
**Spektroskopi Fourier Transform Infrared dengan Kemometrika: Metode Deteksi Cepat untuk
Autentikasi dan Keamanan Pangan**

***Fourier Transform Infrared Spectroscopy with Chemometrics: A Rapid Detection Method for Food
Authentication and Safety***

Evia Zunita Dwi Pratiwi^{1*}, Ajeng Dyah Kurniawati¹

¹*Program Studi Teknologu Pangan, Universitas Telkom, Kampus Purwokerto, Jl.
DI Panjaitan No.128, Purwokerto 53147, Jawa Tengah, Indonesia*

*Email: eviazdp@telkomuniversity.ac.id

Abstract

High-value products such as honey, oils, meat, and spices are primary targets of adulteration. To meet the need for fast, accurate, and non-destructive analytical methods for detecting adulteration, this study reviews the application of Fourier Transform Infrared spectroscopy combined with chemometric techniques. Fourier Transform Infrared spectroscopy offers advantages such as minimal sample preparation, rapid analysis, and high sensitivity, while chemometrics enables the interpretation of complex spectral data through techniques like Principal Component Analysis, Discriminant Analysis, and Partial Least Squares. The findings indicate that Fourier Transform Infrared, especially when using Attenuated Total Reflectance accessories, is effective in detecting adulteration in various food products such as sesame oil, honey, butter, and meat. Spectral pre-processing methods such as Standard Normal Variate, Multiplicative Scatter Correction, and Savitzky-Golay derivatives are crucial in improving model accuracy. Chemometric analyses such as Principal Component Analysis (unsupervised) and Discriminant Analysis or Partial Least Squares (supervised) have proven effective in classifying and predicting the level of adulteration. Therefore, the combination of Fourier Transform Infrared and chemometrics has strong potential as a reliable tool for food product authentication and quality monitoring throughout the supply chain.

Keyword: *Food Fraud, Multivariate Analysis, Non-destructive*

Abstrak

Pemalsuan pangan merupakan praktik yang mengancam keamanan dan integritas produk makanan serta kepercayaan konsumen. Produk bernilai ekonomi tinggi seperti madu, minyak, daging, dan rempah menjadi target utama praktik adulterasi. Untuk menjawab kebutuhan akan metode analisis yang cepat, akurat, dan non-destruktif dalam mendeteksi pemalsuan, penelitian ini mengulas penggunaan spektroskopi *Fourier Transform Infrared* yang dikombinasikan dengan teknik kemometrik. Spektroskopi *Fourier Transform Infrared* menawarkan keunggulan seperti minimnya persiapan sampel, kecepatan analisis, dan sensitivitas tinggi, sementara kemometrik memungkinkan interpretasi data spektral kompleks melalui teknik seperti *Principal Component Analysis*, *Discriminant Analysis*, dan *Partial Least Squares*. Hasil ulasan menunjukkan bahwa *Fourier Transform Infrared*, terutama dengan aksesoris *Attenuated Total Reflectance*, efektif dalam mendeteksi adulterasi pada berbagai produk pangan seperti minyak wijen, madu, mentega, dan daging. *Pre-processing* spektra seperti *Standard Normal Variate*, *Multiplicative Scatter Correction*, dan derivatif *Savitzky-Golay* sangat penting untuk meningkatkan akurasi model. Analisis kemometrik seperti *Principal Component Analysis (unsupervised)* dan *Discriminant Analysis* atau *Partial Least Squares (supervised)* terbukti mampu mengelompokkan serta memprediksi tingkat adulterasi secara efektif. Dengan demikian, kombinasi *Fourier Transform Infrared* dan kemometrik berpotensi menjadi alat yang andal untuk autentikasi dan pengawasan mutu produk pangan di seluruh rantai pasok.

Kata kunci: *Pemalsuan Pangan, Analisis Multivariat, Non-destruktif*

PENDAHULUAN

Pemalsuan merupakan bentuk penipuan pangan yang menimbulkan resiko bagi keamanan produk – produk pangan. Keamanan pangan menjadi perhatian yang semakin meningkat bagi konsumen, produsen pangan, dan pemerintah (Karimi et al., 2016). Resiko

kesehatan akibat adanya pemalsuan produk yang mungkin akan muncul seperti mual, alergi, dan keracunan sangat mungkin terjadi. Pemalsuan makanan didefinisikan sebagai proses degradasi kualitas makanan secara disengaja, baik dengan menambahkan bahan berkualitas rendah atau

