DOI:10.12441/spyswjs.20221209001 [文章编号] 1673-1689(2025)03-0119-11

基于近红外光谱的红茶滋味评价与拼配策略

林怿箐[1] 周巧仪[2] 李臻锋[1] 宋飞虎[1] 刘 莉[3] 宋春芳[1*] 凌彩金[2]

（1. 江南大学智能制造学院，江苏 无锡 214122；2. 广东省农业科学院茶叶研究所广东省茶树资源创新利用重点实验室，广东 广州 510640；3. 山东碧海机械科技有限公司，山东 临沂 276600）

摘要：【目的】探究一种基于光谱信息的数字化拼配方法，以提高红茶拼配效率并保证成品茶品质的稳定性。**【方法】**以‘英红九号’红茶为研究对象，采用偏最小二乘回归方法，比较不同光谱预处理方法和特征波长筛选算法对预测模型性能的影响，建立红茶中茶多酚质量分数、游离氨基酸质量分数、水浸出物质量及滋味评分的定量预测模型。进一步结合多目标优化算法，将茶叶拼配问题转化为一个兼顾品质和成本的多目标优化数学模型，利用NSGA-II（非支配排序遗传算法II）对拼配方案进行全局寻优，通过人工感官审评验证优化结果。**【结果】**建立的茶多酚质量分数、游离氨基酸质量分数、水浸出物质量及滋味评分预测模型的预测集决定系数分别达到0.890、0.810、0.802和0.863，均优于全波段预测结果。通过数字化拼配策略优化后的最佳拼配方案在人工感官审评结果符合标准样要求的同时，使拼配成本降低了28.5%。**【结论】**通过近红外光谱技术和多目标优化算法实现了从感官审评到茶叶拼配全流程的数字化。近红外光谱可有效反映红茶中主要呈味物质的化学信息和滋味品质，与多目标优化算法相结合可快速形成优势配方，可作为茶叶拼配过程中的有效辅助手段。研究结果对推动茶产业智能化升级有重要的理论价值和现实意义。

关键词：近红外光谱；NSGA-II；红茶；滋味品质；拼配

Taste Evaluation and Blending Strategy of Black Tea Based on Near Infrared Spectroscopy

LIN Yiqing[1] *ZHOU Qiaoyi*[2] *LI Zhenfeng*[1] *SONG Feihu*[1] *LIU Li*[3]
SONG Chunfang[1*] *LING Caijin*[2]

(1. School of Intelligent Manufacturing, Jiangnan University, Wuxi 214122, China; 2. Guangdong Provincial Key Laboratory of Tea Plant Resources Innovation and Utilization, Tea Research institute, Guangdong Academy of Agricultural Sciences, Guangzhou 510640, China; 3. Shandong Bihai Machinery Technology, Co., Ltd., Linyi 276600, China)

Abstract: [**Objective**] The aim of the study is to explore a digital blending method based on spectral information, thereby improving the efficiency of black tea blending and ensuring the stability of the finished tea quality. [**Method**] 'Ying Hong No. 9' black tea was taken as the research subject. Partial least squares regression was employed to compare the effects of different spectral preprocessing methods and feature wavelength selection algorithms on prediction model performance. Quantitative prediction models for the mass fraction of tea polyphenols, the mass fraction of free amino acids, and the mass of water-soluble extractives, as well as the taste scores, were established accordingly. Furthermore, a multi-objective optimization algorithm was employed to

基金项目：以农产品为单元的广东省现代农业产业技术体系创新团队建设项目（茶叶产业技术体系）（2024CXTD11）；广东省驻镇帮镇扶村项目（KTP20240140）。

通信作者：宋春芳（1974—），女，博士，教授，博士研究生导师，主要从事农产品无损检测与控制研究。E-mail：songcf@jiangnan.edu.cn

收稿日期：2022-12-09 **修回日期：**2023-01-25

transform the tea blending process into a mathematical model that balanced both quality and cost considerations. The NSGA-Ⅱ (non-dominated sorting genetic algorithm Ⅱ) was utilized for global optimization of blending recipes, with manual sensory evaluation conducted to validate the results. [**Result**] The prediction models for the mass fraction of tea polyphenols, the mass fraction of free amino acids, and the mass of water-soluble extractives, as well as the taste scores, achieved determination coefficients of 0.890, 0.810, 0.802, and 0.863, respectively, in their predictive sets, all outperforming the full-spectrum prediction results. The optimized blending recipe derived from digital blending strategy optimization not only met sensory evaluation standards but also reduced blending costs by 28.5%. [**Conclusion**] The combination of near-infrared spectroscopy and the multi-objective optimization algorithm enables digitization of the whole process from sensory evaluation to tea blending. Near-infrared spectroscopy effectively captures chemical information related to key flavor compounds and taste quality of black tea. The multi-objective optimization algorithm, together with near-infrared spectroscopy, enables rapid development of optimal recipes, serving as an effective auxiliary method in the tea blending process. The findings hold significant theoretical and practical value in advancing intelligent upgrading in the tea industry.

