

# ANALISIS *CLUSTER* TERHADAP SPEKTRA INFRAMERAH FENOL, POLIEUGENOL DAN INTERAKSI KEDUANYA SEBUAH TINJAUAN STATISTIK

Agung Abadi Kiswandono  
Fakultas Kesehatan Masyarakat, Universitas Prima Indonesia  
Medan Sumatera Utara, Indonesia  
e-mail : nau\_shila@yahoo.com

## ABSTRACT

### *Cluster Analisis of Phenol Infrared Spectra, Poliugenol and Both Interction Overview Statistics*

*Identification had been carried out for eight different compounds using infrared spectrophotometer are phenol, polieugenol, and the mole ratio of phenol and polieugenol, and the results were analyzed using cluster analysis. The purpose of this study was to obtain infrared absorption on the interaction of these compounds, determine their group based on infrared absorption spectra and determine the characteristics of the resulting cluster. The results showed that the cluster analysis on the basis of infrared spectra could be grouped into three clusters, cluster compounds that had moderate absorption, low absorption and high absorption.*

*Keyword : cluster, polyeugenol, phenol*

## ABSTRAK

Delapan jenis senyawa telah diidentifikasi menggunakan spektrofotometer inframerah, yaitu fenol, polieugenol dan perbandingan mol fenol dan polieugenol, lalu hasil identifikasi tersebut dilakukan analisis menggunakan analisis cluster untuk memperoleh hubungan interaksi serapan inframerah pada senyawa – senyawa tersebut, kemudian mengelompokkan jenis senyawa – senyawa tersebut berdasarkan serapan spektra inframerah serta mengetahui ciri – ciri *cluster* yang dihasilkan. Berdasarkan jenis serapan spektra inframerah, hasil analisis *cluster* dari delapan jenis senyawa dapat dikelompokkan menjadi tiga *cluster*, yaitu *cluster* senyawa yang mempunyai serapan sedang, *cluster* senyawa yang memiliki serapan rendah dan *cluster* senyawa yang memiliki serapan tinggi.

Kata kunci : *cluster*, polieugenol, fenol

## PENDAHULUAN

Interaksi suatu senyawa dengan senyawa lainnya secara kualitatif dapat diketahui dengan spektra inframerah, karena spektra inframerah merupakan kekhasan sebuah molekul secara menyeluruh. Gugus – gugus atom tertentu memberikan penambahan serapan pada kerapatan tertentu (Silverstein, *et.al.* 1984) Spektrometri inframerah melingkupi pengamatan terhadap gerakan – gerakan atom di dalam molekul yang berupa vibrasi dan rotasi. Saat terjadi interaksi dengan

radiasi inframerah, molekul dapat menyerap energi radiasi tersebut pada panjang gelombang yang spesifik sehingga terjadi transisi di antara tingkat vibrasi dasar (*ground state*) dan tingkat energi tereksitasi (*excited state*).

Keberagaman vibrasi yang terjadi secara simultan menghasilkan spektrum absorpsi yang sangat kompleks yang merupakan ciri khas dari gugus fungsi yang menyusun molekul dan keseluruhan konfigurasi molekul (Lambert *et.al.* 2001). Spektrum inframerah dari suatu senyawa pada dasarnya merupakan superposisi pita

absorpsi dari gugus – gugus fungsi yang spesifik. Untuk analisis kualitatif, salah satu ciri spektrum inframerah adalah deteksi terhadap ada atau tidaknya absorpsi pada daerah-daerah frekuensi yang spesifik yang dapat dihubungkan dengan gerakan vibrasi *stretching* (ulur) dan *bending* (tekuk) yang spesifik pula. Data yang diperoleh dari spektra ini, dapat dibandingkan dengan spektra senyawa murni (standar) atau dari literatur sehingga dapat dilakukan identifikasi.

Pada suatu analisis spektrum inframerah, akan diperoleh banyak bilangan – bilangan gelombang, sesuai dengan senyawa – senyawa yang dianalisis. Serapan bilangan gelombang tersebut dapat diklasifikasikan atau dikelompokkan. Menurut analisis statistik, kriteria spektrum inframerah tersebut dinyatakan sebagai variat. Semakin banyak serapan dan *peak* yang menjadi kriteria suatu gugus fungsi ataupun atom tertentu akan semakin rumit analisis statistik yang harus dilakukan.

Analisis multivariat merupakan analisis yang cocok untuk meringkas data dengan peubah yang banyak. Beberapa analisis dalam analisis multivariat yang dapat digunakan untuk memahami dan mempermudah interpretasi data multivariat diantaranya adalah analisis *Cluster* (Fraley dan Raftery, 2007, Oh dan Raftery, 2007), bahkan Raftery dan Dean (2006) telah membuat suatu *model-based clustering*. Model yang dibuat ini lebih konsisten dan lebih akurat hasilnya dalam mengestimasi jumlah kelompok dengan rata – rata kesalahan yang rendah.