penggunaan bahan ilegal demi keuntungan pribadi. Pemalsuan dilatarbelakangi oleh adanya peningkatan keuntungan dengan mencampurkan komposisi yang lebih murah (Fadzillillah et al., 2013). Pencemaran produk pangan dapat terjadi akibat kontaminasi fisik, kimia, dan biologis sedangkan pemalsuan mutu pangan melibatkan praktik penipuan dengan menggunakan bahan yang tidak sesuai, pelabelan yang menyesatkan, dan manipulasi kandungan gizi. Kedua hal tersebut menyebabkan resiko kesehatan dan mengurangi kepercayaan konsumen terhadap industri pangan (Fadlal et al., 2024). Produk pangan berharga dan bernilai ekonomi tinggi menjadi rawan terjadi pemalsuan seperti madu, daging giling, *butter*, susu dan rempah – rempah bubuk. Pengakuan terhadap keaslian produk disesuaikan dengan dokumen *food codex* berupa standar keamanan kesehatan masyarakat dan penjaminan terhadap pangan bebas pemalsuan. Selain itu manajemen mutu dan penjaminan mutu juga diatur dalam dokumen SNI 19-8402-1996 yang menjabarkan definisi kualitas mutu sebagai totalitas atribut yang memiliki kapasitas baik secara langsung maupun tidak langsung dan memenuhi kebutuhan pelanggan (Fadlal et al., 2024). Kebutuhan akan penjaminan terhadap kondisi pangan yang sesuai standar mutu tersebut menjadi latar belakang pengembangan metode analisis yang sesuai untuk mendeteksi pemalsuan, alduterasi, dan penipuan produk pangan. Kebutuhan akan metode deteksi keaslian pangan yang andal, cepat, dan akurat menjadi sangat penting. Spektroskopi *Fourier Transform Infrared* (FTIR) adalah teknologi yang dapat digunakan sebagai metode analitik di bidang pangan karena sedikit persiapan sampel yang diperlukan, tidak menggunakan pelarut berbahaya, dan dapat melakukan analisis secara cepat (Rodriguez-Saona & Allendorf, 2011). Spektroskopi FTIR dapat diunggulkan karena merupakan analisis non-destruktif, memiliki tingkat presisi tinggi sehingga tidak memerlukan kalibrasi eksternal, sensitif, dan dapat memindai data setiap detik (Dutta, 2017). Perkembangan FTIR sendiri menjadi pembaruan bagi teknologi Spektroskopi *Infrared*. Hal tersebut sangat mungkin melakukan analisis secara efisien karena menghemat waktu dan dapat menggunakan sampel dalam jumlah besar. Spektroskopi FTIR menggunakan prinsip dasar teknik inframerah (IR), dengan menghasilkan spektra penyerapan radiasi IR oleh molekul yang mengalami gerakan mekanis berupa vibrasi dan rotasi akibat adanya penyerapan energi. Gerakan mekanis tersebut berbeda pada setiap bilangan gelombang sesuai dengan mode ikatan kimia molekul dalam sampel. Detektor mengukur jumlah energi pada setiap frekuensi yang telah melewati sampel. Hasil pengukuran tersebut

disebut sebagai spektra yaitu plot antara intensitas terhadap frekuensi. Frekuensi yang diukur secara individu tidak dapat langsung diidentifikasi atau diinterpretasikan, sehingga dapat berpotensi mengakibatkan pengukuran yang lambat. FTIR menggunakan interferogram yang memungkinkan pengukuran semua frekuensi secara bersamaan, sehingga membuat pengukuran menjadi lebih cepat (Dutta, 2017). Oleh sebab itu, spektroskopi FTIR dapat mengklasifikasikan material yang termasuk ke dalam keluarga gugus karbon dengan sangat baik berdasarkan interaksi IR dengan material yang diuji (Tucureanu et al., 2016).

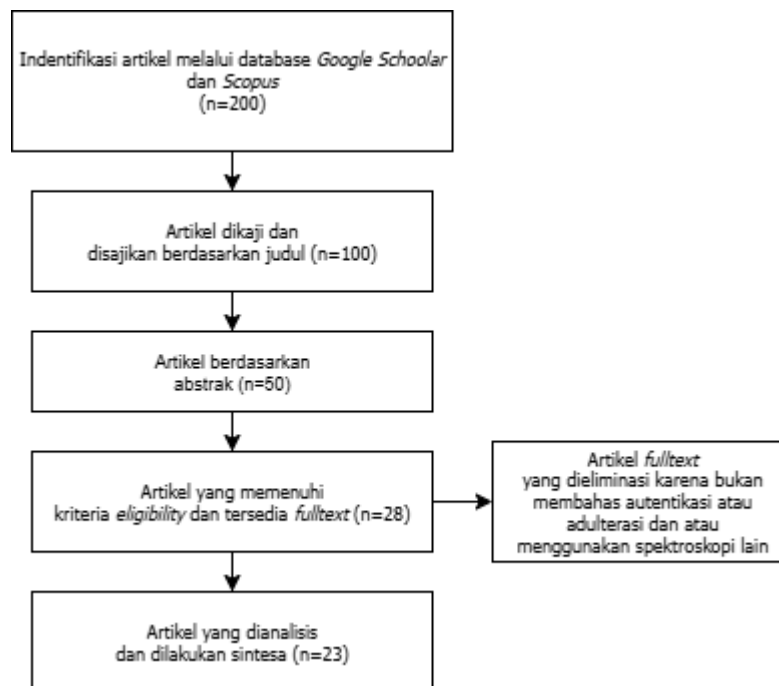
Setiap sampel memiliki komposisi unik dan atom yang berbeda, tidak ada dua senyawa yang berbeda menghasilkan spektra yang sama persis. Spektrum yang menghasilkan puncak merupakan indikasi langsung dari jumlah konsentrasi molekul yang ada (Dutta, 2017). Spektra memiliki informasi data kimia dengan kompleksitas tinggi. Dalam melakukan analisis spektra dibutuhkan teknik kemometrik. Teknik tersebut merupakan kombinasi yang menerapkan metode statistik dan matematika untuk tujuan mengekstrak informasi penting dari kumpulan data spektra yang kompleks dan memiliki kolinieritas tinggi. Aplikasi penggunaan metode kemometrik meliputi pengenalan pola, resolusi, dan kalibrasi multivariat (Mendlein et al., 2018). *Pre-processing*, analisis multivariat, klusterisasi atau klasifikasi, kalibrasi, dan validasi merupakan bagian dari metode kemometrik. Pengenalan pola biasanya digunakan untuk tujuan klasifikasi. Sedangkan kalibrasi berkaitan dengan menghubungkan, mengkorelasikan, atau memodelkan respon terukur berdasarkan jumlah, konsentrasi, sifat fisik atau kimia lainnya dari sekumpulan analit. Secara sederhananya kalibrasi tersebut mengacu pada proses menghubungkan konsentrasi analit dari sifat fisik atau kimia dengan respons terukur, contohnya yaitu spektra *near-infrared* dari sampel yang memiliki informasi multikomponen dari sampel itu sendiri. Sedangkan metode resolusi berfokus pada memulihkan spektrum asli dari spektrum yang tumpang tindih atau spektrum dengan informasi yang tidak dibutuhkan. Metode tersebut biasanya disebut sebagai *multivariate curve resolution* (Mendlein et al., 2018).