Keywords: near-infrared spectroscopy; NSGA-II; black tea; taste quality; blending

拼配是红茶精制过程中的关键技术，在拼配过程中需要综合考虑不同茶叶原料的品质特点、加工工艺等因素，并参照当年对标准样的品质要求，秉承“取长补短、高低平衡”的原则将各原料按一定比例混合，最终形成与标准样品质相当的成品茶[1]。目前，红茶的拼配仍然是一门专业性很强的技艺，通常由经验丰富的评茶专家通过感官审评确定各原料的感官特性，再结合过往拼配经验试配小样，辅以调剂，才能确定最终的拼配方案[2]。面对种类、数量庞大且品质、产量、价格各异的茶叶原料，人工拼配往往意味着大量的人力、物力和时间成本，茶叶的经济价值也难以得到充分发挥。如何在保证成品茶品质稳定的同时，提高生产效率，并将茶叶原料的经济效益最大化，是当前茶叶生产加工中亟待解决的问题。

目前关于茶叶数字化拼配的研究较少。Fomeni等[3]针对茶叶拼配中成本与品质的权衡问题，探讨了利用多目标优化方法实现茶叶数字化拼配的可行性。于杰等[4]以最小化企业投入成本为目标，综合考虑各原料的成本、产地、库存等因素，通过线性规划方法实现抹茶拼配比例的自动求解。然而，在上述研究中，原料茶的品质信息仍然需要通过人工感官审评的方式获取，拼配效率的提升幅度较为有限。对于先进检测技术在茶叶拼配中的应用，宁井铭、宋彦等[5-6]先后利用高光谱成像、近红外光谱技术采集拼配后茶样的检测数据，基于机器学习方法实现了工夫红茶、炒青绿茶的拼配比例预测，由于该方法以预先设定好的拼配方案作为预测样本，模型的预测性能在很大程度上受限于样本规模和拼配比例的设置，且过程中未涉及生产成本的考量。

近红外光谱检测技术具有快速、无损的优势，近年来，此技术的相关应用研究已经渗透到茶叶的质量控制、生产加工等各个领域，如：茶叶品种[7-9]、等级[10-12]、年份[13]、产地[14-16]的快速判别，掺假检测[17]，萎凋[18]、发酵[19-21]等加工过程中的品质监控，茶叶感官品质属性的智能化评价[22-23]以及品质相关化学成分的含量预测[24-25]。在人工拼配过程中，评茶专家的感官审评结果是形成拼配方案的重要依据。因此，在满足预测精度的条件下，基于近红外光谱的茶叶感官品质评价模型预测结果同样可以作为茶叶数字化拼配的参考依据。然而，鲜有研究将茶叶品质的智能化评价结果进一步应用到茶叶拼配中。

‘英红九号’是从云南大叶种中选育出的无性系茶树品种，具有优质、高产的特点。目前，市售的‘英红九号’商品茶主要通过拼配得到。近年来，‘英红九号’的茶叶种植面积和产量不断扩大，为了稳定商品茶的品质和控制生产成本，在拼配过程中需要综合考虑茶叶原料的批次、季节、价格等因素。作者以‘英红九号’红茶为研究对象，将近红外光谱定量分析技术与多目标优化算法结合，提出了一种基于近红外光谱的红茶滋味品质评价与数字化拼配策略。首先，根据不同品质红

茶的近红外光谱数据，采用偏最小二乘回归（partial least squares regression，PLSR）方法建立红茶中主要呈味物质（茶多酚、游离氨基酸、水浸出物）和滋味评分的定量预测模型。然后，选取4种具有代表性的红茶作为拼配原料茶，将各原料茶的滋味评分预测结果转化为评价因子，以最小化拼配成本以及拼配样与标准样的滋味品质偏差为目标，通过NSGA-II（非支配排序遗传算法II）对各原料茶的拼配比例进行全局寻优，基于近红外光谱技术实现了从感官审评到拼配全过程的数字化，快速形成兼顾成本和品质的优势拼配方案。