Analisis *cluster* merupakan teknik multivariat dengan tujuan utama untuk mengelompokkan obyek – obyek berdasarkan karakteristik yang dimilikinya. Analisis *cluster* sangat berguna untuk menganalisis dan meringkas informasi yang memiliki banyak data (Fraley *et.al.* 2005). Analisis *cluster* mengklasifikasi obyek sehingga setiap obyek yang paling dekat kesamaannya dengan obyek lain berada dalam *cluster* yang sama. *Cluster – cluster* yang terbentuk memiliki homogenitas internal yang tinggi dan heterogenitas eksternal yang tinggi

(Kuncoro, 2003). Obyek dalam setiap kelompok cenderung mirip satu sama lain dan berbeda jauh (tidak sama) dengan obyek dari *cluster* lainnya. Proses analisis cluster dapat dijelaskan dalam empat tahap, yaitu (1) Perumusan Masalah berdasarkan tujuannya (2) Menentukan ukuran ketidakmiripan (3) Memilih prosedur cluster (4) Interpretasi dan pemberian nama terhadap Cluster (Supranto, 2000).

Beberapa penelitian telah memakai “analisis *cluster*” sebagai alat bantu untuk melihat hubungan dan mengelompokkan obyek penelitian (Purwaningsih, 2007, Udiyani, 2007, dan Budhi *et.al.* 2008) tetapi belum ada peneliti menggunakan analisis cluster untuk menganalisis spektrum inframerah. Serapan inframerah pada beberapa senyawa, misalnya fenol, polieugenol dan interaksi keduanya memiliki banyak variat, yakni berupa *peak* yang dinyatakan sebagai bilangan – bilangan gelombang, sehingga data – data ini dapat dikelompokkan dan dianalisis menggunakan analisis *cluster*. Tulisan ini mencoba untuk membahas mengenai analisis *cluster* terhadap spektrum inframerah fenol, polieugenol dan interaksi keduanya. Untuk melihat interaksi fenol – polieugenol pada penelitian ini dibuat dengan mencampurkan larutan fenol dengan polieugenol dalam pelarut kloroform melalui proses ekstraksi (*shaker*) dengan beberapa perbandingan mol.

## BAHAN DAN METODE

### Bahan dan Alat

Bahan yang dipakai pada penelitian ini adalah fenol, kloroform, akuabides dan polieugenol, sedangkan alat yang digunakan adalah corong pisah, alat penunjang berupa alat-alat gelas dan botol, neraca analitik (Mettler Toledo AB54-S), *shaker*, desikator, spektrofotometer inframerah (Shimadzu FT-IR 8201PC) dan program Minitab 14.

## Metode Penelitian

### *Spektrum Inframerah (Kiswando, 2010)*

Larutan fenol dan polieugenol dengan perbandingan mol 50 : 1, 20 : 1, 1:1, 1 : 2, 1 : 15 dan 1 : 47 dimasukkan dalam botol, kemudian *dishaker* selama 72 jam, lalu dipisahkan antara fasa organik dengan fasa air. Fasa organik diuapkan dan padatan yang diperoleh dikeringkan dalam *desikator* untuk kemudian dianalisis dengan spektrofotometer Inframerah.

### *Prosedur Analisis Cluster (Purwaningsih, 2007)*

Langkah – langkah yang akan dilakukan dalam menentukan analisis *cluster* adalah sebagai berikut :

- Merumuskan masalah
- Menentukan ukuran ketakmiripan antar dua obyek, dalam hal ini dihitung menggunakan jarak *Euclidean* dan *Pearson*.
- Membuat *cluster*, proses *cluster* ini dilakukan dengan dua metode yaitu secara hirarki dan non hirarki.
- Memberi nama spesifik setelah *cluster* terbentuk, untuk menggambarkan isi *cluster* tersebut.
- Membuat kesimpulan

### *Analisis Cluster dengan Minitab 14 (Udiyani, 2007)*

Untuk mempercepat dan mendapatkan hasil dengan akurat, maka proses data menggunakan program Minitab 14. Obyek dikombinasikan berdasarkan jarak atau kesamaan masing – masing bilangan gelombang. Penggerombolan *aglomeratif* yang sering digunakan dimulai dengan satu obyek dan menggabungkannya ke kelompok obyek yang lebih besar.

Langkah pertama adalah menghitung matriks jarak keseluruhan data dengan salah satu ukuran jarak

(Perhitungan ini digunakan untuk semua obyek, Jarak antara satu dan obyek yang sama adalah 0).

$$d_{12} = [(x_{11} - x_{21})^2 + (x_{12} - x_{22})^2 \dots + (x_{115} - x_{215})^2]^{1/2} \dots \dots \dots (1)$$

Setelah terentuk satu *cluster*, lalu proses *Agromerasi* dimulai dengan jarak antar obyek yang paling dekat.

Langkah ke dua, adalah setelah terbentuknya *cluster* maka akan terlihat nilai koefisien dan nilai inilah yang menunjukkan jarak terdekat antara dua obyek tersebut.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### **Spektra inframerah dan Intensitas Serapan**

Spektrum inframerah dari kedelapan sampel seperti terlihat pada Gambar 1, kemudian jenis serapan spektrum inframerah dan besarnya intensitas dari ke delapan sampel secara lengkap disajikan pada Tabel 1.