Kemampuan teknik spektroskopi FTIR dalam mengidentifikasi interaksi antara energi elektromagnetik dengan molekul kimia dalam sampel pangan secara baik dapat meningkatkan peluang penerapan teknologi non-destruktif yang cepat guna meningkatkan pengawasan terhadap produk pangan sehingga mengurangi kerugian akibat adanya pemalsuan pangan. Meskipun banyak studi telah melakukan penelitian terkait pemalsuan

menggunakan berbagai teknik, namun fokus pada deteksi pemalsuan yang terpadu, tidak memerlukan persiapan sampel yang rumit, dan dapat digunakan pada berbagai tahap rantai pasok sangat perlu dikembangkan. Ulasan secara komprehensif terhadap penggunaan metode kemometrik pada spektroskopi FTIR untuk mendeteksi alduterasi, kualitas, dan pengujian terhadap keaslian produk pangan sangat diperlukan untuk dapat menggunakan peluang ini serta mengkaji tren di masa depan dari Spektroskopi FTIR.

Penelitian kepustakaan ini menggunakan kajian literatur dengan melakukan pendekatan systematic review untuk melakukan proses identifikasi serta intepretasi terhadap hasil penelitian yang memiliki relevansi dengan topik. Literatur yang digunakan berupa jurnal ilmiah dengan menggunakan kata kunci pencarian dalam bahasa inggris “*Spectroscopy FTIR, Food Authentication, Alduteration, dan Chemometrics*” dari tahun 2015 – 2025. Dari hasil pencarian dan penelusuran seperti pada Gambar 1 alur penelitian diperoleh 23 artikel secara mendalam dianalisis karena memenuhi kriteria inklusi yang sesuai dengan topik pembahasan.

METODE



Gambar 1 Diagram alir penelitian

HASIL DAN PEMBAHASAN

Akuisisi Data Spektra

Pengukuran data spektra menggunakan Spektroskopi FTIR dengan beberapa perlengkapan asesori berupa sel transmitan, beam splitter potassium bromida (KBr), kuvet, kurator infrared, dan sebagainya yang tersambung dengan *software* (Jamwal et al., 2021). Mode transmitansi biasanya digunakan, teknik sampling *Attenuated Total Reflectance* (ATR) atau *Horizontal Attenuated Total Reflectance* (HATR). Kristal ATR dipasang secara vertikal, sedangkan kristal HATR menggunakan orientasi horizontal. Kristal ATR dan HATR dapat berupa Zinc Selenit (ZnSe), diamond, atau Germanium (Ge) hanya berbeda pada bentuk dan ukurannya. ATR menjadi aksesoris Spektroskopi FTIR dengan performansi baik dalam mendeteksi pemalsuan *Virgin Coconut Oil* (VCO), deteksi cepat keaslian madu hutan (Prayitno et al., 2021) dan madu liar (Riswahyuli et al., 2020). Berdasarkan penelitian dalam Ozulku et al., (2017), sampel cair seperti minyak dan lemak dapat dilakukan dengan meneteskan sampel pada permukaan kristal ATR. Sampel padat dapat menggunakan cakram KBr dengan melakukan penghalusan terhadap sampel padatan. Spektrum elektromagnetik yang digunakan secara umum untuk analisis keaslian dan alduterasi produk pangan adalah pada wilayah *Mid-infrared* ($4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$). Dalam Ozulku et al., (2017), untuk mendeteksi pemalsuan minyak digunakan $3800 - 600 \text{ cm}^{-1}$ dengan resolusi 4 cm^{-1} pada bilangan gelombang tersebut cocok untuk melakukan analisis terhadap kompleksitas campuran minyak karena terdapat informasi terkait gugus fungsi OH, CH, C=O dan C-O. Sedangkan pada Arslan and Çağlar (2019), deteksi alduterasi minyak gandum $4000 - 650 \text{ cm}^{-1}$, wilayah tersebut relevan dengan gugus fungsi ester, asam lemak, dan trigliserida. Pada deteksi alduterasi madu, menggunakan bilangan gelombang

