

Klasifikasi Kopi Bubuk Speisialti Kalosi dan Toraja Menggunakan *UV-Visible Spectroscopy* dan Metode PLS-DA

(Classification of Ground Roasted Kalosi and Toraja Specialty Coffees using UV-Visible Spectroscopy and PLS-DA Method)

Diding Suhandy^{1*}, Meinilwita Yulia²

(Diterima Mei 2018/Disetujui Januari 2019)

ABSTRAK

Kopi spesialti dijual dengan harga yang sangat mahal. Kopi spesialti biasanya dikonsumsi tunggal (tanpa dicampur dengan jenis kopi lain). Untuk itulah proses uji keaslian untuk memastikan kemurnian kopi spesialti menjadi sesuatu yang sangat penting untuk dilakukan. Pada penelitian ini, *UV-visible spectroscopy* yang dikombinasikan dengan metode PLS-DA digunakan untuk membedakan dua jenis kopi spesialti asal Provinsi Sulawesi Selatan, yaitu kopi Kalosi dan kopi Toraja. Sebanyak 100 sampel kopi bubuk Kalosi dan kopi Toraja digunakan sebagai sampel di mana setiap sampelnya memiliki bobot 1 g. Setiap sampel diekstraksi menggunakan air suling dan spektra sampel hasil ekstraksi kemudian diukur data spektranya dengan mode transmisi menggunakan *UV-Visible spectrometer* (Genesys™ 10S UV-Vis, Thermo Scientific, USA). Hasil klasifikasi menggunakan metode PLS-DA menunjukkan bahwa semua sampel prediksi dapat diklasifikasikan dengan benar sesuai dengan kelasnya masing-masing (Kalosi dan Toraja) dengan nilai sensitivitas, spesifisitas, dan akurasi sebesar 100%.

Kata kunci: kopi Kalosi, kopi Toraja, PLS-DA, uji keaslian, *UV-Visible spectroscopy*

ABSTRACT

Specialty coffee is sold in a very expensive price. Specialty coffee is usually consumed as a single origin (without mixed with other coffee). For this reason, the detection of impurities (authentication) in specialty coffee is a very important process to be performed. In this study, UV-visible spectroscopy combined with PLS-DA method were used to discriminate between two specialty coffees from South Sulawesi (Kalosi and Toraja). A number of 100 ground roasted coffee samples were used for Kalosi and Toraja, respectively (1 gram each sample). A standard aqueous extraction procedure of the coffee samples using distilled water was performed and the spectral data of aqueous samples of Kalosi and Toraja coffee were acquired in transmittance mode using a UV-Visible spectrometer (Genesys™ 10S UV-Vis, Thermo Scientific, USA). The result showed that using PLS-DA method, all prediction samples were correctly classified into their corresponding classes with 100% rate for sensitivity, specificity, and accuracy, respectively.

Keywords: authentication, Kalosi coffee, PLS-DA, Toraja coffee, UV-Visible spectroscopy

PENDAHULUAN

Saat ini berbagai produk pertanian yang memiliki karakteristik unik, ciri khas tertentu, diproses dengan teknik khusus, dan dijual dengan harga yang sangat mahal dibandingkan dengan produk pertanian biasa (*regular product*). Produk ini dikenal juga sebagai produk pertanian spesialti. Salah satunya adalah produk kopi spesialti. Salah satu kopi spesialti yang dijual dengan harga tinggi adalah produk kopi yang memiliki label khusus yang mengacu ke daerah asal produk kopi tersebut sehingga kopi spesialti disebut

juga sebagai *rare origin*. Beberapa produk kopi spesialti bahkan telah mendapatkan perlindungan sekaligus pengakuan sebagai produk spesialti berupa sertifikat atau label indikasi geografis (IG).

Di Provinsi Sulawesi Selatan terdapat dua jenis kopi Arabika yang telah mendapatkan sertifikasi indikasi geografis, yaitu kopi Arabika Kalosi Enrekang (Sertifikat IG No. ID G 000 000 018) dan kopi Arabika Toraja (Sertifikat IG No. ID G 000 000 025). Sebenarnya, kedua kopi spesialti tersebut memiliki kawasan produksi indikasi geografis yang sangat berdekatan. Kawasan produksi indikasi geografis kopi Kalosi terletak di dataran tinggi sepanjang punggung pegunungan Latimojong, Kabupaten Enrekang, sedangkan kawasan produksi indikasi geografis kopi Toraja terletak di Kabupaten Tana Toraja dan Kabupaten Toraja Utara (DJHKI 2018).

Kopi spesialti biasanya dikonsumsi dalam bentuk tunggal (tanpa dicampur kopi lain) sehingga sangat penting untuk memastikan keaslian dan kemurnian kopi spesialti sebagai upaya untuk menjaga kualitas

1 Jurusan Teknik Pertanian, Fakultas Pertanian, Universitas Lampung, Jl. Prof. Dr. Soemantri Brojonegoro No. 1, Bandar Lampung 35145

2 Jurusan Teknologi Pertanian, Politeknik Negeri Lampung, Jl. Soekarno Hatta No. 10 Rajabasa, Bandar Lampung 35141

* Penulis Korespondensi:
Email: diding.suhandy@fp.unila.ac.id

kopi spesialti yang diperdagangkan. Menurut Pascu (2013) yang dimaksud dengan produk yang otentik (*authentic product*) mengacu ke produk yang bersifat original, asli, sesuai, dan tidak diragukan lagi. Artinya, produk kopi spesialti dengan indikasi geografis dikatakan asli atau otentik adalah jika kopi spesialti tersebut original dan asli berasal dari daerah yang sesuai dengan indikasi geografisnya sesuai dengan label yang tertera di kemasan. Jika tidak asli maka produk kopi spesialti tersebut bisa jadi telah dipalsukan sehingga kopi spesialti tersebut tidak lagi 100% berasal dari daerah sesuai indikasi geografisnya. Organisasi Kopi Internasional (*International Coffee Organization/ICO*) melaporkan bahwa pemalsuan kopi karena alasan ekonomi dianggap sebagai salah satu ancaman paling serius pada perkembangan pasar kopi spesialti yang berkelanjutan (Cai *et al.* 2016). Untuk itulah pengembangan metode uji keaslian kopi spesialti menjadi sangat penting.

