

ABSTRACT

CHEMOMETRICS ANALYSIS USING *Principal Component Analysis* (PCA) AND *Partial Least Square* (PLS) IN THE AUTHENTICATION OF BLACK SEED OIL BASED ON FTIR SPECTROPHOTOMETRY DATA

By

Triana Puji Astari

Currently, determining the authenticity of oil is a significant issue in the food industry. This research aims to identify the purity of black seed oil distributing in Bandar Lampung. The study utilizes the *Fourier Transform Infrared Spectroscopy* (FTIR) method combined with Chemometrics, employing *Principal Component Analysis* (PCA) and *Partial Least Square* (PLS) analysis. There is a difference in peak intensities between olive oil, which is relatively higher than those in black seed oil, at 1744 cm^{-1} , 1461 cm^{-1} , 1170 cm^{-1} , and 723 cm^{-1} . PCA results indicate that the five samples of distributing black seed oil show closely proximate distance to the standard olive oil. The PLS calibration model resulted in an R-Square (R^2) value of 0.982 with a standard error (SE) of 0.10%, while the validation set displayed an R-Square (R^2) value of 0.963 with a standard error (SE) of 0.10%. Predictions using the PLS model combined with a Box plot revealed the percentage of olive oil mixed into black seed oil ranging from 82% to 89%.

Keywords: Black Seed Oil, Boxplot, Chemometrics, FTIR, PCA, PLS.

ABSTRAK

ANALISIS KEMOMETRIKA MENGGUNAKAN *Principal Component Analysis* (PCA) DAN *Partial Least Square* (PLS) PADA AUTENTIKASI MINYAK HABBATUSSAUDA BERBASIS DATA SPEKTROFOTOMETRI FTIR

Oleh

Triana Puji Astari

Dewasa ini penentuan keaslian minyak merupakan isu besar dalam bidang makanan. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi kemurnian minyak habbatussauda yang beredar di Bandar Lampung. Pada penelitian ini menggunakan metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) yang dikombinasikan dengan Kemometrika dengan analisis *Principal Component Analysis* (PCA) dan *Partial Least Square* (PLS). Terdapat perbedaan puncak gelombang pada minyak zaitun yang relatif lebih tinggi dari pada puncak minyak habbatussauda pada 1744 cm^{-1} , 1461 cm^{-1} , 1170 cm^{-1} dan 723 cm^{-1} . Hasil PCA menunjukkan kelima sampel minyak habbatussauda yang beredar di pasaran memiliki jarak yang saling berdekatan dengan standar minyak zaitun. Hasil model PLS set kalibrasi didapatkan nilai R-Square (R^2) 0,982 dengan nilai standar error (SE) 0,10%, sedangkan untuk set validasi menunjukkan adanya nilai R-Square (R^2) 0,963 dengan nilai standar error (SE) 0,10%. Hasil prediksi dengan menggunakan model PLS yang dikombinasikan dengan Box plot diketahui kadar campuran minyak zaitun dalam minyak habbatussauda adalah 82% hingga 89 %.

Kata Kunci: Boxplot, FTIR, Kemometrika, Minyak Habbatussauda, PCA, PLS.