsak

b. Pembuatan ekstrak

Daun yang diperoleh dari laboratorim-laboratorium Fakultas farmasi Universitas Jember dan Materia Medica dikumpulkan kemudian diangin-anginkan dan dioven pada suhu 50° C selama 10 - 15 menit untuk menghilangkan kelembaban pada daun. Daun yang sudah kering dihancurkan atau diblender hingga daun menjadi serbuk. Serbuk daun ditimbang 80 gram dan dibagi menjadi dua bagian dimasukkan dalam erlenmeyer 500 ml ditambahkan metanol pada masing-masing erlenmeyer sampai volume 400 ml kemudian diekstraksi dengan ultrasonikator selama 1 jam. Hasil ekstraksi kemudian dimaserasi selama 24 jam. Ekstrak cair yang didapat kemudian disaring menggunakan kertas saring. Filtrat yang diperoleh dipisahkan menggunakan rotavapor pada suhu 60 °C untuk menguapkan pelarut dan diperoleh ekstrak kental. Ekstrak kental dikeringkan dengan aerosil. Selanjutnya ekstrak yang

sudah kering digerus sampai halus dan diayak dengan ayakan B-60, kemudian disimpan dalam vial yang telah diberi label.

3.5.2 Penentuan Data NIR

Instrumen NIR dihidupkan dan ditunggu selama 30 menit. Selanjutnya dibuka perangkat lunak Brimrose. Sampel yang telah dipreparasi diletakkan diatas plat tempat sampel secara merata. Satu sampel di-*scan* 4 kali dan dilakukan 3 kali penembakan pada masing-masing *scanning*. Langkah-langkah tersebut diulangi untuk masing-masing sampel. Setelah selesai, perangkat lunak Brimrose ditutup, spektra hasil *scanning* kemudian diamati dengan perangkat lunak Prospect. Selanjutnya data yang telah diperoleh diolah dengan perangkat lunak *The Unscrambler X 10.2* (Camo software).

3.5.3 Penentuan Kadar Alkaloid Total dengan Spektrofotometer UV-Vis Pembuatan kurva kalibrasi kafein

1) Preparasi Bromocresol Green

Ditimbang 6,98 mg bromocresol green dilarutkan dengan 0,3 mL 2N NaOH dan 0,5 mL akuades selanjutnya dimasukkan ke dalam labu ukur 100 mL dan ditambahkan akuades sampai batas volume.

2) Preparasi Dapar fosfat

Larutan dapar fosfat (pH 4,7) disiapkan dengan menyesuaikan pH. Larutan dapar fosfat dibuat dengan menimbang natrium fosfat 7,16 g dan 4,202 g asam salisilat kemudian dimasukkan ke dalam labu ukur 100 mL dan ditambahkan akuades sampai batas volume.

3) Preparasi larutan standar kafein

Larutan baku dibuat dengan menimbang 40 mg kafein dilarutkan dengan etanol 10 mL. Satu seri konsentrasi larutan kafein dalam etanol dibuat dari larutan baku, yaitu dengan range konsentrasi 50 – 200 µg/mL. Selanjutnya dilakukan pengenceran larutan induk kafein dengan memipet sejumlah tertentu larutan induk, ditambahkan 2 mL dapar fosfat pH 4,7 dan 2 mL larutan BCG (Bromocresol Green) dan diekstraksi dengan 3 mL kloroform sebanyak tiga kali. Diambil fase kloroform

dimasukkan labu ukur 10 mL ditambahkan kloroform sampai batas volume. Absorbansi kloroform kompleks diukur pada panjang gelombang 430 nm. Blanko yaitu semua reagen tanpa larutan ekstrak.

4) Penentuan kadar alkaloid total

Penentuan kadar alkaloid total dilakukan dengan cara sampel sebanyak 200 µg/ml dari masing-masing larutan uji ekstrak ditambahkan dengan 2 ml dapar fosfat pH 4,7 dan 2 ml larutan BCG (Bromocresol Green) kemudian diekstraksi dengan 3 mL kloroform sebanyak tiga kali menggunakan vortex. Diambil fase kloroform dimasukkan ke dalam labu ukur 10 mL dan ditambahkan kloroform sampai batas volume. Diukur absorbansinya pada panjang gelombang 430 nm. Blanko yaitu semua reagen tanpa larutan ekstrak.

3.5.4 Pembentukan model klasifikasi dan kalibrasi

Data yang diperoleh dari pengukuran spektroskopi NIR diolah dengan menggunakan perangkat lunak *The Unscrambler versi X 10.2 (Camo software)*. Pembentukan model klasifikasi dilakukan dengan metode *Linear Discriminant Analysis*, *Support Vector Machines* dan *Soft Independent Modelling of Class Analogies*, dengan langkah-langkah sebagai berikut: software *The Unscrambler versi X 10.2* dibuka. Data dimasukkan dengan memilih File, import data, lalu dipilih *Brimrose* sehingga akan muncul tampilan data dengan masing-masing panjang gelombang. Selanjutnya dibuat kategori objek. Kategori tersebut yaitu “matriks” dan “alkaloid”. Dimana “matriks” adalah sampel bukan ekstrak yang terdapat dalam ekstrak (aerosil dan akuades), sedangkan “alkaloid” adalah sampel ekstrak daun tanaman. Objek dikelompokkan dengan memilih *define range* dan *column range* diisi dengan kategori pada kolom 1 dan absorbansi pada kolom yang lain. Selanjutnya, model dibuat dengan klik *task, analyze*, lalu dipilih *Linear Discriminant Analysis*. Jika hasil prediksi dari model telah sesuai dengan klasifikasi yang sebenarnya, maka model klasifikasi tersebut dikatakan valid apabila % akurasi yang diperoleh sebesar 100%. Model klasifikasi yang terbentuk kemudian dapat digunakan untuk memprediksi klasifikasi dari sampel yang belum diketahui.

Pembentukan model kalibrasi dibuat dengan metode *Partial Least Square* (PLS). Data absorbansi sampel yang mengandung alkaloid dianalisis dengan metode PLS dimana untuk membentuk sebuah model kalibrasi, nilai absorbansi ditandai sebagai prediktor (variabel x) dan konsentrasi ditandai sebagai respon (variabel y). Langkah-langkah yang dilakukan adalah sebagai berikut: software *The Unscrambler versi X 10.2* dibuka. Data dimasukkan dengan memilih File, import data, lalu dipilih *Brimrose* sehingga akan muncul tampilan data dengan masing-masing panjang gelombang. Objek dikelompokkan dengan mengklik *define range* dan *column range* diisi dengan nilai konsentrasi pada kolom 1 dan absorbansi pada kolom lain yang tersisa. Selanjutnya, model dibuat dengan memilih *task*, *analyze*, lalu *Partial Least Square*. Kriteria dari PLS yang harus dipenuhi adalah nilai R^2 , RMSEC (*Root Mean Standart Error Of Calibration*), RMSECV (*Root Mean Square Error Cross Validation*). Pemilihan set data spektrum didasarkan pada kemampuan prediksi yang terbaik dengan nilai korelasi R^2 semakin besar, nilai galat RMSEC dan RMSECV terbaik apabila nilai semakin kecil.

3.5.5 Validasi model PLS dan LDA

1) *Leave-One-Out-Cross Validation* (LOOCV)

Set validasi ini dibuat dengan meninggalkan satu data dari masing-masing replikasi sampel untuk validasi silang, yaitu dengan melibatkan sampel pengamatan tunggal dari 15 sampel ekstrak *training set*. Hal ini dilakukan berulang pada setiap observasi dalam sampel yang digunakan sebagai data validasi.

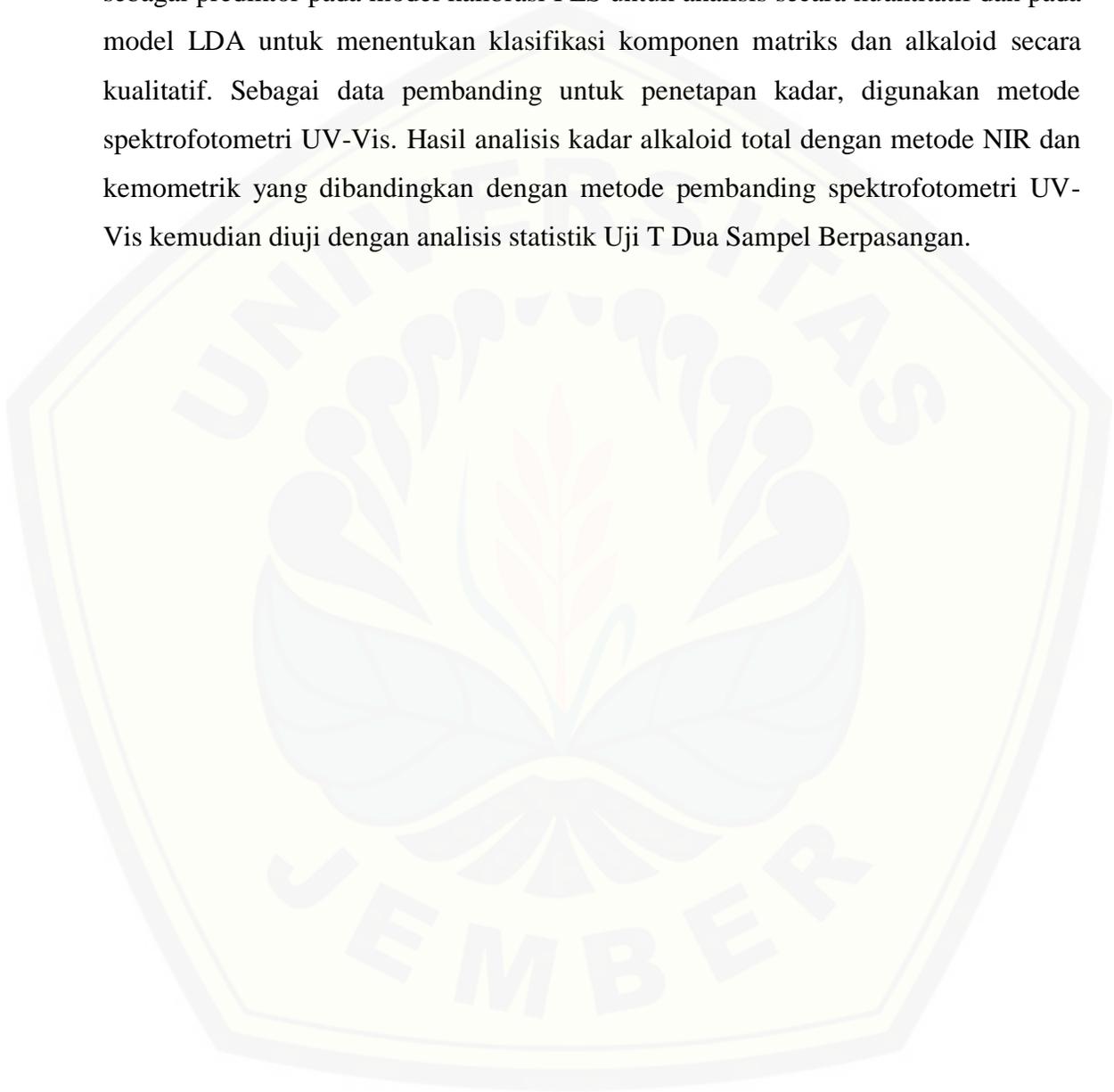
2) *2-Fold Cross-Validation* (*Test set*)

Set validasi ini dibuat dengan preparasi 5 sampel ekstrak yang ditetapkan kadarnya dengan spektrofotometri UV-Vis. Penetapan data NIR dilakukan dengan scanning sampel test set hingga menghasilkan data spektrum yang kemudian diolah dengan perangkat lunak *The Unscrambler versi X 10.2*.

3.5.6 Aplikasi pada sampel ekstrak nyata (komersil)

Tahap ini bertujuan untuk mengaplikasikan model kemometrik yang telah dibentuk pada ekstrak daun (sediaan kapsul) yang beredar dipasaran. Dilakukan

preparasi sampel dengan menimbang 50 mg serbuk kapsul. Dilakukan pemindaian sampel dengan instrumen NIR sehingga diperoleh data spektrum dengan absorbansi sebagai prediktor pada model kalibrasi PLS untuk analisis secara kuantitatif dan pada model LDA untuk menentukan klasifikasi komponen matriks dan alkaloid secara kualitatif. Sebagai data pembanding untuk penetapan kadar, digunakan metode spektrofotometri UV-Vis. Hasil analisis kadar alkaloid total dengan metode NIR dan kemometrik yang dibandingkan dengan metode pembanding spektrofotometri UV-Vis kemudian diuji dengan analisis statistik Uji T Dua Sampel Berpasangan.



BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian yang telah dilakukan, peneliti dapat menyimpulkan bahwa:

1. Penentuan kadar alkaloid dapat ditentukan dengan menggunakan metode spektroskopi inframerah dekat (NIR) dan kemometrik menggunakan model kalibrasi dengan PLS dan klasifikasi dengan LDA.
2. Hasil analisis kadar alkaloid total dengan metode spektroskopi NIR kemometrik dibandingkan dengan metode pembanding spektrofotometri UV-Vis tidak memiliki perbedaan yang bermakna setelah diuji dengan menggunakan analisis statistik Uji T Dua Sampel Berpasangan.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian, maka peneliti dapat memberikan saran pada penelitian ini sebagai berikut:

1. Perlu dibentuk sebuah model kalibrasi dengan jumlah sampel lebih banyak sehingga cakupan rentang konsentrasi lebih luas untuk kadar sampel yang akan dikuantitasi.
2. Perlu dikembangkan analisis kadar alkaloid pada ekstrak daun menggunakan metode kemometrik lainnya selain analisis secara kuantitatif dengan PLS.
3. Perlu dibentuk model kalibrasi sampel tanaman untuk penentuan beberapa kandungan fitokimia.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdollahi, H., Panahi, M. Shariat., Khoshayand, Mohammad Reza. 2003. *Simultaneous Spectrophotometric Determination of Iron, Cobalt and Copper by Partial Least-Squares Calibration Method in Micellar Medium*. Iranian Journal of Pharmaceutical Research, 207-212.
- Africia, S. M. 2007. *Kombinasi Metode Spektrofotometri dan Kalibrasi Multivariat untuk Penentuan Simultan Natrium Benzoat dan Kalsium Sorbat*. Skripsi, Bogor: Institut Pertanian Bogor.
- Ajanal, M., Gundkalle, M.B., Nayak,S.U., 2012. *Estimation of total alkaloid in ChitrakadivatibyUV-Spectrophotometer*.
www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles?PMC3644759/#
- Aksara, R., Musa, W.J.A., Alio, L. 2003. *Identifikasi Senyawa Alkaloid Dari Ekstrak Metanol Kulit Batang Mangga (Mangifera indica L)*. Jurnal Entropi, Volume Viii, Nomor 1.
- Amin, M. S. 2011. *Pengkajian Metode Near Infrared (NIR) untuk Evaluasi Mutu Pakan Ayam Broiler secara Cepat dan Akurat*. Bogor: IPB.
- A.M. Levent. 2002. *HPLC method for the analysis of paracetamol, caffeine, and dipyrone*. Turk. J. Chem. 26 : 521-528.
- Andasuryani., Purwanto, Y.A., Budiastara, I.W & Syamsu, K. 2014. *Prediction Of Catechin Content in Gambier (Uncaria gambir Roxb.) Using NIR Pectroscopy*. Jurnal Teknologi Industri Pertanian. 24 (1): 43-52.
- AOAC. 1998. *Peer-Verified Methods Program Manual on Policies and Procedures*. USA: Arlington, Virginia.

- Ashley, K., Andrews, R. N., Cavazos, L. and Demange, M. 2001. *Ultrasonic extraction as a sampel preparation technique for elemental analysis by atomic spectrometry*. Journal of Analytic Spectrometry, 16, p.1147–1153.
- Astarina, N.W.G., Astuti, K.W., Warditiani, N.K. 2013. *Skrining Fitokimia Ekstraksi Metanol Rimpang Bangle (Zingiber purpureum Roxb.)*. Skripsi. Bali: UNUD.
- Awa, K., Okumura, T., Shinzawa, H., Otsuka, M & Ozaki, Y. 2008. *Self-modeling curve resolution (SMCR) analysis of near-infrared (NIR) imaging data of pharmaceutical tablets*. Analytica Chimica Acta. 619: 81-86.
- Azzahra, F., Lukmayani, Y., Sajidah, E.R. 2015. *Isolasi dan Karakterisasi Alkaloid dari Daun Sirih Merah (Piper Crocatum Ruiz & Pav)*. ISSN 2460-6472.
- Baranska, W. 2005. Quality control of harpagophytum procumbens and its related phytopharmaceutical products by means of NIR-FT-Raman spectroscopy. *Biopolymers*, 77, p.1–8.
- Berrueta, L. A., Alonso-Salces, R. M. and Héberger, K. 2007. *Supervised pattern recognition in food analysis*. Journal of Chromatography, 1158, p.196–214.
- Bro, R. 2003. *Multivariate calibration : What is in chemometrics for the analytical chemist?* Analytica Chimica Acta, 500, p.185–194.
- Camo.2005.*TheUnscramblerMethods*.<http://www.camo.com/downloads/U9.6%20pdf%20manual/The%20Unscrambler%20Methods.pdf>.(27 April 2015)
- Cody, V. 1985. *Flavonoid in Biology And Medicine II, Biochemical Celluler and Medicinal Properties*. New York: Liss In
- Cutter, E. 1989. *Plant Anatomy: Experiment and Interpretation Part 2 Organs*. London: The English Language Book Society and Edward Arnold (Publishers) Ltd.
- C. Qing-Chun, and J. Wang. 2001. *Simultaneous determination of artificial sweetners, preservatives, caffeine, theobromine, and theophylline in food and pharmaceutical preparations by ion chromatography*. J. Chromatogr. A 937: 57-64.