Spektra inframerah merekam panjang gelombang atau frekuensi versus % T. Bila suatu senyawa menyerap cahaya pada suatu panjang gelombang tertentu, maka intensitas cahaya yang diteruskan oleh cuplikan akan berkurang, hal ini mengakibatkan penurunan % T dan dalam spektra terlihat sebagai puncak serapan. Bagian spektra dengan % T menunjukkan angka 100 atau mendekati 100, berarti tidak ada serapan untuk suatu senyawa pada panjang gelombang tersebut.

Agar tidak terjadi salah interpretasi, kemudian % T dikonversi menjadi absorbansi, kemudian data serapan inframerah dalam bentuk absorbansi ini digunakan sebagai data untuk analisis *Cluster*. Data tersebut seperti terlihat pada Tabel 2 dan 3. Data yang digunakan dalam makalah ini diambil dari delapan senyawa pada Tabel 1, 2 dan 3, Pada Tabel tersebut terdapat 15 variabel, dimana variabel – variabel tersebut adalah jenis serapan inframerah.

Tabel 1. Intensitas serapan (%T ) pada FT-IR untul fenol, polieugenol dan fenol : polieugenol (Yogyakarta, 2010)

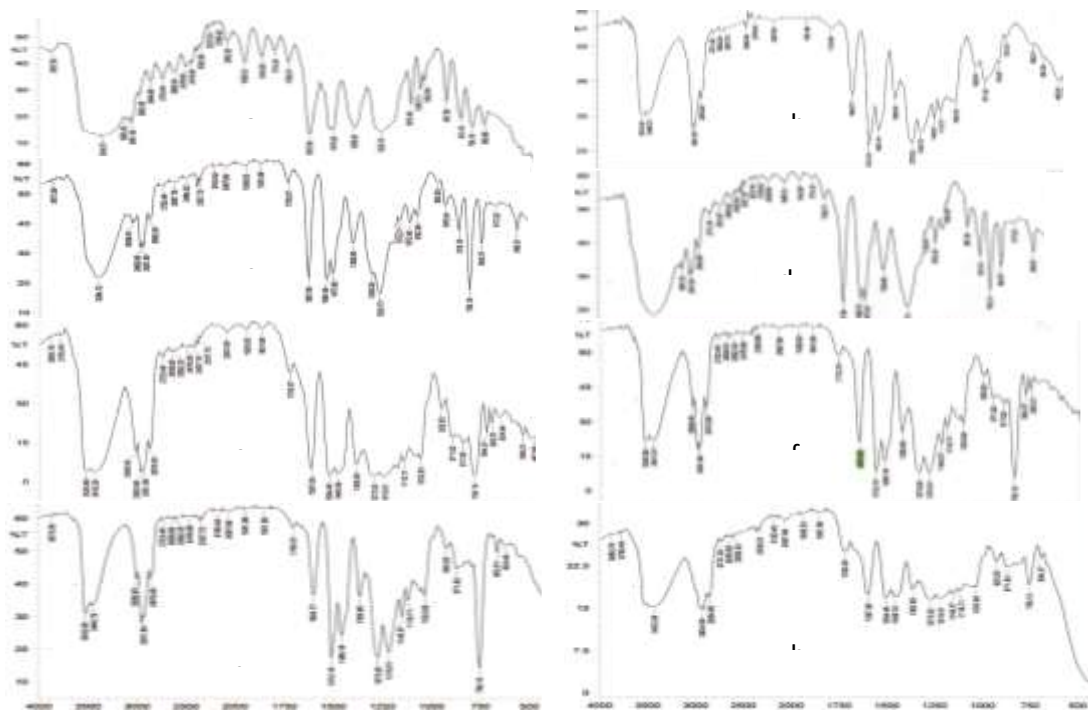
Senyawa	Intensitas serapan (%I)														
	-OH	C-H tekukan (alkenil)	C-H tekukan (alkil)	C=C aromatik			O-H dalam bidang	Uluran C-H	C-O eter	C-H keluar bidang	C=C keluar bidang	O-H keluar bidang			
	3340,7	3047-3093	2962-2846		1473;1496;1597			1365	1226	1273;1033		810;756	686	509	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Fenol	12,98	17,48	28,25	32,98	14,95	14,96	13,16	15,64	14,40	100,00	100,00	15,85	18,90	16,71	8,00
Polieugenol	30,37	100,00	28,77	32,46	27,90	25,69	32,98	32,37	27,67	26,06	31,90	41,20	37,19	100,00	38,25
Fenol: Polieugenol (50:1)	21,77	40,13	31,88	32,03	23,22	21,12	21,30	33,31	16,52	22,84	42,38	17,63	37,42	33,21	37,52
Fenol: Polieugenol (20:1)	18,58	32,04	31,26	38,36	22,98	23,46	21,90	31,66	20,84	100,00	44,69	25,73	35,93	32,83	36,97
Fenol: Polieugenol (1:1)	3,84	11,45	3,55	12,37	2,79	2,16	4,55	6,14	2,06	2,04	8,30	2,02	14,39	18,26	17,21
Fenol: Polieugenol (1:2)	22,08	36,12	18,99	35,85	13,07	8,25	20,93	25,09	7,70	7,83	28,82	5,36	37,77	41,19	38,35
Fenol: Polieugenol (1:15)	15,24	41,31	29,68	41,26	23,81	17,00	36,37	35,86	18,78	17,23	36,07	13,88	44,83	49,37	100,00
Fenol: Polieugenol (1:47)	33,75	100,00	14,61	16,95	16,84	16,75	17,30	18,27	16,70	16,39	18,63	19,01	22,55	23,82	100,00