1 材料与方法

1.1 试验材料

以广东省英德市的11种‘英红九号’红茶为试验材料，每种红茶制作20份重复样品，所有红茶样品由当地企业提供，涵盖了不同的采摘季节、生产批次和市场价格。红茶感官审评小组由来自中国广东省农业科学院茶叶研究所的3名专业评茶员组成，根据GB/T 23776—2018从外形、汤色、香气、滋味和叶底依照百分制进行打分和评价，取平均分作为最终审评结果。由于近红外光谱反映了红茶中呈味物质的化学信息，因此，主要利用红茶的滋味属性评价结果进行后续的预测建模和拼配优化，‘英红九号’的滋味品质主要根据茶汤的醇厚、鲜爽以及苦涩这3个方面进行综合评价。

1.2 仪器与设备

紫外分光光度计：T6型，北京普析通用仪器有限责任公司；近红外光谱仪：NIR2500色散型，上海复享光学股份有限公司。

1.3 方法

将所有样品磨粉过筛，参照GB/T 8313—2018、GB/T 8314—2013、GB/T 8305—2013，采用紫外分光光度计测定红茶中的茶多酚、游离氨基酸质量分数以及水浸出物质量。

1.3.1 近红外光谱采集

近红外光谱仪于室温24 ℃预热0.5 h后，使用漫反射模式采集红茶样品的光谱数据，每条光谱曲线连续扫描32次，每份样品重复采集3条光谱曲线，取平均值作为当前样品的原始光谱数据。光谱仪的扫描范围为900~2 500 nm，积分时间设为100 ms。

1.3.2 红茶滋味品质指标预测建模

将220份红茶样品用Kennard-Stone（K-S）法按3∶1划分到校正集和预测集。最终，校正集样品165个，预测集样品55个。以近红外光谱数据作为模型输入，茶多酚质量分数、游离氨基酸质量分数、水浸出物质量、滋味评分作为‘英红九号’红茶的滋味品质指标，通过偏最小二乘回归方法分别建立茶多酚质量分数、游离氨基酸质量分数、水浸出物质量、滋味评分的定量预测模型。光谱数据处理主要涉及Savitzky-Golay（S-G）平滑、标准变量变换（standard normal variate，SNV）、多元散射校正（multiple scatter correction，MSC）、一阶导数（FD）、二阶导数（SD）这5种光谱预处理方法和竞争自适应重加权采样（competitive adapative reweighted sampling，CARS）、连续投影算法（successive projections algorithm，SPA）、随机蛙跳算法（shuffled frog leaping algorithm，SFLA）、遗传算法（genetic algorithm，GA）这4种特征波长筛选方法。10折交叉验证下的均方根误差（root mean square error of 10-cross-validation，RMSECV）、交叉验证的决定系数（determination coefficient of cross-validation，R_{CV}）、预测集均方根误差（root mean square error of prediction，RMSEP）和预测集的决定系数（determination coefficient of prediction，R_P）用于确定各滋味品质指标预测模型的最佳潜变量数、最佳光谱预处理方法以及最佳特征波长筛选算法。其中，R_{CV}和R_P越大，RMSECV和RMSEP越小，表明模型预测性能越好。

1.3.3 数字化拼配模型构建

茶叶拼配旨在寻求品质和成本之间的平衡点，即在保证拼配样品质符合标准样要求的同时，充分利用不同品质、等级的茶叶原料感官特性进行拼配，达到降低拼配成本的目的。NSGA-II[26]在进化多目标优化领域得到了广泛应用，该算法对经典的遗传算法进行改进，引入精英策略，通过快速非支配排序方法和个体间的拥挤距离计算，根据适应度函数对种群中的优势个体进行快速筛选。课题组在建立滋味评分预测模型的基础上，通过PlatEMO平台[27]下的NSGA-II将茶叶拼配问题转化为兼顾品质和成本的多目标优化问题。首先，假设共有n种茶叶原料参与拼配，根据标准样的感官审评得分确定拼配样的目标评分。以n种