- Departemen Kesehatan Republik Indonesia. 1989. *Materia Medika Indonesia Jilid V*. Jakarta: Direktorat Jenderal Pengawasan Obat Dan Makanan. Halaman 194-197, 513-520, 536, 539-540, 549-552.
- Departemen Kesehatan Republik Indonesia. 1995. *Farmakope Indonesia Edisi IV*. Jakarta : Direktorat Jenderal Pengawasan Obat dan Makanan.
- Dirjen POM. 1995. *Materia Medika Indonesia, Jilid VI*. Jakarta: Departemen Kesehatan Republik Indonesia. Hal. 103-113.
- Dirjen POM. 1999. *Farmakope Indonesia, Edisi ke-4*. Jakarta: Departemen Kesehatan Republik Indonesia, 7-8.
- Evi, M. R., Rhardjo, B., Sutiarmo, L& Hardjoko, A. 2012. *Pendekatan Multivariat Untuk Pengukuran Kualitas Tomat (Lycopersicon esculentum) Berdasarkan Parameter Warna*. AGRITECH. 32(1) : 79-86.
- Ewald, C., Modig, S. F., Johansson, K., Sjöholm, I. and Akesson, B. 1999. *Effect of processing on major flavonoids in processed onions, green beans, and peas*. Food Chemistry, 64, p.231–235.
- Fauzi, M. and Trilita, M. N. (2005). *Aplikasi artificial neural network untuk peramalan aliran sungai blega*. Jurnal Rekayasa Perencanaan, 1 (3).
- Gad, H., El-Ahmady, S., Abou-Shoer, M. and Al-Azizi, M. 2012. *Application of chemometrics in authentication of herbal medicines: A review*. Phytochemical Analysis, 24, p.1–24.
- Handa, S., Khanuja, S., Longo, G., dan Rakesh, D. 2008. *Extraction Technologies for Medicinal and Aromatic Plants*. Italy : International Centre for Science and High Technology.
- Harborne, J. 1987. *Metode Fitokimia: Penuntun Cara Modern Menganalisis Tumbuhan*. Bandung: ITB Press.
- Harmita. 2004. *Petunjuk pelaksanaan validasi metode dan cara perhitungannya*. Majalah Ilmu Kefarmasian, 1, p.117–135.

- Hartati, I. 2010. *Isolasi Alkaloid Dari Tepung Gadung (Dioscorea hispida Dennst) Dengan Teknik Ekstraksi Berbantu Gelombang Mikro*. Tesis. Semarang: UNDIP.
- Hernani., Marwati, T dan Winarti, C. 2007. *Pemilihan Pelarut Pada Pemurnian Ekstrak Lengkuas (Alpinia galanga) Secara Ekstraksi*. J.Pascapanen 4(1): 1-8.
- K. Masatoki, and T. Hirokazu. 2000. *Fluorometric reactions of purines and determination of caffeine*. Talanta 36: 1171-1175.
- Karlinasari, L., Sabed, M., Wistara, N. J., Purwanto, Y. A& Wijayanto, H. 2012. *Karakteristik Spektra Absorbansi NIR (Near Infra Red) Kayu Acacia mangium WILLD. Pada 3 Umur Berbeda*. Jurnal Ilmu Kehutanan.6 (1) : 45-52
- Kementrian Kehutanan RI. 2010. Lokakarya Nasional Tanaman Obat Indonesia. [Online]. Available at: <http://www.dephut.go.id/index.php?q=id/node/6603>. [Accessed: 23 April 2015].
- Kohavi, R. 1995. *A study of cross validation and bootsrap for accuracy estimation and model selection*. Internatioanl Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI), 14 (2), p.1137–1145.
- Kumar, S. and Pandey, A. 2013. *Chemistry and biological activities of flavonoids: an overview*. The Scientific World Journal, 2013.
- Kuno, A. and Matsuo, M. 2000. *Nondestructive specication of solid mixtures by multivariate calibration of x-ray absorption near edge strucure using artificial neural networks and partial least square*. Analytic Sci, 16, p.597–602.
- Latifaningsih, L. 2012. *Pengaruh Konsentrasi Dan Waktu Perendaman Dalam Larutan Asam Asetat Terhadap Sifat Sensoris, Kadar Protein Total, Dan Alkaloid Total Emping Melinjo*. Skripsi. Surakarta : UNS.
- Latifa, R. 2015. *Karakter Morfologi Daun Beberapa Jenis Pohon Penghijauan Hutan Kota Di Kota Malang*. Skripsi. Malang : UMM.

- Lengkey, L., Budiastira, I., Seminar K., dan Purwoko, B. 2013. *Prediction Model of Moisture , Fat, and Free Fatty Acid Content of Physic Nut (Jatropha curcas L.) Seed Using Near Infrared (NIR) Spectroscopy and Partial Least Square (PLS) Method*. Jurnal Littri. 19(4)
- Lohninger, H. 2004. *Multivariate calibration* [terhubung berkala]. Available at: http://www.vias.org/tmdatanaleng/cc_multivarcal.html. [Accessed: 23 April 2015].
- Malangngi, Liberty P., Sangi, Meiske S., Paendong J.J.E. 2012. *Penentuan Kandungan Tanin dan Uji Aktivitas Antioksidan Ekstrak Biji Buah Alpukat (Persea americana Mill)*. Jurnal MIPA USNSRAT ONLINE 1 (1) 5-10.
- Mantanus, J. (2012). *New Pharmaceutical Applications Involving Near Infrared Spectroscopy as A PAT Compliant Process Analyzer*. Thesis, Belgium: University of Liege.
- Miller, J. and Miller, J. 2000. *Statistic and Chemometrics for Analytical Chemistry*. Fourth Edition. Harlow: Pearson Education.
- Miller, J. and Miller, J. 2005. *Statistic and Chemometrics for Analytical Chemistry*. Fifth Edition. Harlow: Pearson Education.
- Miller, J. and Miller, J. 2010. *Statistic and Chemometrics for Analytical Chemistry*. Sixth Edition. Harlow: Pearson Education.
- Mulja, M. & Suharman. 1995. *Analisis Instrumental*. Surabaya : Airlangga University Press.
- Pranowo, H., Tahur, I. and Widiatmoko, A. 2006. *Hubungan kuantitatif struktur elektronik dan aktivitas inhibisi senyawa kurkumin pada reaksi etoksiresorufin o-dealkilasi (erod)*. Indo. J. Chem, 7 (1), p.78–82.
- Resi, A. W. and Surgani, A. 2009. *Flavonoida (Quercetin) dalam Makalah Kimia Organik*, Program S2 Kimia. Makassar: Universitas Hassanudin Indonesia.
- Rohman, A. and Che Man, Y. 2010. *FTIR Spectroscopy combined with chemometrics for analysis of lard in the mixtures with body fat of lamb, cow, and chicken*. Int.l Food Res.J, 17, p.519–526.

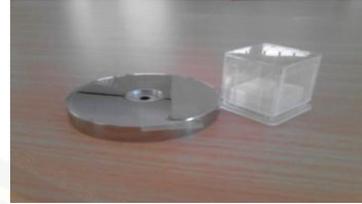
- Rohman, A., Sisindari., Erwanto, Y., Che Man, Y.B. 2011. *Analysis of Pork Adultration in Beef Meatball using Fouriner Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy*. Meat Science. 88: 91-95.
- Rozaini, N. 2003. *Teknik Sampling*. Medan: Fakultas Kesehatan Masyarakat Universitas Sumatera Utara.
- R. Pagliariussi, S. Frietas, A.P. Luis, and J.K. Bastos. 2002. *A quantitative method for the analysis of xanthine alkaloids in Paullinia cupana (guarana) by capillary gas chromatography*. J. Sep. Sci. 25: 371-374.
- Samson, E ., Semangun , H & Rondonuwu, F.S. 2013. *Analisis Kandungan Karotenoid Ekstrak Kasar Buah Pisang Tongkat Langit (Musa troglodytarum) Dengan Menggunakan Spektroskopi NIR (Near Infrared)*. Traditional Medicine Journal, 18(1) : 17-21.
- Sari, D.K., Waedhani, D.H., Prasetyaningrum, A. 2012. *Pengujian Kandungan Total Fenol Kappahycus alvarezzi Dengan Metode Ekstraksi Ultasonik Dengan Variasi Suhu Dan Waktu*. ISBN 978-602. 1-3.
- Schwanninger M, Rodrigues & Fackler, K.J.C. 2011. *A Review of Band Assignments in Near Infrared Spectra of Wood & Wood Components*. J.Near Infrared Spectroscopy, 19: 287-308.
- Shamsa, F., Monsef, H., Gharmooshi, R. and Verdian-rizi, M. 2008. *Spectrophotometric determination of total alkaloids in some Iranian medicinal plants*. Thai J. Pharm. Sci. 32 17-20.
- Siaputra, L., Atmadja, A.S. 2006. *Pengaruh Pengumuman Dividen Terhadap[Harga Saham Sebelum dan Sesudah Ex-Dividend Date di Bursa Efek Jakarta (BEJ)*. Jurnal Akuntansi Dan Keuangan, Vol 8, NO. 1. 71-77.
- Stanimirova, I., Ustun, B., Cajka, T., Riddlelova, K., Hajslova, J., Buydens, L. M. C & Walczak, B. 2010. *Tracing the Geographical Origin of Honeys Using the GCxGC-MS & Pattern Recognition Techniques*. Food Chemistry, 118: 171-176.

- Stchur, P., Cleveland, D., Zhou, J. and Michel, R. 2002. *A review of recent applications of near infrared spectroscopy, and the characteristics of a novel PbS CCD array-based near infrared spectrometer*. Appl Spect Rev, 37, p.383–428.
- Susanti, S. 2010. *Penetapan Kadar Formaldehid Pada Tahu Yang Dijual Di Pasar Ciputat Dengan Metode Spektrofotometri UV-Vis Disertai Kolorimetri Menggunakan Pereaksi NASH*. Skripsi. Jakarta: UIN.
- Sutedjo. (1989). *Fotosintesis tumbuhan*. Bandung: Rineka Cipta.
- Tjahjanto, R.T dan Gunlazuardi, J. 2001. *Preparasi Lapisan Tipis TiO₂ sebagai Fotokatalis: Keterkaitan antara Ketebalan dan Aktivitas Fotokatalisis*. Makara, Jurnal Penelitian, Vol 5, nomor 2, Hal 81-91.
- Titis, M., Fachirah, E., Kusriani, D. 2013. *Isolasi Idenifikasi dan Uji Aktifitas Senyawa Alkaloid Daun Binahong (Anredera cordifolia (Tenora) Steenis)*. Chem info, Vol 1, No 1, Hal 196-201.
- Varmuza, K. 2000. *Applied chemometrics: from chemical data to relevant information*. 1st Conference on Chemistry Cairo University.
- Wulandari, I. 2011. *Teknologi Ekstraksi Dengan Metode Maserasi Dalam Etanol 70% Pada Daun Kumis Kucing (Osthosiphon Stamineus Benth) Di Balai Besar Penelitian Dan Pengembangan Tanaman Obat Dan Obat Tradisional (B2P2TO-OT) Tawangmangu*. Skripsi. Surakarta: UNS
- X. Qing-qin, D.L. Ming, J.P. Wang, and A.H. Bai. 2002. *Directmdetermination of caffeine and theophylline by gas chromatography*, Fenxi Kexue Xuebao 18: 520-525.
- Zou, H., Yang, G., Qin, Z., Jiang, W., Du, A. and Aboul-Enein, H. 2005. *Progress in quality control of herbal medicine with IR fingerprint spectra*. Analytical Letters, 38, p.1457–1475.

LAMPIRAN**LAMPIRAN A. ALAT DAN BAHAN YANG DIGUNAKAN****A.1 Sampel Training Set dan Test set****A.2 Sampel Nyata****A.3 Instrumen**

a. Spektrofotometer NIR b. Spektrofotometri UV-Vis

A.4 Kompartemen Sampel

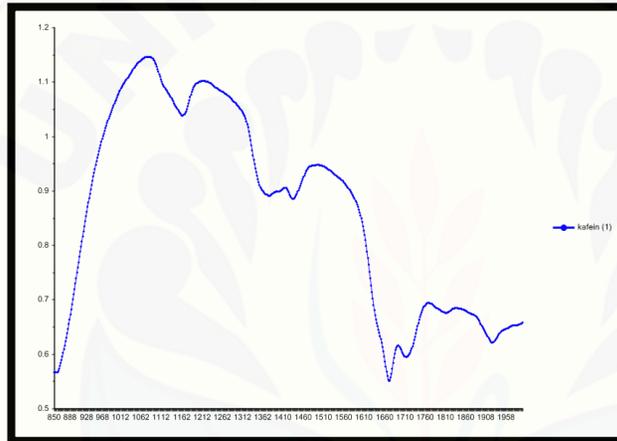


a. Kompartemen sampel spektro b. Kompartemen sampel NI

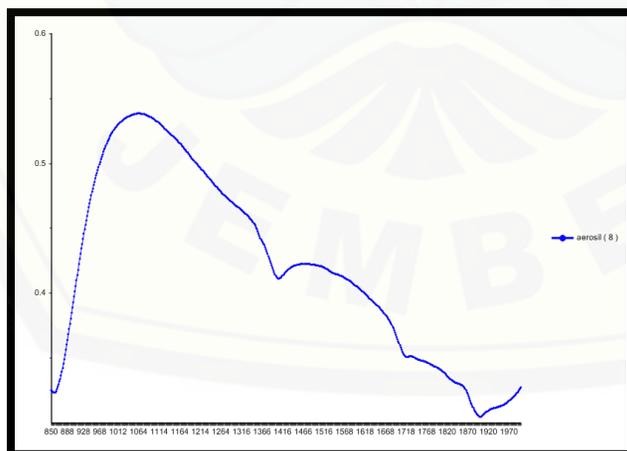
LAMPIRAN B. Spektroskopi NIR

B.1 Spektroskopi NIR

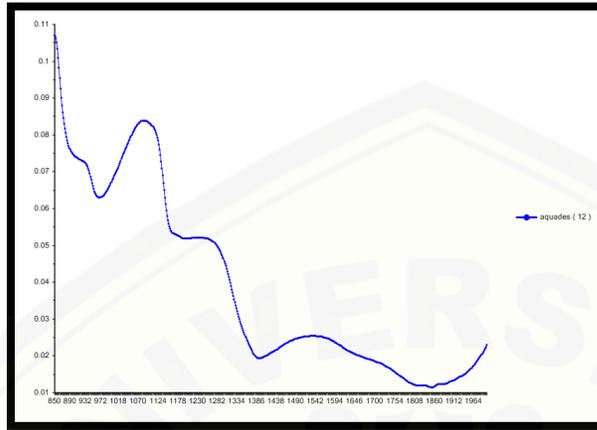
1. Spektrum Standar Kafein



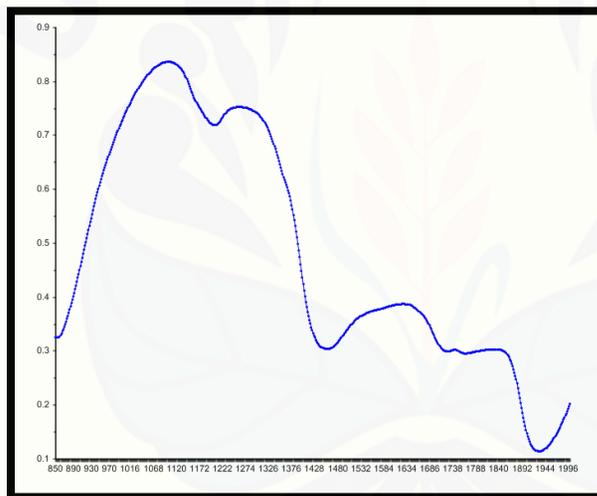
2. Spektrum Aerosil



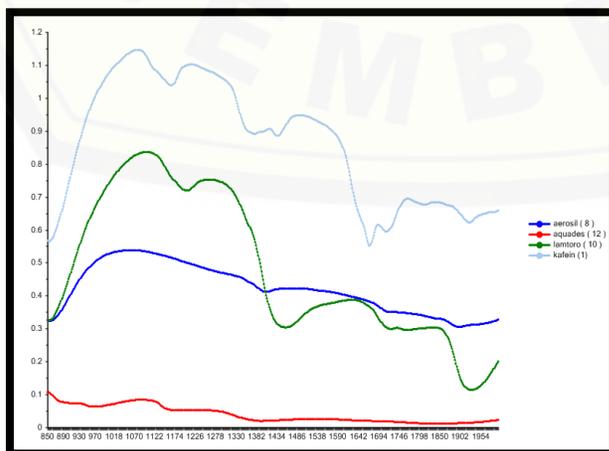
3. Spektrum Akuades



4. Spektrum Ekstrak sampel



5. Spektrum Gabungan



LAMPIRAN C. Identitas Sampel Ekstrak**C.1 Sampel Training Set**

No	Kode	Sampel
	A	Kopi arabika muda
	B	Kopi arabika tua
	C	Blimbing
	D	Binahong
	E	Buncis
	F	Jambu biji
	G	Katuk
	H	Kembang bulan
	I	Kluwih
	J	Kunir
	K	Lamtoro
	L	Mangga
	M	Mengkudu
	N	Pandan
	O	Pare

C.2 Sampel Test Set

No	Kode	Sampel
	P	Pepaya
	Q	Putri malu
	R	Sambiloto
	S	Sirih
	T	Sirsak

C.3 Sampel Nyata

Sampel	Pabrik	Kandungan Ekstrak	Waktu Kadaluarsa	Bobot ekstrak per kapsul
Stimuno	Dexa medica	Meniran	Maret 2017	50 mg
Daun salam	Herbalindo utama	Salam	Mei 2016	200 mg

LAMPIRAN D. Perhitungan % Rendemen

$$\% \text{ Rendemen ekstrak} = \frac{\text{berat ekstrak yang didapat}}{\text{berat serbuk yang diekstraksi}} \times 100\%$$