Tabel 2. Intensitas serapan (% T) pada FT-IR untul fenol, polieugenol dan fenol-polieugenol (Yogyakarta, 2010)

Senyawa	Intensitas serapan (T)														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Fenol	0,13	0,17	0,28	0,33	0,15	0,15	0,13	0,16	0,14	1,00	1,00	0,16	0,19	0,17	0,08
Polieugenol	0,30	1,00	0,29	0,32	0,28	0,26	0,33	0,32	0,28	0,26	0,32	0,41	0,37	1,00	0,38
Fenol: Polieugenol (50:1)	0,22	0,40	0,32	0,32	0,23	0,21	0,21	0,33	0,17	0,23	0,42	0,18	0,37	0,33	0,38
Fenol: Polieugenol (20:1)	0,19	0,32	0,31	0,38	0,23	0,23	0,22	0,32	0,21	1,00	0,45	0,26	0,36	0,33	0,37
Fenol: Polieugenol (1:1)	0,04	0,11	0,04	0,12	0,03	0,02	0,05	0,06	0,02	0,02	0,08	0,02	0,14	0,18	0,17
Fenol: Polieugenol (1:2)	0,22	0,36	0,19	0,36	0,13	0,08	0,21	0,25	0,08	0,08	0,29	0,05	0,38	0,41	0,38
Fenol: Polieugenol (1:15)	0,15	0,41	0,30	0,41	0,24	0,17	0,36	0,36	0,19	0,17	0,36	0,14	0,45	0,49	1,00
Fenol: Polieugenol (1:47)	0,34	1,00	0,15	0,17	0,17	0,17	0,17	0,18	0,17	0,16	0,19	0,19	0,23	0,24	1,00

Tabel 3. Absorbansi serapan ( $A = -\log T$ ) pada FT-IR untuk fenol, polieugenol dan fenol-polieugenol (Yogyakarta, 2010)

Senyawa	Intensitas serapan ( $A = -\log T$ )														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Fenol	0,89	0,76	0,55	0,48	0,83	0,83	0,88	0,81	0,84	0,00	0,00	0,80	0,72	0,78	1,10
Polieugenol	0,52	0,00	0,54	0,49	0,55	0,59	0,48	0,49	0,56	0,58	0,50	0,39	0,43	0,00	0,42
Fenol: Polieugenol (50:1)	0,66	0,40	0,50	0,49	0,63	0,68	0,67	0,48	0,78	0,64	0,37	0,75	0,43	0,48	0,43
Fenol: Polieugenol (20:1)	0,73	0,49	0,51	0,42	0,64	0,63	0,66	0,50	0,68	0,00	0,35	0,59	0,44	0,48	0,43
Fenol: Polieugenol (1:1)	1,42	0,94	1,45	0,91	1,55	1,67	1,34	1,21	1,69	1,69	1,08	1,69	0,84	0,74	0,76
Fenol: Polieugenol (1:2)	0,66	0,44	0,72	0,45	0,88	1,08	0,68	0,60	1,11	1,11	0,54	1,27	0,42	0,39	0,42
Fenol: Polieugenol (1:15)	0,82	0,38	0,53	0,38	0,62	0,77	0,44	0,45	0,73	0,76	0,44	0,86	0,35	0,31	0,00
Fenol: Polieugenol (1:47)	0,47	0,00	0,84	0,77	0,77	0,78	0,76	0,74	0,78	0,79	0,73	0,72	0,65	0,62	0,00



Gambar 1. Spektra IR (a). Fenol, (b). Polieugenol, perbandingan mol fenol : polieugenol (c) 50 : 1 (d) 20 : 1 (e) 1 : 1 (f) 1 : 2 (g) 1 : 15 (h) 1 : 47.

Ada dua proses penting yaitu *algoritma cluster* dalam pembentukan *cluster* dan menentukan jumlah *cluster* yang akan dibentuk. Keduanya mempunyai implikasi substansial tidak hanya pada hasil yang diperoleh tetapi juga pada interpretasi yang akan dilakukan terhadap hasil tersebut. Dua metode paling umum dalam *algoritma cluster* adalah metode hirarkhi dan metode non hirarkhi.

### Proses *clustering* secara hirarkhi

Proses *clustering* dilakukan secara hirarkhi dan non-hirarkhi, kedua metode tersebut digunakan secara berdampingan. Pada makalah ini proses *clustering* secara hirarkhi menggunakan dua metode, yakni *euclidian* dan *pearson* secara *single linkage*, *average linkage* dan *median linkage*, sedangkan proses *clustering* secara non-hirarkhi menggunakan metode *k-means*. Proses komputasi yang digunakan untuk mengolah data adalah program minitab 14.