4000 – 650 cm^{-1} , kemudian melakukan analisis mendalam pada wilayah sidik jari 1200 – 800 cm^{-1} , wilayah tersebut merupakan wilayah sidik jari yang dapat melihat jelas struktur molekul madu asli dan teradulterasi (Prayitno et al., 2021). Wilayah *mid-infrared* dibagi menjadi dua wilayah yaitu kelompok gugus fungsional (4000 – 1500 cm^{-1}) dan wilayah sidik jari (1500 – 400 cm^{-1}). *Mid-infrared* memberikan informasi mengenai getaran fundamental dari hampir semua gugus fungsi kimia tertentu. Gugus fungsi tersebut meliputi C-H, O-H, N-H, atau C = O. Wilayah spektra untuk gugus fungsi 3014 – 2857 cm^{-1} merupakan wilayah regangan hidrogen, sedangkan regangan ikatan rangkap berada pada 1743 – 1662 cm^{-1} (Mousa et al., 2021). Pita serapan pada 1459 cm^{-1} berupa getaran regangan C=C, sedangkan 1151 – 1097 cm^{-1} diidentifikasi sebagai getaran regangan dari C-O (Irnawati et al., 2023).

Replikasi dalam pengambilan spektra digunakan untuk meningkatkan akurasi pengukuran. Selain itu pengaturan terhadap jumlah *scanning* saat melakukan pengukuran spektroskopi FTIR sangat penting untuk menghindari data *noise*. Jumlah *scanning* merupakan perbandingan antara *signal – to – noise*. Sedangkan *resolution* membantu untuk membedakan dua puncak yang berdekatan dalam dapat menggunakan 4 cm^{-1} , 2 cm^{-1} , atau 1 cm^{-1} . Penggunaan 16 kali *scanning* dengan resolusi 4 cm^{-1} pada setiap spektrum telah berhasil mengelompokkan dalam deteksi adulterasi shafron standar dari penggunaan pewarna makanan (Karimi et al., 2016), 32 kali *scanning* dan resolusi 4 cm^{-1} dalam deteksi keaslian madu hutan (Prayitno et al., 2021), 64 kali *scanning* dengan resolusi 2 cm^{-1} untuk membangun model deteksi madu berdasarkan asal usul botani pada wilayah *middle-infrared* 4000 – 400 cm^{-1} (Tsagkaris et al., 2023), dan 16 kali *scanning* pada resolusi 4 cm^{-1} pada deteksi keaslian minyak wijen serta minyak wijen yang teradulterasi dengan minyak kacang hazel, canola, dan bunga matahari (Ozulku et al., 2017). Pengaturan terhadap metode akuisisi spektra sangat berguna untuk mendapatkan informasi mengenai sampel serta analisis lanjut yaitu multivariat atau kemometrik. Pada Tabel 1 merupakan penelitian terdahulu yang menggunakan instrumen spektroskopi FTIR dalam analisis keaslian produk dengan berbagai metode akuisisi data spektra. Berbagai sampel mulai dari padatan hingga cairan dapat dilakukan menggunakan spektroskopi FTIR.

Tabel 1 Metode Akuisisi Data Spektra

Tujuan	Interaksi Optik	Mode Akuisi Spektra	Bilangan gelombang analisis	Penelitian
Klasifikasi prediktif keaslian daging (sapi dan kambing) terhadap substitusi daging babi	Absorbansi	32 <i>scans</i> , 4 cm^{-1}	4000–525 cm^{-1}	(Dimitriou et al., 2025)
Alduterasi gula aren dengan gula kelapa	Reflektansi	0.48 cm^{-1}	4000–650 cm^{-1}	(Masithoh et al., 2022)
Deteksi adulterasi madu dengan bahan aduleran permen leleh, molase, gula pasir, pisang matang, dan shebeb	Transmitansi	4 <i>scans</i> , 4 cm^{-1}	1800–650 cm^{-1}	(Damto et al., 2023)
Metode autentikasi minyak babi dalam produk minyak ikan tuna	-	32 <i>scans</i> , 8 cm^{-1}	4000-600 cm^{-1}	(Irnawati et al., 2023)
Autentikasi madu hutan Kalimantan Timur serta tingkat adulterasi sukrosa dalam madu	Absorbansi	32 <i>scans</i> , 4 cm^{-1}	5000-650 cm^{-1}	(Prayitno et al., 2021)
Deteksi keaslian madu liar di Indonesia	Absorbansi	42 <i>scans</i> , 4 cm^{-1}	4000–650 cm^{-1}	(Riswahyuli et al., 2020)
Deteksi dan kuantifikasi adulterasi pewarna makanan pada safron	Transmitansi	16 <i>scans</i> , 4 cm^{-1}	4000–400 cm^{-1}	(Karimi et al., 2016)