No	Nama Simplisia	Serbuk	Ekstrak	% Rendemen
1	Binahong	80,0435	2,5243	3,154
2	Jambu biji	80,0304	5,2717	6,587
3	Katuk	80,0442	3,4661	4,309
4	Kembang bulan	80,0994	2,5000	3,121
5	Kunir	80,4729	4,6482	5,776
6	Lamtoro	80,0066	2,6083	3,260
7	Mangga	80,1578	8,2029	10,23
8	Mengkudu	80,0248	3,0480	3,809
9	Pandan	80,0750	2,2540	2,815
10	Patikan kebo	80,0570	2,9762	3,718
11	Pepaya	80,0112	5,3008	6,625
12	Sirih	80,0465	3,9268	4,906
13	Sirsak	80,1078	3,6850	4,600

LAMPIRAN E. Data Absorbansi Penetapan Kadar Alkaloid Total

E.1 Alkaloid

U-1800 Spectrophotometer
 Serial NUM: 5730116
 ROM Version: 07
 Sample Name:
 Date:
 Operator:

Wavelength Scan
 Data Mode: ABS
 Scan Range: 500.0-200.0nm
 Slit Width: 4nm
 Speed(nm/min): 100nm/min
 Lamp Change Wavelength: 340.0nm
 Path Length:

ALL Data							
WL(nm)	ABS	WL(nm)	ABS	WL(nm)	ABS	WL(nm)	ABS
500.0	0.716	499.5	0.718	499.0	0.717	498.5	0.718
498.0	0.719	497.5	0.720	497.0	0.720	496.5	0.720
496.0	0.721	495.5	0.722	495.0	0.723	494.5	0.724
494.0	0.726	493.5	0.728	493.0	0.728	492.5	0.729
492.0	0.730	491.5	0.732	491.0	0.733	490.5	0.734
490.0	0.734	489.5	0.735	489.0	0.736	488.5	0.737
488.0	0.739	487.5	0.739	487.0	0.740	486.5	0.741
486.0	0.742	485.5	0.742	485.0	0.743	484.5	0.744
484.0	0.745	483.5	0.746	483.0	0.747	482.5	0.748
482.0	0.749	481.5	0.750	481.0	0.751	480.5	0.752
480.0	0.754	479.5	0.755	479.0	0.756	478.5	0.757
478.0	0.758	477.5	0.759	477.0	0.760	476.5	0.761
476.0	0.763	475.5	0.764	475.0	0.766	474.5	0.767
474.0	0.768	473.5	0.769	473.0	0.771	472.5	0.773
472.0	0.775	471.5	0.777	471.0	0.778	470.5	0.779
470.0	0.781	469.5	0.782	469.0	0.783	468.5	0.784
468.0	0.785	467.5	0.787	467.0	0.788	466.5	0.789
466.0	0.790	465.5	0.791	465.0	0.792	464.5	0.794
464.0	0.795	463.5	0.795	463.0	0.797	462.5	0.799
462.0	0.800	461.5	0.801	461.0	0.803	460.5	0.804
460.0	0.805	459.5	0.807	459.0	0.809	458.5	0.810
458.0	0.812	457.5	0.813	457.0	0.815	456.5	0.816
456.0	0.817	455.5	0.818	455.0	0.820	454.5	0.821
454.0	0.823	453.5	0.825	453.0	0.827	452.5	0.829
452.0	0.830	451.5	0.832	451.0	0.833	450.5	0.835
450.0	0.836	449.5	0.838	449.0	0.840	448.5	0.841
448.0	0.841	447.5	0.843	447.0	0.844	446.5	0.845
446.0	0.846	445.5	0.848	445.0	0.849	444.5	0.849
444.0	0.850	443.5	0.851	443.0	0.852	442.5	0.853
442.0	0.854	441.5	0.855	441.0	0.856	440.5	0.856
440.0	0.857	439.5	0.858	439.0	0.858	438.5	0.859
438.0	0.860	437.5	0.862	437.0	0.863	436.5	0.864
436.0	0.864	435.5	0.865	435.0	0.866	434.5	0.867
434.0	0.868	433.5	0.869	433.0	0.869	432.5	0.870
432.0	0.871	431.5	0.871	431.0	0.872	430.5	0.873
430.0	0.874	429.5	0.874	429.0	0.873	428.5	0.873
428.0	0.877	427.5	0.872	427.0	0.872	426.5	0.872
426.0	0.872	425.5	0.872	425.0	0.872	424.5	0.872
424.0	0.871	423.5	0.870	423.0	0.870	422.5	0.869
422.0	0.869	421.5	0.869	421.0	0.869	420.5	0.869
420.0	0.868	419.5	0.868	419.0	0.868	418.5	0.867
418.0	0.866	417.5	0.865	417.0	0.864	416.5	0.863
416.0	0.862	415.5	0.862	415.0	0.861	414.5	0.860
414.0	0.859	413.5	0.859	413.0	0.858	412.5	0.857
412.0	0.855	411.5	0.853	411.0	0.851	410.5	0.850
410.0	0.848	409.5	0.847	409.0	0.846	408.5	0.845
408.0	0.844	407.5	0.843	407.0	0.842	406.5	0.841
406.0	0.840	405.5	0.838	405.0	0.837	404.5	0.836
404.0	0.835	403.5	0.833	403.0	0.832	402.5	0.830
402.0	0.828	401.5	0.827	401.0	0.826	400.5	0.825
400.0	0.823	399.5	0.822	399.0	0.820	398.5	0.819
398.0	0.818	397.5	0.817	397.0	0.816	396.5	0.814
396.0	0.813	395.5	0.811	395.0	0.809	394.5	0.807
394.0	0.806	393.5	0.805	393.0	0.804	392.5	0.804
392.0	0.803	391.5	0.801	391.0	0.799	390.5	0.797
390.0	0.796	389.5	0.795	389.0	0.793	388.5	0.792
388.0	0.790	387.5	0.789	387.0	0.787	386.5	0.786
386.0	0.784	385.5	0.782	385.0	0.781	384.5	0.780

LAMPIRAN F. Pembuatan Larutan pada Penetapan Kadar Alkaloid Total**F.1 Larutan Alkaloid**

$$\text{Standar Induk} \frac{40,061 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4006,1 \mu\text{g/ml}$$

Pengenceran standar 1000 $\mu\text{g/ml}$

- $\frac{2,5 \text{ ml}}{10 \text{ ml}} \times 4006,1 \mu\text{g/ml} = 1001,53 \mu\text{g/ml}$
- $\frac{\text{ml}}{10 \text{ ml}} \times 1001,53 \mu\text{g/ml} = 200,31 \mu\text{g/ml}$
- $\frac{1 \text{ ml}}{10 \text{ ml}} \times 1001,53 \mu\text{g/ml} = 100,31 \mu\text{g/ml}$
- $\frac{0,5 \text{ ml}}{10 \text{ ml}} \times 1001,53 \mu\text{g/ml} = 50,31 \mu\text{g/ml}$

Pengenceran standar 400 ppm

- $\frac{1 \text{ ml}}{10 \text{ ml}} \times 4006,1 \mu\text{g/ml} = 400,61 \mu\text{g/ml}$
- $\frac{\text{ml}}{10 \text{ ml}} \times 400,61 \mu\text{g/ml} = 160,24 \mu\text{g/ml}$

F.2 Larutan Ekstrak

Sampel	Replikasi	Pembuatan Larutan Ekstrak
A	1	$\frac{20,04 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4008 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,04 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4008 \mu\text{g/ml}$
B	1	$\frac{20,11 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4022 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,10 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4020 \mu\text{g/ml}$
C	1	$\frac{20,15 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4030 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,17 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4034 \mu\text{g/ml}$
D	1	$\frac{40,15 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4001,5 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,12 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4001,2 \mu\text{g/ml}$
E	1	$\frac{20,09 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4018 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,14 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4028 \mu\text{g/ml}$
F	1	$\frac{20,03 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4006 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,03 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4006 \mu\text{g/ml}$
G	1	$\frac{40,03 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,03 \mu\text{g/ml}$

	2	$\frac{40,04 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,04 \mu\text{g/ml}$
H	1	$\frac{40 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,11 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4011 \mu\text{g/ml}$
I	1	$\frac{40,07 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,7 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,03 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,3 \mu\text{g/ml}$
J	1	$\frac{20,20 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4040 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,22 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4044 \mu\text{g/ml}$
K	1	$\frac{20,06 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4012 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,08 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4016 \mu\text{g/ml}$
L	1	$\frac{40,13 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,13 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,11 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,11 \mu\text{g/ml}$
M	1	$\frac{20,05 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4010 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,05 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4010 \mu\text{g/ml}$
<hr/>		
N	1	$\frac{40,01 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,1 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,07 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,7 \mu\text{g/ml}$
O	1	$\frac{40,02 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,2 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,08 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,8 \mu\text{g/ml}$
P	1	$\frac{20,23 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4046 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,25 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4050 \mu\text{g/ml}$
Q	1	$\frac{20,25 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4050 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,22 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4044 \mu\text{g/ml}$
R	1	$\frac{20,06 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4012 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,08 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4016 \mu\text{g/ml}$
S	1	$\frac{20,03 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4006 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{20,04 \text{ mg}}{5 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4008 \mu\text{g/ml}$
T	1	$\frac{40,02 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,2 \mu\text{g/ml}$
	2	$\frac{40,08 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 \mu\text{g/ml} = 4000,8 \mu\text{g/ml}$

LAMPIRAN G. Pembuatan Larutan Dapar Fosfat pH 4,7

Ditimbang 7,16 g Na_2HPO_4 dan 4,202g Asam sitrat dilarutkan dalam akuades 100 ml.

LAMPIRAN H. Pembuatan Larutan Bromecresol Green

Ditimbang 6,98 mg BCG dilarutkan dalam 0,3 ml 2N NaOH dan 0,5 ml akuades diultrasonik add 100 ml.

LAMPIRAN I. PENGUJIAN AKURASI

Adisi	Penimbangan sampel (mg)	Penambahan standar adisi (mg)	Massa teoritis (mg)	Massa hasil percobaan (mg)	Recovery (%)	Rata-rata (%)	RSD (%)
30%	40,12	0,5723	49,7160	49,0512	98,6628	98,4324	0,162
	40,12	0,5723	49,7160	49,0512	98,6628		
	40,15	0,5723	49,7443	48,7368	97,9716		
60%	40,12	1,1447	61,1640	59,3339	97,0078	97,1199	0,039
	40,12	1,1447	61,1640	59,3339	97,0078		
	40,15	1,1447	61,1923	59,5672	97,3443		
					Rata-rata	97,7762	0,101

Perhitungan sampel uji akurasi dengan metode standar adisi dilakukan dengan cara sebagai berikut :

Ekstrak yang digunakan untuk uji akurasi adalah ekstrak dengan kadar kafein paling tinggi, yaitu ekstrak K dengan rata-rata kadar kafein 47,694 mg CE/g (4,7694%).

1. Adisi 30%

- Pembuatan sampel adisi

Bila ditimbang sampel 40 mg, maka jumlah standar kafein yang ditambahkan dalam sampel sebesar:

$$\frac{40 \text{ mg} \times 4,7694 \times 0,3}{100 \text{ mg}} = 0,5723 \text{ mg standar kafein}$$

- Pembuatan sampel adisi

Menimbang standar dengan kafein = 5,723 mg, dimasukkan labu ukur 10 ml dan ditambahkan etanol sampai tanda batas.

$$\frac{5,723 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 = 572,3 \text{ ppm}$$

Cara kerja :

- a. Sebanyak 40 mg ekstrak ditimbang dan dimasukkan dalam labu ukur 10 mL, ditambahkan etanol (tidak sampai tanda batas).
- b. Memipet 1 ml larutan standar 572,3 ppm, memasukkan ke labu ukur 10 ml yang berisi larutan ekstrak, sehingga telah dilakukan adisi sebanyak 5,723 mg ke dalam 40 mg ekstrak.

$$1 \text{ ml dari } 572,3 \text{ ppm} = \frac{572,3 \text{ mg}}{1000 \text{ ml}} \times 1 \text{ ml} = 0,5723 \text{ mg}$$

- c. Menambahkan etanol sampai tanda batas.
- d. Sebanyak 0,5 ml larutan adisi dilarutkan 2 mL dapar fosfat pH 4,7 dan ditambahkan 2 mL larutan BCG kemudian diekstraksi dengan kloroform 3 mL sebanyak tiga kali ad 10 mL.

- Perhitungan % *recovery*

Misal : pada replikasi 1 dengan penimbangan sampel 40,12 mg

Konsentrasi teoritis :

$$\frac{4,7694 \text{ mg}}{100 \text{ mg}} \times 40,12 \text{ mg} = 1,9135 + 0,5723$$

$$= 2,4858 \text{ mg (jumlah alkaloid dalam sampel adisi 30%)}$$

$$\frac{2,4858 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 = 248,58 \text{ } \mu\text{g/ml}$$

$$248,58 \text{ } \mu\text{g/ml} \times 10 \text{ ml} = 2485,8 \text{ } \mu\text{g}$$

$$2485,8 \text{ } \mu\text{g} \times 10/0,5 \text{ ml} = 49,716 \text{ mg}$$

$$\text{Hasil percobaan} = 49,0512 \text{ mg}$$

$$\% \text{ recovery} = \frac{49,0512 \text{ mg}}{49,716 \text{ mg}} \times 100\% = 98,6628\%$$

2. Adisi 60%

- Pembuatan sampel adisi

Bila ditimbang sampel 40 mg, maka jumlah standar kafein yang ditambahkan dalam sampel sebesar:

$$\frac{40 \text{ mg} \times 4,7694 \times 0,6}{100 \text{ mg}} = 1,1447 \text{ mg standar kafein}$$

- Pembuatan sampel adisi

Menimbang standar dengan alkaloid = 11,447 mg, dimasukkan labu ukur 10 ml dan ditambahkan etanol sampai tanda batas.

$$\frac{11,447 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 = 1144,7 \text{ ppm}$$

Cara kerja :

- Sebanyak 40 mg ekstrak ditimbang dan dimasukkan dalam labu ukur 10 mL, ditambahkan etanol (tidak sampai tanda batas).
- Memipet 1 ml larutan standar 1144,7 ppm, memasukkan ke labu ukur 10 ml yang berisi larutan ekstrak, sehingga telah dilakukan adisi sebanyak 1,1447 mg ke dalam 40 mg ekstrak.

$$1 \text{ ml dari } 11388 \text{ ppm} = \frac{1144,7 \text{ mg}}{1000 \text{ ml}} \times 1 \text{ ml} = 1,1447 \text{ mg}$$

- Menambahkan etanol sampai tanda batas.
- Sebanyak 0,5 ml larutan adisi dilarutkan 2 mL dapar fosfat pH 4,7 dan ditambahkan 2 larutan BCG kemudian diekstraksi dengan kloroform 3 mL sebanyak tiga kali ad 10 mL.

- Perhitungan % *recovery*

Misal : pada replikasi 1 dengan penimbangan sampel 40,15 mg

Konsentrasi teoritis :

$$\frac{4.7694 \text{ mg}}{100 \text{ mg}} \times 40,15 \text{ mg} = 1,9149 + 1,1447$$

$$= 3,0596 \text{ mg (jumlah kafein dalam sampel adisi 60%)}$$

$$\frac{3,0596 \text{ mg}}{10 \text{ ml}} \times 1000 = 305,96 \text{ } \mu\text{g/ml}$$

$$305,96 \text{ } \mu\text{g/ml} \times 10 \text{ ml} = 3059,6 \text{ } \mu\text{g}$$

$$3059,6 \text{ } \mu\text{g} \times 10/0,5 \text{ ml} = 61,1923 \text{ mg}$$

$$\text{Hasil percobaan} = 59,5672 \text{ mg}$$

$$\% \text{ recovery} = \frac{59,5672 \text{ mg}}{61,1923 \text{ mg}} \times 100\% = 97,3443\%$$

**LAMPIRAN J. Hasil Pengukuran Kadar Alkaloid Total Sampel *Training Set*,
Test Set dan Sampel Nyata dengan Spektrofotometer UV-Vis**

J.1 Contoh Perhitungan

$$\text{Persamaan : } Y = 8,9688 \times 10^{-3} x - 0,3575$$

Replikasi 1

$$0,332 = 8,9688 \times 10^{-3} x - 0,3575$$

$$X = 76,8776 \mu\text{g/ml}$$

$$\text{Dalam 10 ml : } 76,8776 \mu\text{g/ml} \times 10 \text{ ml} = 768,776 \mu\text{g}$$

$$\text{Dalam 10 ml : } \frac{768,776 \mu\text{g}}{0,5 \text{ ml}} \times 10 \text{ ml} = 15,3755 \text{ mg}$$

$$: \frac{15,3755 \text{ mg}}{40,15} = 38,2952 \text{ mg CE/g ekstrak}$$

Replikasi 2

$$0,311 = 8,9688 \times 10^{-3} x - 0,3575$$

$$X = 74,5362 \mu\text{g/ml}$$

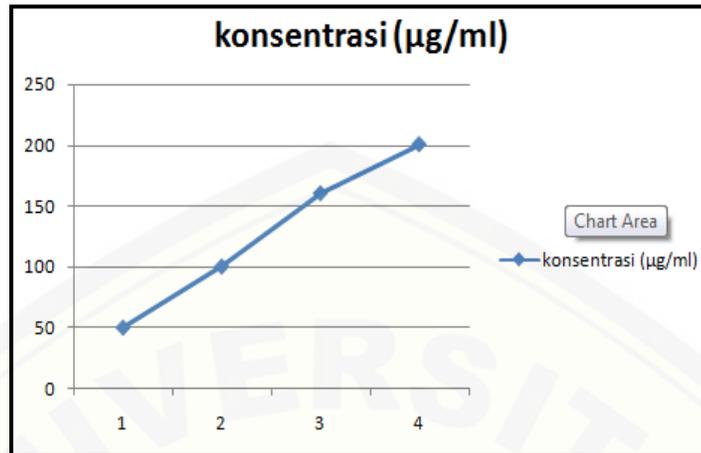
$$\text{Dalam 10 ml : } 74,5362 \mu\text{g/ml} \times 10 \text{ ml} = 745,362 \mu\text{g}$$

$$\text{Dalam 10 ml : } \frac{745,362 \mu\text{g}}{0,5 \text{ ml}} \times 10 \text{ ml} = 14,9072 \text{ mg}$$

$$: \frac{14,9072 \text{ mg}}{40,12 \text{ mg}} = 37,1566 \text{ mg CE/g ekstrak}$$