Obyek dikombinasikan berdasarkan jarak atau kesamaan masing – masing bilangan gelombang. Penggerombolan *aglomeratif* yang sering digunakan dimulai dengan satu obyek dan menggabungkannya ke kelompok obyek yang lebih besar. Proses penggabungan dua objek atau lebih dapat dilihat pada tabel *Agglomeration Schedule* (Tabel 4).

Langkah pertama adalah menghitung matriks jarak keseluruhan data dengan salah satu ukuran jarak. Angka 1,761 diperoleh dengan menggunakan formula 1.

$$d_{12} = [(0,89 - 0,52)^2 + (0,76 - 0,00)^2 + (0,55 - 0,54)^2 + \dots + (1,10 - 0,42)^2]^{1/2}$$

$$d_{12} = 1,761.$$

Perhitungan untuk obyek lainnya dianalogikan seperti perhitungan tersebut di atas. Jarak antara satu dan obyek yang sama adalah 0.

Tabel 4. Hasil Perhitungan Matriks Jarak Tahap Pertama (Yogyakarta, 2010)

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1,761	1,255	1,065	2,928	1,690	1,699	1,832
2	1,761	0	0,813	0,988	3,390	1,470	0,923	1,122
3	1,255	0,813	0	0,683	2,902	0,962	<b>0,596</b>	0,949
4	1,065	0,988	0,683	0	3,261	1,499	0,988	1,300
5	2,928	3,390	2,902	3,261	0	2,175	2,958	2,732
6	1,690	1,470	0,962	1,499	2,175	0	0,973	1,143
7	1,699	0,923	<b>0,596</b>	0,988	2,958	0,973	0	1,009
8	1,832	1,122	0,949	1,300	2,732	1,143	1,009	0

Tabel 5. Hasil Perhitungan Matriks Jarak Tahap Kedua (Yogyakarta, 2010)

	1	2	3&7	4	5	6	8
1	0.000	1.287	1.034	1.026	3.159	1.580	1.311
2	1.287	0	0.406	0.836	3.146	1.216	0.759
3&7	1.034	0.406	0	<b>0.342</b>	3.081	1.231	0.792
4	1.026	0.836	<b>0.342</b>	0	1.630	1.837	1.973
5	3.159	3.146	3.081	1.630	0	1.088	1.966
6	1.580	1.216	1.231	1.837	1.088	0	0.486
8	1.311	0.759	0.792	1.973	1.966	0.486	0

Keterangan : angka pada kolom dan baris satu merupakan jenis senyawa

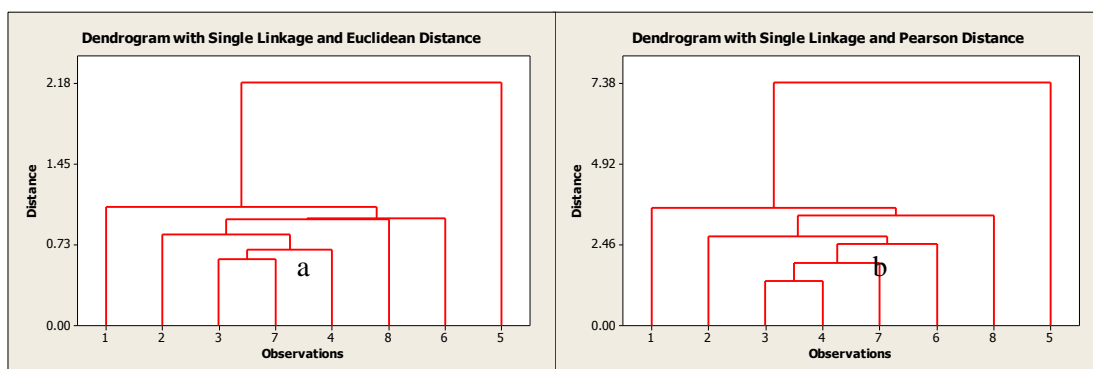
- 1. Fenol
- 2. Polieugenol
- 3. Fenol : Polieugenol 50 : 1
- 4. Fenol : Polieugenol 20 : 1
- 5. Fenol : Polieugenol 1 : 1
- 6. Fenol : Polieugenol 1 : 2
- 7. Fenol : Polieugenol 1 : 15
- 8. Fenol : Polieugenol 1 : 47

Pada tahap pertama, terbentuk satu *cluster* antara senyawa 7 dengan senyawa 3, dengan nilai koefisien sebesar 0,596 yang menunjukkan besarnya jarak antara senyawa 7 dan senyawa 3. Proses *Agglomerasi* dimulai dengan jarak antar obyek yang paling dekat, yaitu jarak antara senyawa 7 dan senyawa 3 yang memiliki jarak terdekat dari 28 kombinasi jarak antar obyek yang ada. Pada tahap kedua, dapat dilihat terbentuknya *cluster* antara senyawa 3,7 dengan senyawa 4, dengan nilai koefisien sebesar 0,342 yang menunjukkan besarnya jarak terdekat antara senyawa 3,7 dengan senyawa 4, seperti yang terlihat pada Tabel 5.

Proses *cluster* dilanjutkan hingga pada kolom tahap selanjutnya menunjukkan nilai tahap 0, yang berarti proses

*cluster* berhenti. Secara komputasi proses *cluster* dapat dikerjakan lebih cepat dengan memasukkan data pada program minitab 14, sehingga akan diperoleh dendrogram seperti pada Gambar 2.