Proses uji keaslian kopi bubuk, metode *cup tasting* atau disebut juga sebagai *sensory test* merupakan metode yang saat ini banyak digunakan, khususnya untuk penilaian kualitas kopi bubuk spesialti. Meskipun *cup tasting* telah diterima sebagai salah satu metode penilaian mutu kopi spesialti, metode ini memiliki beberapa kelemahan seperti terbatasnya *cupper experts* (penilai), tidak konsisten, relatif antar-penilai, dan bersifat subjektif (Craig *et al.* 2018). Untuk mengatasi keterbatasan metode *cup tasting* ini maka beberapa metode analitik sudah digunakan dan dilaporkan untuk penilaian kualitas kopi bubuk. Cai *et al.* (2016) melaporkan penggunaan metode berbasis kromatografi *ultra-high performance liquid chromatography coupled high resolution mass spectrometry* (UPLC-HRMS) dan metode kemometrika *orthogonal partial least squares discriminant analysis* (OPL-DA) untuk membedakan kopi bubuk murni (*non-adulterated*) dan kopi bubuk yang sudah dicampur dengan beras dan kacang kedelai (*adulterated*). Daniel *et al.* (2018) menggunakan metode berbasis kromatografi *capillary electrophoresis-tandem mass spectrometry* (CE-MS) untuk menguji keaslian kopi bubuk yang dicampur dengan kacang kedelai dan jagung. Penggunaan metode CE-MS dan metode kemometrika PCA (*principal component analysis*) berhasil membedakan kopi bubuk murni dan kopi bubuk yang sudah dicampur dengan bahan bukan kopi (kacang kedelai dan jagung). Hanya saja penggunaan metode analitik berbasis kromatografi tersebut mahal biaya analisisnya, melibatkan bahan kimia, membutuhkan waktu proses analisis yang lama (*time consuming*), dan melibatkan penggunaan alat yang mahal.

Metode analitik berbasis *spectroscopy*, penggunaan metode NIR *spectroscopy*, mid infrared *spectroscopy*, nuclear magnetic resonance (NMR) *spectroscopy* dan Raman *spectroscopy* yang dikombinasikan dengan beberapa metode kemometrika seperti PCA (*principal component analysis*), SIMCA (*soft independent modeling of class analogy*), dan PLS-DA (*partial least squares discriminant analysis*) telah dilaporkan berhasil membedakan kopi bubuk murni

dari kopi bubuk yang dicampur (tidak murni) (Wermelinger *et al.* 2011; Bertone *et al.* 2016; Marquetti *et al.* 2016; Ribeiro *et al.* 2017; Assis *et al.* 2018; Craig *et al.* 2018).

Metode *spectroscopy* pada panjang gelombang ultraviolet-cahaya tampak atau *UV-visible* juga dilaporkan berhasil membedakan kopi bubuk luwak asli dan campuran (Yulia & Suhandy 2017) dan kopi bubuk lanang dan bukan lanang (Suhandy & Yulia 2017; Suhandy *et al.* 2017). Metode *UV-visible spectroscopy* memiliki beberapa keunggulan dibandingkan dengan metode *spectroscopy* yang lain, seperti alatnya yang relatif murah, ekstraksi sampel hanya menggunakan air panas (bebas bahan kimia), mudah dalam menjalankan alatnya dan tersedia hampir di banyak laboratorium standar di Indonesia. Dengan demikian, metode ini sangat prospektif untuk dikembangkan di Indonesia sebagai metode uji keaslian kopi spesialti.

Dari kajian pustaka yang dilakukan, tidak ditemukan adanya laporan penggunaan *UV-visible spectroscopy* dan metode PLS-DA untuk klasifikasi kopi bubuk spesialti asal Sulawesi Selatan. Oleh karena itu, pada penelitian ini diujicobakan penggunaan metode *UV-visible spectroscopy* dan metode kemometrika PLS-DA untuk membedakan dua buah kopi bubuk spesialti asal Provinsi Sulawesi Selatan, yaitu kopi Kalosi dan kopi Toraja.

METODE PENELITIAN

Penelitian ini dilaksanakan dari bulan November–Desember 2017 di Laboratorium Rekayasa Bioproses dan Pasca Panen Pertanian, Jurusan Teknik Pertanian, Fakultas Pertanian, Universitas Lampung.

Sampel Penelitian

Sampel yang digunakan adalah dua jenis kopi spesialti asal Provinsi Sulawesi Selatan, yaitu kopi Kalosi dan Toraja (dalam bentuk biji kopi sebelum disangrai atau *green beans*) yang dibeli dari toko kopi terpercaya (*trusted shop*) di Bandar Lampung. Kedua jenis kopi disangrai pada suhu 200°C (suhu masuk) dan 213°C (suhu keluar) selama 10 menit. Kopi hasil sangrai kemudian dibiarkan selama 2 hari di suhu ruang (28°C) sebelum diproses lebih lanjut. Kopi kemudian digiling menggunakan penggiling listrik (Sayota). Ukuran partikel memiliki pengaruh yang sangat signifikan pada kualitas spektra (Suhandy *et al.* 2016). Pada penelitian ini digunakan kopi bubuk dengan ukuran partikel 420 mikrometer yang diperoleh dengan mengayak sampel kopi bubuk pada ayakan mesh 40 selama 10 menit dengan pengayak mekanis Meinzer II *sieve shaker* (CSC Scientific Company, Inc. USA). Sampel kemudian diekstraksi menggunakan air suling. Proses ekstraksi sampel kopi bubuk dilakukan dengan mengikuti prosedur seperti yang telah dilaporkan sebelumnya (Suhandy *et al.* 2016; Suhandy & Yulia 2017). Secara singkat prosedur ekstraksi sampel kopi adalah sebagai berikut: setiap sampel kopi sebanyak 1 g dicampur air suling sebanyak 10 mL

bersuhu 90–98°C, kemudian diaduk selama 5 menit pada kecepatan 350 rpm. Setelah itu sampel disaring menggunakan kertas saring Whatmann No. 40. Hasil saringan kemudian didiamkan untuk mencapai suhu ruang dan kemudian diencerkan menggunakan air suling dengan perbandingan 1:20 (volume/volume).

