

**PENGEMBANGAN MODEL *PARTIAL LEAST SQUARE REGRESSION*  
(PLSR) UNTUK MEMPREDIKSI KEASAMAN (pH) DAN KADAR AIR  
BIJI KAKAO (*Theobroma Cacao* L.) MENGGUNAKAN SPEKTROSKOPI  
*VISIBLE NEAR INFRARED* (VIS-NIR)**

**INTISARI**

**Oleh:**

**DEDE CAHYO PRIAMBODO**

**17/413936/TP/11878**

Fermentasi sangat penting dalam pengolahan kakao yang memecah senyawa gula dalam pulp menjadi asam organik. Asam organik yang dihasilkan merangsang reaksi enzimatik dalam biji kakao yang mempengaruhi aroma, rasa, dan warna biji kakao. Keasaman (pH) dan kadar air biji kakao menjadi indikator kualitas kakao setelah fermentasi, sehingga informasi tentang kadar air dan pH menjadi penting untuk diketahui. Parameter tersebut biasanya diukur dengan menggunakan pH meter dan metode gravimetri yang membutuhkan waktu cukup lama untuk analisis dan merusak sampel sehingga tidak dapat digunakan lagi. Saat ini telah banyak dikembangkan analisis kualitatif dan kuantitatif menggunakan spektroskopi *Visible Near-Infrared* (Vis/NIR). Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengembangkan model kalibrasi non-destruktif untuk memprediksi pH dan kadar air biji kakao pada berbagai tingkat fermentasi menggunakan spektrometer *Visible Near-infrared* dan metode kemometrik. Sampel terdiri dari 315 biji kakao yang diperoleh dari 3 daerah (Lampung, Makasar, dan Kulon Progo) pada 3 tingkat fermentasi yaitu tanpa fermentasi, fermentasi setengah, dan fermentasi penuh. Model kalibrasi dan prediksi dilakukan dengan regresi *Partial Least Square* (PLS) yang melibatkan variabel X (hasil pengukuran Vis/NIR) dan variabel Y (pH dan kadar air). *Smoothing*, *Baseline Correction*, *Normalization*, *Standard Normal Variate* (SNV), dan *Multiplicative Scatter Correction* (MSC) digunakan untuk pra-pemrosesan spektrum. Hasil penelitian menunjukkan bahwa metode SNV menghasilkan model terbaik untuk memprediksi pH dengan koefisien determinasi untuk kalibrasi ( $R_C^2$ ) sebesar 0,80 dan prediksi ( $R_P^2$ ) sebesar 0,77. Model terbaik untuk memprediksi kadar air diperoleh dengan spektra *original* dan MSC yang keduanya menghasilkan nilai yang sama yaitu  $R_C^2$  sebesar 0,55 dan  $R_P^2$  sebesar 0,41. Hasil penelitian menunjukkan kemampuan spektroskopi Vis/NIR dan peran penting kemometrik dalam mengembangkan model untuk memprediksi pH dan kadar air biji Kakao.

Kata kunci: model kalibrasi, model prediksi, kemometrik, regresi

**DEVELOPMENT OF PARTIAL LEAST SQUARE REGRESSION (PLSR)  
MODEL FOR PREDICTING ACIDITY (pH) AND MOISTURE CONTENT  
OF COCOA BEAN (*Theobroma Cacao* L.) USING VISIBLE NEAR  
INFRARED SPECTROSCOPY (VIS-NIR)**

**ABSTRACT**

**By:**

**DEDE CAHYO PRIAMBODO**

**17/413936/TP/11878**

Fermentation is critical in cacao processing which breakdowns sugar compounds in the pulp into organic acids. The produced organic acids stimulate enzymatic reactions in the beans which affect the flavor, taste, and color of the cacao beans. Acidity (pH) and moisture content of cacao beans are indicators of cacao quality after fermentation. Thus, information about moisture content and pH becomes important to know. Those parameters are commonly measured using pH meter and gravimetric methods which are time-consuming and destruct the sample so that the sample cannot be reuse. Currently, many qualitative and quantitative analyzes have been developed using Visible Near-Infrared (Vis/NIR) spectroscopy. The objective of this study was to develop non-destructive calibration models to predict the pH and moisture content of cacao beans at various fermentation levels using a Visible Near-Infrared spectrometer and chemometric methods. The samples consisted of 315 cacao beans obtained from 3 regions (Lampung, Makasar, and Kulon Progo) at 3 levels of fermentation (unfermented, half fermented, fully fermented). The calibration and prediction models were performed by Partial Least Square regression (PLS) which involves X variables (Vis/NIR measurement results) and Y variable (pH and moisture content). Smoothing, Normalization, Baseline Correction, Standard Normal Variate (SNV), and Multiplicative Scattered Correction (MSC) were used for spectra pre-processing. The research showed that the SNV method resulted in the best model for pH with the determination coefficient of calibration ( $R_C^2$ ) was 0.80 and prediction ( $R_P^2$ ) was 0.77. Original and MSC methods resulted in the best model for moisture content with the same value of  $R_C^2$  of 0.55 and  $R_P^2$  of 0.41. The results showed the capability of Vis/NIR spectroscopy and the important role of chemometrics in developing models for predicting pH and moisture content of cacao beans.

**Keywords:** calibration model, prediction model, chemometrics, regression