拼配原料的近红外光谱数据作为输入，通过滋味评分预测PLSR模型得到第i种拼配原料的滋味预测评分，记为S_i。为了量化各原料间的滋味品质差异，通过z-score标准化处理将滋味评分数据转化为滋味评价因子s_i，滋味评价因子的计算方法见式（1）。

$$s_i=\frac{S_i-\bar{S}}{\sigma_S} \tag{1}$$

式中：

s_i——滋味评价因子；

S_i——滋味预测评分；

$\bar{S}$——参与拼配的茶叶原料滋味评分平均值；

σ_S——参与拼配的茶叶原料滋味评分标准差。

传统的拼配过程是由专业的拼配师参照当年标准样的品质要求进行拼配。为了实现拼配过程的数学化，需要对标准样的品质要求进行适当的简化，即通过拼配目标评分S_t来近似反映标准样的品质要求。课题组以4种拼配原料的拼配过程为例，并将滋味目标评分设置为90分，在实际应用中可由用户参照当年标准样的品质要求进行设置。结合各拼配原料的市场价格，以最小化拼配样的拼配成本、拼配样与标准样的滋味评分偏差为优化目标，分别构建品质偏差目标函数Q和拼配成本目标函数P，见式（2）。

$$\min\begin{cases}Q=\left|\sum_{i=1}^{n}s_i\cdot x_i-S_t\right|\\P=\sum_{i=1}^{n}c_i\cdot x_i\end{cases} \tag{2}$$

式中：

Q——品质偏差目标函数；

P——拼配成本目标函数；

n——拼配原料的种类总数；

s_i——滋味评价因子；

x_i——第i种拼配原料的拼配比例，%；

S_t——z-score标准化处理后的目标评分；

c_i——第i种拼配原料的市场售价。

茶叶拼配的配方设计要求所有原料茶的拼配比例之和为100%，且拼配比例的精度为1%。考虑到用户的主观偏好和实际拼配要求，需要对拼配过程中的各个关键参数设置约束条件，见式（3）。

$$\begin{cases}\sum_{i=1}^{n}x_i=100\%\\Q\leqslant\delta\\a_i\leqslant x_i\leqslant b_i\end{cases} \tag{3}$$

式中：

n——拼配原料的种类总数；

Q——品质偏差目标函数；

δ——滋味品质偏差阈值；

x_i——第i种拼配原料的拼配比例，%；

a_i——第i种拼配原料的拼配比例下限，根据用户主观偏好设置；

b_i——第i种拼配原料的拼配比例上限，根据用户主观偏好设置。

超体积（hypervolume，HV）常用于评估多目标优化下的解集与真实Pareto前沿解集的接近程度。HV值越大，表明多目标优化模型的寻优结果越好，根据HV值在迭代过程中的变化可判断模型的收敛情况。

涉及的所有数据处理与建模方法通过MATLAB 2021b（美国MathWorks公司）实现。

2 结果与讨论

2.1 感官审评结果

对3名红茶评茶员的评价结果进行Pearson相关性分析，通过组内相关系数（intraclass correlation coefficient，ICC）检验3名评茶员评价结果的一致性。一般认为，ICC值为0.81~1.00表示评价一致性极好，0.61~0.80表示评价一致性较好，0.41~0.60表示评价一致性尚可[28]。相关性分析结果见表1，3名评茶员的ICC值均为0.810~1.000，并且在双尾检验的0.01水平显著相关，表明3名评茶员的评价结果一致性极好。

表1 3名评茶员评价结果的一致性分析

Table 1 Consistency analysis of the evaluation results from three tea tasters

	评茶员1	评茶员2	评茶员3
评茶员1	1.000**		
评茶员2	0.866**	1.000**	
评茶员3	0.822**	0.970***	1.000**

注：**表示在0.01级别（双尾）相关性显著；***表示在0.001级别（双尾）相关性极显著。

2.2 滋味品质指标的光谱预处理方法优选

校正集和预测集中的滋味品质指标分布情况见表2，各滋味品质指标的校正集和预测集的范围十分接近，在数据集中分布情况高度相似，满足预测建模条件。

表2 校正集和预测集的滋味品质指标分布

Table 2 Distribution of taste quality indicators in the calibration and prediction sets

品质指标	数据集	范围/%	均值/%	标准偏差
茶多酚	校正集	13.42~21.00	16.39	1.970
	预测集	13.43~21.00	15.80	2.056
游离氨基酸	校正集	2.03~3.90	2.84	0.468
	预测集	2.02~3.78	2.79	0.491
水浸出物	校正集	31.68~39.85	34.89	2.221
	预测集	31.97~39.55	34.66	2.043
滋味评分	校正集	80.00~93.00	86.68	3.293
	预测集	80.33~92.67	87.47	3.589