Pengambilan Spektra UV-visible

Pengambilan data spektra larutan sampel kopi bubuk hasil ekstraksi dilakukan dengan alat spektrometer yang bekerja di daerah ultraviolet dan cahaya tampak (UV-visible). Sebanyak 3 mL larutan kopi diteteskan ke dalam kuvet (tebal 10 mm) dan spektranya diukur pada rentang panjang gelombang 190–1100 nm (Genesys UV-visible spectrometer, Thermo Fisher, Scientific, USA). Pengambilan spektra untuk sampel dan referensi (air suling) dilakukan dengan mode transmisi dengan resolusi sebesar 1 nm (sehingga total terdapat 911 panjang gelombang yang terlibat dan diukur nilai absorbansinya). Nilai absorbansi spektra kemudian dihitung dengan menggunakan persamaan (1) sebagai berikut:

$$A(\lambda) = -\log_{10} \frac{S(\lambda)}{R(\lambda)} \quad (1)$$

Keterangan:

$A(\lambda)$ = Nilai absorbansi sampel pada panjang gelombang λ

$S(\lambda)$ = Nilai intensitas cahaya sampel pada panjang gelombang λ

$R(\lambda)$ = Nilai intensitas cahaya referensi pada panjang gelombang λ

Analisis Kemometrika

Analisis kemometrika dilakukan menggunakan perangkat lunak *The Unscrambler X* (versi *free trial* 30 hari, CAMO, AS, Norwegia). Secara umum tahapan analisis kemometrika meliputi proses transformasi data spektra (untuk memaksimalkan informasi dan meminimalkan *noise* pada data spektra), kemudian proses klusterisasi menggunakan metode *principal components analysis* (PCA) atau analisis komponen utama (AKU), dan terakhir membangun model diskriminasi atau model klasifikasi untuk proses diskriminasi dan klasifikasi sampel kopi berdasarkan daerah geografisnya (origin).

Proses transformasi spektra menggunakan 4 algoritma, yaitu *Savitzky-Golay smoothing* (SGS), *standard normal variate* (SNV), *multiplicative scatter correction* (MSC), dan *Savitzky-Golay 1st derivative* (SGD1). Secara umum, proses transformasi spektra dilakukan untuk memperbaiki *signal to noise ratio* (SNR) data spektra sekaligus mengurangi efek hamburan (*scattering*). Meskipun pada praktiknya efek *scattering* ini sudah diminimalkan saat pengambilan spektra dengan mendinginkan larutan kopi hasil ekstraksi dan hasil pengenceran selama 10 menit untuk setiap sampel. Hal ini dilakukan untuk memastikan bahwa larutan cukup jernih dan berkurangnya efek hamburan. Namun demikian, pada pengukuran spektra larutan kopi hasil ekstraksi sangat dimungkinkan

muncul efek hamburan yang nilainya bervariasi antar-sampel bergantung pada kejernihan larutan.

Model diskriminasi untuk klasifikasi kelas kopi Kalosi dan Toraja dibangun menggunakan metode regresi berbasis PLS (*partial least squares*) dengan variabel X berupa data spektra dan variabel Y berupa data jenis kopi (kopi Kalosi dan Toraja). Untuk kuantifikasi variabel Y maka kelas kopi Kalosi diberi nilai $Y=1$, sedangkan kelas kopi Toraja diberi nilai $Y=0$. Metode PLS dengan keperluan diskriminasi ini dikenal juga dengan metode PLS-DA (*partial least squares-discriminant analysis*). Pada penelitian ini PLS-DA dibangun untuk membuat model diskriminasi yang memiliki kemampuan untuk mengklasifikasi sampel apakah masuk ke dalam kelas kopi Kalosi atau masuk ke dalam kelas kopi Toraja. Untuk itu, setiap model PLS-DA yang dibangun memiliki aturan nilai ambang batas atau *threshold* untuk menilai sebuah sampel apakah masuk ke dalam suatu kelas tertentu atau tidak. Nilai *threshold* ini secara umum dapat ditentukan dengan dua metode, yaitu menggunakan teorema Bayes atau menggunakan angka tertentu seperti nilai 0,5. Beberapa studi terdahulu menggunakan teorema Bayes sebagai acuan nilai *threshold* seperti Grasel & Ferrão (2016); Sanchez *et al.* (2018). Sementara itu, untuk acuan nilai *threshold* menggunakan nilai 0,5 juga banyak diadopsi oleh riset sebelumnya (Suhandy & Yulia 2017; Cortés *et al.* 2017; Giovenzana *et al.* 2018). Pada penelitian ini, nilai 0,5 digunakan sebagai nilai *threshold* untuk menilai hasil klasifikasi PLS-DA. Hasil PLS-DA berupa nilai prediksi Y diartikan sebagai berikut: sampel dengan nilai Y kurang dari 0,5 maka sampel tersebut diklasifikasikan sebagai sampel kopi Toraja. Jika nilai Y lebih dari 0,5 maka sampel diklasifikasikan sebagai kopi Kalosi.

Sebelum dilakukan pengembangan model PLS-DA, sampel dibagi menjadi dua set sampel, yaitu sampel kalibrasi sebanyak 168 sampel dan sampel prediksi sebanyak 32 sampel. Proses pembagian sampel dilakukan secara acak (*random*). Sampel kalibrasi digunakan untuk membangun model PLS-DA sedangkan sampel prediksi digunakan untuk mengevaluasi performansi model PLS-DA yang dibangun.

Parameter untuk Mengevaluasi Model Diskriminasi PLS-DA

Mengevaluasi kemampuan model diskriminasi PLS-DA maka hasil klasifikasi PLS-DA disajikan dalam bentuk matriks konfusi (*confusion matrix*) seperti pada Tabel 1. TP atau *true positive* merupakan sampel kopi Kalosi yang diklasifikasikan secara benar sebagai kopi Kalosi. FP atau *false positive* adalah sampel kopi Kalosi yang diklasifikasikan sebagai kopi Toraja. TN atau *true negative* adalah sampel kopi Toraja yang diklasifikasikan sebagai kopi Toraja. FN atau *false negative* adalah sampel kopi Toraja yang diklasifikasikan sebagai kopi Kalosi. Berdasarkan nilai Tabel 1 kemudian dihitung beberapa parameter berikut, yaitu akurasi, sensitivitas, spesifisitas, dan *Matthews's correlation coefficient* (MCC). Rumus untuk meng-

Tabel 1 Matriks konfusi untuk menghitung nilai sensitivitas, spesifisitas, dan akurasi

	Sampel kopi Kalosi (aktual)	Sampel kopi Toraja (aktual)
Sampel kopi Kalosi (prediksi oleh PLS-DA)	TP	FP
Sampel kopi Toraja (prediksi oleh PLS-DA)	FN	TN

hitung parameter tersebut disajikan pada persamaan (2) hingga persamaan (5) (de Santana *et al.* 2018).

$$\text{Sensitivitas (\%)} = \frac{TP}{TP+FN} \times 100 \quad (2)$$

$$\text{Spesifisitas (\%)} = \frac{TN}{TN+FP} \times 100 \quad (3)$$

$$\text{Akurasi (\%)} = \frac{TP+TN}{TP+TN+FN+FP} \times 100 \quad (4)$$

$$\text{MCC} = \frac{(TP \times TN - FP \times FN)}{\sqrt{(TP+FN)(TP+FP)(TN+FN)(TN+FP)}} \quad (5)$$

