

# 抹茶品质指标的可见近红外光谱检测研究

荣艳娜<sup>1</sup>, 柳新荣<sup>2</sup>, 邢志强<sup>2</sup>, 陈全胜<sup>1,3</sup>, 欧阳琴<sup>1\*</sup>

(1. 江苏大学食品与生物工程学院, 镇江 212013; 2. 佳禾食品工业股份有限公司, 苏州 215200;  
3. 集美大学海洋食品与生物工程学院, 厦门 361021)

**摘要:** **目的** 建立适用于抹茶品质的可见近红外(visible-near infrared, Vis-NIR)光谱快速无损检测模型以实现多种品质指标的定量分析。**方法** 通过 Vis-NIR 获取抹茶样本的光谱数据, 使用一阶导数(first derivative, 1<sup>st</sup>)光谱预处理方法, 最后采用自助软收缩法(bootstrapping soft shrinkage, BOSS)、迭代变量子集优化法(iterative variable subset optimization, IVSO)和竞争性自适应重加权采样法(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)筛选光谱特征变量, 构建抹茶品质指标的偏最小二乘(partial least square, PLS)预测模型, 探究光谱信息与茶多酚、游离氨基酸、酚氨比、咖啡碱和可溶性糖之间的定量关系。**结果** 构建的 Vis-NIR 的 CARS-PLS 预测模型在抹茶品质指标含量预测方面均获得了最佳结果, 预测相关系数(correlation coefficient in the prediction set,  $R_p$ )分别为 0.9227、0.8906、0.9243、0.9381 和 0.9522; 预测均方根误差(root mean square error in the prediction set, RMSEP)分别为 0.867、0.337、0.557、0.216 和 0.440。**结论** 本研究采用的 Vis-NIR 光谱技术综合了可见光、短波近红外和长波近红外的优势, 在快速无损预测多种抹茶品质指标方面具有良好应用潜力, 为抹茶品质的快速无损高效检测提供理论依据和技术支撑。

**关键词:** 可见近红外光谱法; 抹茶; 化学计量学; 变量筛选; 无损检测

## Detection of quality indicators in matcha using visible-near infrared spectroscopy

RONG Yan-Na<sup>1</sup>, LIU Xin-Rong<sup>2</sup>, XING Zhi-Qiang<sup>2</sup>,  
CHEN Quan-Sheng<sup>1,3</sup>, OUYANG Qin<sup>1\*</sup>

(1. School of Food and Biological Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China;  
2. Jiahe Foods Industry Co., Ltd., Suzhou 215200, China; 3. College of Ocean Food and  
Biological Engineering, Jimei University, Xiamen 361021, China)

**ABSTRACT: Objective** To establish a rapid non-destructive detection model of matcha quality based on visible-near infrared (Vis-NIR) spectroscopy for the assessment of matcha quality, enabling quantitative analysis of multiple quality indicators. **Methods** The spectral data of matcha samples were used to Vis-NIR, the spectral were preprocessed by first derivative (1<sup>st</sup>), and then bootstrapping soft shrinkage (BOSS), iterative variable subset optimization (IVSO) and competitive adaptive reweighted sampling (CARS) feature variable to screen the spectral characteristic variables, and construct partial least square (PLS) model to explore the relationship between spectral

基金项目: 国家自然科学基金项目(32172289)

Fund: Supported by the National Natural Science Foundation of China (32172289)

\*通信作者: 欧阳琴, 博士, 教授, 主要研究方向为食品质量快速无损检测。E-mail: oyqyf@ujs.edu.cn

\*Corresponding author: OUYANG Qin, Ph.D, Professor, School of Food and Biological Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China. E-mail: oyqyf@ujs.edu.cn

information and tea polyphenols, free amino acids, phenol-ammonia ratio and caffeine and soluble sugars. **Results** The CARS-PLS prediction models constructed by Vis-NIR obtained the best results in predicting matcha quality indicators with correlation coefficient in the prediction set ( $R_p$ ) of 0.9227, 0.8906, 0.9243, 0.9381 and 0.9522, respectively, and the root mean square error in the prediction set (RMSEP) was 0.867, 0.337, 0.557, 0.216 and 0.440, respectively. **Conclusion** This study combines the advantages of visible light, short-wave NIR and long-wave NIR, which has good potential for rapid and nondestructive prediction of a variety of matcha quality indicators, and provides a theoretical basis and technical support for rapid and nondestructive and efficient testing of matcha quality.

**KEY WORDS:** visible-near infrared spectroscopy; matcha; chemometrics; variables selection; nondestructive detection

## 0 引言

抹茶是采用覆盖栽培的茶树叶片为原料,经加工而成的微粉状茶产品,最大程度保留了茶叶的营养成分<sup>[1]</sup>。抹茶中的氨基酸、茶多酚、咖啡碱以及可溶性糖是评价抹茶品质的重要指标<sup>[2-4]</sup>。研究发现,遮荫覆盖过程增加了氨基酸含量,赋予了抹茶强烈的鲜味<sup>[5]</sup>;茶多酚和咖啡碱是高品质抹茶的另外两种主要成分<sup>[6]</sup>,会引起涩味和苦味<sup>[7-8]</sup>;茶多酚和游离氨基酸之间的平衡对抹茶风味具有重要作用,茶多酚与游离氨基酸含量比例(酚氨比)越低,抹茶口感越浓郁醇厚;可溶性糖赋予抹茶甜味<sup>[9]</sup>。研究抹茶品质指标的快速检测方法对抹茶品质评价具有重要的意义。HORIE 等<sup>[10]</sup>使用高效液相色谱法(high performance liquid chromatography, HPLC)测定茶叶中的咖啡碱。ZHANG 等<sup>[11]</sup>使用紫外可见分光光度法(ultraviolet-visible spectrophotometry, UV-Vis)和化学计量学方法来分析茶叶中的咖啡碱和茶多酚。王忠合等<sup>[12]</sup>采用超高压液相色谱-四极杆飞行时间质谱法测定乌龙茶中的游离氨基酸。尽管传统的方法具有较高的精度,但检测成本高,且耗时较长<sup>[13]</sup>。因此,有必要选择一种快速、高效、准确的抹茶品质指标检测方法。

