Aplikasi Teknologi *Near Infrared Reflectance Spectroscopy* Dengan Metode *Partial Least Square* Untuk Prediksi Kadar *Patchouli* Alkohol Minyak Nilam

(*The Technology Application Near Infrared Reflectance Spectroscopy With Partial Least Square Method (PLS) To Prediction Patchouli Alcohol Content In Patchouli Oil*)

Sry Afrita Fitia¹, Rita Khathir¹, Zulfahrizal^{1*}

¹Program Studi Teknik Pertanian, Fakultas Pertanian, Universitas Syiah Kuala

*Corresponding author: zulfahrizal@unsyiah.ac.id

Abstrak. Minyak nilam merupakan salah satu jenis dari minyak atsiri yang dapat digunakan sebagai bahan baku dalam industri parfum, kosmetik serta untuk pengobatan. Minyak nilam mengandung *patchouli* alkohol yaitu penyusun utama yang digunakan sebagai indikator untuk mengetahui kualitas dari minyak nilam. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mengkaji kemampuan teknologi *near infrared reflectance spectroscopy* (NIRS) dengan metode *partial least square* (PLS) dalam memprediksi kadar *patchouli* alkohol pada minyak nilam. Hasil penelitian menunjukkan bahwa PLS mampu memprediksi kadar *patchouli* alkohol dengan menghasilkan model yang tergolong *good model performance*. Peningkatan performa kinerja PLS terbaik diperoleh pada penggunaan *pretreatment standart normal variate* dengan nilai RPD 2,83 dengan karakteristik model nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,93, nilai koefisien determinasi (R^2) 0,86 dan nilai *error* (RMSEC) sebesar 4,11.

Kata Kunci: Minyak Nilam, *Patchouli* Alkohol, *Partial Least Square*

Abstract. Patchouli oil is one type of essential oil that is used as a raw material in the perfume, cosmetic and medical industry. Patchouli oil is categorized in with the main component of essential oil patchouli alcohol used as an indicator to determine the quality of patchouli oil. The purpose of this research is to assessing technological capabilities of near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) with method partial least square (PLS) to predict patchouli alcohol content in patchouli oil. The results showed that PLS be able to predict patchouli alcohol levels by producing a model that is classified as good model performance. The best improved performance in the pretreatment PLS performance was by using standard normal variate as pretreatment with RPD value about 2,83 correlation coefficient (r) 0.93, the coefficient of determination (R^2) at 0.86, and (RMSEC) about 4.11.

Keywords: Patchouli Oil, Patchouli Alcohol, Partial Least Square

PENDAHULUAN

Indonesia merupakan negara yang berpotensi sebagai penghasil minyak atsiri yang cukup besar. Beberapa jenis tanaman penghasil minyak atsiri diantaranya yaitu nilam, cengkeh, kayu manis, pala, sereh wangi, akar wangi dan lain sebagainya. Tanaman nilam pada umumnya telah dibudidayakan di Indonesia yaitu nilam Aceh (*Pogostemon coblin* Benth) dan nilam Jawa (*Pogostemon heyneanus* Benth). Minyak nilam merupakan salah satu jenis dari minyak atsiri yang dapat digunakan sebagai bahan baku dalam industri parfum, kosmetik serta untuk pengobatan. Minyak nilam telah menyumbang lebih dari 50 persen ekspor minyak atsiri Indonesia, sehingga diharapkan menjadi komoditas unggulan di pasar ekspor (Idris *et al.*, 2014). Minyak nilam mengandung *patchouli* alkohol yaitu penyusun utama dan digunakan sebagai indikator untuk mengetahui kualitas dari minyak nilam. Tanaman nilam ini untuk keseluruhan mengandung minyak atsiri tetapi kandungan minyak atsiri yang terbesar terdapat pada bagian daun (Syauqiah, 2008).