Sensitivitas merupakan parameter yang menunjukkan kemampuan model diskriminasi PLS-DA yang dibangun dalam mengklasifikasikan sampel kopi Kalosi secara benar. Sementara itu, spesifisitas merupakan parameter yang menunjukkan kemampuan model diskriminasi PLS-DA yang dibangun dalam mengklasifikasikan sampel kopi Toraja secara benar. Akurasi merupakan rasio persentase dari keseluruhan sampel (Kalosi dan Toraja) yang diklasifikasikan secara benar. Nilai sensitivitas, spesifisitas, dan akurasi berada di rentang 0–100%. MCC memiliki nilai -1 hingga +1. Nilai MCC = +1 menunjukkan hasil klasifikasi yang sempurna (de Santana *et al.* 2018).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Analisis Spektra Kopi Kalosi dan Toraja

Gambar 1a adalah spektra *original* rata-rata 100 sampel dari masing-masing kopi (Kalosi dan Toraja) pada rentang panjang gelombang 190–1100 nm (911 variabel panjang gelombang). Spektra *original* adalah data spektra hasil pengukuran spektrometer tanpa proses transformasi spektra. Secara umum bentuk spektra *original* yang diperoleh sangat identik dengan bentuk spektra kopi lainnya yang sudah dilaporkan seperti kopi luwak (Yulia & Suhandy 2017) dan kopi lanang (Suhandy & Yulia 2017). Dari Gambar 1a terlihat kedua rata-rata spektra nilainya sangat berdekatan dan sulit membedakan kedua jenis kopi (Kalosi dan Toraja) dari spektra *original*. Untuk melihat perbedaan kedua spektra rata-rata maka dihitung juga nilai selisih spektra Kalosi dan Toraja. Untuk memperjelas nilai selisih yang diperoleh kemudian dikalikan 10 dan hasilnya terlihat di Gambar 1a. Sekarang tampak jelas kontribusi spektra di rentang 250–450 nm untuk membedakan kopi Kalosi dan Toraja. Rentang panjang gelombang 450–1100 nm sangat kecil kontribusinya terlihat dari nilai selisih kedua jenis spektra yang mendekati 0.

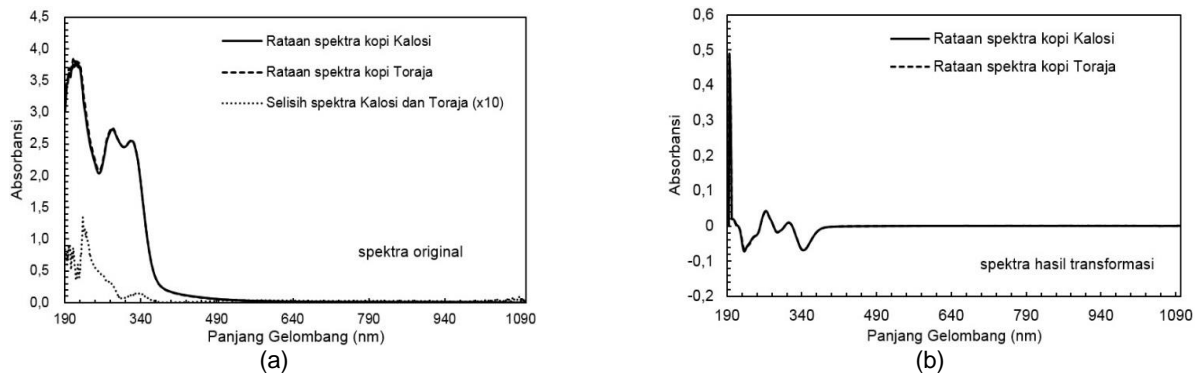
Spektra *original* biasanya masih banyak mengandung *noise* atau informasi yang tidak penting yang bila tidak dihilangkan maka dapat menurunkan kehandalan (*robustness*) model klasifikasi yang diha-

silkan. Untuk meningkatkan kualitas spektra maka proses transformasi data spektra dilakukan dengan menggunakan 4 algoritma, yaitu Savitzky-Golay *smoothing* (SGS), *standard normal variate* (SNV), *multiplicative scatter correction* (MSC), dan Savitzky-Golay *1st derivative* (SGD1). Hasil transformasi data spektra ditunjukkan pada Gambar 1b.

Hasil Analisis Komponen Utama (AKU)

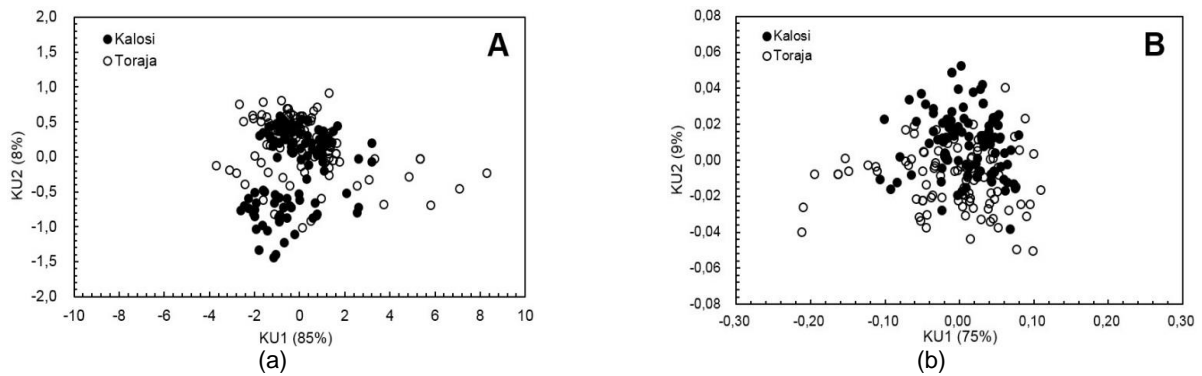
Gambar 2 menunjukkan hasil *principal component analysis* (PCA) atau analisis komponen utama (AKU) untuk spektra *original* (190–1100 nm) (Gambar 2a) dan spektra hasil transformasi (190–1100 nm) (Gambar 2b). Untuk spektra *original* (190–1100 nm) diperoleh komponen utama ke-1 (KU1) mampu menjelaskan varian data spektra sebesar 85% dan komponen utama ke-2 (KU2) sebesar 8% dengan total KU1+KU2 sebesar 93%. Dapat dilihat bahwa menggunakan data spektra *original* dan melibatkan semua panjang gelombang 190–1100 nm, proses pemisahan sampel kopi Kalosi dan Toraja masih sangat sulit di mana sampel kedua jenis kopi saling bertumpuk. Untuk spektra hasil transformasi dan menggunakan panjang gelombang 190–1100 nm, hasil AKU dengan KU1 sebesar 75% dan KU2 sebesar 9% (total KU1 dan KU2 sebesar 84%) ditunjukkan pada Gambar 2b. Hasil ini menunjukkan bahwa proses pemisahan kedua jenis kopi masih cukup sulit meskipun yang digunakan adalah spektra hasil transformasi (SGS+SNV+MSC+SGD1).