可见近红外(visible near infrared, Vis-NIR)光谱技术作为快速、准确、无损的检测方法<sup>[4]</sup>,包括可见光(350~700 nm)、短波近红外(700~1100 nm)和长波近红外(1100~2500 nm)。其中可见光主要反映物质对可见光的吸收、散射和透射情况,对于颜色的感知非常重要;短波近红外和长波近红外能够对物质的含氢基团合频和倍频的吸收进行快速响应。WANG 等<sup>[14]</sup>采用 900~1700 nm 波长范围的便携式近红外预测了抹茶中茶多酚和游离氨基酸含量;GUO 等<sup>[15]</sup>利用 1000~2500 nm 波长范围的傅里叶近红外(Fourier transform near-infrared, FT-NIR)预测了抹茶中茶多酚、游离氨基酸和酚氨比含量;OUYANG 等<sup>[16]</sup>利用可见-近红外高光谱成像技术(600~1700 nm)同时测定抹茶中茶多酚、游离氨基酸、酚氨比和叶绿素含量。以上研究表明,Vis-NIR 光谱技术应用于抹茶品质指标的快速检测具有一定的可行性。然而,尚未有研究全面涵盖可见光、短波近红外和长波近红外所有区域(350~2500 nm)以深入探究抹茶品质指

标的特征。

本研究探索应用波段为 350~2500 nm 的 Vis-NIR 建立抹茶多种品质指标的预测模型的可行性,并解析特征波长与不同品质指标之间的关系。本研究旨在为抹茶品质的快速、无损、高效检测提供理论依据和技术支撑,对选择用于评价抹茶品质的合适波段的 Vis-NIR 光谱仪具有重要指导意义。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料与试剂

#### 1.1.1 实验材料

从淘宝、京东、阿里巴巴尽可能收集了中国市场上所有质量等级的抹茶产品,样品来自于江苏鑫品茶业有限公司、浙江振通宏食品有限公司、杭州茗宝食品有限公司、广州润茗食品科技有限公司等 40 多家不同企业,共 115 个样本。为了确保抹茶粉样品的质量,将其保存在 $-18^{\circ}\text{C}$ 冰箱中备用。

#### 1.1.2 试剂

福林酚试剂、碳酸钠、没食子酸、磷酸盐缓冲液、磷酸氢二钠、磷酸二氢钾、茛三酮、碱式乙酸铅、萘酚试剂(分析纯,国药集团化学试剂有限公司)。

### 1.2 仪器与设备

FieldSpec<sup>®</sup>3 可见近红外光谱仪(美国 ASD 公司);BC/BD-519HEM 冰箱(海尔集团公司);BSA224S-CW 电子分析天平(精度 0.0001 g,德国赛多利斯有限公司);TGL-16M 台式高速冷冻离心机(湖南湘仪实验室仪器开发有限公司);Milli-Q 超纯水装置(密理博中国有限公司);UV-1601 紫外可见分光光度计(德国 Beifen Rayleigh 公司)。

### 1.3 实验方法

#### 1.3.1 抹茶中品质指标测定方法

酚氨比含量是茶多酚总量与游离氨基酸总量的比值。茶多酚检测采用 GB/T 8313—2018《茶叶中茶多酚和儿茶素类含量的检测方法》中的福林酚试剂法;游离氨基酸检测参考 GB/T 8314—2013《茶 游离氨基酸总量的测定》中茛三酮比色法。咖啡碱检测采用 GB/T 8312—2013《茶

咖啡碱测定》中碱式乙酸铅法。可溶性多糖检测采用蒽酮比色法<sup>[17]</sup>。

### 1.3.2 近红外光谱数据采集

本研究采用美国 ASD 公司的 FieldSpec<sup>®</sup>3 可见近红外光谱仪。光谱采集参数如下:积分时间为 100 ms;平滑度为 5;光谱范围为 350~2500 nm,在 350~1000 nm 的采样间隔为 1.4 nm,在 1000~2500 nm 的采样间隔为 2 nm。总共 115 个样本,每个样本取 5 g 放置于石英杯中,采集 3 次光谱,取平均值作为该样品的原始光谱。

## 1.4 数据处理

### 1.4.1 光谱预处理

由于存在背景干扰、基线漂移和散射效应,研究采用一阶导数(1<sup>st</sup> 导数)方法对所有样本的原始光谱进行预处理。

### 1.4.2 建模方法

本研究采用自助软收缩法(bootstrapping soft shrinkage, BOSS)、迭代变量子集优化法(iteratively variable subset optimization, IVSO)和竞争性自适应加权抽样法(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)等变量算法对抹茶光谱数据进行筛选,并建立抹茶品质指标的偏最小二乘(partial least square, PLS)预测模型。