Gambaran secara visual dari hasil analisis *cluster* ini disajikan pada dendrogramnya. Untuk menentukan jumlah *cluster* yang terbaik belum ada metode pasti yang bisa digunakan, sehingga untuk menentukan jumlah *cluster* dari dendrogram dilihat dari jarak terpanjang pada dendrogram saat pembentukan *clusternya*. Jika sulit melihat secara visual, dapat dilihat dari jarak pembentukan antar *cluster* yaitu level jarak iterasi ke-*i* dikurangi level jarak iterasi ke - (*i-1*).



Gambar 2. Dendrogram dengan *Single Linkage* (a) *Euclidean distance* (b) *Pearson Distance*

Tabel 6. Jarak Pembentukan Terbesar Menjadi Satu *Cluster* (Yogyakarta, 2010)

<i>Single Linkage</i>				
Iterasi	Juml <i>cluster</i> terbentuk	Level Kesamaan	Level Jarak	Jarak Pembentukan Antar <i>cluster</i>
2	6	79,8432	0,68323	0,08733
3	5	76,0159	0,81296	0,12973
4	4	71,9915	0,94937	0,13641
5	3	71,6103	0,96229	0,01292
6	2	68,586	1,0648	0,10251
7	1	35,8226	2,17534	1,11054

Pada Tabel 6 terlihat bahwa jarak pembentukan terbesar terjadi pada saat pembentukan menjadi satu *cluster*, dengan nilai 1,11054. Sehingga kesimpulan yang dapat diambil dari dendogram di atas adalah bahwa *cluster* terbentuk yang dipilih adalah satu *cluster* (seluruh pengamatan).

### Proses *clustering* non-hirarki

Metode non-hirarki memproses semua obyek (kasus) secara sekaligus. Metode non-hirarki yang digunakan adalah *k-means* dimana *k* adalah banyaknya *cluster* = 3. Nilai 3 diambil dari 3 *cluster* terakhir yang terjadi, yaitu pada metode *Pearson* terdapat pada senyawa 1, 5 dan 8 sehingga pada metode non-hirarki ini banyaknya *cluster* adalah 3. Proses pengclusteran dengan metode *k-means* adalah :

- Besarnya *k* (banyaknya *cluster*) = 3.
- Centroid ada 3 karena jumlah *cluster* ada tiga. Nilai centroid diperoleh secara acak (dalam hal ini diambil dari 3 *cluster* terakhir yang sering muncul), yaitu senyawa 1, 6, 5 untuk metode *euclidian* dan 1, 8, 5 untuk metode *Pearson*.

$C_1$  (centroid *cluster* 1) adalah nilai ke-15 variabel dari senyawa 1.

$C_2$  (centroid *cluster* 2) adalah nilai ke-15 variabel dari senyawa 5.

$C_3$  (centroid *cluster* 3) adalah nilai ke-15 variabel dari senyawa 8.

Jarak setiap obyek dari centroid (pusat *cluster*) pertama dengan menggunakan kuadrat jarak euclidean pada Tabel 7 adalah sebagai berikut :

$$\text{Senyawa 1 ; } C-1 : [(0,89 - 0,89)^2 + (0,76-0,76)^2 + (0,55 - 0,55)^2 + \dots + (1,1 - 1,1)^2] = 0$$

$$\text{Senyawa 2 ; } C-1 : [(0,52 - 0,89)^2 + (0 - 0,76)^2 + (0,54 - 0,55)^2 + \dots + (0,42 - 1,1)^2] = 3,1$$

$$\text{Senyawa 1 ; } C-2 : [(0,89 - 1,42)^2 + (0,76 - 0,94)^2 + (0,55 - 1,45)^2 + \dots + (1,1 - 0,76)^2] = 8,57$$

Untuk senyawa yang lain dihitung dengan cara yang sama, sehingga didapatkan data seperti Tabel 8 dan 9.



c) Selanjutnya menghitung kembali centroid yang baru, yang merupakan rata-rata ke – 15 variabel pada setiap *cluster* (Tabel 10).

$C_1^*$  (centroid *cluster* 1) adalah nilai ke – 15 variabel dari 2 senyawa yang masuk ke dalam *cluster* 1 pada langkah b.

$C_2^*$  (centroid *cluster* 2) adalah nilai rata – rata ke – 15 variabel dari 1 senyawa yang masuk ke *cluster* 2 pada langkah b.

$C_3^*$  (centroid *cluster* 3) adalah nilai rata – rata ke – 15 variabel dari 5 senyawa yang masuk ke *cluster* 3 pada langkah b.

Kemudian jarak setiap obyek dari centroid (pusat *cluster*) pertama dengan menggunakan kuadrat jarak *euclidean* seperti langkah b di atas diperoleh data seperti Tabel 11 dan 12.

Karena tidak ada perubahan dari hasil peng*clusteran*, yakni hasilnya sama dengan langkah b, maka proses berhenti, sehingga dari tiga *cluster* yang terbentuk di dapatkan rata – rata besarnya serapan (dalam satuan absorbansi) pada setiap *cluster*, seperti dalam Tabel 13.