Melihat pengaruh rentang panjang gelombang pada hasil analisis pemisahan sampel maka dibuat plot AKU untuk spektra *original* (250–450 nm) dan spektra hasil transformasi (250–450 nm). Hasilnya ditunjukkan pada Gambar 3a dan 3b. Terlihat untuk spektra *original*, penggunaan rentang panjang gelombang 250–450 nm untuk analisis AKU memiliki nilai KU1 dan KU2 adalah sebesar 99 dan 1% (total KU1+KU2 sebesar 100%). Untuk spektra hasil transformasi pada rentang panjang gelombang 250–450 nm nilai KU1 dan KU2 sebesar 45 dan 28% (total KU1+KU2 sebesar 73%). Seperti terlihat pada Gambar 3a, untuk spektra *original* hasil AKU tetap menghasilkan proses pemisahan sampel yang cukup sulit untuk kopi Toraja dan kopi Kalosi. Namun demikian, spektra hasil transformasi dengan panjang gelombang 250–450 nm memperlihatkan adanya potensi pemisahan antara sampel kopi Toraja dan Kalosi. Dari hasil ini dapat disimpulkan data spektra hasil transformasi pada panjang gelombang 250–450 nm memiliki informasi memadai untuk identifikasi sekaligus klasifikasi kopi Toraja dan Kalosi. Hasil ini juga menunjukkan betapa pentingnya melakukan analisis spektra (proses transformasi dan pemilihan panjang gelombang tertentu) sebelum data



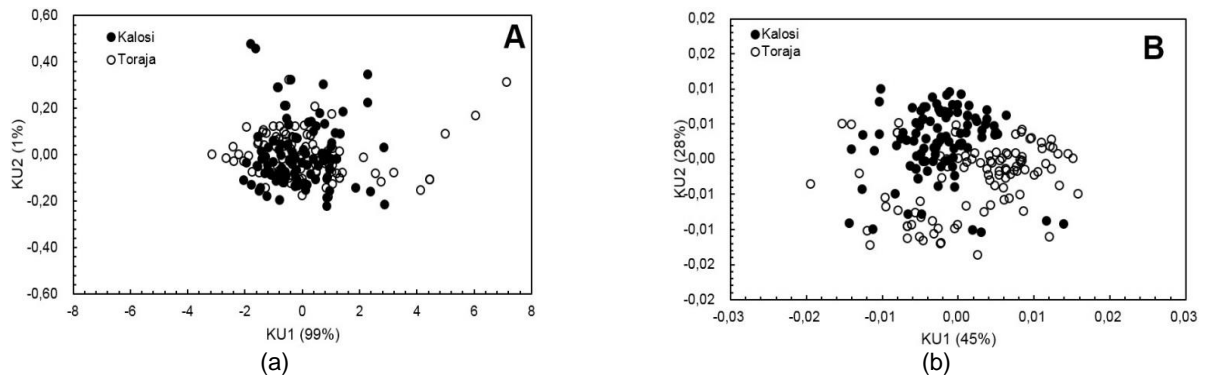
Keterangan: (a) Spektra *original* dan (b) Spektra hasil transformasi (SGS+SNV+MSC+SGD1).

Gambar 1 Spektra rataan kopi Kalosi dan Toraja untuk panjang gelombang 190–1100 nm.



Keterangan: (a) Spektra *original* dan (b) Spektra hasil transformasi.

Gambar 2 Plot hasil analisis komponen utama (AKU) kopi Kalosi dan Toraja untuk panjang gelombang 190–1100 nm.



Keterangan: (a) Spektra *original* dan (b) Spektra hasil transformasi (SGS+SNV+MSC+SGD1).

Gambar 3 Plot hasil analisis komponen utama (AKU) kopi Kalosi dan Toraja untuk panjang gelombang 250–450 nm.

spektra digunakan untuk analisis berikutnya baik untuk keperluan studi kualitatif maupun kuantitatif.

Pengembangan Model PLS-DA untuk Klasifikasi Kopi Kalosi dan Toraja

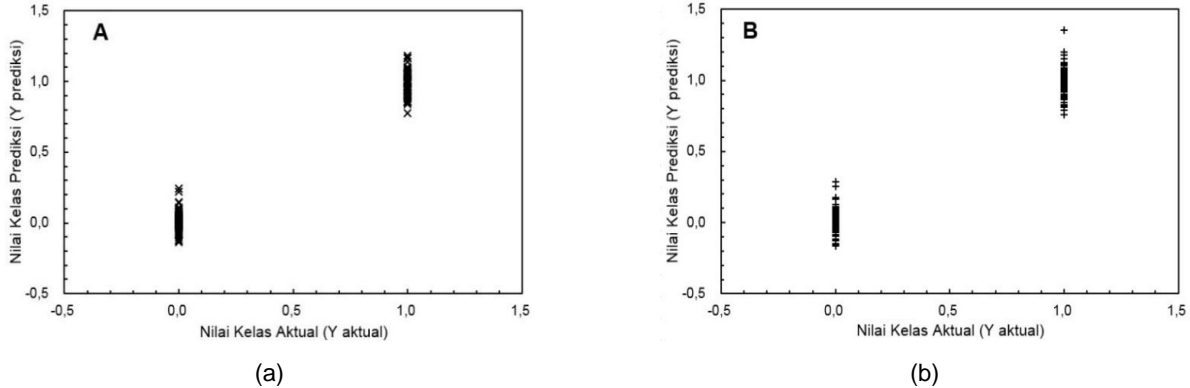
Proses klasifikasi maka model klasifikasi kopi Kalosi dan Toraja dibangun dengan menggunakan metode PLS-DA. Ada 4 tipe model PLS-DA yang dibangun, yaitu model PLS-DA1 yang dibangun dengan menggunakan spektra *original* dan rentang panjang gelombang 190–1100 nm, model PLS-DA2 yang dibangun dengan menggunakan spektra *original* dan rentang panjang gelombang 250–450 nm, model PLS-DA3 yang dibangun dengan menggunakan spektra hasil

transformasi dan rentang panjang gelombang 190–1100 nm serta model PLS-DA4 yang dibangun dengan menggunakan spektra hasil transformasi dan rentang panjang gelombang 250–450 nm. Semua model dibangun dengan sampel sebanyak 168 sampel dengan metode validasi *full cross-validation*. Hasilnya dapat dilihat pada Tabel 2. Faktor PLS merupakan salah satu parameter penting untuk menilai kualitas model di mana faktor PLS menunjukkan tingkat kompleksitas model tersebut. Jumlah faktor PLS yang optimal dan dipilih ditentukan menggunakan nilai RMSECV (*root mean squared error of cross-validation*). Faktor PLS yang terpilih bersesuaian dengan nilai RMSECV yang terkecil. Secara umum faktor PLS tidak boleh terlalu