Standar : Alkaloid

Konsentrasi ($\mu\text{g/ml}$)	Absorbansi
50,31	0,098
100,31	0,611
160,24	1,110
200,31	1,425



J.2 Hasil Perhitungan mg CE/g Ekstrak Seluruh *Training Set*

Sampel <i>Training Set</i>	Massa Penimbangan (mg)	Absorbansi	mg CE/g ekstrak	Rata-rata mg CE/g ekstrak
A	20,04	0,108	25,4422	25,4149
	20,04	0,107	25,3876	
B	20,11	0,171	29,3021	29,2816
	20,10	0,170	29,2612	
C	20,15	0,195	30,5719	30,5390
	20,17	0,196	30,2062	
D	40,15	0,332	38,2952	37,7259
	40,12	0,311	37,1566	
E	20,09	0,345	38,9881	39,0227
	20,14	0,348	39,0574	
F	20,03	0,436	44,1704	44,3374
	20,03	0,442	44,5044	
G	40,03	0,180	29,9425	29,5768
	40,04	0,167	29,2110	
H	40	0,110	26,0430	25,9059
	40,11	0,106	25,7687	
I	40,07	0,157	28,6327	28,6192
	40,03	0,156	28,6056	
J	20,20	0,191	30,2007	30,2483

	20,22	0,193	30,2989	
K	20,06	0,505	47,9395	47,6936
	20,08	0,497	47,4477	
L	40,13	0,334	38,4254	38,5184
	40,11	0,337	38,6114	
M	20,05	0,390	41,5683	41,5127
	20,05	0,388	41,4571	
N	40,01	0,114	26,2789	26,0645
	40,07	0,107	25,8501	
O	40,02	0,305	36,9151	36,8551
	40,08	0,304	36,7951	

J.3 Hasil Perhitungan mg CE/g Ekstrak Seluruh *Test Set*

Sampel <i>Test Set</i>	Massa Penimbangan (mg)	Absorbansi	mg CE/g ekstrak	Rata-rata mg CE/g ekstrak
P	20,23	0,354	34,3423	34,7357
	20,25	0,364	35,1291	
Q	20,25	0,149	25,0994	25,4196
	20,22	0,155	25,7399	
R	20,06	0,438	44,0043	44,2266
	20,08	0,441	44,4488	
S	20,03	0,310	37,1566	36,9804
	20,04	0,304	36,8042	
T	40,02	0,216	31,9559	31,4035
	40,08	0,197	30,8510	

J.4 Hasil Perhitungan mg CE/g Ekstrak Sampel Nyata

J.4.1 Persentase hasil percobaan (mg CE/g ekstrak) dengan metode spektroskopi NIR

	Predicted	Deviation
Stimuno (1)	2.2579	1.5264
Stimuno (2)	2.2516	1.5111
Stimuno (3)	2.1412	1.5127
Stimuno (4)	2.2580	1.5264
Stimuno (5)	2.2516	1.5111
Stimuno (6)	2.1412	1.5127
daun salam (1)	0.6569	2.1842
daun salam (2)	0.5369	2.1852
daun salam (3)	0.4807	2.2086
daun salam (4)	0.6569	2.1842
daun salam (5)	0.5369	2.1852
daun salam (6)	0.4807	2.2086

Masing-masing nilai mg CE/g ekstrak yang tercantum sebagai '*predicted*' pada Tabel diatas dihitung rata-ratanya dari sampel nyata sehingga diperoleh nilai rata-rata mg CE/g ekstrak sampel nyata yang ditentukan dengan metode spektroskopi NIR.

J.4.2 Perbandingan hasil penetapan kadar dengan metode spektroskopi NIR dan spektrofotometri UV-Vis dalam mg CE/g ekstrak

Sampel Nyata	Hasil Pengukuran mg CE/g ekstrak dengan NIR \pm SD	Hasil Pengukuran mg CE/g ekstrak dengan Spektrofotometri UV-Vis \pm SD
Stimuno	22,1960 \pm 1,557	25,1841 \pm 0,0106
Daun salam	5,5820 \pm 1,161	6,8703 \pm 0,0088

LAMPIRAN K. Hasil Analisis Statistik Uji T dengan *Program Statistical Product and Service Solutions* (SPSS)

Paired Samples Statistics

		Mean	N	Std. Deviation	Std. Error Mean
Pair 1	NIR	1. 3875E0	12	.868854 9	.250816 8

Paired Samples Statistics

		Mean	N	Std. Deviation	Std. Error Mean
Pair 1	NIR	1. 3875E0	12	.868854 9	.250816 8
	SPEKTRO	2. 553372E1	12	.808464 4	.233383 6

Paired Sam ons

		N	Correlation	Sig.
pair 1	NIR & SPEKTRO	12	.997	.000

Paired Samples Test

	Paired Differences					t	Df	Sig. (2-tailed)
	Mean	Std. Deviation	Std. Error Mean	95% Confidence Interval of the Difference				
				Lower	Upper			
Pair 1 NIR & SPEKTRO088 0929	.0 254302	-.0373415	.0746015	.733	11	.. 479

L.1.2 Data Training Set yang Digunakan sebagai Model Kalibrasi

	Measured	Predicted
aerosil (1)	0.0000	0.2074
aerosil (2)	0.0000	0.1702
aerosil (3)	0.0000	0.1519
aerosil (4)	0.0000	-0.5965
aerosil (5)	0.0000	-0.5983
aerosil (6)	0.0000	-0.5917
aerosil (7)	0.0000	0.3123
aerosil (8)	0.0000	0.3175
aerosil (9)	0.0000	0.3077
aerosil (10)	0.0000	-0.5770
aerosil (11)	0.0000	-0.5579
aerosil (12)	0.0000	-0.5708
aquades (1)	0.0000	0.5339
aquades (2)	0.0000	0.5377
aquades (3)	0.0000	0.5459

	Measured	Predicted
aerosil (4)	0.0000	-0.5965
aerosil (5)	0.0000	-0.5983
aerosil (6)	0.0000	-0.5917
aerosil (7)	0.0000	0.3123
aerosil (8)	0.0000	0.3175
aerosil (9)	0.0000	0.3077
aerosil (10)	0.0000	-0.5770
aerosil (11)	0.0000	-0.5579
aerosil (12)	0.0000	-0.5708
aquades (1)	0.0000	0.5339
aquades (2)	0.0000	0.5377
aquades (3)	0.0000	0.5459
aquades (4)	0.0000	0.1176
aquades (5)	0.0000	0.2115
aquades (6)	0.0000	0.2401

	Measured	Predicted
aquades (7)	0.0000	0.8876
aquades (8)	0.0000	0.9592
aquades (9)	0.0000	1.0135
aquades (10)	0.0000	0.6858
aquades (11)	0.0000	0.6612
aquades (12)	0.0000	0.6380
arabika muda (1)	2.5415	3.6675
arabika muda (2)	2.5415	3.6667
arabika muda (3)	2.5415	3.5596
arabika muda (4)	2.5415	3.6978
arabika muda (5)	2.5415	3.6060
arabika muda (6)	2.5415	3.4497
arabika muda (7)	2.5415	3.8806
arabika muda (8)	2.5415	3.8522
arabika muda (9)	2.5415	3.6561

	Measured	Predicted
arabika muda (10)	2.5415	4.2695
arabika muda (11)	2.5415	4.1781
arabika muda (12)	2.5415	4.1593
arabika tua (1)	2.9282	2.5062
arabika tua (2)	2.9282	2.4851
arabika tua (3)	2.9282	2.3538
arabika tua (4)	2.9282	2.7159
arabika tua (5)	2.9282	2.6355
arabika tua (6)	2.9282	2.5936
arabika tua (7)	2.9282	2.6797
arabika tua (8)	2.9282	2.5688
arabika tua (9)	2.9282	2.5310
arabika tua (10)	2.9282	3.3811
arabika tua (11)	2.9282	3.3769
arabika tua (12)	2.9282	3.2726

	Measured	Predicted	Pred STDE
belimbing (1)	3.0539	3.7259	1.9514
belimbing (2)	3.0539	3.8053	1.9519
belimbing (3)	3.0539	3.7539	1.9518
belimbing (4)	3.0539	1.5045	1.9175
belimbing (5)	3.0539	1.4497	1.9176
belimbing (6)	3.0539	1.5267	1.9178
belimbing (7)	3.0539	3.8401	1.9489
belimbing (8)	3.0539	3.7447	1.9488
belimbing (9)	3.0539	3.7128	1.9485
belimbing (10)	3.0539	3.0606	1.9338
belimbing (11)	3.0539	3.0898	1.9337
belimbing (12)	3.0539	2.9698	1.9336
binahong (1)	3.7726	3.6679	1.9077
binahong (2)	3.7726	3.5366	1.9071
binahong (3)	3.7726	3.5796	1.9070

	Measured	Predicted
binahong (4)	3.7726	2.4722
binahong (5)	3.7726	2.5298
binahong (6)	3.7726	2.4568
binahong (7)	3.7726	3.7669
binahong (8)	3.7726	3.7808
binahong (9)	3.7726	3.6246
binahong (10)	3.7726	3.1208
binahong (11)	3.7726	3.1502
binahong (12)	3.7726	3.0955
binahong (13)	3.7726	1.6823
binahong (14)	3.7726	1.7024
binahong (15)	3.7726	1.6003
buncis (1)	3.9023	3.9421
buncis (2)	3.9023	3.8479
buncis (3)	3.9023	3.8081

	Measured	Predicted
buncis (4)	3.9023	4.0925
buncis (5)	3.9023	3.9896
buncis (6)	3.9023	3.9762
buncis (7)	3.9023	4.1830
buncis (8)	3.9023	4.1718
buncis (9)	3.9023	4.0742
buncis (10)	3.9023	3.5571
buncis (11)	3.9023	3.4818
buncis (12)	3.9023	3.4382
jambu biji (1)	4.4337	2.5885
jambu biji (2)	4.4337	2.5291
jambu biji (3)	4.4337	2.5449
jambu biji (4)	4.4337	1.9787
jambu biji (5)	4.4337	1.9422
jambu biji (6)	4.4337	1.8544

	Measured	Predicted
jambu biji (7)	4.4337	2.0849
jambu biji (8)	4.4337	1.9954
jambu biji (9)	4.4337	1.9323
jambu biji (10)	4.4337	1.4916
jambu biji (11)	4.4337	1.3768
jambu biji (12)	4.4337	1.3275
kafein1	100.0000	99.6120
kafein2	100.0000	99.6113
kafein3	100.0000	99.6745
kafein4	100.0000	99.6255
kafein5	100.0000	99.4766
kafein6	100.0000	99.3899
kafein7	100.0000	99.3582
kafein8	100.0000	99.3593
kafein9	100.0000	102.7212

	Measured	Predicted
katuk (9)	2.9577	0.3960
katuk (10)	2.9577	0.3585
katuk (11)	2.9577	0.2688
katuk (12)	2.9577	0.2321
keluwih (1)	2.8619	2.3613
keluwih (2)	2.8619	2.3508
keluwih (3)	2.8619	2.3522
keluwih (4)	2.8619	2.2598
keluwih (5)	2.8619	2.2270
keluwih (6)	2.8619	2.0665
keluwih (7)	2.8619	2.0456
keluwih (8)	2.8619	1.9879
keluwih (9)	2.8619	1.8756
keluwih (10)	2.8619	2.8580
keluwih (11)	2.8619	2.8191

	Measured	Predicted
keluwih (12)	2.8619	2.7150
kembang bulan (1)	2.5906	6.1049
kembang bulan (2)	2.5906	6.0343
kembang bulan (3)	2.5906	5.9646
kembang bulan (4)	2.5906	6.0181
kembang bulan (5)	2.5906	5.9538
kembang bulan (6)	2.5906	5.8088
kembang bulan (7)	2.5906	5.6458
kembang bulan (8)	2.5906	5.6064
kembang bulan (9)	2.5906	5.5552
kembang bulan (10)	2.5906	5.9795
kembang bulan (11)	2.5906	5.9559
kembang bulan (12)	2.5906	5.9508
kunir (1)	3.0248	5.0700
kunir (2)	3.0248	5.0183

	Measured	Predicted
kunir (3)	3.0248	5.0793
kunir (4)	3.0248	6.8113
kunir (5)	3.0248	6.6814
kunir (6)	3.0248	6.6827
kunir (7)	3.0248	5.8760
kunir (8)	3.0248	5.8147
kunir (9)	3.0248	5.8480
kunir (10)	3.0248	5.3022
kunir (11)	3.0248	5.1377
kunir (12)	3.0248	5.1237
kunir (13)	3.0248	5.8582
kunir (14)	3.0248	5.8033
kunir (15)	3.0248	5.8290
lamtoro (1)	4.7694	3.5103
lamtoro (2)	4.7694	3.4331

	Measured	Predicted
lamtoro (3)	4.7694	3.4218
lamtoro (4)	4.7694	3.7687
lamtoro (5)	4.7694	3.7820
lamtoro (6)	4.7694	3.7768
lamtoro (7)	4.7694	4.3147
lamtoro (8)	4.7694	4.2527
lamtoro (9)	4.7694	4.2465
lamtoro (10)	4.7694	3.3802
lamtoro (11)	4.7694	3.3788
lamtoro (12)	4.7694	3.3504
mangga (1)	3.8518	5.1166
mangga (2)	3.8518	4.9908
mangga (3)	3.8518	4.8960
mangga (4)	3.8518	5.5126
mangga (5)	3.8518	5.3890

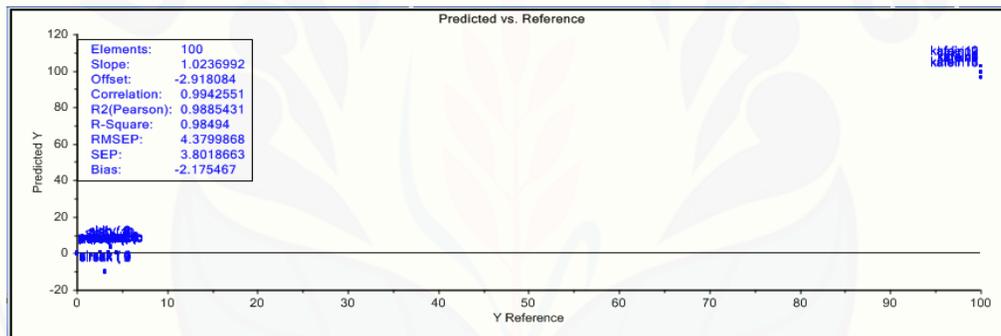
	Measured	Predicted
mangga (6)	3.8518	5.3357
mangga (7)	3.8518	5.4776
mangga (8)	3.8518	5.3330
mangga (9)	3.8518	5.2357
mangga (10)	3.8518	4.9088
mangga (11)	3.8518	4.7940
mangga (12)	3.8518	4.6600
mangga (13)	3.8518	4.1988
mangga (14)	3.8518	4.1453
mangga (15)	3.8518	4.0774
mengkudu (1)	4.1513	4.1431
mengkudu (2)	4.1513	4.0804
mengkudu (3)	4.1513	4.0217
mengkudu (4)	4.1513	4.4139
mengkudu (5)	4.1513	4.3139

	Measured	Predicted
mengkudu (6)	4.1513	4.2923
mengkudu (7)	4.1513	4.7413
mengkudu (8)	4.1513	4.6366
mengkudu (9)	4.1513	4.5296
mengkudu (10)	4.1513	3.9731
mengkudu (11)	4.1513	3.8405
mengkudu (12)	4.1513	3.6986
pandan (1)	2.6065	5.1597
pandan (2)	2.6065	4.9643
pandan (3)	2.6065	4.9259
pandan (4)	2.6065	5.4612
pandan (5)	2.6065	5.4234
pandan (6)	2.6065	5.3168
pandan (7)	2.6065	5.3807
pandan (8)	2.6065	5.3256

	Measured	Predicted
pandan (9)	2.6065	5.2360
pandan (10)	2.6065	4.4135
pandan (11)	2.6065	4.3971
pandan (12)	2.6065	4.2808
pare (1)	3.6855	-0.0905
pare (2)	3.6855	-0.1458
pare (3)	3.6855	-0.1444
pare (4)	3.6855	0.2879
pare (5)	3.6855	0.2121
pare (6)	3.6855	0.1077
pare (7)	3.6855	0.2248
pare (8)	3.6855	0.1802
pare (9)	3.6855	0.0915
pare (10)	3.6855	-0.0091
pare (11)	3.6855	-0.1199

pare (11)	3.6855	-0.1199
pare (12)	3.6855	-0.1415

L.2.3 Hasil Validasi Model Kalibrasi dengan *Test Set*



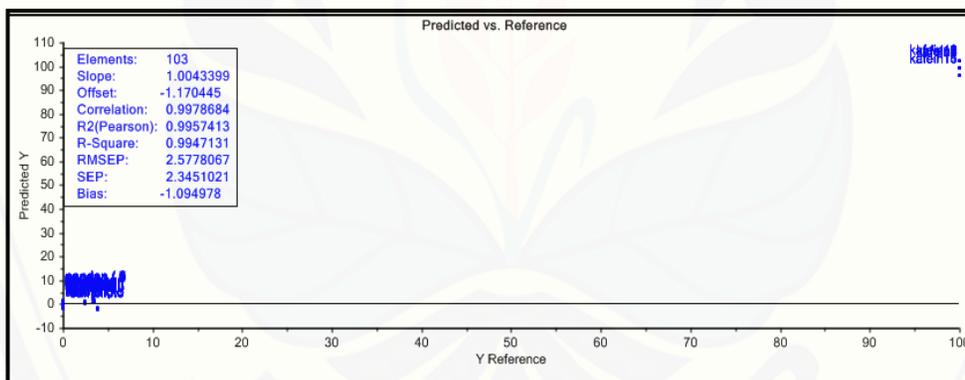
L.2.4 Data *Test Set* yang Digunakan dalam Validasi Model Kalibrasi

	Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference
aerosil (1)	0.2074	2.6806	0.0000	aquades (4)	0.1176	1.9361	0.0000	kafein7	99.3582	0.7461	100.0000
aerosil (2)	0.1701	2.7163	0.0000	aquades (5)	0.2116	1.9189	0.0000	kafein8	99.3592	0.7507	100.0000
aerosil (3)	0.1519	2.7583	0.0000	aquades (6)	0.2400	1.9146	0.0000	kafein9	102.7213	0.8245	100.0000
aerosil (4)	-0.5965	4.0035	0.0000	aquades (7)	0.8875	1.6529	0.0000	kafein10	102.7404	0.8352	100.0000
aerosil (5)	-0.5983	3.9935	0.0000	aquades (8)	0.9592	1.6421	0.0000	kafein11	102.6779	0.8030	100.0000
aerosil (6)	-0.5917	3.9887	0.0000	aquades (9)	1.0136	1.6525	0.0000	kafein12	102.7641	0.8203	100.0000
aerosil (7)	0.3122	2.9404	0.0000	aquades (10)	0.6857	1.9708	0.0000	kafein13	96.5357	0.6631	100.0000
aerosil (8)	0.3175	2.9315	0.0000	aquades (11)	0.6611	1.9775	0.0000	kafein14	96.5204	0.6633	100.0000
aerosil (9)	0.3077	2.9356	0.0000	aquades (12)	0.2074	2.6806	0.0000	kafein15	96.4267	0.6621	100.0000
aerosil (10)	-0.5770	1.8705	0.0000	kafein1	99.6120	1.0159	100.0000	kafein16	96.4848	0.6615	100.0000
aerosil (11)	-0.5580	1.8611	0.0000	kafein2	99.6113	0.9921	100.0000	pepaya (1)	0.6624	2.0859	3.4736
aerosil (12)	-0.5708	1.8519	0.0000	kafein3	99.6745	1.0446	100.0000	pepaya (2)	0.6547	2.0990	3.4736
aquades (1)	0.5338	1.8416	0.0000	kafein4	99.6255	1.0260	100.0000	pepaya (3)	0.6251	2.1336	3.4736
aquades (2)	0.5378	1.8112	0.0000	kafein5	99.4766	0.6911	100.0000	pepaya (4)	1.1051	1.9320	3.4736
aquades (3)	0.5459	1.8082	0.0000	kafein6	99.3899	0.7030	100.0000	pepaya (5)	1.0730	1.9545	3.4736
aquades (4)	0.1176	1.9361	0.0000	kafein7	99.3582	0.7461	100.0000	pepaya (6)	1.0112	1.9685	3.4736

	Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference
pepaya (6)	1.0112	1.9685	3.4736	putri malu (9)	0.8746	4.6737	2.5420	sambiloto (12)	0.2124	4.3224	4.4227
pepaya (7)	1.0315	2.1091	3.4736	putri malu (10)	0.8647	4.6996	2.5420	sirih (1)	4.2806	3.9848	3.6980
pepaya (8)	1.0235	2.1219	3.4736	putri malu (11)	1.0383	4.8937	2.5420	sirih (2)	4.2083	3.9611	3.6980
pepaya (9)	0.9709	2.1706	3.4736	putri malu (12)	0.9966	4.9123	2.5420	sirih (3)	4.1228	3.9433	3.6980
pepaya (10)	0.2067	2.1567	3.4736	sambiloto (1)	0.2926	4.4765	4.4227	sirih (4)	4.0077	3.6317	3.6980
pepaya (11)	0.1857	2.1782	3.4736	sambiloto (2)	0.1947	4.4697	4.4227	sirih (5)	3.9174	3.6243	3.6980
pepaya (12)	0.1992	2.1756	3.4736	sambiloto (3)	0.1792	4.4987	4.4227	sirih (6)	3.8864	3.6234	3.6980
putri malu (1)	0.9389	5.1274	2.5420	sambiloto (4)	0.6405	4.5869	4.4227	sirih (7)	3.8019	3.5755	3.6980
putri malu (2)	0.9688	5.1082	2.5420	sambiloto (5)	0.5801	4.6463	4.4227	sirih (8)	3.8428	3.5566	3.6980
putri malu (3)	0.9419	5.1281	2.5420	sambiloto (6)	0.5998	4.6246	4.4227	sirih (9)	3.7610	3.5291	3.6980
putri malu (4)	1.0515	5.3581	2.5420	sambiloto (7)	0.8020	4.4724	4.4227	sirih (10)	3.1655	2.6679	3.6980
putri malu (5)	1.0658	5.3849	2.5420	sambiloto (8)	0.7526	4.4793	4.4227	sirih (11)	3.2212	2.6380	3.6980
putri malu (6)	0.9854	5.3760	2.5420	sambiloto (9)	0.7197	4.5061	4.4227	sirih (12)	3.2825	2.6527	3.6980
putri malu (7)	0.9804	4.6637	2.5420	sambiloto (10)	0.2474	4.2752	4.4227	sirsak (1)	-10.0999	4.7789	3.1404
putri malu (8)	0.9259	4.6696	2.5420	sambiloto (11)	0.2585	4.3011	4.4227	sirsak (2)	-10.1835	4.8068	3.1404
putri malu (9)	0.8746	4.6737	2.5420	sambiloto (12)	0.2124	4.3224	4.4227	sirsak (3)	-10.2120	4.8003	3.1404

sirsak (3)	-10.2120	4.8003	3.1404
sirsak (4)	-9.2705	4.2996	3.1404
sirsak (5)	-9.3439	4.3273	3.1404
sirsak (6)	-9.3633	4.3552	3.1404
sirsak (7)	-9.9345	4.4482	3.1404
sirsak (8)	-10.0784	4.4598	3.1404
sirsak (9)	-10.0762	4.4558	3.1404
sirsak (10)	-10.4395	4.7945	
sirsak (11)	-10.5832	4.8161	
sirsak (12)	-10.6303	4.8102	

L.2.5 Hasil Validasi Model Kalibrasi dengan LOOCV

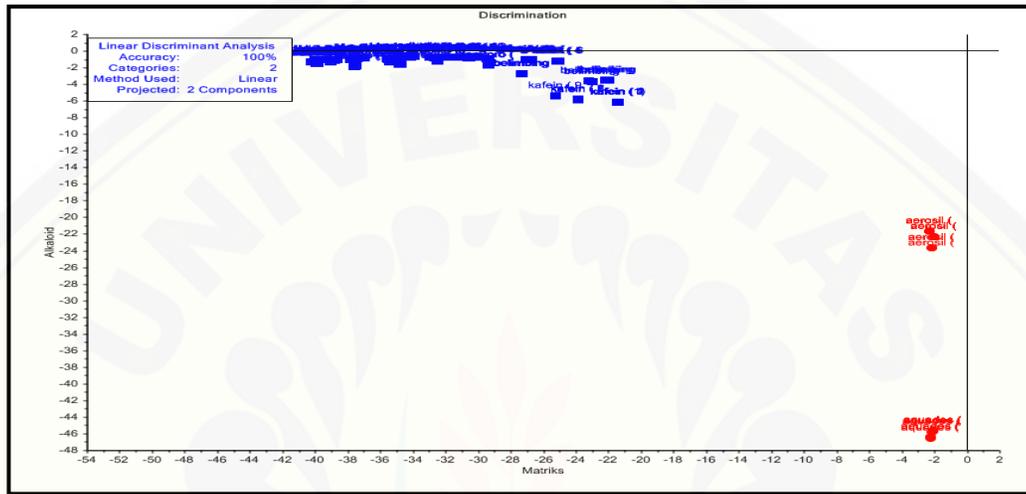


L.2.6 Data LOOCV yang Digunakan dalam Validasi Model Kalibrasi

	Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference
aerosil (1)	0.2074	2.6806	0.0000	aquades (4)	0.1176	1.9361	0.0000	belimbing (7)	3.8401	2.6356	3.0539
aerosil (2)	0.1701	2.7163	0.0000	aquades (5)	0.2116	1.9189	0.0000	belimbing (8)	3.7447	2.6176	3.0539
aerosil (3)	0.1519	2.7583	0.0000	aquades (6)	0.2400	1.9146	0.0000	belimbing (9)	3.7129	2.6208	3.0539
aerosil (4)	-0.5965	4.0035	0.0000	aquades (7)	0.8875	1.6529	0.0000	belimbing (10)	3.0605	1.3359	3.0539
aerosil (5)	-0.5983	3.9935	0.0000	aquades (8)	0.9592	1.6421	0.0000	belimbing (11)	3.0898	1.3431	3.0539
aerosil (6)	-0.5917	3.9887	0.0000	aquades (9)	1.0136	1.6525	0.0000	belimbing (12)	2.9898	1.3147	3.0539
aerosil (7)	0.3122	2.9404	0.0000	aquades (10)	0.6857	1.9708	0.0000	kafein1	99.6120	1.0159	100.0000
aerosil (8)	0.3175	2.9315	0.0000	aquades (11)	0.6611	1.9775	0.0000	kafein2	99.6114	0.9921	100.0000
aerosil (9)	0.3077	2.9356	0.0000	aquades (12)	0.6381	1.9590	0.0000	kafein3	99.6745	1.0446	100.0000
aerosil (10)	-0.5770	1.8705	0.0000	belimbing (1)	3.7259	1.6145	3.0539	kafein4	99.6255	1.0260	100.0000
aerosil (11)	-0.5580	1.8611	0.0000	belimbing (3)	3.8053	1.6058	3.0539	kafein5	99.4766	0.6911	100.0000
aerosil (12)	-0.5708	1.8519	0.0000	belimbing (4)	3.7539	1.5993	3.0539	kafein6	99.3899	0.7030	100.0000
aquades (1)	0.5338	1.8416	0.0000	belimbing (5)	1.5045	0.7549	3.0539	kafein7	99.3582	0.7461	100.0000
aquades (2)	0.5378	1.8112	0.0000	belimbing (6)	1.4497	0.7644	3.0539	kafein8	99.3592	0.7507	100.0000
aquades (3)	0.5460	1.8082	0.0000	belimbing (7)	1.5267	0.8312	3.0539	kafein9	102.7213	0.8245	100.0000
aquades (4)	0.1176	1.9361	0.0000	belimbing (7)	3.8401	2.6356	3.0539	kafein10	102.7404	0.8352	100.0000

	Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference
kafein10	102.7404	0.8352	100.0000	lamtoro (9)	4.2465	2.3291	4.7694	mengkudu (12)	3.6986	1.4729	4.1513
kafein11	102.6779	0.8030	100.0000	lamtoro (10)	3.3802	2.0127	4.7694	pandan (1)	5.1596	1.0258	2.6065
kafein12	102.7641	0.8203	100.0000	lamtoro (11)	3.3788	1.9886	4.7694	pandan (2)	4.9643	1.0210	2.6065
kafein13	96.5357	0.6631	100.0000	lamtoro (12)	3.3504	1.9789	4.7694	pandan (3)	4.9259	1.0459	2.6065
kafein14	96.5204	0.6633	100.0000	mengkudu (1)	4.1431	1.3696	4.1513	pandan (4)	5.4612	0.9579	2.6065
kafein15	96.4267	0.6621	100.0000	mengkudu (2)	4.0804	1.4118	4.1513	pandan (5)	5.4234	0.9966	2.6065
kafein16	96.4848	0.6615	100.0000	mengkudu (3)	4.0217	1.4313	4.1513	pandan (6)	5.3168	0.9934	2.6065
lamtoro (1)	3.5103	1.4593	4.7694	mengkudu (4)	4.4139	1.6384	4.1513	pandan (7)	5.3807	0.9062	2.6065
lamtoro (2)	3.4332	1.4351	4.7694	mengkudu (5)	4.3139	1.6797	4.1513	pandan (8)	5.3256	0.8899	2.6065
lamtoro (3)	3.4218	1.4006	4.7694	mengkudu (6)	4.2923	1.6544	4.1513	pandan (9)	5.2360	0.8761	2.6065
lamtoro (4)	3.7687	2.1201	4.7694	mengkudu (7)	4.7413	1.6916	4.1513	pandan (10)	4.4135	1.2727	2.6065
lamtoro (5)	3.7820	2.1062	4.7694	mengkudu (8)	4.6366	1.6943	4.1513	pandan (11)	4.3971	1.2842	2.6065
lamtoro (6)	3.7768	2.0854	4.7694	mengkudu (9)	4.5296	1.7391	4.1513	pandan (12)	4.2808	1.3189	2.6065
lamtoro (7)	4.3147	2.4201	4.7694	mengkudu (10)	3.9731	1.4643	4.1513	sambiloto (1)	0.2926	4.4765	4.4227
lamtoro (8)	4.2527	2.3537	4.7694	mengkudu (11)	3.8405	1.4715	4.1513	sambiloto (2)	0.1947	4.4697	4.4227
lamtoro (9)	4.2465	2.3291	4.7694	mengkudu (12)	3.6986	1.4729	4.1513	sambiloto (3)	0.1792	4.4987	4.4227

	Predicted	Deviation	Reference		Predicted	Deviation	Reference
sambiloto (3)	0.1792	4.4987	4.4227	sirsak (7)	-9.9345	4.4482	3.1404
sambiloto (4)	0.6405	4.5869	4.4227	sirsak (8)	-10.0784	4.4598	3.1404
sambiloto (5)	0.5801	4.6463	4.4227	sirsak (9)	-10.0762	4.4558	3.1404
sambiloto (6)	0.5998	4.6246	4.4227	sirsak (10)	-10.4395	4.7945	3.1404
sambiloto (7)	0.8020	4.4724	4.4227	sirsak (11)	-10.5832	4.8161	3.1404
sambiloto (8)	0.7526	4.4793	4.4227	sirsak (12)	-10.6303	4.8102	3.1404
sambiloto (9)	0.7197	4.5061	4.4227				
sambiloto (10)	0.2474	4.2752	4.4227				
sambiloto (11)	0.2585	4.3011	4.4227				
sambiloto (12)	0.2124	4.3224	4.4227				
sirsak (1)	-10.0999	4.7789	3.1404				
sirsak (2)	-10.1835	4.8068	3.1404				
sirsak (3)	-10.2120	4.8003	3.1404				
sirsak (4)	-9.2705	4.2996	3.1404				
sirsak (5)	-9.3439	4.3273	3.1404				
sirsak (6)	-9.3633	4.3552	3.1404				

LAMPIRAN M. Hasil Analisis Kualitatif dengan Model Kemometrik LDA**M.1 Dengan Spektroskopi NIR****M.1.1 Model Klasifikasi yang terbentuk dari Sampel *Training Set***

M.1.2 Model Klasifikasi yang terbentuk dari Sampel *Training Set*

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
aerosol (1)	1	-3.0000	-12.4915	matriks
aerosol (2)	2	-2.9974	-12.4898	matriks
aerosol (3)	3	-2.9969	-12.4852	matriks
aerosol (4)	4	-1.7541	-17.1493	matriks
aerosol (5)	5	-1.7541	-17.1498	matriks
aerosol (6)	6	-1.7530	-17.1518	matriks
aerosol (7)	7	-1.7819	-15.7846	matriks
aerosol (8)	8	-1.7781	-15.7935	matriks
aerosol (9)	9	-1.7791	-15.7926	matriks
aerosol (10)	10	-1.5421	-16.2273	matriks
aerosol (11)	11	-1.5421	-16.2342	matriks
aerosol (12)	12	-1.5409	-16.2377	matriks
aquades (1)	13	-1.9639	-33.3860	matriks
aquades (2)	14	-1.9546	-33.3212	matriks
aquades (3)	15	-1.9497	-33.2857	matriks
aquades (4)	16	-2.0434	-33.9181	matriks
aquades (5)	17	-2.0269	-33.8160	matriks
aquades (6)	18	-2.0235	-33.7917	matriks
aquades (7)	19	-1.8685	-32.6941	matriks
aquades (8)	20	-1.8540	-32.5841	matriks
aquades (9)	21	-1.8460	-32.5332	matriks
aquades (10)	22	-1.9462	-33.2641	matriks
aquades (11)	23	-1.9513	-33.3043	matriks
aquades (12)	24	-1.9527	-33.3096	matriks
arabika mud	25	-25.4360	-0.9626	alkaloid
arabika mud	26	-25.4166	-0.9641	alkaloid
arabika mud	27	-25.4225	-0.9658	alkaloid
arabika mud	28	-23.9461	-0.8047	alkaloid
arabika mud	29	-23.9060	-0.8057	alkaloid
arabika mud	30	-23.8734	-0.8083	alkaloid
arabika mud	31	-27.9782	-1.1318	alkaloid
arabika mud	32	-27.9558	-1.1310	alkaloid
arabika mud	33	-27.9114	-1.1297	alkaloid
arabika mud	34	-28.7917	-1.1673	alkaloid