Artinya, untuk serapan gugus OH (pada kolom 1) terbesar berada pada *cluster* ketiga dengan rata – rata sebesar 0,63, sedangkan serapan OH terkecil pada *cluster* kedua dengan rata-rata sebesar 0,28 dan seterusnya.

Tabel 7. Nilai Centroid dari tiap *Cluster* (Yogyakarta, 2010)

1	0.89	0.76	0.55	0.48	0.83	0.83	0.88	0.81	0.84	0	0	0.8	0.72	0.78	1.1
5	1.42	0.94	1.45	0.91	1.55	1.67	1.34	1.21	1.69	1.69	1.08	1.69	0.84	0.74	0.76
8	0.47	0	0.84	0.77	0.77	0.78	0.76	0.74	0.78	0.79	0.73	0.72	0.65	0.62	0

Tabel 8. Hasil Perhitungan Jarak Setiap Obyek dengan Menggunakan Kuadrat Jarak *Euclidean*

	C1	C2	C3
1	0.00	8.57	3.36
2	3.10	11.49	1.26
3	1.58	8.42	0.90
4	1.13	10.63	1.69
5	8.57	0.00	7.47
6	2.86	4.73	1.31
7	2.89	8.75	1.02
8	3.36	7.47	0.00

Tabel 9. Hasil Pengelompokan Berdasarkan *Cluster* Terdekat

C1	C2	C3
1		
		2
		3
4		
	5	
		6
		7
		8

Keterangan

- Jarak terdekat senyawa 1 adalah dengan C1, sehingga senyawa 1 dikelompokkan dalam *cluster* 1
- Jarak terdekat senyawa 2 adalah dengan C3, sehingga senyawa 2 dikelompokkan dalam *cluster* 3.
- dan seterusnya, sehingga didapatkan kelompok senyawa pada *cluster*-nya masing – masing, dari tabel tersebut (sebelah kanan) didapatkan *cluster* sebagai berikut, *Cluster* 1 dengan anggota senyawa 1 dan senyawa 4, *Cluster* 2 dengan anggota senyawa 5 dan *Cluster* 3 dengan anggota senyawa 2, 3, 6, 7 dan 8.

Tabel 10. Nilai Centroid dari tiap *Cluster* (Yogyakarta, 2010)

1	0.81	0.63	0.53	0.45	0.74	0.73	0.77	0.66	0.76	0.00	0.18	0.70	0.58	0.63	0.77
5	1.42	0.94	1.45	0.91	1.55	1.67	1.34	1.21	1.69	1.69	1.08	1.69	0.84	0.74	0.76
8	0.63	0.24	0.63	0.52	0.69	0.78	0.61	0.55	0.79	0.78	0.52	0.80	0.46	0.36	0.25

Tabel 11. Hasil Perhitungan Jarak Setiap Obyek dengan Menggunakan Kuadrat Jarak *Euclidean*

	C1	C2	C3
1	0.28	8.57	2.34
2	1.76	11.49	0.57
3	0.74	8.42	0.15
4	0.28	10.63	0.86
5	9.32	0.00	7.76
6	2.27	4.73	0.65
7	1.65	8.75	0.22
8	2.24	7.47	0.48

Tabel 12. Hasil Pengelompokan Berdasarkan *Cluster* Terdekat

	C1	C2	C3
1			
2			2
3			3
4			
5		5	
6			6
7			7
8			8

*Keterangan*

- Jarak terdekat senyawa 1 adalah dengan C1, sehingga senyawa 1 dikelompokkan dalam cluster 1
- Jarak terdekat senyawa 2 adalah dengan C3, sehingga senyawa 2 dikelompokkan dalam cluster 3
- dan seterusnya, sehingga didapatkan kelompok senyawa pada cluster-nya masing – masing, sehingga didapatkan 3 kelompok cluster, yaitu Cluster 1 dengan anggota senyawa 1 dan senyawa 4, Cluster 2 dengan anggota senyawa 5 dan Cluster 3 dengan anggota senyawa 2, 3, 6, 7 dan 8.

Tabel 13. Nilai Rata – rata Serapan pada Setiap *Cluster* (Yogyakarta, 2010)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
C1	0.32	0.25	0.21	0.18	0.29	0.29	0.31	0.26	0.3	0	0.07	0.28	0.23	0.25	0.31
C2	0.28	0.19	0.29	0.18	0.31	0.33	0.27	0.24	0.34	0.34	0.22	0.34	0.17	0.15	0.15
C3	0.63	0.24	0.63	0.52	0.69	0.78	0.61	0.55	0.79	0.78	0.52	0.8	0.46	0.36	0.25

Tabel 14. Klasifikasi Nama *Cluster* yang Terbentuk

	C1 (sedang)	C2 (rendah)	C3 (Tinggi)
1	0.28		
2			0.57
3			0.15
4	0.28		
5		0.00	
6			0.65
7			0.22
8			0.48
<b>Rata<sup>2</sup></b>	<b>0.28</b>	<b>0.00</b>	<b>0.42</b>

- d) Setelah terbentuk *cluster*, tahap selanjutnya yaitu memberi nama spesifik untuk menggambarkan isi *cluster* tersebut, dari ketiga *cluster* yang terbentuk dapat diklasifikasikan seperti pada Tabel 14.