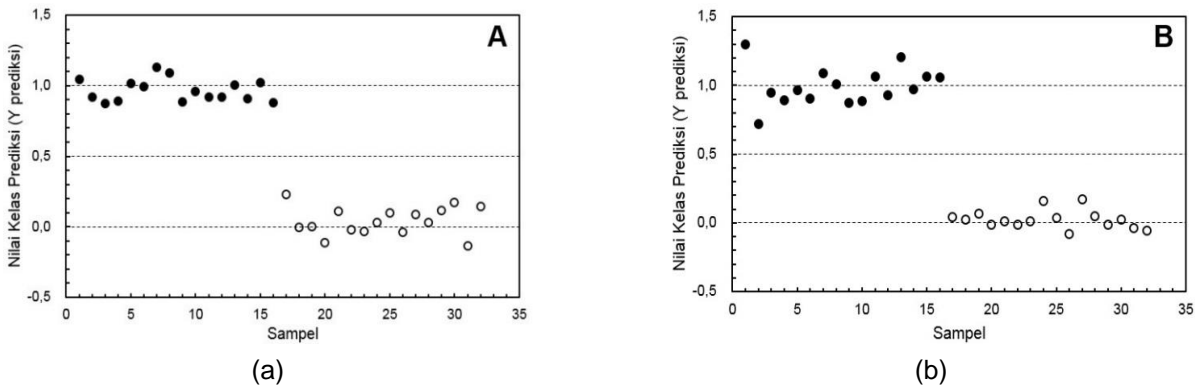
Tabel 2 Hasil pengembangan model PLS-DA untuk klasifikasi kopi Kalosi dan Toraja

Tipe model*	Faktor PLS	R ² _{kal}	R ² _{val}	RMSEC	RMSECV
Model PLS-DA1	5	0,965	0,952	0,093573	0,109898
Model PLS-DA2	7	0,972	0,956	0,084285	0,105345
Model PLS-DA3	9	0,975	0,958	0,078283	0,102929
Model PLS-DA4	7	0,977	0,966	0,076508	0,092235

Keterangan: *PLS-DA1: menggunakan spektra *original* dan rentang panjang gelombang 190–1100 nm.
 PLS-DA2: menggunakan spektra *original* dan rentang panjang gelombang 250–450 nm.
 PLS-DA3: menggunakan spektra hasil transformasi dan rentang panjang gelombang 190–1100 nm.
 PLS-DA4: menggunakan spektra hasil transformasi dan rentang panjang gelombang 250–450 nm.



Gambar 4 Plot model PLS-DA4 (terbaik) untuk klasifikasi kopi Kalosi dan Toraja (a) Kalibrasi (b) Validasi.



Gambar 5 Hasil prediksi untuk klasifikasi kopi Kalosi (●) dan kopi Toraja (○) menggunakan model PLS-DA spektra *original* (a) panjang gelombang 190–1100 nm dan (b) panjang gelombang terpilih 250–450 nm.

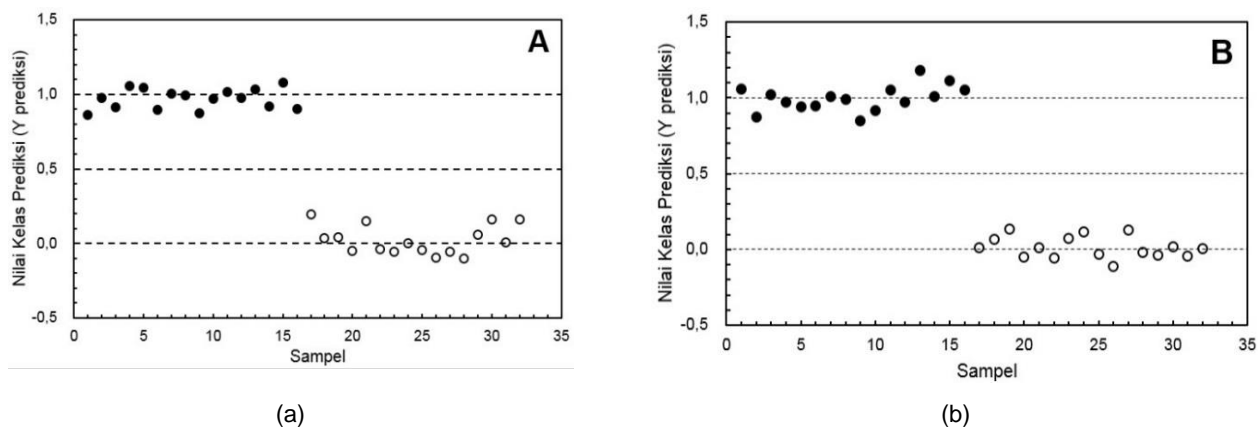
kecil atau terlalu besar untuk menghindari adanya *over fitting* atau *under fitting* dan secara umum dapat dikatakan bahwa jumlah faktor PLS yang terlibat dalam sebuah model PLS sangat bergantung pada kisaran spektra dan *treatment* spektra yang digunakan dan ini sejalan dengan riset sebelumnya (Suhandy *et al.* 2012; Sirisomboon & Posom 2019). Dari Tabel 2 terlihat bahwa model PLS-DA4 dengan menggunakan spektra hasil transformasi dan rentang panjang gelombang 250–450 nm menghasilkan kualitas model klasifikasi PLS-DA terbaik dengan nilai koefisien determinasi tertinggi baik untuk kalibrasi (R²_{kal}=0,977) maupun untuk validasi (R²_{val}= 0,966). Plot model PLS-DA4 untuk kalibrasi dan validasi ditunjukkan pada Gambar 4.