BOSS-PLS<sup>[18]</sup>模型是一种基于大型回归系数评估每个变量重要性的算法。算法流程包括自助采样(bootstrap sampling, BSS)生成  $K$  个变量子集,每个子集中变量数为原始变量数的 0.632 倍,且所有变量权重相同。构建每个子集的 PLS 模型,计算  $K$  个子集的交叉验证均方根误差(root mean square error of cross-validation, RMSECV),并选择最低 RMSECV 的模型。获取每个模型的回归系数的绝对值,进行归一化处理,将归一化的回归向量相加,得到新的变量权重。应用加权自助采样(weighted bootstrap sampling, WBS)生成新的子集,并构建 PLS 模型。重复上述步骤,直到新子集中的变量数减至 1。选择在迭代过程中具有最低 RMSECV 的子集作为最优变量集。

IVSO<sup>[19]</sup>算法采用加权二元矩阵抽样法以竞争性的方式消除变量,使用序贯加法在有效变量矩阵上来生成多个子集。通过计算每个子集的回归系数,选择权重值较大的光谱变量,剔除权重值小的光谱变量。最终选择具有最小 RMSECV 值的变量子集作为最佳变量子集,将优选出的变量用于 PLS 建模<sup>[20]</sup>。

CARS<sup>[21]</sup>算法基于达尔文进化论中“适者生存”理论,优化特征波长,建立高性能的校正模型。使用蒙特卡罗抽样方法从校准集中以固定比率(通常为校准集的 80%~90%)随机选择样本,并利用波长变量的回归系数绝对值作为每个变量的重要指标。采用指数递减函数去除回归系数绝对值较低的波长变量,并使用自适应加权采样选择重要变量。通过交互验证确定 RMSECV 最低的子集,将选出的变量用于 PLS 建模<sup>[22-23]</sup>。

### 1.4.3 模型评价参数

用 Matlab 2014b 进行数据处理,以校正集相关系数(correlation coefficients of calibration,  $R_c$ )、预测集相关系数(correlation coefficients of prediction,  $R_p$ )、校正均方根误差(root mean square error of calibration, RMSEC)和预测均方根误差(root mean square error of prediction, RMSEP)作为模型评价指标<sup>[24]</sup>。

## 2 结果与分析

### 2.1 抹茶品质指标真实值

为了建立稳健的模型,需要校正集和预测集划分在合理的样本范围内。所有 115 个样本的品质指标从小到大排序,并按照 3:2 的比例划分为校正和预测集。因此,每 5 个样本中的第 1 个、第 3 个和第 5 个样本构成校正集(69 个样本),每 5 个样本中的第 2 个和第 4 个样本构成预测集(46 个样本)。表 1 总结了抹茶中每种品质指标的真实值。从表 1 中可以看出,预测集的每个实测结果范围都被包含在校正集的范围,校正集和预测集的标准差之间没有显著性差异。

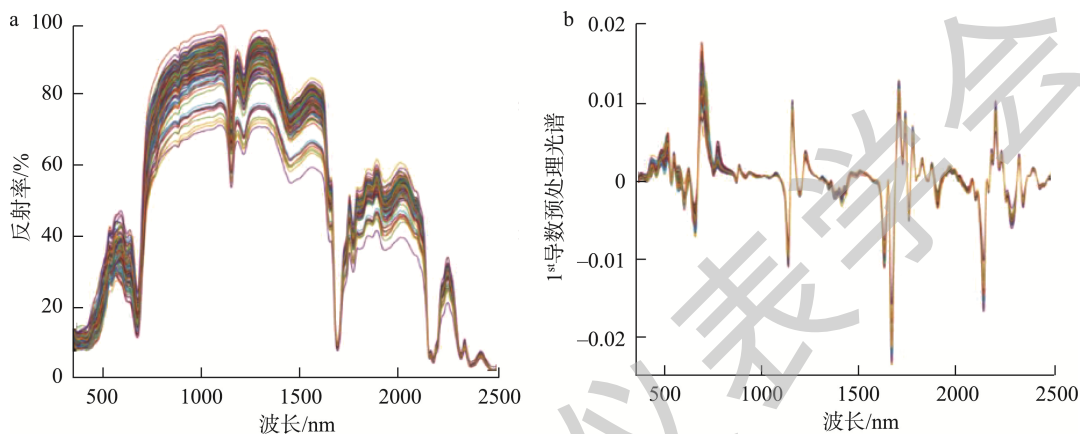
表 1 校正集和预测集中抹茶品质指标的真实值  
Table 1 Actual values of quality indicators in matcha in calibration and prediction sets

参数	子集	单位	样本数	范围	均值	标准差
茶多酚	校正集	%	69	8.45~21.11	13.05	2.25
	预测集	%	46	8.49~18.62	13.01	2.15
游离氨基酸	校正集	%	69	1.53~4.92	2.79	0.75
	预测集	%	46	1.56~4.55	2.78	0.74
酚氨比	校正集	-	69	2.26~7.94	4.87	1.41
	预测集	-	46	2.27~7.93	4.87	1.42
咖啡碱	校正集	%	69	0.77~3.92	2.36	0.64
	预测集	%	46	1.06~3.76	2.36	0.63
可溶性多糖	校正集	%	69	3.56~11.76	5.97	1.52
	预测集	%	46	3.87~9.36	5.93	1.40

