

INTISARI

DETEKSI DAN KLASIFIKASI PEWARNA SINTETIS BERBASIS *MULTI-CHANNEL SPECTROSCOPY* MENGGUNAKAN OPTIMASI ALGORITMA *MACHINE LEARNING*

oleh:

ANDRE AGASI

23/513374/PPA/06522

Deteksi dan klasifikasi pewarna sintetis secara akurat dan cepat menjadi tantangan penting dalam pengawasan keamanan pangan, khususnya penggunaan pewarna sintetis (*Rhodamine B*, *Carmoisine*, *Ponceau 4R*, *Allura Red*). Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi performa sistem multikanal spektroskopi dalam mendeteksi dan membedakan keempat pewarna tersebut pada media air dan *jelly* dengan rentang konsentrasi 1–10 ppm, 25 ppm, 45 ppm, 70 ppm, dan 95 ppm. Selain itu, penelitian ini juga mengkaji efektivitas model *machine learning* dalam melatih data spektral untuk melakukan kuantifikasi konsentrasi pewarna secara akurat. Model regresi dan klasifikasi dikembangkan menggunakan algoritma *Partial Least Square Regressor* (PLSR) dan *Support Vector Regressor* (SVR) untuk prediksi konsentrasi, serta algoritma *k-Nearest Neighbors Classifier* (KNNC), dan *Support Vector Classifier* (SVC) untuk klasifikasi pewarna. Data dibagi dengan rasio 80:20 untuk pelatihan dan pengujian, dan model dilatih menggunakan *cross-validation* 5-fold. Parameter evaluasi R^2 , RMSE, MAE, dan RPD digunakan untuk mengukur akurasi kuantifikasi, sedangkan akurasi, sensitivitas, dan spesifitas digunakan untuk klasifikasi. Model regresi, SVR menunjukkan performa yang sangat baik pada data Absorbansi dalam mendeteksi konsentrasi *Rhodamine B* ($R^2 = 0,986$), *Carmoisine* ($R^2 = 0,997$), *Ponceau 4R* ($R^2 = 0,998$), *Allura Red* ($R^2 = 0,995$) pada media air. Sedangkan pada media *jelly*, SVR pada data Absorbansi dan Kubelka-Munk juga menunjukkan kinerja yang baik dengan nilai RPD >3 . Model klasifikasi, SVC juga menunjukkan performa yang sangat baik dengan akurasi 100% pada data MSC (*multiplicative scatter correction*) dan SNV (*standard normal variate*) dalam mengklasifikasikan *Rhodamine B* dan *Carmoisine* pada media *jelly*. Berdasarkan hasil ini, spektroskopi multikanal dengan optimasi *machine learning* menjadi solusi inovatif untuk deteksi pewarna sintetis secara cepat, non-destruktif, dan praktis, terutama dalam konteks pengawasan kualitas makanan secara portabel dan *real-time*.

Kata Kunci: Spektroskopi Multikanal, *Rhodamine B*, *Carmoisine*, *Ponceau 4R*, *Allura Red*, *Support Vector Machine*, *Partial Least Square*, *k-Nearest Neighbors*.

ABSTRACT

DETECTION AND CLASSIFICATION OF SYNTHETIC DYES USING MULTI-CHANNEL SPECTROSCOPY AND MACHINE LEARNING APPROACHES

by

ANDRE AGASI

23/513374/PPA/06522

The rapid and accurate detection of synthetic dyes remains a critical issue in food safety monitoring. This study investigates the performance of a multichannel spectroscopy system for detecting and discriminating four synthetic dyes (Rhodamine B, Carmoisine, Ponceau 4R, and Allura Red) across a wide concentration range (1–10 ppm, 25 ppm, 45 ppm, 70 ppm, dan 95 ppm) in both water and jelly media. Machine learning models were developed to quantify dye concentrations and classify dye type based on spectral data. Partial Least Square Regressor (PLSR) and Support Vector Regressor (SVR) were employed for regression tasks, while k-Nearest Neighbors Classifier (KNNC), and Support Vector Classifier (SVC) were used for classification. Data were split into training and testing sets using an 80:20 ratio, with the training data evaluated using 5-fold cross-validation. Model performance was assessed using R^2 , RMSE, MAE, and RPD for regression. Accuracy, recall, precision, and f1-score for classification. SVR models using absorbance data yielded high predictive for all dyes in water, with R^2 values of 0.986 for Rhodamine B, 0.997 for Carmoisine, 0.998 for Ponceau 4R, and 0.995 for Allura Red. In jelly, SVR also showed strong performance using absorbance and Kubelka-Munk data, with RPD values >3 . For classification, the SVC model achieved 100% accuracy using MSC (multiplicative scatter correction) dan SNV (standard normal variate) preprocessed data to distinguish Rhodamine B dan Carmoisine in jelly. These findings highlight the potential of integrating multichannel spectroscopy with machine learning as a rapid, non-destructive, and practical approach for real-time food dye detection and quality control.

Keywords: Multichannel Spectroscopy, Rhodamine B, Carmoisine, Ponceau 4R, Allura Red, Support Vector Machine, Partial Least Square, k-Nearest Neighbors.