Tanaman nilam (*Pogostemon coblin* Benth) merupakan salah satu tanaman penghasil minyak atsiri yang penting, dikenal dengan nama *patchouli* oil. Tanaman ini mengandung komponen utama *patchouli* alkohol (PA), yaitu senyawa kelompok seskuiterpen dengan rumus melekul $C_{15}H_{26}O$. Adapun kadar *patchouli* alkohol yang tinggi dalam minyak nilam memberikan

artian bahwa akan semakin baik kualitas minyak tersebut. *Patchouli* alkohol berfungsi sebagai bahan pengikat wewangian agar aroma keharumannya bertahan lama. Penyebab aroma wewangian dapat bertahan lama ialah sifat dari minyak nilam ialah sebagai pengikat bau wangi bahan pewangi lain atau fiksatif sekaligus dapat membentuk bau yang lembut dalam suatu campuran (Sastrohamidjojo, 2002). Biasanya untuk mengetahui kandungan *patchouli* alkohol minyak nilam dilakukan uji laboratorium dimana pengujian ini menggunakan metode dan bahan kimia tertentu sehingga membutuhkan waktu yang cukup lama dan biaya yang mahal. Hal ini tentunya menjadi masalah tersendiri bagi pelaku yang bergerak di perdagangan minyak nilam.

Saat ini teknologi inframerah sudah mulai dikembangkan untuk menguji kualitas minyak nilam khususnya *patchouli* alkohol. Terdapat penelitian yang dilakukan oleh Abdurahman dan Sundarajan (2019) menggunakan *middle infrared reflectance spektroskopi* untuk menguji *patchouli* alkohol dan penelitian yang dilakukan oleh Zulfahrizal *et al.*, (2019) melakukan penelitian untuk pengujian kadar *patchouli alcohol* (PA) pada minyak nilam Aceh yang menunjukkan bahwa teknologi NIRS mampu menduga kandungan kadar *patchouli* alkohol dengan menggunakan metode *partial least squares*. Kemudian ada juga penelitian yang dilakukan oleh Burahman (2020) yang menggunakan teknologi *near infrared reflectance spektroskopi* dengan metode *principal component regression* (PCR) untuk menguji *patchouli* alkohol. Oleh karena itu dalam penelitian ini mencoba untuk mengembangkan model pendugaan yang baru dengan menggunakan metode *partial least square* dan menggunakan *pretreatment de-trending dan standart normal variate*.

METODE PENELITIAN

Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini adalah GCMS, *Self developed FT-IR IPTEK T-1516*, botol kaca 5 ml, timbangan, pipet ukur, gelas reaksi dan *Unscrambler software® X version 10.5*. Bahan yang digunakan pada penelitian adalah minyak nilam Aceh hasil fraksinasi dengan kadar *patchouli* alkohol yang berbeda.

Perlakuan Sampel

Minyak nilam Aceh yang digunakan adalah minyak yang sudah difraksinasi di Atsiri Research Center Universitas Syiah Kuala Banda Aceh, yaitu minyak fraksi berat dua jenis (M1 da M2) dan minyak fraksi ringan satu jenis (M3). Uji kromatografi gas (GCMS) dilakukan untuk mendefinisikan kandungan *patchouli* alkohol untuk ketiga minyak fraksinasi tersebut. Lalu ketiga jenis minyak ini dicampur untuk mendapatkan tiga jenis yakni minyak destilat satu yang memiliki kadar *patchouli* alkohol antara 0-20% dengan jumlah sampel sebanyak tujuh buah, destilat dua memiliki kadar *patchouli* alkohol 21-32% dengan jumlah enam buah, dan destilat tiga memiliki kadar *patchouli* alkohol antara 33-50% dengan jumlah tujuh sampel.

Uji Kadar *Patchouli* Alkohol Laboratorium

Pengujian kadar *patchouli* alkohol menggunakan metode Kromatografi gas (GCMS) yang digunakan dalam kimia analitik untuk memisahkan dan menganalisis senyawa pada minyak nilam yang dapat menguap tanpa dekomposisi. Kromatografi gas (GCMS) dapat digunakan untuk pengujian kemurnian zat tertentu, atau memisahkan komponen yang berbeda dari campuran (jumlah relatif komponen tersebut juga dapat ditentukan). Juga dapat digunakan dalam mengidentifikasi suatu senyawa. Cara kerja GCMS menurut Darmapatni *et al.* (2016) adalah

komponen yang telah dilarutkan dengan pelarut kemudian diinjeksikan dan di bawa oleh *carier gas supplay* melewati kolom yang telah dipanaskan terlebih dahulu memakai oven. Sehingga komponen tersebut terbaca di *detector* dan direkam dalam *recorder*. Disini akan didapatkan pembacaan berupa *peak area* yang menunjukkan perprosentase area dari komponen yang dianalisa prosentase area didapatkan dari pembacaan grafik. Grafik berupa *peak* pada rentang waktu tertentu menunjukkan kecepatan migrasi komponen dan setiap komponen punya rentang waktu tertentu.