Deteksi cepat minyak wijen perasan dingin dengan alduteran jenis minyak yang lain	Absorbansi	16 <i>scans</i> , 4 cm ⁻¹	3800–600 cm ⁻¹	(Ozulku et al., 2017)
---	------------	--------------------------------------	---------------------------	-----------------------

Pre-Processing Spektra

Tahap ini merupakan langkah awal sebelum dilakukan analisis terhadap data spektral, serta merupakan bagian penting dalam analisis spektra untuk tujuan mengurangi gangguan yang tidak diinginkan dalam data spektral. Data spektra hasil akusisi mungkin saja mengandung penyimpangan informasi yang berasal dari derau (*noise*), pergeseran garis dasar, faktor eksternal atau lingkungan lainnya, serta variasi dalam pengaturan optik (Zhao et al., 2025). Penyimpangan tersebut berpotensi untuk menurunkan hubungan linier antara data spektral dengan analit dari sampel yang dianalisis. Spektra hasil pembacaan ATR masih dalam bentuk informasi yang mentah, sehingga berisi informasi variabel yang memiliki keterkaitan tinggi, serta informasi yang kurang relevan (Abuchi & Akinbode, 2020). *Pre-processing* menghasilkan data yang layak untuk analisis lanjutan yaitu eksplorasi, kalibrasi, dan pengembangan model.

Secara umum metode *pre-processing* spektra yaitu *smoothing*, *first derivative*, *second derivative*, *normalization* (NOR), *multiplicative scatter correction* (MSC), dan *standard normal variable* (SNV). SNV, MSC, dan NOR merupakan metode untuk tujuan koreksi hamburan, serta mengurangi variabilitas antar sampel (Tsagkaris et al., 2023). Sedangkan efek tambahan dari spektra dan multiplikasi data dapat dihilangkan dengan *Norris-Williams* dan *Savitzky-Golay* (*SG*) *derivations* karena keduanya menggunakan penghalusan spektra untuk mengurangi rasio sinyal dengan *noise* (Tsagkaris et al., 2023). Spektra data hasil *pre-processing* kemudian dapat digunakan untuk menghasilkan model kuantitatif dan kualitatif. Namun hasil *pre-processing* spektra belum tentu meningkatkan model tersebut, hal tersebut bergantung dari kesesuaian metode *pre-processing* yang digunakan (Li et al., 2020). Misalnya, deteksi tepung yang mengandung gluten dan non-gluten menggunakan pendekatan spektroskopi FTIR dan *machine learning* memerlukan perlakuan *pre-processing* dengan menerapkan *Savitzky-Golay* turunan pertama (SG1) (polynomial orde ke-2, jendela 7 titik), *Baseline filter* (BFaw) (Whittaker otomatis, $\lambda = 100$, $P = 0.001$), *Standard normal variate* (SNV), *Mean-centering* (MC), *Multiplicative scatter correction* (MSC), dan *Autoscaling* pada spektra masing – masing sampel untuk mengurangi dan menghilangkan sinyal – sinyal yang tidak diinginkan. Hasilnya kombinasi MC dan SG1 meningkatkan kinerja model kalibrasi multivariat yang akan digunakan untuk eksplorasi dan klasifikasi pada sampel tepung rye dan jelai, namun untuk sampel tepung gandum adalah pada metode *pre-processing* BFaw (Abuchi & Akinbode, 2020). Kombinasi metode *pre-processing* dapat dilakukan, namun *pre-processing* yang berlebihan dapat menyebabkan hilangnya informasi penting dalam data spektra. Hal tersebut beresiko menurunkan kualitas data hasil yang akan dianalisis. Semua proses *pre-processing* tersebut dapat dilakukan menggunakan aplikasi Unscrambler X (Camo), Matlab, dan Phytion.

Analisis Kemometrik

Hasil pengukuran spektroskopi FTIR menghasilkan data yang besar serta mengandung kolinieritas yang tinggi, untuk mengurangi dimensi data yang besar pada data pengukuran yang sangat kompleks dibutuhkan metode kemometrik sehingga diperoleh implikasi yang komprehensif. Analisis ini mengandalkan teknik analisis multivariat dalam interpretasi data kimia secara efektif. Kemometrik merupakan kombinasi metode matematika dan metode statistika untuk menyaring (ekstraksi), representasi, serta menampilkan informasi data kimia secara maksimal menggunakan data hasil analisis (Domingo et al., 2014; Jamwal et al., 2021). Penggunaan rata-rata, varians, dan kovarians sebagai deskriptor statistik sederhana pada data dengan variable yang besar akan mengalami penurunan efektivitas seiring dengan ukuran dan kompleksitas data yang bertambah (Perera et al., 2021).