注:酚氨比是茶多酚和游离氨基酸含量的比值,-表示无单位。

## 2.2 抹茶的可见近红外光谱特性

抹茶样本的 Vis-NIR 如图 1 所示, 抹茶样本在 350~2500 nm 范围内均有明显的吸收峰, 样本中存在的成分含量决定 Vis-NIR 的反射率<sup>[25]</sup>, 而不同抹茶中成分含量不同, 所以产生不一致的光谱图。表明扫描的近红外光谱可以用于抹茶品质指标含量的定量分析。如图 1a 原始光谱图看出样品具有基线漂移, 这可能会导致测量数据与真实值存在一定的差异<sup>[26]</sup>。为消除基线漂移, 对采集到的光谱数据进行 1<sup>st</sup> 导数预处理(图 1b)。



注: a: 抹茶样品的原始光谱; b: 抹茶样本的 1<sup>st</sup> 导数预处理光谱。

图 1 抹茶样本的 Vis-NIR 光谱

Fig.1 Vis-NIR spectra of matcha

表 2 1<sup>st</sup> 导数预处理后的不同模型预测抹茶品质指标的结果

Table 2 Results of different models for predicting quality indicators in matcha after 1<sup>st</sup> derivative preprocessed

参数	模型	变量数	主成分数	校正集		预测集	
				$R_c$	RMSEC	$R_p$	RMSEP
茶多酚	PLS	2151	6	0.8422	1.200	0.7640	1.370
	BOSS-PLS	24	10	0.9492	0.702	0.8523	1.230
	IVSO-PLS	526	7	0.9273	0.835	0.8937	1.010
	CARS-PLS	81	10	0.9486	0.706	0.9227	0.867
游离氨基酸	PLS	2151	6	0.8959	0.331	0.8728	0.373
	BOSS-PLS	11	4	0.8979	0.328	0.8729	0.369
	IVSO-PLS	1736	5	0.8905	0.339	0.8633	0.383
	CARS-PLS	53	4	0.8926	0.336	0.8906	0.337
酚氨比	PLS	2151	4	0.9122	0.575	0.9114	0.590
	BOSS-PLS	15	5	0.9375	0.488	0.8966	0.650
	IVSO-PLS	303	4	0.9321	0.508	0.9218	0.570
	CARS-PLS	94	4	0.9260	0.530	0.9243	0.557
咖啡碱	PLS	2151	9	0.9323	0.229	0.8907	0.297
	BOSS-PLS	25	9	0.9490	0.199	0.9025	0.272
	IVSO-PLS	302	4	0.9084	0.264	0.9044	0.265
	CARS-PLS	53	6	0.9387	0.218	0.9381	0.216
可溶性多糖	PLS	2151	6	0.8635	0.759	0.7749	0.909
	BOSS-PLS	11	10	0.9449	0.493	0.8434	0.769
	IVSO-PLS	114	8	0.9681	0.378	0.8842	0.678
	CARS-PLS	53	10	0.9682	0.376	0.9522	0.440

BOSS-PLS 模型的茶多酚、游离氨基酸、酚氨比、咖啡因和可溶性多糖含量的最佳预测结果如表 2 所示。茶多酚 BOSS-PLS 最佳预测效果的  $R_c=0.9492$ ,  $R_p=0.8523$ 。游离氨基酸的最佳 BOSS-PLS 模型所对应的  $R_c=0.8979$ ,  $R_p=0.8729$ 。酚氨比的最佳 BOSS-PLS 模型的  $R_c=0.9375$ ,  $R_p=0.8966$ 。咖啡碱最佳 BOSS-PLS 模型校正集的  $R_c=0.9490$ ,  $RMSEC=0.199$ ; 预测集的  $R_p=0.9025$ ,  $RMSEP=0.272$ 。最后可溶性多糖的 BOSS-PLS 建模所得预测性能最佳的  $R_c=0.9449$ ,  $RMSEC=0.493$ ,  $R_p=0.8434$  和  $RMSEP=0.769$ 。

表 2 总结了茶多酚、游离氨基酸、酚氨比、咖啡因和可溶性多糖的 IVSO-PLS 模型的预测结果。预测茶多酚的最佳 IVSO-PLS 模型,  $R_c=0.9273$  和  $R_p=0.8937$ 。游离氨基酸的最佳 IVSO-PLS 预测模型,  $R_c=0.8905$  和  $R_p=0.8633$ 。酚氨比的最佳 IVSO-PLS 预测模型,  $R_c=0.9321$  和  $R_p=0.9218$ 。咖啡碱的最佳 IVSO-PLS 预测模型,  $R_c=0.9084$  和  $R_p=0.9044$ 。最后, 可溶性多糖的最佳 IVSO-PLS 预测模型,  $R_c=0.9681$  和  $R_p=0.8842$ 。