Klasifikasi Sampel Prediksi Menggunakan Model PLS-DA

Model klasifikasi PLS-DA yang telah dibangun kemudian digunakan untuk proses klasifikasi sampel

prediksi (16 sampel kopi Kalosi dan Toraja). Hasil klasifikasi secara visual dapat dilihat pada Gambar 5 untuk spektra *original* dan Gambar 6 untuk spektra hasil transformasi. Nilai *threshold* sebesar 0,5 digunakan sebagai acuan untuk menilai apakah sampel prediksi termasuk ke dalam kelas Kalosi (Y=1) atau Toraja (Y=0). Seperti terlihat pada Gambar 5 dan 6, semua sampel prediksi dapat diklasifikasikan secara benar ke dalam kelas masing-masing untuk spektra *original* dan hasil transformasi dan untuk rentang panjang gelombang penuh 190–1100 nm dan panjang gelombang terpilih 250–450 nm.

Untuk menghitung nilai sensitivitas, spesifisitas, dan akurasi hasil klasifikasi ini maka hasil klasifikasi secara kuantitatif dideskripsikan pada sebuah tabel matriks konfusi (*confusion matrix*) seperti terlihat pada Tabel 3. Dengan menggunakan persamaan (2), (3), (4), dan (5) maka dari Tabel 3 diperoleh nilai sensitivitas, spesifisitas, dan akurasi sebesar 100% untuk semua model PLS-DA. Nilai MCC yang diperoleh sebesar +1 untuk



Gambar 6 Hasil prediksi untuk klasifikasi kopi Kalosi (●) dan kopi Toraja (○) menggunakan model PLS-DA spektra hasil transformasi (a) panjang gelombang 190–1100 nm dan (b) panjang gelombang terpilih 250–450 nm.

Tabel 3 Matriks konfusi untuk hasil klasifikasi sampel prediksi menggunakan model klasifikasi PLS-DA

Tipe model PLS-DA		Sampel kopi Kalosi (aktual)	Sampel kopi Toraja (aktual)
Model PLS-DA1	Sampel kopi Kalosi (prediksi oleh PLS-DA)	16	0
	Sampel kopi Toraja (prediksi oleh PLS-DA)	0	16
Model PLS-DA2	Sampel kopi Kalosi (prediksi oleh PLS-DA)	16	0
	Sampel kopi Toraja (prediksi oleh PLS-DA)	0	16
Model PLS-DA3	Sampel kopi Kalosi (prediksi oleh PLS-DA)	16	0
	Sampel kopi Toraja (prediksi oleh PLS-DA)	0	16
Model PLS-DA4	Sampel kopi Kalosi (prediksi oleh PLS-DA)	16	0
	Sampel kopi Toraja (prediksi oleh PLS-DA)	0	16

semua model PLS-DA. Hasil ini menunjukkan potensi penggunaan teknologi *UV-Visible spectroscopy* dan metode PLS-DA untuk proses diskriminasi kopi bubuk Kalosi dan Toraja. Teknologi ini dapat digunakan sebagai dasar pengembangan sistem uji keaslian atau otentifikasi kopi bubuk asal Sulawesi Selatan (Kalosi dan Toraja).

Hasil penelitian ini juga menunjukkan potensi penggunaan *UV-visible spectroscopy* dan metode PLS-DA untuk uji keaslian (*authentication*) kopi spesialti secara umum di Indonesia (tidak terbatas kopi asal Sulawesi Selatan saja). Kemampuan PLS-DA untuk proses uji keaslian kopi spesialti ini juga sejalan dengan penelitian sebelumnya. Ozdekan *et al.* (2013) menggunakan *proton transfer reaction-mass spectrometry* dan metode PLS-DA untuk membedakan beberapa kopi spesialti dengan persentase keberhasilan klasifikasi di atas 90%. Botelho *et al.* (2017) berhasil mengklasifikasikan kopi Brasil berdasarkan asal geografisnya dengan menggunakan *fluorescence spectroscopy* dan metode PLS-DA. Dengan ketersediaan alat *UV-visible spectrometer* yang cukup banyak di Indonesia maka pengembangan metode uji keaslian kopi spesialti asal Indonesia menggunakan metode *UV-visible spectroscopy* dan PLS-DA sangat mungkin dihilirisasi.

KESIMPULAN

Hasil penelitian ini menunjukkan model diskriminasi yang dibangun menggunakan metode PLS-DA memiliki kualitas baik. Semua model yang dihasilkan memiliki nilai koefisien determinasi yang tinggi. Nilai RMSEC dan RMSECV juga sangat kecil yang menunjukkan semua model PLS-DA yang dibangun tidak mengalami *over fitting*. Hasil prediksi juga menunjukkan semua model PLS-DA yang dibangun mampu mengklasifikasikan sampel prediksi dengan sangat baik dengan nilai sensitivitas, spesifisitas, dan akurasi sebesar 100%. Dari penelitian ini juga dapat disimpulkan bahwa model PLS-DA4, yaitu model PLS-DA yang dibangun dengan menggunakan rentang data spektra 250–450 nm dan tipe spektra hasil transformasi (SGS+MSC+SNV+SGD1) merupakan model PLS-DA terbaik. Dari sisi nilai koefisien determinasi maka model PLS-DA4 merupakan model terbaik dengan nilai koefisien determinasi tertinggi baik untuk kalibrasi ($R^2_{kal}=0,977$) maupun untuk validasi ($R^2_{val}=0,966$). Kemudian dari sisi waktu pengolahan data maka model PLS-DA4 lebih singkat karena menggunakan rentang spektra yang lebih pendek (250–450 nm) dengan melibatkan jumlah peubah total sebanyak 201 panjang gelombang dibandingkan dengan rentang

spektra awal (190–1100 nm) yang melibatkan jumlah peubah total sebanyak 911 panjang gelombang. Kemudian dari sisi keandalan maka model PLS-DA4 merupakan model yang andal atau *robust* karena dibangun menggunakan tipe spektra hasil transformasi. Seperti diketahui bahwa salah satu tujuan transformasi spektra adalah untuk memperkuat informasi penting sekaligus menghilangkan informasi yang tidak penting dari spektra (*noise*). Dengan demikian, penelitian ini juga menunjukkan pentingnya proses transformasi spektra dan pemilihan rentang panjang gelombang yang tepat pada proses pengembangan model PLS-DA untuk klasifikasi kopi bubuk Kalosi dan Toraja.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada Direktorat Riset dan Pengabdian Masyarakat (DRPM) Direktorat Jenderal Penguatan Riset dan Pengembangan Kementerian Riset Teknologi dan Pendidikan Tinggi (Kemenristekdikti) atas bantuan pendanaan penelitian ini melalui hibah Penelitian Strategis Nasional Institusi (PSNI) 2018–2019 (Nomor Kontrak: 393/UN26.21/PN/2018). Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada Jurusan Teknik Pertanian Universitas Lampung atas izin penggunaan alat *UV-visible spectrometer*.