Tabel 2 Metode Kemometrik dalam Deteksi Adulterasi dan Autentikasi Pangan

Aplikasi	Teknik Kemometrika		Hasil	Penelitian
<i>Unscrambler X</i> (CAMO Software AS, Oslo, Norway)	<i>Partial least-squares regression</i> (PLSR)		Mendeteksi tingkat pemalsuan gula <i>Arenga pinnata</i> dengan gula kelapa dengan rentang 0 – 100%. Model PLSR prediksi menggunakan FT-IR menghasilkan R ² 0,95 – 0.96	(Masithoh et al., 2022)

<i>TQ Analyst 9.0 (Thermo Nicolet, Madison, WI, USA)</i>	<i>Principle Component Analysis (PCA), Discriminant Analysis (DA), Principal Component Regression (PCR), dan Partial Least Square (PLS)</i>	PCA digunakan dalam deteksi dan diferensiasi sampel (pengurangan jumlah variabel). Dilanjutkan dengan DA digunakan untuk mengelompokkan madu hutan Kalimantan asli dan teralduterasi sukrosa berdasarkan perhitungan jarak Mahalanobis. Regresi yaitu PCR dan PLSR digunakan untuk tingkat alduterasi sukrosa terhadap madu hutan asli. (Prayitno et al., 2021)
<i>SIMCA 14.0 software (Umetrics, Sweden) dan MetaboAnalyst 5.0.</i>	<i>Principle Component Analysis (PCA), Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA) Orthogonal Partial Least Squares Discriminant Analysis (OPLS)</i>	Analisis pengenalan pola yang digunakan PCA mampu membedakan antara minyak ikan tuna dan minyak babi R^2 0,998 dan Q^2 0.990. PLS-DA hanya dapat membedakan sampel secara parsial. Plot skor PLS-DA Menunjukkan hasil tumpang tindih (overlapping) untuk mendeteksi keberadaan minyak babi dengan konsentrasi rendah dalam minyak ikan tuna. Sedangkan analisis lanjutan OPLS-DA (R^2_x 0.998 dan R^2_y 0.735) menunjukkan model akurasi tinggi mampu membedakan dan mengklasifikasikan sampel minyak ikan tuna yang dipalsukan dengan minyak babi meski dengan konsentrasi rendah. (Irnawati et al., 2023)
<i>OPUS Software (Version 7.2, Bruker, Germany)</i>	<i>Principle Component Analysis (PCA) dan Partial Least Square (PLS)</i>	Analisis klusterisasi menggunakan PCA dapat membedakan dan mengklasifikasi antara minyak wijen murni dengan adulterasi minyak lain. Metode PLS mampu menentukan hubungan antara konsentrasi pemalsu aktual dengan konsentrasi yang diprediksi FTIR dengan nilai R^2 prediksi 0,9526 – 0,9633 (Ozulku et al., 2017)

Analisis kemometrika terdiri atas metode klasifikasi dan regresi. Metode klasifikasi mencakup metode analisis data eksploratori yaitu tanpa pengawasan dan metode dengan pengawasan. *Principal komponen analysis* (PCA) merupakan salah satu analisis klasifikasi dengan pengenalan pola tak terawasi (*unsupervised pattern recognition*). PCA dapat mentransformasi data set dengan variable besar menjadi sejumlah komponen utama (*principal component*) atau menjadi komponen data set yang lebih kecil, serta mengenali pola atau struktur data tersembunyi tanpa menggunakan label kelas dalam data. Metode ini menggambarkan kumpulan data besar menggunakan sistem matriks kovarians (Perera et al., 2021). PCA cocok untuk teknik spektroskopi atau teknik analitis lainnya yang memiliki kumpulan data kompleks (Arslan & Çağlar, 2019). Dalam penelitian Prayitno et al., (2021), PCA digunakan untuk membedakan madu asli dan madu sukrosa dengan hasil komponen utama yaitu PC1, PC2, dan PC3 sebesar 85,31; 13,75; dan 0,51% sehingga dapat terviasualisasi perbedaan madu murni dengan madu sukrosa. Pada Tabel 2 metode klasifikasi PCA banyak digunakan dan berhasil mengelompokkan data spektra FTIR dalam deteksi pencampuran produk pangan dengan substitusi bahan lain terhadap produk pangan asli. Sedangkan metode analisis lain untuk klasifikasi adalah *Discriminant Analysis* (DA) yang merupakan analisis klasifikasi dengan pengenalan pola terawasi (*supervised pattern recognition*) (Fadzillillah et al., 2013). DA bertujuan untuk membangun model matematis yang dapat mengidentifikasi kelas yang tepat untuk setiap sampel, berdasarkan data spektrum FTIR yang diperoleh. Prediksi keaslian daging menggunakan model PLS-DA dengan akurasi klasifikasi 92,86% menggunakan wilayah spektra FTIR 600 –

4000 cm⁻¹ pendekatan instrumental tersebut menghasilkan verifikasi yang kuat terhadap keaslian daging, seperti daging sapi dan kambing, terhadap substitusi daging babi (Dimitriou et al., 2025). Hasil tersebut membuktikan bahwa dengan data set yang besar dan multivariat seperti spektra, kombinasi PLS dan DA dapat menangani kompleksitas data yang ada.