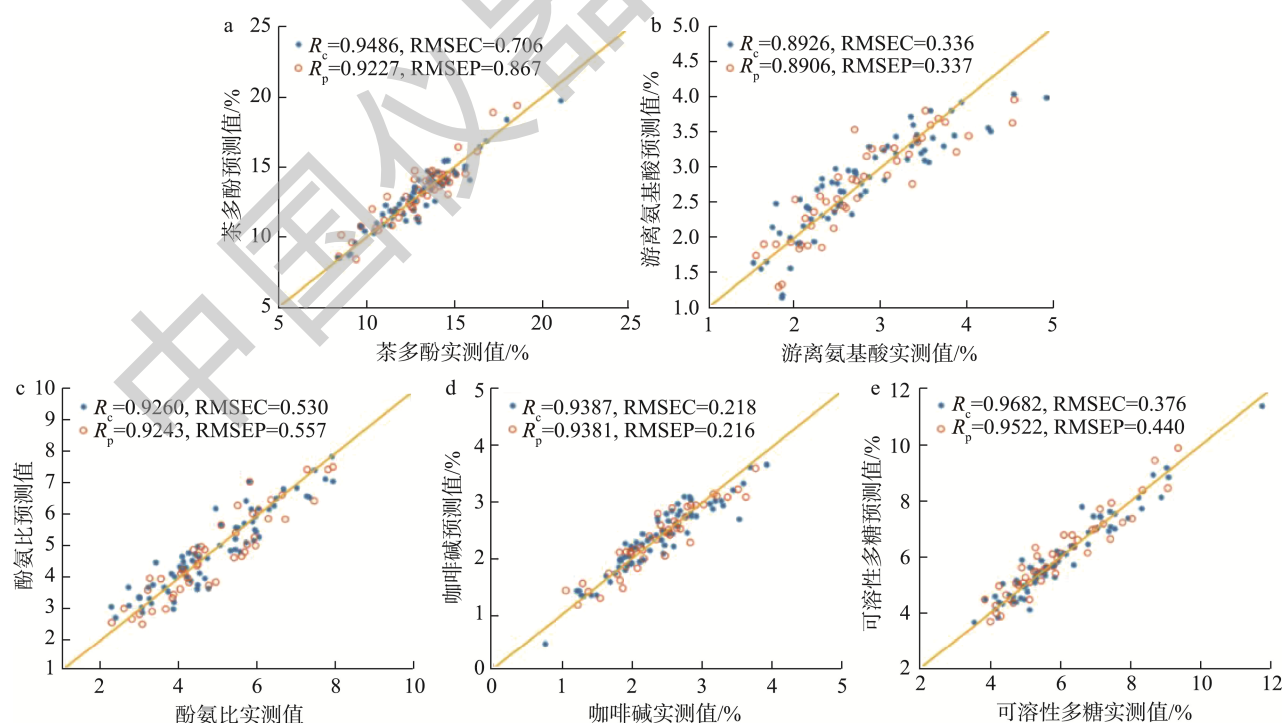
如图 2a 所示, 茶多酚的最佳 CARS-PLS 模型的校正集  $R_c=0.9486$ ,  $RMSEC=0.706$ ; 预测集  $R_p=0.9227$ ,  $RMSEC=0.867$ 。如图 2b 所示, 游离氨基酸最佳预测模型,  $R_c=0.8926$  和  $R_p=0.8906$ 。图 2c 为酚氨比的最优 CARS-PLS 模型预测散点图,  $R_c=0.9260$ ,  $RMSEC=0.530$ ,  $R_p=0.9243$  和  $RMSEP=0.557$ 。如图 2d 所示, 咖啡碱的最佳 CARS-PLS

预测模型的校正集  $R_c=0.9387$  和预测集  $R_p=0.9381$ 。最后, 如图 2e 所示, CARS-PLS 预测可溶性多糖的最佳模型中校正集  $R_c=0.9682$ ,  $RMSEC=0.376$ ;  $R_p=0.9522$ ,  $RMSEP=0.440$ 。

## 2.4 特征波长筛选

如图 3 所示, 茶多酚、游离氨基酸、酚氨比、咖啡碱以及可溶性多糖通过 CARS-PLS 筛选了 81、53、94、53 和 53 个特征变量, 占总变量的 3.8% (81/2151)、2.4% (53/2151)、4.4% (94/2151)、2.4% (53/2151) 和 2.4% (53/2151), 极大地简化了模型。茶多酚相关的波长在 526 nm、546 nm, 是与氮元素有关<sup>[27]</sup>; 1121 nm 吸收带与茶多酚与氨基酸 C-H 的二级倍频吸收有关; 同时, 1353、1354、1355、1356、1642、1643、1644、1645、1646、1647、1648 nm 为茶多酚的特征波长, 这对应于  $CH_3$  的第二倍频和  $ArCH$  的第一倍频; 在 1930 nm 附近的相关波长是与 O-H 键的转变有关; 2255~2285 nm 吸收带与 CH 的拉伸和变形的组合振动有关<sup>[15]</sup>, 1440~1462 nm 吸收带与 OH、CH 和 NH 的振动有关, 1663、1808 和 1808 nm 的信号归因于 CH、C=O 和 OH 的振动<sup>[28]</sup>。

游离氨基酸相关的波长在 351~382 nm, 对应 R 吸收带的  $n-\pi^*$  的电子跃迁; 在 535~547 nm, 与绿色吸收有关; 751、752、753、754 nm, 对应  $CH_3$  和  $CH_2$  的第三倍频; 在 1614~1621 nm, 对应  $Ar-CH$  的第一倍频<sup>[16]</sup>; 1424、1425、1426 nm 的吸收带与 C-H 键拉伸和 O-H 键弯曲有关<sup>[27]</sup>; 2222~2274 nm 与  $CH_3$  之间的组合振动有关。