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
arabika mud	34	-28.7917	-1.1673	alkaloid
arabika mud	35	-28.7491	-1.1651	alkaloid
arabika mud	36	-28.7217	-1.1626	alkaloid
arabika tua (37	-25.4097	-1.1417	alkaloid
arabika tua (38	-25.3850	-1.1434	alkaloid
arabika tua (39	-25.3562	-1.1426	alkaloid
arabika tua (40	-23.3215	-1.0948	alkaloid
arabika tua (41	-23.3124	-1.0978	alkaloid
arabika tua (42	-23.2713	-1.1005	alkaloid
arabika tua (43	-22.6382	-1.0538	alkaloid
arabika tua (44	-22.6045	-1.0569	alkaloid
arabika tua (45	-22.5815	-1.0618	alkaloid
arabika tua (46	-28.6163	-1.3200	alkaloid
arabika tua (47	-28.5936	-1.3216	alkaloid
arabika tua (48	-28.5427	-1.3179	alkaloid
belimbing (1	49	-19.7067	-2.7729	alkaloid
belimbing (2	50	-19.6677	-2.7729	alkaloid
belimbing (3	51	-19.6502	-2.7769	alkaloid
belimbing (4	52	-7.4374	-7.2622	alkaloid
belimbing (5	53	-7.4528	-7.2459	alkaloid
belimbing (6	54	-7.4591	-7.2319	alkaloid
belimbing (7	55	-16.7526	-3.4241	alkaloid
belimbing (8	56	-16.6262	-3.4550	alkaloid
belimbing (9	57	-16.5770	-3.4655	alkaloid
belimbing (1	58	-15.9783	-3.2271	alkaloid
belimbing (1	59	-15.9016	-3.2437	alkaloid
belimbing (1	60	-15.8633	-3.2532	alkaloid
binahong (1	61	-23.2567	-0.8537	alkaloid
binahong (2	62	-23.1372	-0.8447	alkaloid
binahong (3	63	-23.0852	-0.8395	alkaloid
binahong (4	64	-14.7548	-1.8296	alkaloid
binahong (5	65	-14.7020	-1.8393	alkaloid
binahong (6	66	-14.6640	-1.8452	alkaloid
binahong (7	67	-32.0349	-1.5751	alkaloid

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
binahong (7	67	-32.0349	-1.5751	alkaloid
binahong (8	68	-31.9213	-1.5519	alkaloid
binahong (9	69	-31.8173	-1.5309	alkaloid
binahong (1	70	-25.0300	-0.8041	alkaloid
binahong (1	71	-24.9849	-0.7980	alkaloid
binahong (1	72	-24.9610	-0.7937	alkaloid
binahong (1	73	-22.1938	-0.7333	alkaloid
binahong (1	74	-22.1602	-0.7321	alkaloid
binahong (1	75	-22.1176	-0.7309	alkaloid
buncis (1)	76	-27.7705	-1.1507	alkaloid
buncis (2)	77	-27.7538	-1.1456	alkaloid
buncis (3)	78	-27.7471	-1.1429	alkaloid
buncis (4)	79	-25.0975	-0.9743	alkaloid
buncis (5)	80	-25.0763	-0.9677	alkaloid
buncis (6)	81	-25.0467	-0.9626	alkaloid
buncis (7)	82	-29.7743	-1.3453	alkaloid
buncis (8)	83	-29.7909	-1.3458	alkaloid
buncis (9)	84	-29.8019	-1.3464	alkaloid
buncis (10)	85	-23.4956	-0.8914	alkaloid
buncis (11)	86	-23.4635	-0.8869	alkaloid
buncis (12)	87	-23.4157	-0.8821	alkaloid
jambu biji (1	88	-26.9200	-1.1059	alkaloid
jambu biji (2	89	-26.8941	-1.1014	alkaloid
jambu biji (3	90	-26.8833	-1.1004	alkaloid
jambu biji (4	91	-25.4709	-1.0728	alkaloid
jambu biji (5	92	-25.4459	-1.0699	alkaloid
jambu biji (6	93	-25.3970	-1.0652	alkaloid
jambu biji (7	94	-28.2388	-1.2331	alkaloid
jambu biji (8	95	-28.1607	-1.2210	alkaloid
jambu biji (9	96	-28.1104	-1.2121	alkaloid
jambu biji (1	97	-27.8767	-1.1509	alkaloid
jambu biji (1	98	-27.8350	-1.1445	alkaloid
jambu biji (1	99	-27.7972	-1.1381	alkaloid
kafein1	100	-15.6391	-5.1484	alkaloid

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
kafein1	100	-15.6391	-5.1484	alkaloid
kafein2	101	-15.6417	-5.1526	alkaloid
kafein3	102	-15.6554	-5.1561	alkaloid
kafein4	103	-15.6520	-5.1505	alkaloid
kafein5	104	-17.4641	-4.9873	alkaloid
kafein6	105	-17.4641	-4.9844	alkaloid
kafein7	106	-17.4529	-4.9764	alkaloid
kafein8	107	-17.4510	-4.9750	alkaloid
kafein9	108	-18.3960	-4.6789	alkaloid
kafein10	109	-18.3985	-4.6811	alkaloid
kafein11	110	-18.3977	-4.6818	alkaloid
kafein12	111	-18.3947	-4.6897	alkaloid
kafein13	112	-14.6467	-4.9787	alkaloid
kafein14	113	-14.6371	-4.9806	alkaloid
kafein15	114	-14.6365	-4.9748	alkaloid
kafein16	115	-14.6404	-4.9799	alkaloid
katuk (1)	116	-21.3008	-0.8045	alkaloid
katuk (2)	117	-21.2719	-0.8034	alkaloid
katuk (3)	118	-21.2488	-0.8021	alkaloid
katuk (4)	119	-18.0325	-1.0630	alkaloid
katuk (5)	120	-17.9885	-1.0673	alkaloid
katuk (7)	121	-17.9599	-1.0690	alkaloid
katuk (7)	122	-19.2393	-0.9161	alkaloid
katuk (8)	123	-19.1987	-0.9172	alkaloid
katuk (9)	124	-19.1520	-0.9197	alkaloid
katuk (10)	125	-21.5870	-0.7676	alkaloid
katuk (11)	126	-21.5599	-0.7675	alkaloid
katuk (12)	127	-21.5245	-0.7668	alkaloid
keluwih (1)	128	-34.2542	-1.8273	alkaloid
keluwih (2)	129	-34.2060	-1.8183	alkaloid
keluwih (3)	130	-34.1938	-1.8160	alkaloid
keluwih (4)	131	-31.0785	-1.3193	alkaloid
keluwih (5)	132	-31.0256	-1.3112	alkaloid
keluwih (6)	133	-30.9677	-1.3021	alkaloid

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
ketuwih (6)	133	-30.9677	-1.3021	alkaloid
ketuwih (7)	134	-30.8614	-1.2877	alkaloid
ketuwih (8)	135	-30.8260	-1.2821	alkaloid
ketuwih (9)	136	-30.7789	-1.2754	alkaloid
ketuwih (10)	137	-30.8509	-1.2767	alkaloid
ketuwih (11)	138	-30.8125	-1.2713	alkaloid
ketuwih (12)	139	-30.7592	-1.2636	alkaloid
kembang bul	140	-21.9866	-0.7501	alkaloid
kembang bul	141	-21.9224	-0.7541	alkaloid
kembang bul	142	-21.8701	-0.7571	alkaloid
kembang bul	143	-20.4571	-0.8900	alkaloid
kembang bul	144	-20.3915	-0.8984	alkaloid
kembang bul	145	-20.3557	-0.9038	alkaloid
kembang bul	146	-21.1369	-0.8235	alkaloid
kembang bul	147	-21.0819	-0.8279	alkaloid
kembang bul	148	-21.0284	-0.8320	alkaloid
kembang bul	149	-23.3883	-0.7497	alkaloid
kembang bul	150	-23.3664	-0.7510	alkaloid
kembang bul	151	-23.3349	-0.7532	alkaloid
kunir (1)	152	-19.3721	-0.8926	alkaloid
kunir (2)	153	-19.3522	-0.8951	alkaloid
kunir (3)	154	-19.3246	-0.8987	alkaloid
kunir (4)	155	-27.1317	-0.9413	alkaloid
kunir (5)	156	-27.0802	-0.9387	alkaloid
kunir (6)	157	-27.0542	-0.9372	alkaloid
kunir (7)	158	-21.7370	-0.7350	alkaloid
kunir (8)	159	-21.6866	-0.7380	alkaloid
kunir (9)	160	-21.6426	-0.7405	alkaloid
kunir (10)	161	-16.5896	-1.2719	alkaloid
kunir (11)	162	-16.5557	-1.2800	alkaloid
kunir (12)	163	-16.5118	-1.2900	alkaloid
kunir (13)	164	-22.5037	-0.7287	alkaloid
kunir (14)	165	-22.4952	-0.7299	alkaloid
kunir (15)	166	-22.4816	-0.7313	alkaloid

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
kunir (15)	166	-22.4816	-0.7313	alkaloid
lamtoro (1)	167	-21.2386	-1.7851	alkaloid
lamtoro (2)	168	-21.1988	-1.7739	alkaloid
lamtoro (3)	169	-21.1664	-1.7680	alkaloid
lamtoro (4)	170	-18.0443	-2.2204	alkaloid
lamtoro (5)	171	-18.0116	-2.2172	alkaloid
lamtoro (6)	172	-17.9830	-2.2136	alkaloid
lamtoro (7)	173	-27.2185	-2.0235	alkaloid
lamtoro (8)	174	-27.1637	-2.0104	alkaloid
lamtoro (9)	175	-27.1026	-1.9975	alkaloid
lamtoro (10)	176	-25.1913	-1.8106	alkaloid
lamtoro (11)	177	-25.1553	-1.8044	alkaloid
lamtoro (12)	178	-25.1199	-1.7975	alkaloid
mangga (1)	179	-32.0833	-1.4742	alkaloid
mangga (2)	180	-32.0047	-1.4608	alkaloid
mangga (3)	181	-31.9415	-1.4500	alkaloid
mangga (4)	182	-38.1825	-2.6464	alkaloid
mangga (5)	183	-38.1444	-2.6370	alkaloid
mangga (6)	184	-38.0943	-2.6252	alkaloid
mangga (7)	185	-35.2121	-2.0285	alkaloid
mangga (8)	186	-35.1321	-2.0120	alkaloid
mangga (9)	187	-35.0690	-1.9986	alkaloid
mangga (10)	188	-24.7218	-0.7713	alkaloid
mangga (11)	189	-24.6963	-0.7683	alkaloid
mangga (12)	190	-24.6885	-0.7670	alkaloid
mangga (13)	191	-30.0597	-1.1702	alkaloid
mangga (14)	192	-30.0344	-1.1670	alkaloid
mangga (15)	193	-30.0206	-1.1653	alkaloid
mengkudu (1)	194	-19.2689	-0.8926	alkaloid
mengkudu (1)	195	-19.2175	-0.8957	alkaloid
mengkudu (1)	196	-19.1758	-0.8986	alkaloid
mengkudu (1)	197	-22.9927	-0.7823	alkaloid
mengkudu (1)	198	-22.9611	-0.7800	alkaloid
mengkudu (1)	199	-22.9476	-0.7778	alkaloid

Prediction		matriks	alkaloid	Predicted
		1	2	3
mengkudu (1)	196	-19.1758	-0.8986	alkaloid
mengkudu (1)	197	-22.9927	-0.7823	alkaloid
mengkudu (1)	198	-22.9611	-0.7800	alkaloid
mengkudu (1)	199	-22.9476	-0.7778	alkaloid
mengkudu (1)	200	-24.5418	-0.7423	alkaloid
mengkudu (1)	201	-24.4659	-0.7375	alkaloid
mengkudu (1)	202	-24.3913	-0.7329	alkaloid
mengkudu (1)	203	-20.1632	-0.7935	alkaloid
mengkudu (1)	204	-20.1078	-0.7972	alkaloid
mengkudu (1)	205	-20.0661	-0.8002	alkaloid
pandan (1)	206	-30.0649	-1.2657	alkaloid
pandan (2)	207	-30.0246	-1.2578	alkaloid
pandan (3)	208	-29.9849	-1.2494	alkaloid
pandan (4)	209	-27.8149	-1.0578	alkaloid
pandan (5)	210	-27.8074	-1.0541	alkaloid
pandan (6)	211	-27.7561	-1.0453	alkaloid
pandan (7)	212	-26.9151	-0.9652	alkaloid
pandan (8)	213	-26.8733	-0.9581	alkaloid
pandan (9)	214	-26.8263	-0.9499	alkaloid
pandan (10)	215	-23.6070	-0.8125	alkaloid
pandan (11)	216	-23.5718	-0.8097	alkaloid
pandan (12)	217	-23.5433	-0.8055	alkaloid
pare (1)	218	-26.9583	-1.4712	alkaloid
pare (2)	219	-26.9117	-1.4736	alkaloid
pare (3)	220	-26.9104	-1.4721	alkaloid
pare (4)	221	-26.4176	-1.4022	alkaloid
pare (5)	222	-26.4047	-1.4022	alkaloid
pare (6)	223	-26.3556	-1.4039	alkaloid
pare (7)	224	-31.5035	-1.9904	alkaloid
pare (8)	225	-31.4995	-1.9894	alkaloid
pare (9)	226	-31.4347	-1.9865	alkaloid
pare (10)	227	-23.1722	-1.2068	alkaloid
pare (11)	228	-23.1267	-1.2146	alkaloid
pare (12)	229	-23.0999	-1.2173	alkaloid

M.1.3 Hasil Validasi Model Klasifikasi dengan *Test Set* (LOOCV)

Classified_LOOC	ID	matriks		Class
		1	2	
aerosil (1)	1	-3.0000	-12.4915	matriks
aerosil (2)	2	-2.9974	-12.4898	matriks
aerosil (3)	3	-2.9969	-12.4852	matriks
aerosil (4)	4	-1.7541	-17.1493	matriks
aerosil (5)	5	-1.7541	-17.1498	matriks
aerosil (6)	6	-1.7530	-17.1518	matriks
aerosil (7)	7	-1.7819	-15.7846	matriks
aerosil (8)	8	-1.7781	-15.7935	matriks
aerosil (9)	9	-1.7791	-15.7926	matriks
aerosil (10)	10	-1.5421	-16.2273	matriks
aerosil (11)	11	-1.5421	-16.2342	matriks
aerosil (12)	12	-1.5409	-16.2377	matriks
aquades (1)	13	-1.9639	-33.3860	matriks
aquades (2)	14	-1.9546	-33.3212	matriks
aquades (3)	15	-1.9497	-33.2858	matriks
aquades (4)	16	-2.0434	-33.9181	matriks
aquades (5)	17	-2.0269	-33.8160	matriks
aquades (6)	18	-2.0235	-33.7917	matriks
aquades (7)	19	-1.8685	-32.6941	matriks
aquades (8)	20	-1.8540	-32.5842	matriks
aquades (9)	21	-1.8460	-32.5332	matriks
aquades (10)	22	-1.9462	-33.2641	matriks
aquades (11)	23	-1.9513	-33.3043	matriks
aquades (12)	24	-1.9527	-33.3096	matriks
belimbing (1)	25	-19.7067	-2.7729	alkaloid
belimbing (2)	26	-19.6677	-2.7729	alkaloid
belimbing (3)	27	-19.6502	-2.7769	alkaloid
belimbing (4)	28	-7.4374	-7.2622	alkaloid
belimbing (5)	29	-7.4528	-7.2459	alkaloid
belimbing (6)	30	-7.4591	-7.2319	alkaloid
belimbing (7)	31	-16.7526	-3.4241	alkaloid
belimbing (8)	32	-16.6262	-3.4550	alkaloid
belimbing (9)	33	-16.5770	-3.4655	alkaloid
belimbing (10)	34	-15.9783	-3.2271	alkaloid

Classified_LOOC	ID	matriks		Class
		1	2	
belimbing (10)	34	-15.9783	-3.2271	alkaloid
belimbing (11)	35	-15.9016	-3.2437	alkaloid
belimbing (12)	36	-15.8633	-3.2552	alkaloid
kafein1	37	-15.6391	-5.1484	alkaloid
kafein2	38	-15.6417	-5.1526	alkaloid
kafein3	39	-15.6554	-5.1561	alkaloid
kafein4	40	-15.6520	-5.1505	alkaloid
kafein5	41	-17.4641	-4.9873	alkaloid
kafein6	42	-17.4641	-4.9844	alkaloid
kafein7	43	-17.4529	-4.9764	alkaloid
kafein8	44	-17.4510	-4.9750	alkaloid
kafein9	45	-18.3960	-4.6789	alkaloid
kafein10	46	-18.3985	-4.6811	alkaloid
kafein11	47	-18.3977	-4.6818	alkaloid
kafein12	48	-18.3947	-4.6897	alkaloid
kafein13	49	-14.6467	-4.9787	alkaloid
kafein14	50	-14.6371	-4.9806	alkaloid
kafein15	51	-14.6365	-4.9748	alkaloid
kafein16	52	-14.6404	-4.9799	alkaloid
lamtoro (1)	53	-21.2386	-1.7851	alkaloid
lamtoro (2)	54	-21.1988	-1.7739	alkaloid
lamtoro (3)	55	-21.1664	-1.7680	alkaloid
lamtoro (4)	56	-18.0443	-2.2204	alkaloid
lamtoro (5)	57	-18.0116	-2.2172	alkaloid
lamtoro (6)	58	-17.9830	-2.2136	alkaloid
lamtoro (7)	59	-27.2185	-2.0235	alkaloid
lamtoro (8)	60	-27.1637	-2.0104	alkaloid
lamtoro (9)	61	-27.1026	-1.9975	alkaloid
lamtoro (10)	62	-25.1913	-1.8106	alkaloid
lamtoro (11)	63	-25.1553	-1.8044	alkaloid
lamtoro (12)	64	-25.1199	-1.7975	alkaloid
mengkudu (1)	65	-19.2689	-0.8926	alkaloid
mengkudu (2)	66	-19.2175	-0.8957	alkaloid
mengkudu (3)	67	-19.1758	-0.8986	alkaloid