DAFTAR PUSTAKA

- Assis C, Oliveira LS, Sena MM. 2018. Variable selection applied to the development of a robust method for the quantification of coffee blends using mid infrared spectroscopy. *Food Analytical Methods*. 11: 578–588. <https://doi.org/10.1007/s12161-017-1027-7>
- Bertone E, Venturello A, Giraud A, Pellegrino G, Geobaldo F. 2016. Simultaneous determination by NIR spectroscopy of the roasting degree and Arabica/Robusta ratio in roasted and ground coffee. *Food Control*. 59: 683–689. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2015.06.055>
- Botelho BG, Oliveira LS, Franca AS. 2017. Fluorescence spectroscopy as tool for the geographical discrimination of coffees produced in different regions of Minas Gerais State in Brazil. *Food Control*. 77: 25–31. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2017.01.020>
- Cai T, Ting H, Jin-lan Z. 2016. Novel identification strategy for ground coffee adulteration based on UPLC–HRMS oligosaccharide profiling. *Food Chemistry*. 190: 1046–1049. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.06.084>
- Cortésa V, Cubero S, Aleixos N, Blasco J, Talens P. 2017. Sweet and nonsweet taste discrimination of nectarines using visible and near-infrared spectroscopy. *Postharvest Biology and Technology*. 133 :113–120. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2017.07.015>
- Craig AP, Botelho BG, Oliveira LS, Franca AS. 2018. Mid infrared spectroscopy and chemometrics as tools for the classification of roasted coffees by cup quality. *Food Chemistry*. 245: 1052–1061. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.11.066>
- Daniel D, Lopes FS, dos Santos VB, do Lago CL. 2018. Detection of coffee adulteration with soybean and corn by capillary electrophoresis-tandem mass spectrometry. *Food Chemistry*. 243: 305–310. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.09.140>
- de Santana FB, Mazivila SJ, Gontijo LC, Neto WB, Poppi RJ. 2018. Rapid discrimination between authentic and adulterated andiroba oil using FTIR-HATR spectroscopy and random forest. *Food Analytical Methods*. 11: 1927–1935. <https://doi.org/10.1007/s12161-017-1142-5>
- DJHKI (Direktorat Jenderal Hak Kekayaan Intelektual) Kementerian Hukum dan HAM Republik Indonesia. 2018. Indikasi Geografis [internet]. [diunduh tanggal 13 Mei 2018]. Tersedia pada: <http://www.dgip.go.id>.
- Giovenzana V, Beghi R, Tugnolo A, Brancadoro L, Guidetti R. 2018. Comparison of two immersion probes coupled with visible/near infrared spectroscopy to assess the must infection at the grape receiving area. *Computers and Electronics in Agriculture*. 146: 86–92. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2018.01.017>
- Grasel FS, Ferrao MF. 2016. A rapid and non-invasive method for the classification of natural tannin extracts by near infrared spectroscopy and PLS-DA. *Analytical Methods*. 8: 644–649. <https://doi.org/10.1039/C5AY02526E>
- Marquetti I, Link JV, Lemes ALG, Scholz MBS, Valderrama P, Bona E. 2016. Partial least square with discriminant analysis and near infrared spectroscopy for evaluation of geographic and genotypic origin of arabica coffee. *Computers and Electronics in Agriculture*. 121: 313–319. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2015.12.018>
- Ozdestan O, van Ruth SM, Alewijn M, Koot A, Romano A, Cappelin L, Biasioli F. 2013. Differentiation of specialty coffees by proton transfer reaction-mass spectrometry. *Food Research International*. 53: 433–439. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.05.013>
- Pascu E. 2013. The authenticity and traceability of food-consumers protection form. *Annals of Faculty of Economics*. 1(1): 658–662.
- Ribeiro MVM, Boralle N, Pezza HR, Pezza L, Toci AT. 2017. Authenticity of roasted coffee using ¹H NMR spectroscopy. *Journal of Food Composition and*

- Analysis*. 57: 24–30. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2016.12.004>
- Sanchez PM, Pauli ED, Scheel GL, Rakocevic M, Bruns RE, Scarminio IS. 2018. Irrigation and light access effects on coffee arabica l. leaves by FTIR-chemometric analysis. *Journal of The Brazilian Chemical Society*. 29(1): 168–176.
- Sirisomboon P, Posom, J. 2019. Online measurement of activation energy of ground bamboo using near infrared spectroscopy. *Renewable Energy*. 133: 480–488. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.10.051>
- Suhandy D, Yulia M. 2017. Peaberry coffee discrimination using uv-visible spectroscopy combined with SIMCA and PLS-DA. *International Journal of Food Properties*. 20: S331–S339. <https://doi.org/10.1080/10942912.2017.1296861>
- Suhandy D, Yulia M, Ogawa Y, Kondo N. 2017. Discrimination of peaberry coffee using uv-visible spectroscopy and simca method. *Agritech*. 37(4): 471–476. <https://doi.org/10.22146/agritech.12720>
- Suhandy D, Waluyo S, Sugianti C, Yulia M, Iriani R, Handayani FN, Apratiwi N. 2016. The Use of UV-Vis-NIR spectroscopy and chemometrics for identification of adulteration in ground roasted arabica coffees -investigation on the influence of particle size on spectral analysis-. Dalam: *Prosiding Seminar Nasional Tempe 2016*. Bandar Lampung, 28 Mei 2016. Hal:198–204.
- Suhandy D, Yulia M, Ogawa Y, Kondo N. 2012. L-Ascorbic Acid Prediction in Aqueous Solution Based on FTIR-ATR Terahertz spectroscopy. *Engineering in Agriculture, Environment, and Food*. 5: 152–158.
- Wermelinger T, D'Ambrosio L, Klopprogge B, Yeretzian C. 2011. Quantification of the robusta fraction in a coffee blend via raman spectroscopy: proof of principle. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 59: 9074–9079. <https://doi.org/10.1021/jf201918a>
- Yulia M, Suhandy D. 2017. Indonesian palm civet coffee discrimination using UV-visible spectroscopy and several chemometrics methods. *Journal of Physics: Conference Series*. 835: 1–6. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/835/1/012010>