Pengaturan Alat NIRS

Adapun alat yang digunakan untuk mendapatkan spektrum NIRS minyak nilam yaitu *self developed FT-IR IPTEK T-1516*. Spektrum NIRS yang dihasilkan oleh alat ini secara umum sudah sesuai standar alat NIRS komersial. Akan tetapi perlu diperhatikan pengaturan frekuensi dan kebutuhan energi (*optical gain*, *number of scans* dan *resolution*) dalam proses pengambilan spektrumnya agar dihasilkan spektrum yang baik. Adapun alat *self developed FT-IR IPTEK T-1516* dapat meradiasikan gelombang cahaya dengan kisaran panjang gelombang antara 1000 nm sampai 2500 nm ($4000\text{-}10.000\text{ cm}^{-1}$) serta dikontrol oleh perangkat lunak *Thermo Operation®*. Spektrum NIRS bisa didapatkan dengan konfigurasi alur kerja ala (*workflow*) yang dibangun dengan menggunakan perangkat lunak terintegrasi *Thermo Operation®*. Pembuatan *workflow* dilakukan untuk mengatur alat dalam bekerja. Pengaturan alat NIRS diatur dengan 64 *scans*, *resolution* 2.0 cm^{-1} dan gain 4x sehingga dapat mengakuisisi spektrum *diffuse reflectance* sampel, lalu merata-ratakan hasilnya dan menyimpan hasil pemindaian kedalam dua bentuk *file* yaitu *.SPA dan *.CSV. Hasil yang didapatkan dari transpormasi nilai reflektan ke *absorbance* yang diubah ke dalam bentuk log (1/R) (Zulfahrizal *et al.*, 2017).

Pemeriksaan Data Outlier (PCA dan Hotteling T^2 Ellipse)

Data *outlier* di *remove* dengan metode *principal component analysis* (PCA) dan *hotteling T2 ellipse* yang merupakan cara untuk menganalisa data pencilan. Data yang diambil adalah data yang berada di dalam garis *ellipse*, apabila data berada di luar garis *ellipse*, maka data tersebut ditandai sebagai data pencilan (*outlier*) dan dihilangkan (*remove*) agar hasil prediksi lebih akurat (Cozolino *et al.*, 2011).

Perlakuan Pretreatment

Data penelitian selanjutnya diberikan *pretreatment* spektrum. Menurut (Mouazen *et al.*, 2010) dilakukan terlebih dahulu koreksi spektrum agar dapat membangun model prediksi spektrum NIR dengan tujuan menghilangkan *noise* pada spektrum sampel sehingga hasil dari prediksi lebih akurat. Pada penelitian ini digunakan *pretreatment* yaitu *de-trending* (DT) dan *standart normal variate* (SNV). Model prediksi yang digunakan untuk memprediksi kadar *patchouli* alkohol minyak nilam adalah metode *partial least square*.

Pembuatan Model Kalibrasi dan Evaluasi Keakuratan Model

Kadar *patchouli* alkohol diprediksi dengan cara membangun model PLS berdasarkan data dari spektrum NIR (Variable X) dan data nilai *patchouli* alkohol dari laboratorium (Variable Y). Evaluasi keakuratan model kalibrasi dilakukan dengan cara melihat parameter statistik meliputi; koefisien korelasi (r), koefisien determinasi (R^2), *root mean square error* (RMSE), *residual predictive deviation Index* (RPD), serta jumlah *latent variable* (LV).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Spektrum Mentah Minyak Nilam