Partial least square regression (PLSR) merupakan analisis kuantitatif yang digunakan untuk aplikasi prediktif. Analisis ini digunakan untuk membuat model regresi linier antara variabel yang akan diprediksi dan variabel yang diamati. PLSR memaksimalkan kovariansi dua matriks data dan membangun model dimana skor dari satu matriks dapat digunakan untuk memprediksi skor matriks lainnya (Perera et al., 2021). Misalnya salah satu matriks multivariat adalah konsentrasi sampel yang diuji, sedangkan matriks lainnya adalah intensitas penyerapan (absorbansi), transmitansi, atau reflektansi pada rentang bilangan gelombang tertentu pada Spektroskopi FTIR. Nilai statistik digunakan untuk mengevaluasi hasil berdasarkan nilai *R-square*, *Root Mean Square Error of Calibration* (RMSEC), *Root Mean Square Error of Cross Validation* (RMSECV), kemiringan (*slope*), dan *offset*. Hasil PLSR menunjukkan linieritas tinggi yaitu $R^2 > 0,999$ antara nilai aktual dan prediksi, PLSR berhasil mengkuantifikasikan kadar di bawah 0,56% dan 0,99% dalam campuran yang tidak diketahui antara kandungan minyak bunga matahari dan minyak kedelai sebagai bahan pemalsuan pada produk *wheat germ oil* (Arslan & Çağlar, 2019).

KESIMPULAN

Penelaahan terhadap 23 studi menunjukkan bahwa kombinasi antara spektroskopi FTIR dan analisis multivariat mampu menjadi metode non-destruktif yang cepat, sensitif, dan akurat untuk mendeteksi praktik adulterasi pada berbagai produk pangan bernilai tinggi. Berbagai studi yang direview menunjukkan bahwa pendekatan FTIR–kemometrik telah berhasil diimplementasikan dalam deteksi pemalsuan berbagai produk pangan, mulai dari madu, mentega, minyak, hingga daging. Studi ini tidak hanya menganalisis performa teknis instrumen FTIR, tetapi juga memberikan panduan praktis untuk pengembangan penerapan di lapangan dalam pengawasan mutu dan keamanan rantai pasok pangan.

SARAN

Berdasarkan hasil pendekatan sistematis ini dapat memberikan inisiasi pengembangan metode FTIR portable kedepan sehingga dapat digunakan untuk penjaminan kualitas maupun keaslian produk pangan selama rantai pasok dan pengembangan model multivariat universal terhadap berbagai adulterasi sehingga dapat digunakan sebagai alat pemantauan mutu yang adaptif dalam sistem jaminan mutu nasional dan internasional.

DAFTAR PUSTAKA

- Abuchi, G., & Akinbode, A. (2020). *Fourier-Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy and Machine Learning Approaches to Detect and Quantify Cross- Contact of Non-Gluten and Gluten-Rich Flours Written for presentation at the 2020 ASABE Annual International Meeting Sponsored by ASABE*. 1–9.
- Arslan, F. N., & Çağlar, F. (2019). Attenuated Total Reflectance–Fourier Transform Infrared (ATR–FTIR) Spectroscopy Combined with Chemometrics for Rapid Determination of Cold-Pressed Wheat Germ Oil Adulteration. *Food Analytical Methods*, 12(2), 355–370. <https://doi.org/10.1007/s12161-018-1368-x>
- Damto, T., Zewdu, A., & Birhanu, T. (2023). Application of Fourier transform infrared (FT-IR) spectroscopy and multivariate analysis for detection of adulteration in honey markets in Ethiopia. *Current Research in Food Science*, 7(August), 100565. <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2023.100565>
- Dimitriou, L., Koureas, M., Kapageridou, S., Pappas, C. S., Manouras, A., & Malissiova, E. (2025). *Meat authenticity predictive classification by implementing Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) combined with chemometrics*. *Journal of Food Composition and Analysis*. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jfca.2025.107862>
- Domingo, E., Tirelli, A. A., Nunes, C. A., Guerreiro, M. C., & Pinto, S. M. (2014). Melamine detection in milk using vibrational spectroscopy and chemometrics analysis: A review. *Food Research International*, 60, 131–139. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.11.006>
- Dutta, A. (2017). Fourier Transform Infrared Spectroscopy. In *Spectroscopic Methods for Nanomaterials Characterization* (Vol. 2). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-46140-5.00004-2>
- Fadlal, M., Priyadi, I., Nurlaela, R. S., & Imami, I. (2024). Pengawasan Mutu Pangan : Pencemaran dan Pemalsuan Yang Sering Terjadi Pada Produk Pangan. *Jurnal Karimah Tauhid*, 3, 7147–7156.
- Fadzillillah, N. A., Rohman, A., Ismail, A., Mustafa, S., & Khatib, A. (2013). Application of FTIR-ATR