*Cluster pertama* : Ke – 15 jenis serapan memiliki rata – rata sedang dari *cluster* kedua dan *cluster* ketiga, sehingga dapat digolongkan menjadi kelompok senyawa dengan serapan absorbansi sedang, anggotanya adalah senyawa 1 dan 4. *Cluster kedua* : Ke-15 jenis serapan memiliki rata – rata terkecil diantara *cluster* yang lain, sehingga dapat digolongkan menjadi kelompok senyawa dengan serapan rendah, anggotanya adalah senyawa 5. *Cluster ketiga* : Ke – 15 jenis serapan memiliki rata – rata tinggi, sehingga dapat digolongkan menjadi kelompok senyawa serapan tinggi, anggotanya adalah senyawa 2, 3, 6, 7 dan 8.

### KESIMPULAN

Berdasarkan hasil pembahasan, maka dapat disimpulkan bahwa Hasil analisis *cluster* dari delapan jenis senyawa berdasarkan jenis serapan spektra inframerah, dapat dikelompokkan menjadi tiga *cluster*, yaitu: *cluster* pertama adalah kelompok senyawa yang mempunyai serapan sedang (senyawa 1 yaitu fenol dan senyawa4 yaitu fenol:polieugenol, 20 : 1),

*cluster* kedua adalah kelompok senyawa yang memiliki serapan rendah (senyawa 5 yaitu fenol : polieugenol, 1 : 1), dan *cluster* ketiga adalah kelompok senyawa yang memiliki serapan tinggi (senyawa 2, 3, 6, 7, dan 8 berturut – turut polieugenol, fenol: polieugenol dengan perbandingan 50 : 1, 1: 2, 1 : 15 dan 1 : 47).

### UCAPAN TERIMAKASIH

Penghargaan yang setinggi – tingginya atas kehadiran Bapak Dr. Dwi Siswanta, M. Eng dan Dr. Nurul Hidayat Aprilita, M. S., pada saat makalah ini dipresentasikan. Terima kasih atas saran dan masukannya untuk perbaikan pada makalah ini.

### DAFTAR PUSTAKA

- Budhi, G. S., Liliana dan S. Harryanto, 2008, *Cluster Analysis untuk Memprediksi Talenta Pemain Basket Menggunakan Jaringan Saraf Tiruan Self Organizing Maps (SOM)*, Jurnal Informatika Vol. 9, NO. 1, 23 – 32.
- Fraley, C. and A. E. Raftery, 2002, *Model-Based Clustering, Discriminant Analysis, and Density Estimation*, Journal of the American Statistical Association, 97, pp. 611 – 631.

- Fraley, C., dan A. E. Raftery, 2007, *Model-based Methods of Classification : Using the Mclust Software in Chemometrics*, Journal of Statistical Software, Vol. 18, issue 6.
- Fraley, C., A. E. Raftery dan R. Wehrens, 2005, *Incremental Model-Based Clustering for Large Datasets With Small Clusters*, Journal of Computational and Graphical Statistics, Volume 14, Number 3, Pages 529 – 546.
- Kiswandono, A. A., 2010, *Studi Transpor Fenol Menggunakan Membran Cair Polieugenol*, Tesis, Universitas Gadjah mada, Yogyakarta.
- Kuncoro, M., 2003, *Metode Riset Untuk Bisnis dan Ekonomi*. Jakarta : Erlangga
- Lambert, J. B., H. F. Shurvell, D. A. Lightner, R. G. Cooks, 2001, *Organic Structural Spectroscopy*, Prentice-Hall, Inc., New Jersey.
- Oh, M., dan A. E. Raftery, 2007, *Model-Based Clustering With Dissimilarities : A Bayesian Approach*, Journal of Computational and Graphical Statistics, Volume 16, Number 3, Pages 559 – 585.
- Purwaningsih, D. W., 2007, *Analisis Cluster Terhadap Tingkat Pencemaran Udara Pada Sektor Industri di Jawa Tengah*, Skripsi, universitas Diponegoro, Semarang.
- Raftery, A. E. dan N. Dean, 2006, *Variable Selection for Model-Based Clustering*, Journal of the American Statistical Association March 2006, Vol. 101, No. 473.
- Sartono, B., 2003. *Analisis Peubah Ganda*. Bogor : IPB
- Silverstein, Bassler dan Morrill, 1984, *Penyidikan Spektrometri Senyawa Organik*, edisi 4, Alih bahasa Hartomo, A. J., dan Purba, A. V., Penerbit Erlangga, Jakarta.
- Supranto, J., 2000, *Teknik Sampling Untuk Survei dan Eksperimen*, Edisi Baru. Jakarta : PT. Rineka Cipta.
- Udiyani, P. M., 2007, *Analisis Cluster Terhadap Radioaktivitas Alam Tapak Reaktor dan Instalasi Nuklir di Pulau Jawa*, Prosiding Seminar Nasional ke – 13 Teknologi dan Keselamatan PLTN Serta Fasilitas Nuklir.