Spektrum mentah adalah hasil dari pengambilan spektrum *near infrared reflectance* (NIR) pada selang panjang gelombang 1000-2500 nm. Pada penelitian ini tidak menggunakan panjang gelombang 780-999 nm dikarenakan pada panjang gelombang dibawah 1000 nm cenderung tidak memberikan informasi yang dibutuhkan untuk pengukuran spektra dengan alat NIRS dalam mendeteksi kandungan kimia dari bahan, karena bersinggungan dengan cahaya tampak. Pada panjang gelombang tersebut dapat dilihat spektrum dengan beberapa puncak dan lembah spektrum. beberapa puncak dan lembah yang terbentuk pada spektrum yang dihasilkan sebagai tanda keberadaan kandungan zat kimia pada bahan dengan panjang gelombang tertentu. Penyerapan panjang gelombang oleh kandungan kimia tertentu ditunjukkan dengan terjadinya puncak dan lembah gelombang pada kurva absorpsi *near infrared reflectance*, semakin banyak interaksi gelombang NIR dengan kandungan kimia bahan, maka semakin banyak puncak dan lembah gelombangnya. Komponen kimia mempengaruhi puncak dan lembah pada spektrum *near infrared reflectance* (NIR) didalam bahan yang dianalisis. Spektrum mentah minyak nilam fraksinasi dapat dilihat pada Gambar 1.

Gambar 1. Spektrum Mentah Minyak Nilam Fraksinasi

Spektrum pada Gambar 1 terlihat memiliki *noise*. *Noise* (gangguan) biasanya disebabkan oleh faktor internal dan eksternal. Faktor internal dapat disebabkan oleh alat yang berlebihan panas saat pengambilan spektrum. Sedangkan faktor eksternal dapat disebabkan oleh lingkungan yaitu seperti pengaruh suhu dan cahaya dalam ruangan pada saat pengambilan data. *Noise* yang terdapat pada minyak nilam dapat diidentifikasi melalui keberadaan getaran yang banyak pada suatu tempat dan bentuk spektrum yang tidak rapat. Spektrum yang terdapat *noise* dapat diatasi dengan melakukan pengolahan awal data spektra.

Penerapan PCA dan *Hottelling T² Ellipse* untuk Memeriksa Data Outlier

Data *outlier* atau data pencilan adalah suatu data yang berbeda dengan data-data lainnya yang dapat mengganggu data pendugaan pada saat kalibrasi spektrum. Data pencilan dideteksi menggunakan metode *principal component analysis* (PCA) dan *hottelling T² ellipse*. Data yang tergolong ke dalam pencilan merupakan data yang berada di luar garis *ellipse*. Adapun pemeriksaan data pencilan dapat dilihat pada Gambar 2.

Gambar 2. Pemeriksaan Data *Outlier* dengan Metode PCA dan *Hotteling T² Ellipse*

Gambar 2 menjelaskan bahwa tidak ada data yang berada di luar garis *ellipse*. Penelitian ini sesuai dengan penelitian yang dilakukan oleh Burahman (2020), bahwa tidak ada yang tergolong ke dalam data pencilan atau data yang berada di luar garis *ellipse*. Oleh karena itu analisa dapat dilanjutkan ke tahap selanjutnya yaitu pembuatan model pendugaan *patchouli* alkohol menggunakan metode *partial least square*.

Acuan Pengukuran Data Kalibrasi

Acuan Pengukuran data kalibrasi berfungsi untuk membantu mempermudah dalam proses analisa model kalibrasi yang akan dibuat nantinya. Model kalibrasi digunakan dengan tujuan membangun model persamaan matematik yang dapat digunakan untuk dapat memprediksi kandungan kimia bahan pangan tanpa harus melakukan pengukuran langsung secara destruktif yang dapat merusak bahan. Proses kalibrasi menggunakan 20 sampel minyak nilam. Acuan pengukuran data yang perlu dibuat adalah seperti selang antar sampel dan standar deviasi (SD) sampel yang dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Acuan Pengukuran Data Kalibrasi

Bagian	Jumlah Data	Parameter Statistik Deskriptif		
		Maksimum	Minimum	Standar Deviasi
Sampel	20	45,33	7,09	11,64

Tabel 1 dapat dilihat data memiliki keragaman yang cukup besar, bahwa dengan keragaman yang cukup besar ini menunjukkan bahwa persiapan sampel dengan 20 sampel ini sudah cukup bagus dengan nilai standar deviasi 11,64 serta nilai maksimum sebesar 45,33 dan nilai minimum sebesar 7,09 yang diperoleh dari hasil analisis laboratorium.