- spectroscopy coupled with multivariate analysis for rapid estimation of butter adulteration. *Journal of Oleo Science*, 62(8), 555–562. <https://doi.org/10.5650/jos.62.555>
- Irnowati, I., Windarsih, A., Indrianingsih, A. W., Apriyana, W., Ratnawati, Y. A., Nadia, L. O. M. H., & Rohman, A. (2023). Rapid detection of tuna fish oil adulteration using FTIR-ATR spectroscopy and chemometrics for halal authentication. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 13(4), 231–239. <https://doi.org/10.7324/JAPS.2023.120270>
- Jamwal, R., Amit, Kumari, S., Sharma, S., Kelly, S., Cannavan, A., & Singh, D. K. (2021). Recent trends in the use of FTIR spectroscopy integrated with chemometrics for the detection of edible oil adulteration. *Vibrational Spectroscopy*, 113(January), 103222. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2021.103222>
- Karimi, S., Feizy, J., Mehrjo, F., & Farrokhnia, M. (2016). Detection and quantification of food colorant adulteration in saffron sample using chemometric analysis of FT-IR spectra. *RSC Advances*, 6(27), 23085–23093. <https://doi.org/10.1039/c5ra25983e>
- Li, S., Xing, B., Lin, D., Yi, H., & Shao, Q. (2020). Rapid detection of saffron (*Crocus sativus* L.) Adulterated with lotus stamens and corn stigmas by near-infrared spectroscopy and chemometrics. *Industrial Crops and Products*, 152(December 2019), 112539. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2020.112539>
- Masithoh, R. E., Roosmayanti, F., Rismiwandira, K., & Pahlawan, M. F. R. (2022). Detection of Palm Sugar Adulteration by Fourier Transform Near-Infrared (FT-NIR) and Fourier Transform Infrared (FT-IR) Spectroscopy. *Sugar Tech*, 24(3), 920–929. <https://doi.org/10.1007/s12355-021-01058-3>
- Mendlein, A., Szkudlarek, C., & Goodpaster, J. V. (2018). Chemometrics. *Forensic Toxicology*, 82(12), 321–327. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800746-4.00040-X>
- Mousa, M. A. A., Wang, Y., Antora, S. A., Al-qurashi, A. D., Ibrahim, O. H. M., He, H., Liu, S., & Kamruzzaman, M. (2021). An overview of recent advances and applications of FT-IR spectroscopy for quality , authenticity , and adulteration detection in edible oils. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 0(0), 1–19. <https://doi.org/10.1080/10408398.2021.1922872>
- Ozulku, G., Yildirim, R. M., Toker, O. S., Karasu, S., & Durak, M. Z. (2017). Rapid detection of adulteration of cold pressed sesame oil adulterated with hazelnut, canola, and sunflower oils using ATR-FTIR spectroscopy combined with chemometric. *Food Control*, 82, 212–216. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2017.06.034>
- Perera, K. D. C., Weragoda, G. K., Haputhanthri, R., & Rodrigo, S. K. (2021). *Study of concentration dependent curcumin interaction with serum biomolecules using ATR-FTIR spectroscopy combined with Principal Component Analysis (PCA) and Partial Least Square Regression (PLS-R)* (p. 116). <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2021.103288>.
- Prayitno, Y. A., Emmawati, A., Prabowo, S., Candra, K. P., & Rahmadi, A. (2021). Autentikasi Cepat Madu Hutan Kalimantan Timur Dengan Atr-Ftir Spektroskopi Kombinasi Analisis Kemometrika. *Jurnal Teknologi Dan Industri Pangan*, 32(1), 181–189. <https://doi.org/10.6066/jtip.2021.32.2.181>
- Riswahyuli, Y., Rohman, A., Setyabudi, F. M. C. S., & Raharjo, S. (2020). Indonesian wild honey authenticity analysis using attenuated total reflectance-fourier transform infrared (ATR-FTIR) spectroscopy combined with multivariate statistical techniques. *Heliyon*, 6(4), e03662. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e03662>
- Rodriguez-Saona, L. E., & Allendorf, M. E. (2011). Use of FTIR for rapid authentication and detection of adulteration of food. *Annual Review of Food Science and Technology*, 2, 467–483. <https://doi.org/10.1146/annurev-food-022510-133750>
- Tsagkaris, A. S., Bechynska, K., Ntakoulas, D. D., Pasias, I. N., Weller, P., Proestos, C., & Hajslova, J. (2023). *Investigating the impact of spectral data pre-processing to assess honey botanical origin through Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR)* (p. 119). <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2023.105276>
- Țucureanu, V., Matei, A., & Avram, A. M. (2016). FTIR Spectroscopy for Carbon Family Study. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 46(6), 502–520. <https://doi.org/10.1080/10408347.2016.1157013>
- Zhao, Z., Li, L., Li, W., Tian, Y., Zhang, Y., Zhang, Y., Ibba, M. I., He, Z., Hao, Y., & Tian, W. (2025). Rapid evaluation of Farinograph and Extensograph characteristics in bread wheat using near-infrared spectroscopy and chemometrics. *Food Research International*, 218, 116915. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2025.116915>