注: a: 茶多酚; b: 游离氨基酸; c: 酚氨比; d: 咖啡碱; e: 可溶性糖。

图 2 抹茶品质指标 CARS-PLS 模型的真实值与预测值散点图

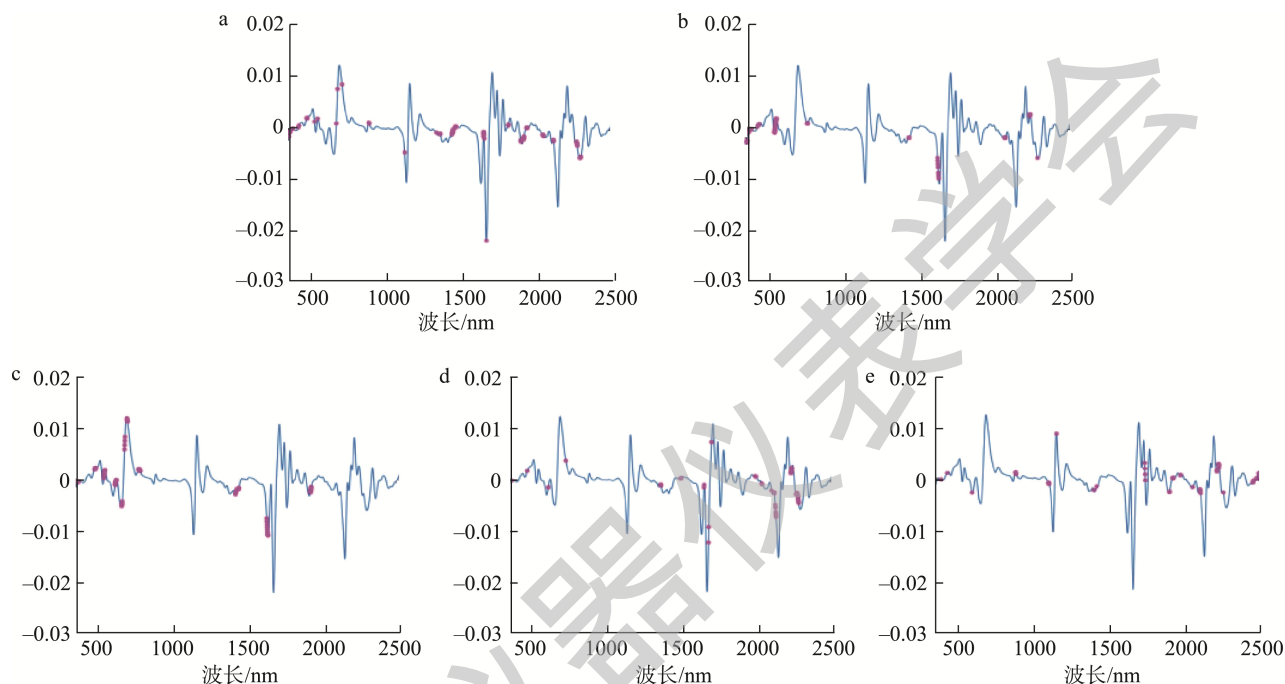
Fig.2 Scatterplots of the true value and predicted value of the CARS-PLS model of matcha quality indicators

酚氨比变化相关的波长在 1433 nm 对应  $\text{CH}_2$  的第二倍频区域<sup>[16]</sup>; 在 1408~1424 nm 与水的强吸收带有关<sup>[29]</sup>; C-C 的三级倍频在 1425 nm 附近<sup>[30]</sup>。

可溶性多糖相关的波长在 1105、1740 nm 附近, 对应于  $\text{CH}_3$  的第二倍频和  $\text{CH}_2$  的第一倍频区域; 1925、1926、1927、1928 nm 附近的吸收带是由 OH 伸缩模式同相振动和结构排列的水分子产生的; 2103~2108 nm 的吸收带与 NH 弯曲和 C=O 拉伸的组合振动有关<sup>[25]</sup>; 1420 nm、1421 nm

对应游离的 O-H 基一级倍频。

咖啡碱相关的波长在 1981、1982、1984 nm 对应于 C=O 键伸缩振动的二级倍频区<sup>[31]</sup>; 在 1642、1643、2250 nm 对应于  $\text{CH}_3$  的不对称拉伸振动的第一个泛音和  $\text{CH}_2$  拉伸、变形的组合振动<sup>[32]</sup>; 在 1672、1674、1692 nm 附近的吸收带与 CH、C=O 和 OH 的振动有关<sup>[28]</sup>; 1487、1490、1491 nm 对应游离的 O-H 基一级倍频<sup>[30]</sup>。结果表明, 抹茶品质指标与二级倍频、一级倍频的近红外有较强相关性。



注: a: 茶多酚; b: 游离氨基酸; c: 酚氨比; d: 咖啡碱; e: 可溶性糖。

图 3 抹茶品质指标的 CARS-PLS 的特征变量

Fig.3 Characteristic variables of CARS-PLS for matcha quality indicators

### 3 结论

利用 Vis-NIR 全光谱结合化学计量学构建抹茶品质指标的预测模型, 并解析了特征波长与不同品质指标之间的关系。研究表明, CARS-PLS 具有最好的预测性能, 模型的  $R_p$  均大于 0.89, 且具有最小的 RMSEP。因此, 该方法可以实现抹茶多种品质指标含量的快速无损检测。Vis-NIR 光谱检测系统光谱范围为 350~2500 nm, 综合了可见光、短波近红外和长波近红外的优势, 可以提供全面的信息, 为选择合适的光谱波段仪器提供了参考。研究成果为抹茶品质指标快速无损高效检测提供理论依据和技术支撑。本研究抹茶样品覆盖范围广, 尽可能包含了市场上的产品, 研究结果显示, 该方法预测抹茶品质指标的  $R_p$  达到 0.9 以上, 充分表明了该方法的可行性。然而, 即使是统一企业, 不同批次的产品也是存在差异, 研究