Pendugaan Kadar *Patchouli* Alkohol Minyak Nilam Menggunakan PLS Tanpa *Pretreatment*

Data spektrum yang dihasilkan dari spektrum mentah yang belum diperbaiki menghasilkan nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,79. Menurut Safitri (2016), apabila nilai koefisien korelasi (r) yang didapatkan mendekati 0,79 maka menunjukkan keeratan hubungan sangat kuat. Nilai koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,63. Menurut Karoui *et al.* (2006) nilai 0,63 menunjukkan prediksi kurang baik dikarenakan hanya 0,50-0,65 *variable Y* yang dapat dijelaskan oleh *variable X*. Nilai *root mean square error calibration* (RMSEC) yang didapatkan yaitu 6,90 lebih rendah dari nilai standar deviasi dan *latent variable* yang digunakan adalah 4. Menurut Zulfahrizal *et al.* (2020) apabila nilai *root mean square error calibration* (RMSEC)

lebih kecil dari nilai standar deviasi berarti data tergolong bagus dan nilai *latent variable* yang baik yaitu dibawah 9 dengan ketentuan semakin kecil semakin bagus. Nilai *residual predictive deviation* (RPD) yang didapatkan adalah 1,68. Menurut Nicolai *et al.* (2007) apabila nilai RPD yang didapatkan 1,68 maka digolongkan dalam prediksi masih kasar (*sufficient performance*). Pada penelitian ini nilai *root mean square error calibration* (RMSEC) masih bisa diturunkan dan nilai *residual predictive deviation* (RPD) masih bisa ditingkatkan sehingga selanjutnya dilakukan *pretreatment* terhadap spektrum mentah. Selengkapanya prediksi kadar *patchouli* alkohol berdasarkan spektrum mentah atau *Non Pretreatment* dapat dilihat pada Gambar 3.

Gambar 3. Plot Data Kalibrasi Kadar *Patchouli* Alkohol Pada *Non Pretreatment*

Pendugaan Kadar *Patchouli* Alkohol Minyak Nilam Menggunakan PLS dan *Pretreatment De-trending*

Perlakuan data dengan menggunakan *Pretreatment De-trending* mampu menghapus *tren* nonlinear pada data spektrum. Gambar 4 menunjukkan spektrum minyak nilam yang diberikan *Pretreatment De-trending* terlihat tipikal spektrum berubah dan *noise* spektrum berkurang yang ditandai dengan spektrum tampak lebih rapat dibandingkan spektrum mentah.

Gambar 4. Spektrum Minyak Nilam dengan *Pretreatment De-trending*

Pada *pretreatment de-trending* didapatkan nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,90.

Menurut Safitri (2016), apabila nilai koefisien korelasi (r) yang didapatkan 0,90 maka tergolong hubungan sangat kuat. Nilai koefisien korelasi meningkat setelah diberikan *pretreatment* dari 0,79 menjadi 0,90. Nilai koefisien determinasi (R^2) yang didapatkan sebesar 0,82. Menurut Karoui *et al.* (2006) apabila nilai koefisien determinasi (R^2) yang didapatkan 0,82 menunjukkan prediksi yang baik. Nilai koefisien determinasi meningkat setelah diberikan *pretreatment* dari 0,63 menjadi 0,82. Nilai *root mean square error calibration* (RMSEC) yang didapatkan sebesar 4,74 lebih rendah dari nilai standar deviasi dan *latent variable* yang digunakan adalah 4. Menurut Zulfahrizal *et al.* (2020) apabila nilai RMSEC lebih kecil dari standar deviasi berarti data tergolong bagus dan nilai *latent variable* yang baik yaitu dibawah 9. Nilai RMSEC menurun setelah diberikan *pretreatment* dari 6,90 menjadi 4,75. Nilai *residual predictive deviation* (RPD) yang didapatkan adalah 2,45. Menurut Nicolai *et al.* (2007) apabila nilai RPD yang didapatkan 2,45 maka digolongkan dalam prediksi yang baik (*good performance*). Nilai *residual predictive deviation* (RPD) meningkat setelah diberikan *pretreatment* dari 1,68 menjadi 2,45. Plot data kalibrasi pada *pretreatment de-trending* dapat dilihat pada Gambar 5.

