

NIR SPECTROSCOPY FOR DETECTION AND QUANTIFICATION OF COCOA POWDER ADULTERATION

**Supervised by Dr. Widiastuti Setyaningsih, S.T.P., M.Sc. and Prof. Dr. D.
Miguel Palma Lovillo**

ABSTRACT

Cocoa powder has many uses and benefits for human health, increasing demand on the market followed by an increase in the price of cocoa powder. This occurrence leads to the adulteration of cocoa powder and thus degrades the quality. This study aimed to detect and quantify cocoa powder adulteration using near-infrared spectroscopy (NIRS) with multivariate analysis. The adulterants used in this study were powder of carob, cocoa shell, foxtail millet, soybean, and whole wheat. The overlapped NIRS spectra of all samples could not be solved using data pre-treatment using the Savitzky-Golay (SG) smoothing. However, unsupervised techniques (principal component and hierarchical clustering analysis) could arrange the samples based on the type and percentage of adulterants. Applying the supervised techniques, random forest (RF) and support vector machine (SVM), successfully classified samples with 100% accuracy for the test set. Subsequently, RF suggested the important wavelengths and perform spectral printing of all samples. The determination of adulteration using five models (partial least square (PLS), Lasso, Ridge, elastic Net, and RF regressions) provided R^2 higher than 0.96 and root mean square error (RMSE) less than 2.6 for the test set. Coupling with the Boruta algorithm, the best regression model for quantification was PLS (R^2 of 1 and RMSE of 0.0000 for the test set). In addition, the prediction models had high reliability in adulteration quantification with low value of MAE. An online application has been prepared to allow other users to use the models and facilitate the determination of adulterants in cocoa powder. Henceforth, NIR spectroscopy with multivariate analysis effectively allows for the detection and quantification of adulteration in cocoa powder.

Keywords: Boruta; chemometrics; classification; Savitzky-Golay

**SPEKTROSKOPI NIR UNTUK DETEKSI DAN
KUANTIFIKASI PEMALSUAN PADA BUBUK KAKAO**
Dibimbing oleh Dr. Widiastuti Setyaningsih, S.T.P., M.Sc. dan Prof. Dr. D.
Miguel Palma Lovillo

INTISARI

Bubuk kakao memiliki banyak kegunaan dan manfaat bagi kesehatan manusia, meningkatnya permintaan di pasaran akan diikuti dengan meningkatnya harga bubuk kakao. Hal ini akan mendorong adanya pemalsuan bubuk kakao dan menurunkan kualitasnya. Penelitian ini bertujuan untuk mendeteksi dan mengkuantifikasi pemalsuan pada bubuk kakao menggunakan *Near-Infrared Spectroscopy* (NIRS) dikombinasikan dengan analisis multivariat. Bahan pemalsu yang digunakan dalam penelitian ini adalah bubuk dari carob, kulit kakao, jewawut, kedelai, dan gandum utuh. Spektrum NIRS yang tumpang tindih dari semua sampel tidak dapat diatasi menggunakan *pre-processing* data (*Savitzky-Golay* (SG) *smoothing*). Namun, teknik *unsupervised* (PCA dan HCA) dapat mengkarakterisasi sampel berdasarkan jenis dan persentase pemalsuan. Sedangkan teknik *supervised*, *random forest* (RF) dan *support vector machine* (SVM), berhasil mengklasifikasikan sampel dengan 100% akurasi pada *test set*. Selanjutnya, RF memilih panjang gelombang penting dan membentuk *spectral print* dari semua sampel. Kuantifikasi pemalsuan dilakukan menggunakan lima model (regresi *partial least square* (PLS), Lasso, Ridge, *elastic Net*, dan RF) menghasilkan R^2 lebih tinggi dari 0,96 dan *root mean square error* (RMSE) kurang dari 2,6 pada *test set*. Penggunaan algoritma Boruta menghasilkan model regresi terbaik untuk kuantifikasi adalah PLS (R^2 1 dan RMSE 0,0000 untuk *test set*). Selain itu, model prediksi memiliki reliabilitas yang tinggi dalam mengkuantifikasi pemalsuan dengan nilai MAE yang rendah. Aplikasi online telah disiapkan untuk memungkinkan pengguna lain menggunakan model tersebut dan memfasilitasi penentuan pemalsuan dalam bubuk kakao. Sehingga dapat disimpulkan bahwa spektroskopi NIR dengan analisis multivariat secara efektif memungkinkan deteksi dan kuantifikasi pemalsuan dalam bubuk kakao.

Kata kunci: Boruta; kemometrika; klasifikasi; Savitzky-Golay