Classified_LOOC	ID	matriks		Class
		1	2	
mengkudu (3)	67	-19.1758	-0.8986	alkaloid
mengkudu (4)	68	-22.9927	-0.7823	alkaloid
mengkudu (5)	69	-22.9611	-0.7800	alkaloid
mengkudu (6)	70	-22.9476	-0.7778	alkaloid
mengkudu (7)	71	-24.5418	-0.7423	alkaloid
mengkudu (8)	72	-24.4659	-0.7375	alkaloid
mengkudu (9)	73	-24.3913	-0.7329	alkaloid
mengkudu (10)	74	-20.1632	-0.7935	alkaloid
mengkudu (11)	75	-20.1078	-0.7972	alkaloid
mengkudu (12)	76	-20.0661	-0.8002	alkaloid
pandan (1)	77	-30.0649	-1.2657	alkaloid
pandan (2)	78	-30.0246	-1.2578	alkaloid
pandan (3)	79	-29.9849	-1.2494	alkaloid
pandan (4)	80	-27.8149	-1.0578	alkaloid
pandan (5)	81	-27.8074	-1.0541	alkaloid
pandan (6)	82	-27.7561	-1.0453	alkaloid
pandan (7)	83	-26.9151	-0.9652	alkaloid
pandan (8)	84	-26.8733	-0.9581	alkaloid
pandan (9)	85	-26.8263	-0.9499	alkaloid
pandan (10)	86	-23.6070	-0.8125	alkaloid
pandan (11)	87	-23.5718	-0.8097	alkaloid
pandan (12)	88	-23.5433	-0.8055	alkaloid
sambiloto (1)	89	-21.4134	-2.0315	alkaloid
sambiloto (2)	90	-21.4086	-2.0355	alkaloid
sambiloto (3)	91	-21.3972	-2.0379	alkaloid
sambiloto (4)	92	-21.2031	-1.9870	alkaloid
sambiloto (5)	93	-21.1760	-1.9853	alkaloid
sambiloto (6)	94	-21.1656	-1.9937	alkaloid
sambiloto (7)	95	-24.7158	-1.9635	alkaloid
sambiloto (8)	96	-24.7064	-1.9718	alkaloid
sambiloto (9)	97	-24.6694	-1.9760	alkaloid
sambiloto (10)	98	-19.7246	-2.0274	alkaloid
sambiloto (11)	99	-19.7056	-2.0340	alkaloid
sambiloto (12)	100	-19.6836	-2.0383	alkaloid

sirsak (1)	101	-22.8954	-0.7564	alkaloid
sirsak (2)	102	-22.8269	-0.7608	alkaloid
sirsak (3)	103	-22.8104	-0.7611	alkaloid
sirsak (4)	104	-20.8227	-0.8259	alkaloid
sirsak (5)	105	-20.7736	-0.8310	alkaloid
sirsak (6)	106	-20.7374	-0.8359	alkaloid
sirsak (7)	107	-22.4631	-0.7485	alkaloid
sirsak (8)	108	-22.4159	-0.7501	alkaloid
sirsak (9)	109	-22.3964	-0.7523	alkaloid
sirsak (10)	110	-21.7820	-0.7394	alkaloid
sirsak (11)	111	-21.7578	-0.7408	alkaloid
sirsak (12)	112	-21.7321	-0.7425	alkaloid

M.1.4 Hasil Validasi Model Klasifikasi dengan *Test Set (2-fold cross validation)*

Classified_2 f	ID	matrks		alkaloid	Class
		1	2		
aerosil (1)	1	-3.0000	-12.4915	matrks	
aerosil (2)	2	-2.9974	-12.4898	matrks	
aerosil (3)	3	-2.9969	-12.4852	matrks	
aerosil (4)	4	-1.7541	-17.1493	matrks	
aerosil (5)	5	-1.7541	-17.1498	matrks	
aerosil (6)	6	-1.7530	-17.1518	matrks	
aerosil (7)	7	-1.7819	-15.7846	matrks	
aerosil (8)	8	-1.7781	-15.7935	matrks	
aerosil (9)	9	-1.7791	-15.7926	matrks	
aerosil (10)	10	-1.5421	-16.2273	matrks	
aerosil (11)	11	-1.5421	-16.2342	matrks	
aerosil (12)	12	-1.5409	-16.2377	matrks	
aquades (1)	13	-1.9539	-33.3860	matrks	
aquades (2)	14	-1.9546	-33.3212	matrks	
aquades (3)	15	-1.9497	-33.2858	matrks	
aquades (4)	16	-2.0434	-33.9181	matrks	
aquades (5)	17	-2.0269	-33.8160	matrks	
aquades (6)	18	-2.0235	-33.7917	matrks	
aquades (7)	19	-1.8685	-32.6941	matrks	
aquades (8)	20	-1.8540	-32.5842	matrks	
aquades (9)	21	-1.8460	-32.5332	matrks	
aquades (10)	22	-1.9462	-33.2641	matrks	
aquades (11)	23	-1.9513	-33.3043	matrks	
aquades (12)	24	-3.0000	-12.4915	matrks	
kafein1	25	-15.6391	-5.1484	alkaloid	
kafein2	26	-15.6417	-5.1526	alkaloid	
kafein3	27	-15.6554	-5.1561	alkaloid	
kafein4	28	-15.6520	-5.1505	alkaloid	
kafein5	29	-17.4641	-4.9873	alkaloid	
kafein6	30	-17.4641	-4.9844	alkaloid	
kafein7	31	-17.4529	-4.9764	alkaloid	
kafein8	32	-17.4510	-4.9750	alkaloid	
kafein9	33	-18.3960	-4.6789	alkaloid	
kafein10	34	-18.3985	-4.6811	alkaloid	

Classified_2 f	ID	matrks		alkaloid	Class
		1	2		
kafein10	34	-18.3985	-4.6811	alkaloid	
kafein11	35	-18.3977	-4.6818	alkaloid	
kafein12	36	-18.3947	-4.6897	alkaloid	
kafein13	37	-14.6467	-4.9787	alkaloid	
kafein14	38	-14.6371	-4.9806	alkaloid	
kafein15	39	-14.6365	-4.9747	alkaloid	
kafein16	40	-14.6404	-4.9799	alkaloid	
pepaya (1)	41	-20.9196	-0.8307	alkaloid	
pepaya (2)	42	-20.8749	-0.8306	alkaloid	
pepaya (3)	43	-20.8420	-0.8291	alkaloid	
pepaya (4)	44	-25.1955	-0.8356	alkaloid	
pepaya (5)	45	-25.1340	-0.8291	alkaloid	
pepaya (6)	46	-25.0716	-0.8228	alkaloid	
pepaya (7)	47	-26.0043	-0.8670	alkaloid	
pepaya (8)	48	-25.9529	-0.8612	alkaloid	
pepaya (9)	49	-25.8971	-0.8545	alkaloid	
pepaya (10)	50	-20.7212	-0.8057	alkaloid	
pepaya (11)	51	-20.6997	-0.8056	alkaloid	
pepaya (12)	52	-20.6548	-0.8058	alkaloid	
putri malu (1)	53	-28.2370	-1.0388	alkaloid	
putri malu (2)	54	-28.2456	-1.0397	alkaloid	
putri malu (3)	55	-28.2349	-1.0385	alkaloid	
putri malu (4)	56	-30.9495	-1.3630	alkaloid	
putri malu (5)	57	-30.9463	-1.3624	alkaloid	
putri malu (6)	58	-30.9364	-1.3613	alkaloid	
putri malu (7)	59	-27.2095	-1.0126	alkaloid	
putri malu (8)	60	-27.2096	-1.0120	alkaloid	
putri malu (9)	61	-27.2050	-1.0115	alkaloid	
putri malu (1)	62	-27.1921	-1.0103	alkaloid	
putri malu (1)	63	-30.4251	-1.3241	alkaloid	
putri malu (1)	64	-30.4064	-1.3216	alkaloid	
sambiloto (1)	65	-21.4134	-2.0315	alkaloid	
sambiloto (2)	66	-21.4086	-2.0355	alkaloid	
sambiloto (3)	67	-21.3972	-2.0379	alkaloid	

Classified_2 f	ID	matrks		alkaloid	Class
		1	2		
sambiloto (3)	67	-21.3972	-2.0379	alkaloid	
sambiloto (4)	68	-21.2031	-1.9870	alkaloid	
sambiloto (5)	69	-21.1760	-1.9853	alkaloid	
sambiloto (6)	70	-21.1656	-1.9937	alkaloid	
sambiloto (7)	71	-24.7158	-1.9635	alkaloid	
sambiloto (8)	72	-24.7064	-1.9718	alkaloid	
sambiloto (9)	73	-24.6694	-1.9760	alkaloid	
sambiloto (1)	74	-19.7246	-2.0274	alkaloid	
sambiloto (1)	75	-19.7056	-2.0340	alkaloid	
sambiloto (1)	76	-19.6836	-2.0383	alkaloid	
sih (1)	77	-28.1953	-1.7553	alkaloid	
sih (2)	78	-28.1470	-1.7449	alkaloid	
sih (3)	79	-28.1063	-1.7352	alkaloid	
sih (4)	80	-23.4423	-1.4714	alkaloid	
sih (5)	81	-23.3844	-1.4660	alkaloid	
sih (6)	82	-23.3236	-1.4601	alkaloid	
sih (7)	83	-27.8391	-1.6635	alkaloid	
sih (8)	84	-27.7433	-1.6458	alkaloid	
sih (9)	85	-27.6872	-1.6361	alkaloid	
sih (10)	86	-15.8594	-2.2549	alkaloid	
sih (11)	87	-15.8462	-2.2509	alkaloid	
sih (12)	88	-15.8130	-2.2535	alkaloid	
sirsak (1)	89	-22.8954	-0.7564	alkaloid	
sirsak (2)	90	-22.8269	-0.7608	alkaloid	
sirsak (3)	91	-22.8104	-0.7611	alkaloid	
sirsak (4)	92	-20.8227	-0.8259	alkaloid	
sirsak (5)	93	-20.7736	-0.8310	alkaloid	
sirsak (6)	94	-20.7374	-0.8359	alkaloid	
sirsak (7)	95	-22.4631	-0.7485	alkaloid	
sirsak (8)	96	-22.4159	-0.7501	alkaloid	
sirsak (9)	97	-22.3964	-0.7523	alkaloid	
sirsak (10)	98	-21.7820	-0.7394	alkaloid	
sirsak (11)	99	-21.7578	-0.7408	alkaloid	
sirsak (12)	100	-21.7321	-0.7425	alkaloid	

M.1.5 Hasil Pengklasifikasian Sampel Nyata dengan Metode LDA

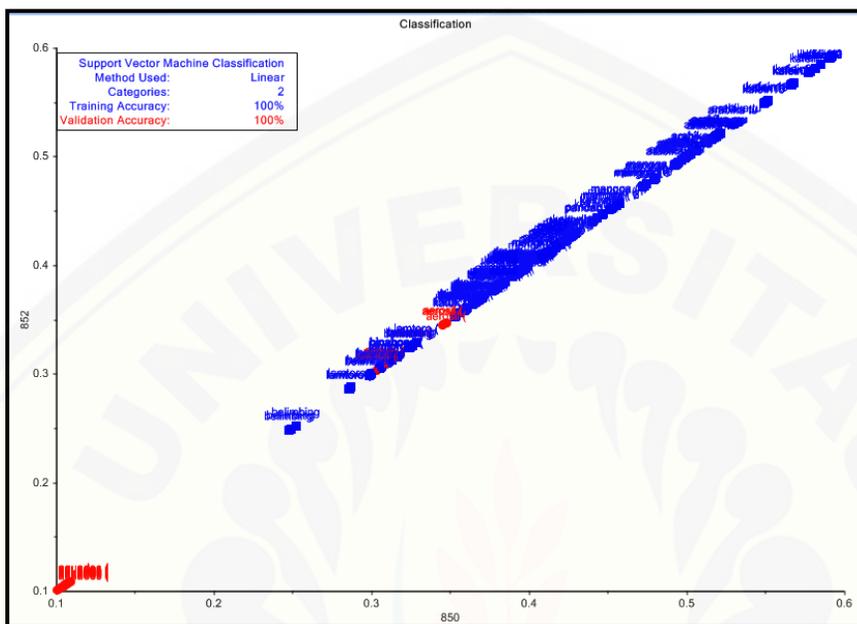
Classified_da	Matrks	Alkaloid		Class
		1	2	
S sampel nyata	1	-20.3995	-3.0991	Alkaloid
S sampel nyata	2	-20.4065	-3.0940	Alkaloid
S sampel nyata	3	-20.4145	-3.0909	Alkaloid
S sampel nyata	4	-17.4760	-4.1689	Alkaloid
S sampel nyata	5	-17.4769	-4.1664	Alkaloid
S sampel nyata	6	-17.4785	-4.1708	Alkaloid
S sampel nyata	7	-17.5904	-4.0876	Alkaloid
S sampel nyata	8	-17.5926	-4.0873	Alkaloid
S sampel nyata	9	-17.5923	-4.0847	Alkaloid
S sampel nyata	10	-20.8698	-3.0338	Alkaloid
S sampel nyata	11	-20.8597	-3.0356	Alkaloid
S sampel nyata	12	-20.8550	-3.0363	Alkaloid
sampel (1)	13	-40.3090	-1.1645	Alkaloid
sampel (2)	14	-40.2829	-1.1636	Alkaloid
sampel (3)	15	-40.2742	-1.1633	Alkaloid
sampel (5)	16	-36.8603	-0.8508	Alkaloid
sampel (5)	17	-36.7227	-0.8464	Alkaloid
sampel (6)	18	-36.6420	-0.8434	Alkaloid
sampel (7)	19	-44.8784	-1.7284	Alkaloid
sampel (8)	20	-44.8105	-1.7214	Alkaloid
sampel (9)	21	-44.7746	-1.7166	Alkaloid
sampel (10)	22	-41.5285	-1.2839	Alkaloid
sampel (11)	23	-41.4325	-1.2755	Alkaloid
sampel (12)	24	-41.3882	-1.2719	Alkaloid

Perhitungan % Kemampuan Prediksi Sampel Nyata

$$\begin{aligned}
 \% \text{ Kemampuan prediksi} &= \frac{\Sigma \text{ sampel nyata yang diprediksi benar}}{\Sigma \text{ total sampel nyata yang digunakan}} \times 100\% \\
 &= \frac{12}{12} \times 100\% \\
 &= 100\%
 \end{aligned}$$

N. HASIL KUALITATIF MODEL SVM

N.1.1. Model Kalibrasi Model SVM *Training Set*



N.1.2. Model Kalibrasi SVM *2-fold cross validation*

Prediction	1	1
aerosil (1)	1	matriks
aerosil (2)	2	matriks
aerosil (3)	3	matriks
aerosil (4)	4	matriks
aerosil (5)	5	matriks
aerosil (6)	6	matriks
aerosil (7)	7	matriks
aerosil (8)	8	matriks
aerosil (9)	9	matriks
aerosil (10)	10	matriks
aerosil (11)	11	matriks
aerosil (12)	12	matriks
aquades (1)	13	matriks
aquades (2)	14	matriks
aquades (3)	15	matriks
aquades (4)	16	matriks
aquades (5)	17	matriks
aquades (6)	18	matriks
aquades (7)	19	matriks
aquades (8)	20	matriks
aquades (9)	21	matriks
aquades (10)	22	matriks
aquades (11)	23	matriks
aquades (12)	24	matriks
belimbing (1)	25	alkaloid
belimbing (3)	26	alkaloid
belimbing (3)	27	alkaloid
belimbing (4)	28	alkaloid
belimbing (5)	29	alkaloid
belimbing (6)	30	alkaloid
belimbing (7)	31	alkaloid
belimbing (8)	32	alkaloid
belimbing (9)	33	alkaloid
belimbing (1)	34	alkaloid

Prediction	1	1
belimbing (10)	34	alkaloid
belimbing (11)	35	alkaloid
belimbing (12)	36	alkaloid
kafein1	37	alkaloid
kafein2	38	alkaloid
kafein3	39	alkaloid
kafein4	40	alkaloid
kafein5	41	alkaloid
kafein6	42	alkaloid
kafein7	43	alkaloid
kafein8	44	alkaloid
kafein9	45	alkaloid
kafein10	46	alkaloid
kafein11	47	alkaloid
kafein12	48	alkaloid
kafein13	49	alkaloid
kafein14	50	alkaloid
kafein15	51	alkaloid
kafein16	52	alkaloid
lamtoro (1)	53	alkaloid
lamtoro (2)	54	alkaloid
lamtoro (3)	55	alkaloid
lamtoro (4)	56	alkaloid
lamtoro (5)	57	alkaloid
lamtoro (6)	58	alkaloid
lamtoro (7)	59	alkaloid
lamtoro (8)	60	alkaloid
lamtoro (9)	61	alkaloid
lamtoro (10)	62	alkaloid
lamtoro (11)	63	alkaloid
lamtoro (12)	64	alkaloid
mengkudu (1)	65	alkaloid
mengkudu (2)	66	alkaloid
mengkudu (3)	67	alkaloid

Prediction		1
mengkudu (3)	67	alkaloid
mengkudu (4)	68	alkaloid
mengkudu (5)	69	alkaloid
mengkudu (6)	70	alkaloid
mengkudu (7)	71	alkaloid
mengkudu (8)	72	alkaloid
mengkudu (9)	73	alkaloid
mengkudu (10)	74	alkaloid
mengkudu (11)	75	alkaloid
mengkudu (12)	76	alkaloid
pandan (1)	77	alkaloid
pandan (2)	78	alkaloid
pandan (3)	79	alkaloid
pandan (4)	80	alkaloid
pandan (5)	81	alkaloid
pandan (6)	82	alkaloid
pandan (7)	83	alkaloid
pandan (8)	84	alkaloid
pandan (9)	85	alkaloid
pandan (10)	86	alkaloid
pandan (11)	87	alkaloid
pandan (12)	88	alkaloid
sambiloto (1)	89	alkaloid
sambiloto (2)	90	alkaloid
sambiloto (3)	91	alkaloid
sambiloto (4)	92	alkaloid
sambiloto (5)	93	alkaloid
sambiloto (6)	94	alkaloid
sambiloto (7)	95	alkaloid
sambiloto (8)	96	alkaloid
sambiloto (9)	97	alkaloid
sambiloto (10)	98	alkaloid
sambiloto (11)	99	alkaloid
sambiloto (12)	100	alkaloid