还需要不断更新模型数据库, 提高模型的泛化能力和稳定性, 适应市场产品的品质快速检测。

### 参考文献

- [1] OUYANG Q, RONG Y, WU J, *et al.* Application of colorimetric sensor array combined with visible near-infrared spectroscopy for the matcha classification [J]. Food Chem, 2023. <http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.136078>
- [2] 袁丽萍, 雷震东, 王欢欢, 等. 基于多元统计分析的抹茶适制品种综合评价[J/OL]. 食品科学: 1-11. [2024-01-02]. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2206.TS.20230310.1150.016.html>
- YUAN LP, LEI ZD, WANG HH, *et al.* Comprehensive evaluation of tea cultivars suitable for matcha based on multivariate statistical analysis [J/OL]. Food Sci: 1-11. [2024-01-02]. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2206.TS.20230310.1150.016.html>

- [3] 毛雅琳, 汪芳, 吕品, 等. 不同粉碎方式对抹茶品质的影响[J]. 中国茶叶, 2022, 44(11): 8-17.  
MAO YL, WANG F, LV P, *et al.* Effect of different grinding methods on the quality value of matcha [J]. *China Tea*, 2022, 44(11): 8-17.
- [4] 毛雅琳, 汪芳, 尹军峰, 等. 不同茶树品种碾茶的品质分析[J]. 茶叶科学, 2020, 40(6): 782-794.  
MAO YL, WANG F, YIN JF, *et al.* Quality analysis of tencha made from different tea cultivars [J]. *J Tea Sci*, 2020, 40(6): 782-794.
- [5] 王镇, 尹福生. 不同覆盖方式对抹茶品质的影响[J]. 中国茶叶, 2017, 39(11): 28-29.  
WANG Z, YIN FS. The impact of different covering methods on the quality of matcha [J]. *China Tea*, 2017, 39(11): 28-29.
- [6] 王晶晶, 孔亚帅, 翟晴晴, 等. 不同施肥处理遮荫数北种茶树主要品质化学成分分析[J]. 农业与技术, 2023, 43(4): 64-67.  
WANG JJ, KONG YS, ZHAI QQ, *et al.* Analysis of the main quality chemical components of shaded and non-shaded tea leaves under different fertilization treatments [J]. *Agric Technol*, 2023, 43(4): 64-67.
- [7] 薛长风, 裴志胜, 文攀. 基于电子舌的茶叶滋味与特征成分相关性分析[J]. 食品科技, 2018, 43(7): 316-321.  
XUE CF, PEI ZS, WEN P. Analysis of flavor and characteristic component correlation of tea based on electronic tongue [J]. *Food Sci Technol*, 2018, 43(7): 316-321.
- [8] ZHANG HH, LI YL, LV YJ, *et al.* Influence of brewing conditions on taste components in Fuding white tea infusions [J]. *J Sci Food Agric*, 2017, 97(9): 2826-2833.
- [9] WU JZ, OUYANG Q, PARK B, *et al.* Physicochemical indicators coupled with multivariate analysis for comprehensive evaluation of matcha sensory quality [J]. *Food Chem*, 2022, 371: 131100.
- [10] HORIE H, NESUMI A, UJIHARA T, *et al.* Rapid determination of caffeine in tea leaves [J]. *J Chromatogr A*, 2002, 942(1-2): 271-273.
- [11] ZHANG XL, JIA WB, TANG XR, *et al.* Geographical discrimination of Pu-erh tea by the determination of elements by low-power total reflection X-ray fluorescence (TXRF) and caffeine and polyphenols by spectrophotometer [J]. *Anal Lett*, 2023, 56(4): 556-575.
- [12] 王忠合, 李晓婷, 胡文梅, 等. 超高压液相色谱-高分辨质谱法检测单丛乌龙茶中氨基酸[J]. 食品与发酵工业, 2020, 46(21): 207-214.  
WANG ZH, LI XT, HU WM, *et al.* Determination of amino acids in Oolong tea by ultra-high pressure liquid chromatography coupled with high resolution mass spectrometry [J]. *Food Ferment Technol*, 2020, 46(21): 207-214.
- [13] OUYANG Q, LIU L, WANG L, *et al.* Rapid determination of free amino acids and caffeine in matcha using near-infrared spectroscopy: A comparison of portable and benchtop systems [J]. *J Food Compos Anal*, 2023, 115: 104868.
- [14] WANG JJ, ZAREEF M, HE PH, *et al.* Evaluation of matcha tea quality index using portable NIR spectroscopy coupled with chemometric algorithms [J]. *J Sci Food Agric*, 2019, 99(11): 5019-5027.
- [15] GUO Z, BARIMAH AO, YIN L, *et al.* Intelligent evaluation of taste constituents and polyphenols-to-amino acids ratio in matcha tea powder using near infrared spectroscopy [J]. *Food Chem*, 2021, 353: 129372.
- [16] OUYANG Q, WANG L, PARK B, *et al.* Simultaneous quantification of chemical constituents in matcha with visible-near infrared hyperspectral imaging technology [J]. *Food Chem*, 2021, 350: 129141.
- [17] 丁雪梅, 张晓君, 赵云, 等. 蒽酮比色法测定可溶性糖含量的试验方法改进[J]. 黑龙江畜牧兽医, 2014, (23): 230-233.  
DING XM, ZHANG XJ, ZHAO Y, *et al.* Improved test method for determination of soluble sugar content by anthrone colorimetric method [J]. *Heilongjiang Anim Sci Vet Med*, 2014, (23): 230-233.
- [18] DENG BC, YUN YH, CAO DS, *et al.* A bootstrapping soft shrinkage approach for variable selection in chemical modeling [J]. *Anal Chim Acta*, 2016, 908: 63-74.
- [19] WANG WT, YUN YH, DENG BC, *et al.* Iteratively variable subset optimization for multivariate calibration [J]. *RSC Adv*, 2015, 5(116): 95771-95780.
- [20] LI J, DENG JH, BAI X, *et al.* Quantitative analysis of aflatoxin B<sub>1</sub> of peanut by optimized support vector machine models based on near-infrared spectral features [J]. *Spectrochim Acta A*, 2023, 303: 123208.
- [21] LI H, LIANG Y, XU Q, *et al.* Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration [J]. *Anal Chim Acta*, 2009, 648(1): 77-84.
- [22] YUAN LM, MAO F, HUANG G, *et al.* Models fused with successive CARS-PLS for measurement of the soluble solids content of Chinese bayberry by Vis-NIRS technology [J]. *Postharvest Biol Technol*, 2020, 169: 111308.
- [23] WANG LS, WANG RJ. Determination of soil pH from Vis-NIR spectroscopy by extreme learning machine and variable selection: A case study in lime concretion black soil [J]. *Spectrochim Acta A*, 2022, 283: 121707.
- [24] ZHOU X, JUN S, YAN T, *et al.* Hyperspectral technique combined with deep learning algorithm for detection of compound heavy metals in lettuce [J]. *Food Chem*, 2020, 321: 126503.
- [25] 白天, 张丽华, 李顺峰, 等. 基于近红外光谱的冻融猪肉糜鉴别模型研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(20): 56-63.  
BAI T, ZHANG LH, LI SF, *et al.* Study on discrimination model of frozen-thawed minced pork based on near infrared spectroscopy [J]. *J Food Saf Qual*, 2023, 14(20): 56-63.
- [26] 唐逸芸, 吕慧英, 王微娜, 等. 基于光谱融合的茶油真伪快速鉴别研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(20): 33-45.  
TANG YY, LV HY, WANG WN, *et al.* Rapid identification of *Camellia* oil authenticity based on spectral fusion [J]. *J Food Saf Qual*, 2023, 14(20): 33-45.
- [27] 余涛, 胡波, 孙睿. 茶叶光谱与叶绿素、茶氨酸、茶多酚含量关系分析[J].