Gambar 5. Plot Data Kalibrasi Kadar *Patchouli* Alkohol Pada *De-trending*

Pendugaan Kadar *Patchouli* Alkohol Minyak Nilam Menggunakan PLS dan *Pretreatment Standart Normal Variate*

Penggunaan *pretreatment standart normal variate* (SNV) ini bertujuan untuk mengurangi pengaruh interferensi gelombang (*noise*). Penggunaan *pretreatment standart normal variate* (SNV) berhasil menghilangkan *scatter effects* (penyebaran efek) dari spektrum, sehingga spektrum minyak nilam yang dihasilkan tampak lebih bagus. Dapat dilihat pada Gambar 6 spektrum minyak nilam menggunakan *pretreatment standart normal variate* (SNV) yang telah mampu menghilangkan *noise* pada spektrum ditandai dengan spektrum yang tampak lebih rapat.

Hasil pendugaan pada *pretreatment standart normal variate* memberikan nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,93. Menurut Safitri (2016) apabila nilai koefisien korelasi (r) yang didapatkan 0,93 menunjukkan korelasi sempurna atau hubungan sangat erat. Nilai koefisien korelasi meningkat setelah diberikan *pretreatment* dari 0,79 menjadi 0,93. Nilai koefisien determinasi (R^2) yang didapatkan sebesar 0,86. Menurut Karoui *et al.* (2006) apabila nilai koefisien determinasi yang didapatkan 0,93 menunjukkan bahwa prediksi yang dihasilkan merupakan prediksi yang sangat baik. Nilai koefisien determinasi meningkat setelah diberikan *pretreatment* dari 0,63 menjadi 0,93. Nilai *root mean mean square error calibration* (RMSEC)

yang didapatkan sebesar 4,11 lebih kecil dari nilai standar deviasi dan *latent variable* yang digunakan adalah 4. Menurut Zulfahrizal *et al.* (2020) apabila nilai RMSEC lebih kecil dari standar deviasi berarti data tergolong bagus dan nilai *latent variable* yang baik yaitu dibawah 9. Nilai RMSEC menurun setelah diberikan *pretreatment* dari 6,90 menjadi 4,11. Nilai *residual predictive deviation* (RPD) yang didapatkan adalah 2,83. Menurut Nicolai *et al.* (2007) apabila nilai RPD yang didapatkan 2,83 maka digolongkan dalam prediksi yang baik (*good performance*). Nilai *residual predictive deviation* (RPD) meningkat setelah diberikan *pretreatment* dari 1,68 menjadi 2,83. Plot data kalibrasi *pretreatment standart normal variate* dapat dilihat pada Gambar 7.

Gambar 6. Spektrum Minyak Nilam dengan *Pretreatment Standart Normal Variate*

Gambar 7. Plot Data Kalibrasi Kadar Patchouli Alkohol Pada Standard Normal Variate

Model Terbaik untuk Prediksi *Patchouli* Alkohol Minyak Nilam

Penentuan model terbaik pendugaan kadar *patchouli* alkohol minyak nilam dengan teknologi *near infrared reflectance* (NIR) dengan melihat nilai *latent variable*, koefisien determinasi (R^2), koefisien korelasi (r), *root mean square error calibration* (RMSEC) dan menghitung nilai *residual predictive deviation* (RPD) sebagai interpretasi dari pengembangan model kalibrasi. Nilai *residual predictive deviation* (RPD) dapat dihitung dengan cara membagi nilai standar deviasi dengan nilai *root mean square error calibration* pada masing-masing prediksi kadar *patchouli* alkohol pada tahap pengembangan model kalibrasi. Interpretasi pengembangan model kalibrasi *partial least square* (PLS) pada pendugaan kadar *patchouli*

alkohol minyak nilam menggunakan *near infrared reflectance spectroscopy* (NIRS) pada spektrum *non pretreatment* dan dengan *pretreatment* dapat dilihat pada Tabel 2.