Prediction		1
pandan (3)	79	alkaloid
pandan (4)	80	alkaloid
pandan (5)	81	alkaloid
pandan (6)	82	alkaloid
pandan (7)	83	alkaloid
pandan (8)	84	alkaloid
pandan (9)	85	alkaloid
pandan (10)	86	alkaloid
pandan (11)	87	alkaloid
pandan (12)	88	alkaloid
sambiloto (1)	89	alkaloid
sambiloto (2)	90	alkaloid
sambiloto (3)	91	alkaloid
sambiloto (4)	92	alkaloid
sambiloto (5)	93	alkaloid
sambiloto (6)	94	alkaloid
sambiloto (7)	95	alkaloid
sambiloto (8)	96	alkaloid
sambiloto (9)	97	alkaloid
sambiloto (10)	98	alkaloid
sambiloto (11)	99	alkaloid
sambiloto (12)	100	alkaloid
sirsak (1)	101	alkaloid
sirsak (2)	102	alkaloid
sirsak (3)	103	alkaloid
sirsak (4)	104	alkaloid
sirsak (5)	105	alkaloid
sirsak (6)	106	alkaloid
sirsak (7)	107	alkaloid
sirsak (8)	108	alkaloid
sirsak (9)	109	alkaloid
sirsak (10)	110	alkaloid
sirsak (11)	111	alkaloid
sirsak (12)	112	alkaloid

N.1.3. Model Kalibrasi SVM LOOCV

Prediction		1
aerosil (1)	1	matriks
aerosil (2)	2	matriks
aerosil (3)	3	matriks
aerosil (4)	4	matriks
aerosil (5)	5	matriks
aerosil (6)	6	matriks
aerosil (7)	7	matriks
aerosil (8)	8	matriks
aerosil (9)	9	matriks
aerosil (10)	10	matriks
aerosil (11)	11	matriks
aerosil (12)	12	matriks
aquades (1)	13	matriks
aquades (2)	14	matriks
aquades (3)	15	matriks
aquades (4)	16	matriks
aquades (5)	17	matriks
aquades (6)	18	matriks
aquades (7)	19	matriks
aquades (8)	20	matriks
aquades (9)	21	matriks
aquades (10)	22	matriks
aquades (11)	23	matriks
aquades (12)	24	matriks
belimbing (1)	25	alkaloid
belimbing (3)	26	alkaloid
belimbing (3)	27	alkaloid
belimbing (4)	28	alkaloid
belimbing (5)	29	alkaloid
belimbing (6)	30	alkaloid
belimbing (7)	31	alkaloid
belimbing (8)	32	alkaloid
belimbing (9)	33	alkaloid
belimbing (10)	34	alkaloid

Prediction		1
belimbing (10)	34	alkaloid
belimbing (11)	35	alkaloid
belimbing (12)	36	alkaloid
kafein1	37	alkaloid
kafein2	38	alkaloid
kafein3	39	alkaloid
kafein4	40	alkaloid
kafein5	41	alkaloid
kafein6	42	alkaloid
kafein7	43	alkaloid
kafein8	44	alkaloid
kafein9	45	alkaloid
kafein10	46	alkaloid
kafein11	47	alkaloid
kafein12	48	alkaloid
kafein13	49	alkaloid
kafein14	50	alkaloid
kafein15	51	alkaloid
kafein16	52	alkaloid
lamtoro (1)	53	alkaloid
lamtoro (2)	54	alkaloid
lamtoro (3)	55	alkaloid
lamtoro (4)	56	alkaloid
lamtoro (5)	57	alkaloid
lamtoro (6)	58	alkaloid
lamtoro (7)	59	alkaloid
lamtoro (8)	60	alkaloid
lamtoro (9)	61	alkaloid
lamtoro (10)	62	alkaloid
lamtoro (11)	63	alkaloid
lamtoro (12)	64	alkaloid
mengkudu (1)	65	alkaloid
mengkudu (2)	66	alkaloid
mengkudu (3)	67	alkaloid

Prediction		
		1
mengkudu (3)	67	alkaloid
mengkudu (4)	68	alkaloid
mengkudu (5)	69	alkaloid
mengkudu (6)	70	alkaloid
mengkudu (7)	71	alkaloid
mengkudu (8)	72	alkaloid
mengkudu (9)	73	alkaloid
mengkudu (10)	74	alkaloid
mengkudu (11)	75	alkaloid
mengkudu (12)	76	alkaloid
pandan (1)	77	alkaloid
pandan (2)	78	alkaloid
pandan (3)	79	alkaloid
pandan (4)	80	alkaloid
pandan (5)	81	alkaloid
pandan (6)	82	alkaloid
pandan (7)	83	alkaloid
pandan (8)	84	alkaloid
pandan (9)	85	alkaloid
pandan (10)	86	alkaloid
pandan (11)	87	alkaloid
pandan (12)	88	alkaloid
sambiloto (1)	89	alkaloid
sambiloto (2)	90	alkaloid
sambiloto (3)	91	alkaloid
sambiloto (4)	92	alkaloid
sambiloto (5)	93	alkaloid
sambiloto (6)	94	alkaloid
sambiloto (7)	95	alkaloid
sambiloto (8)	96	alkaloid
sambiloto (9)	97	alkaloid
sambiloto (10)	98	alkaloid
sambiloto (11)	99	alkaloid
sambiloto (12)	100	alkaloid

sambiloto (12)	100	alkaloid
sirak (1)	101	alkaloid
sirak (2)	102	alkaloid
sirak (3)	103	alkaloid
sirak (4)	104	alkaloid
sirak (5)	105	alkaloid
sirak (6)	106	alkaloid
sirak (7)	107	alkaloid
sirak (8)	108	alkaloid
sirak (9)	109	alkaloid
sirak (10)	110	alkaloid
sirak (11)	111	alkaloid
sirak (12)	112	alkaloid

O. MODEL KLASIFIKASI MODEL SIMCA

O.1.1 Model Klasifikasi SIMCA *Training Set*

Sample - Class member	matriks	alkaloid	Sample - Class	matriks	alkaloid	Sample - Class member	matriks	alkaloid
arabika muda (10)			aerosil (1)	*		binahong (7)		*
arabika muda (11)			aerosil (2)	*		binahong (8)		*
arabika muda (12)		*	aerosil (3)	*		binahong (9)		*
arabika tua (1)			aerosil (4)			binahong (10)		*
arabika tua (2)			aerosil (5)			binahong (11)		*
arabika tua (3)			aerosil (6)			binahong (12)		*
arabika tua (4)			aerosil (7)	*		binahong (13)		*
arabika tua (5)			aerosil (8)	*		binahong (14)		*
arabika tua (6)			aerosil (9)	*		binahong (15)		*
arabika tua (7)			aerosil (10)	*		buncis (1)		*
arabika tua (8)			aerosil (11)	*		buncis (2)		*
arabika tua (9)			aerosil (12)	*		buncis (3)		*
arabika tua (10)			aquades (1)	*		buncis (4)		*
arabika tua (11)			aquades (2)	*		buncis (5)		*
arabika tua (12)			aquades (3)	*		buncis (6)		*
belimbing (1)		*	aquades (4)	*		buncis (7)		*
belimbing (2)		*	aquades (5)	*		buncis (8)		*
belimbing (3)		*	aquades (6)	*		buncis (9)		*
belimbing (4)			aquades (7)	*		buncis (10)		*
belimbing (5)			aquades (8)	*		buncis (11)		*
belimbing (6)			aquades (9)	*		buncis (12)		*
belimbing (7)		*	aquades (10)	*		jambu biji (1)		*
belimbing (8)		*	aquades (11)	*		jambu biji (2)		*
belimbing (9)		*	aquades (12)	*		jambu biji (3)		*
belimbing (10)		*	arabika muda (jambu biji (4)		*
belimbing (11)		*	arabika muda (jambu biji (5)		*
belimbing (12)		*	arabika muda (jambu biji (6)		*
binahong (1)		*	arabika muda (jambu biji (7)		*
binahong (2)		*	arabika muda (jambu biji (8)		*
binahong (3)		*	arabika muda (jambu biji (9)		*
binahong (4)		*	arabika muda (jambu biji (10)		*
binahong (5)		*	arabika muda (jambu biji (11)		*
binahong (6)		*	arabika muda (jambu biji (12)		*
binahong (7)		*	arabika muda (kafein1		*
binahong (8)		*	arabika muda (kafein2		*

Sample - Class member	matriks	alkaloid	Sample - Class member	matriks	alkaloid	Sample - Class member	matriks	alkaloid
kafein1		*	keluwih (6)		*	kunir (15)		*
kafein2		*	keluwih (7)		*	lamtoro (1)		*
kafein3		*	keluwih (8)		*	lamtoro (2)		*
kafein4		*	keluwih (9)		*	lamtoro (3)		*
kafein5		*	keluwih (10)		*	lamtoro (4)		*
kafein6		*	keluwih (11)		*	lamtoro (5)		*
kafein7		*	keluwih (12)		*	lamtoro (6)		*
kafein8		*	kembang bulan (1)		*	lamtoro (7)		*
kafein9		*	kembang bulan (2)		*	lamtoro (8)		*
kafein10		*	kembang bulan (3)		*	lamtoro (9)		*
kafein11		*	kembang bulan (4)		*	lamtoro (10)		*
kafein12		*	kembang bulan (5)		*	lamtoro (11)		*
kafein13		*	kembang bulan (6)		*	lamtoro (12)		*
kafein14		*	kembang bulan (7)		*	mangga (1)		*
kafein15		*	kembang bulan (8)		*	mangga (2)		*
kafein16		*	kembang bulan (9)		*	mangga (3)		*
katuk (1)		*	kembang bulan (10)		*	mangga (4)		*
katuk (2)		*	kembang bulan (11)		*	mangga (5)		*
katuk (3)		*	kembang bulan (12)		*	mangga (6)		*
katuk (4)		*	kunir (1)		*	mangga (7)		*
katuk (5)		*	kunir (2)		*	mangga (8)		*
katuk (7)		*	kunir (3)		*	mangga (9)		*
katuk (7)		*	kunir (4)		*	mangga (10)		*
katuk (8)		*	kunir (5)		*	mangga (11)		*
katuk (9)		*	kunir (6)		*	mangga (12)		*
katuk (10)		*	kunir (7)		*	mangga (13)		*
katuk (11)		*	kunir (8)		*	mangga (14)		*
katuk (12)		*	kunir (9)		*	mangga (15)		*
keluwih (1)		*	kunir (10)		*	mengkudu (1)		*
keluwih (2)		*	kunir (11)		*	mengkudu (2)		*
keluwih (3)		*	kunir (12)		*	mengkudu (3)		*
keluwih (4)		*	kunir (13)		*	mengkudu (4)		*
keluwih (5)		*	kunir (14)		*	mengkudu (5)		*
keluwih (6)		*	kunir (15)		*	mengkudu (6)		*
keluwih (7)		*	lamtoro (1)		*	mengkudu (7)		*

mengkudu (8)	*
mengkudu (9)	*
mengkudu (10)	*
mengkudu (11)	*
mengkudu (12)	*
pandan (1)	*
pandan (2)	*
pandan (3)	*
pandan (4)	*
pandan (5)	*
pandan (6)	*
pandan (7)	*
pandan (8)	*
pandan (9)	*
pandan (10)	*
pandan (11)	*
pandan (12)	*
pare (1)	*
pare (2)	*
pare (3)	*
pare (4)	*
pare (5)	*
pare (6)	*
pare (7)	*
pare (8)	*
pare (9)	*
pare (10)	*
pare (11)	*
pare (12)	*

$$\% \text{ prediksi} = \frac{200}{229} \times 100\% = 87\%$$

O.1.2. Model Klasifikasi SIMCA 2-Fold Cross Validation

Sample - Class	matriks2 f	alkaloid 2
aerosil (1)	*	
aerosil (2)	*	
aerosil (3)	*	
aerosil (4)		
aerosil (5)		
aerosil (6)		
aerosil (7)	*	
aerosil (8)	*	
aerosil (9)	*	
aerosil (10)	*	
aerosil (11)	*	
aerosil (12)	*	
aquades (1)	*	
aquades (2)	*	
aquades (3)	*	
aquades (4)	*	
aquades (5)	*	
aquades (6)	*	
aquades (7)	*	
aquades (8)	*	
aquades (9)	*	
aquades (10)	*	
aquades (11)	*	
aquades (12)	*	
kafein1		*
kafein2		*
kafein3		*
kafein4		*
kafein5		*
kafein6		*
kafein7		*
kafein8		*
kafein9		*
kafein10		*
kafein11		*

Sample - Class	matriks2 f	alkaloid 2
kafein10		*
kafein11		*
kafein12		*
kafein13		*
kafein14		*
kafein15		*
kafein16		*
pepaya (1)		*
pepaya (2)		*
pepaya (3)		*
pepaya (4)		*
pepaya (5)		*
pepaya (6)		*
pepaya (7)		*
pepaya (8)		*
pepaya (9)		*
pepaya (10)		*
pepaya (11)		*
pepaya (12)		*
putri malu (1)		*
putri malu (2)		*
putri malu (3)		*
putri malu (4)		*
putri malu (5)		*
putri malu (6)		*
putri malu (7)		*
putri malu (8)		*
putri malu (9)		*
putri malu (10)		*
putri malu (11)		*
putri malu (12)		*
sambiloto (1)		*
sambiloto (2)		*
sambiloto (3)		*
sambiloto (4)		*

Sample - Class	matriks2 f	alkaloid 2
sambiloto (3)		*
sambiloto (4)		*
sambiloto (5)		*
sambiloto (6)		*
sambiloto (7)		*
sambiloto (8)		*
sambiloto (9)		*
sambiloto (10)		*
sambiloto (11)		*
sambiloto (12)		*
sirih (1)		*
sirih (2)		*
sirih (3)		*
sirih (4)		*
sirih (5)		*
sirih (6)		*
sirih (7)		*
sirih (8)		*
sirih (9)		*
sirih (10)		*
sirih (11)		*
sirih (12)		*
sirsak (1)		*
sirsak (2)		*
sirsak (3)		*
sirsak (4)		*
sirsak (5)		*
sirsak (6)		*
sirsak (7)		*
sirsak (8)		*
sirsak (9)		*
sirsak (10)		*
sirsak (11)		*
sirsak (12)		*

$$\% \text{ prediksi} = \frac{94}{100} \times 100\% = 94\%$$

O.1.2. Model Klasifikasi SIMCA LOOCV

Sample - Class	matriks lo	alkaloid lo	Sample - Class	matriks lo	alkaloid lo	Sample - Class	matriks lo	alkaloid lo
aerosil (1)	*		belimbing (10)		*	mengkudu (3)		*
aerosil (2)	*		belimbing (11)		*	mengkudu (4)		*
aerosil (3)	*		belimbing (12)	*		mengkudu (5)		*
aerosil (4)			kafein1	*		mengkudu (6)		*
aerosil (5)			kafein2	*		mengkudu (7)		*
aerosil (6)			kafein3	*		mengkudu (8)		*
aerosil (7)	*		kafein4	*		mengkudu (9)		*
aerosil (8)	*		kafein5	*		mengkudu (10)		*
aerosil (9)	*		kafein6	*		mengkudu (11)		*
aerosil (10)	*		kafein7	*		mengkudu (12)		*
aerosil (11)	*		kafein8	*		pandan (1)		*
aerosil (12)	*		kafein9	*		pandan (2)		*
aquades (1)	*		kafein10	*		pandan (3)		*
aquades (2)	*		kafein11	*		pandan (4)		*
aquades (3)	*		kafein12	*		pandan (5)		*
aquades (4)	*		kafein13	*		pandan (6)		*
aquades (5)	*		kafein14	*		pandan (7)		*
aquades (6)	*		kafein15	*		pandan (8)		*
aquades (7)	*		kafein16	*		pandan (9)		*
aquades (8)	*		lamtoro (1)	*		pandan (10)		*
aquades (9)	*		lamtoro (2)	*		pandan (11)		*
aquades (10)	*		lamtoro (3)	*		pandan (12)		*
aquades (11)	*		lamtoro (4)	*		sambiloto (1)		*
aquades (12)	*		lamtoro (5)	*		sambiloto (2)		*
belimbing (1)		*	lamtoro (6)	*		sambiloto (3)		*
belimbing (3)		*	lamtoro (7)	*		sambiloto (4)		*
belimbing (3)		*	lamtoro (8)	*		sambiloto (5)		*
belimbing (4)			lamtoro (9)	*		sambiloto (6)		*
belimbing (5)			lamtoro (10)	*		sambiloto (7)		*
belimbing (6)			lamtoro (11)	*		sambiloto (8)		*
belimbing (7)		*	lamtoro (12)	*		sambiloto (9)		*
belimbing (8)		*	mengkudu (1)	*		sambiloto (10)		*
belimbing (9)		*	mengkudu (2)	*		sambiloto (11)		*
belimbing (10)		*	mengkudu (3)	*		sambiloto (12)		*
belimbing (11)		*	mengkudu (4)	*		sirsak (1)		*
sirsak (1)		*						
sirsak (2)		*						
sirsak (3)		*						
sirsak (4)		*						
sirsak (5)		*						
sirsak (6)		*						
sirsak (7)		*						
sirsak (8)		*						
sirsak (9)		*						
sirsak (10)		*						
sirsak (11)		*						
sirsak (12)		*						

$$\% \text{ prediksi} = \frac{106}{112} \times 100\% = 95\%$$