- 遥感技术与应用, 2016, 31(5): 872-878.
- YU T, HU B, SUN R. Relationship between tea spectra and contents of chlorophyll, theanine and polyphenols [J]. *Remote Sens Technol Appl*, 2016, 31(5): 872-878.
- [28] SANAEIFAR A, HUANG XY, CHEN MY, *et al.* Nondestructive monitoring of polyphenols and caffeine during green tea processing using Vis-NIR spectroscopy [J]. *Food Sci Nutr*, 2020, 8(11): 5860-5874.
- [29] 黄俊仕, 王冬欣, 熊爱华. 基于混合变量选择的绿茶酚氨比近红外光谱检测方法[J]. *江西农业大学学报*, 2020, 42(6): 1270-1276.
- HUANG JS, WANG DX, XIONG AIH. A hybrid variable selection strategy of near infrared spectroscopy for detection the ratio of tea polyphenols to amino acids in green tea infusion [J]. *Acta Agric Univ Jiangxiensis*, 2020, 42(6): 1270-1276.
- [30] 董春旺, 梁高震, 安霆, 等. 红茶感官品质及成分近红外光谱快速检测模型建立[J]. *农业工程学报*, 2018, 34(24): 306-313.
- DONG CW, LIANG GZ, AN T, *et al.* Near-infrared spectroscopy detection model for sensory quality and chemical constituents of black tea [J]. *J Agric Eng*, 2018, 34(24): 306-313.
- [31] 赵静远, 熊智新, 宁井铭. 小波变换结合连续投影算法优化茶叶中咖啡碱的近红外分析模型[J]. *分析科学学报*, 2021, 37(5): 611-617.
- ZHAO JY, XIONG ZX, NING JM. Wavelet transform combined with SPA to optimize the near-infrared analysis model of caffeine in tea [J]. *J Anal Sci*, 2021, 37(5): 611-617.
- [32] QUELAL-VASCONEZ MA, LERMA-GARCIA MJ, PEREZ-ESTEVE E, *et al.* Changes in methylxanthines and flavanols during cocoa powder processing and their quantification by near-infrared spectroscopy [J]. *LWT-Food Sci Technol*, 2020, 117: 108598.

(责任编辑: 张晓寒 郑 丽)

## 作者简介



荣艳娜, 硕士研究生, 主要研究方向为食品质量快速无损检测。  
E-mail: 757677831@qq.com



欧阳琴, 博士, 教授, 主要研究方向为食品质量快速无损检测。  
E-mail: oyqyf@ujjs.edu.cn

中国仪器仪表学会