Tabel 2. Hasil Interpretasi Pengembangan Model Kalibrasi *Partial Least Square*

Pendugaan	<i>Latent Variable</i>	r	R ²	RMSEC (%)	RPD
<i>Non pretreatment</i>	4	0,79	0,63	6,90	1,68
<i>De-trending</i>	4	0,90	0,82	4,75	2,45
<i>Standart Normal Variate</i>	4	0,93	0,86	4,11	2,83

Berdasarkan Tabel 2 dapat dilihat bahwa nilai koefisien korelasi (r) pada *pretreatment standart normal variate* didapatkan lebih baik karena nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,93 lebih besar dibandingkan dengan yang lain. Selanjutnya nilai koefisien determinasi (R²) yang didapatkan yaitu sebesar 0,86 pada *pretreatment standart normal variate* maka lebih baik karena nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,86 paling besar dibandingkan dengan yang lain. Nilai *root mean square error calibration* (RMSEC) yang didapatkan oleh *pretreatment standart normal variate* yaitu sebesar 4,11 lebih baik karena nilai yang didapatkan paling kecil dibandingkan dengan yang lain. Kemudian berdasarkan nilai *residual predictive deviation* (RPD) untuk *pretreatment standart normal variate* didapatkan nilai sebesar 2,83 lebih baik karena nilai yang didapatkan lebih besar dibandingkan dengan *pretreatment* yang lain. Berdasarkan semua pembahasan dapat disimpulkan bahwa *pretreatment* terbaik yang digunakan untuk prediksi kadar *patchouli* alkohol pada minyak nilam menggunakan *near infrared reflectance spectroscopy* (NIRS) dengan metode *partial least square* (PLS) adalah *pretreatment standart normal variate*.

SIMPULAN DAN SARAN

Simpulan

Simpulan yang dapat diambil adalah

1. Aplikasi teknologi *near infrared reflectance spectroscopy* (NIRS) dengan metode *partial least square* (PLS) dapat memprediksi kadar *patchouli* alkohol minyak nilam.
2. Model pendugaan prediksi *patchouli* alkohol yang terbaik pada penelitian ini adalah PLS yang dikombinasikan dengan *pretreatment standart normal variate* (SNV) dengan *latent variable* 4, nilai *residual predictive deviation* (RPD) sebesar 2,83, nilai koefisien determinasi (R²) sebesar 0,86, nilai koefisien korelasi (r) sebesar 0,93, nilai *root mean square error calibration* (RMSEC) sebesar 4,11.

Saran

Adapun saran yang dapat diberikan adalah perlunya penelitian lanjutan untuk meningkatkan prediksi pendugaan kadar *patchouli* alkohol ke taraf 99% dengan kombinasi *pretreatment* yang lain.

DAFTAR PUSTAKA

Abdurahman, N. H. dan S. Sundarajan. 2019. Chemical Compound Characterizations of Patchouli Leaf Extract via GC-MS, LC-QTOF-MS, FTIR and 1H NMR. International Journal of Engineering Research and Technology. 8 : 1054-1059.

- Burahman, F. 2020. Pendugaan Kadar Patchouli Alkohol Pada Minyak Nilam Hasil Fraksinasi Menggunakan Metode Principal Component Regression. Skripsi. Program Studi Teknik Pertanian. Fakultas Pertanian Universitas Syiah Kuala. Banda Aceh.
- Cen, H dan Y. He. 2007. Theory and Application of Near Infrared Reflectance Spectroscopy in Determination of Food Quality. *J. Trends in Food Sci and Technol.* 18 : 72-83.
- Cozzolino, D., W. U. Cynkar, N. Shah, P. Smith. 2011. Multivariate Data Analysis Using Appliedto Spectroscopy : Potential Application to Juice and Fruit Quality. *Food Research International.* 44 : 1888-1896.
- Darmapatni, A. K., A. Basori, dan Suaniti, N. M. 2016. Pengembangan Metode GCMS untuk Penetapan Kadar Acetaminophen Pada Spesimen Rambut Manusia. *Jurnal Biosains Pascasarjana.* 18 (3) : 255-269.
- Idris, A., Ramajura, M., dan I. Said. 2014. Analisis Kualitas Minyak Nilam (*Pogostemon Cablin Benth*) Produksi Kabupaten Buol. *Jurnal Akademika Kimia,* 3 (2) : 79-85.
- Karoui, R., A. M. Mouzena, E. Dufourb, L. Pilllonelc, E. Schallerd, J. De Baerdamaekera, J. O. Bossetc. 2006. Chemical Characterisation of Uropean Emmmental Cheese by Near Infrared Spectroscopy Using Chemometric Tools. *International Dairy Journal.* 16 : 1211-1217.
- Khalid, Z., A. A. Munawar, H. Meilina. 2017. Pengembangan Produk Minyak Nilam Dalam Upaya Memenuhi Standar Quality Patchouli Alcohol Menggunakan Chemometric. *Jurnal Serambi Engineering.* 1 (2) : 7.
- Mouazen, A. M., W. Saeys, J. Xing, J. D. Baerdemaeker, H. Ramon. 2010. Near Infrared Spectroscopy for Agricultural Materials: An Instrument Comparison. *J Near InfraredSpectrosc.* 13 : 87-97.
- Nicolai, B. M., K. Beullens, E. Bobelyn, A. Peirs, W. Saeys, K.I. Theron, J. Lamertyn. 2007. Non Destructive Measurement of Fruit and Vegetable Quality by Means of NIR Spectroscopy: A Review. *Postharvest Biology and Technology.* 46 : 99-118.
- Nurhasanah. 2018. Prediksi Kadar Air Beras Menggunakan NIRS Dengan Metode PLS (Partial Least Square) dan Pretreatment Standard Normal Variate, Derivative-1, Savitzky Golay Smoothing. Skripsi. Program Studi Teknik Pertanian. Fakultas Pertanian Universitas Syiah Kuala. Banda Aceh.
- Safitri, W. R. 2016. Pearson Correlation Analysis to Determine The relationship Between City Population Density with Incident Dengue Fever of Surabaya in The Year 2012-2014. *Scientific Journal of Nursing.* 2 (2) : 21- 29.
- Sastrohamidjojo, H. 2002. Kimia Minyak Atsiri. Yogyakarta: FMIPA UGM. *Jurnal Teknik ITS.* 1 : 25-29.
- Syauqiah, I. 2008. Analisis Pengaruh Lama Penyulingan dan Komposisi Bahan Baku Terhadap Rendemen dan Mutu Minyak Atsiri dari Daun dan Batang Nilam. Banjarmasin. Universitas Lambung Mangkurat.
- Zulfahrizal, A. A. Munawar, dan H. Meilina. 2017. Rancang Bangun Alat Sensor Portable Berbasis Pengembangan Aplikasi Teknologi Near Infrared Sebagai Metode Baru yang Rapid dan Non-Destructive untuk prediksi Kualitas Kakao. Dalam Suhendrayatna, H. Meilina, Zulfahrizal, Sugianto, T. Rikhayat, Jamil, M. Makky dan A. G. Haji (Eds.) *Prosiding Seminar Nasional Pasca Sarjana Universitas Syiah Kuala.* A32-A37.
- Zulfahrizal, A. A. Munawar, H. Meilina. 2019. Fast Quantitative Prediction of Patchouli Alcohol Content Using Near Infrared Reflektance Spectroscopy. 2nd International Conference of Essential Oils. Banda Aceh. 29- 30 Oktobel 2019.
- Zulfahrizal, A. A. Munawar, Mahlinda. 2020. Desain Alat Sensor Near Infrared Reflectance Spectroscopy untuk Peningkatan Nilai Jual Minyak Nilam Aceh. Laporan Penelitian. Fakultas Pertanian Universitas Syiah Kuala. Banda Aceh.