图1(a)为220份红茶样品的近红外原始光谱，波长范围为1 100~2 400 nm。不同品质的红茶样品在1 195、1 470、1 720、1 940、2 150、2 325 nm附近均存在明显的吸收峰。由于光谱采集过程中环境和人为因素干扰，原始光谱曲线上存在许多噪点，可通过S-G平滑方法消除，见图1(b)。为了进一步确定近红外光谱数据对各滋味品质指标的最佳预处理方法，采用SNV、MSC、FD、SD对光谱数据进行预处理，预处理后的光谱曲线见图1(c)~(f)。在此基础上，以各个滋味品质指标为预测输出分别建立PLSR预测模型，通过比较各个模型在预测集上的R_P^2和RMSEP，对预处理方法进行优选。不同预处理方法的模型性能指标变化情况见图2，各滋味品质指标在不同光谱预处理方法下的预测建模效果具有明显的差异。茶多酚预测模型的最佳预处理方法为S-G平滑(R_P^2=0.877，RMSEP=0.716)，游离氨基酸预测模型的最佳预处理方法为SD(R_P^2=0.755，RMSEP=0.246)，水浸出物预测模型的最佳预处理方法为MSC(R_P^2=0.765，RMSEP=0.982)，滋味评分预测模型的最佳预处理方法为SNV(R_P^2=0.853，RMSEP=1.354)。茶多酚、游离氨基酸、水浸出物和滋味评分在最佳光谱预处理方法下的PLSR预测模型性能指标与原始光谱预测模型相比均有不同程度的改善，R_P^2分别提高了8.62%、1.68%、3.67%、2.73%，RMSEP分别降低了11.77%、2.06%、5.30%、5.06%。由于使用了全波段光谱数据进行预测建模，在增加了计算复杂度的同时引入了大量冗余的光谱信息，为了进一步提高模型的预测性能，需要对光谱数据进行优选，剔除光谱中的无关变量以确定各滋味品质指标下的最优特征波长组合。

2.3 特征波长优选与滋味品质评价模型建立

各滋味品质指标在最佳预处理方法下利用CARS、SPA、SFLA、GA这4种特征波长筛选算法进行波长优选。其中，CARS的运行次数和蒙特卡罗采样次数分别设置为1 000和100，选取最小RMSECV作为最佳采样点；SPA通过前向投影映射方法找到最大投影向量下的波长组合，并以预测集的最小RMSEP作为评价指标确定最优特征波长；SFLA的迭代次数设置为10 000，初始子集变量个数设置为10，按照10 000次迭代中各波长变量被选择的概率进行排序，从概率最高的波长开始，每次建模增加一个波长，根据最小RMSECV确定最佳的特征波长组合；GA的迭代次数设置为100，种群规模为50，交叉率和变异率设置为0.5和0.01，以RMSECV作为适应度函数，引入竞争机制，每次迭代保留当前种群的最佳个体作为子代，通过F检验确定与全局最优个体无显著差异的RMSECV阈值，选取RMSECV低于阈值且特征波长数量最少的个体作为最佳特征波长组合。

4种波长筛选算法在4个滋味品质指标预测中的R_P^2和RMSEP见图3，不同波长筛选算法在不同滋味品质指标上的预测性能差异较大，单一波长筛选算法受制于算法机制和采样的随机性等因素，虽然采用了多次迭代和交叉验证方法，但在剔除无关变量的过程中仍可能导致有用信息的误判和遗漏，从而加剧模型预测性能的下降。因此，对不同的滋味品质指标进行波长筛选算法的优选是必要的。

由图3可知，茶多酚预测模型在SFLA下的性能最优(R_P^2=0.890，RMSEP=0.675)，游离氨基酸预测模型在SPA下的性能最优(R_P^2=0.810，RMSEP=0.212)，水浸出物预测模型在SFLA下的性能最优(R_P^2=0.802，RMSEP=0.901)，滋味评分预测模型在SPA下的性能最优(R_P^2=0.863，RMSEP=1.307)。与对应的最佳预处理方法下的全波段预测模型相比，剔除无关波长变量后的4个滋味品质指标预测模型的性能均有提升，表明通过优选不同滋味品质指标预测模型的光谱预处理方法和波长筛选算法的最佳组合，可提高模型的预测性能，最大限度地保留与各滋味品质指标高度相关的特征波长。

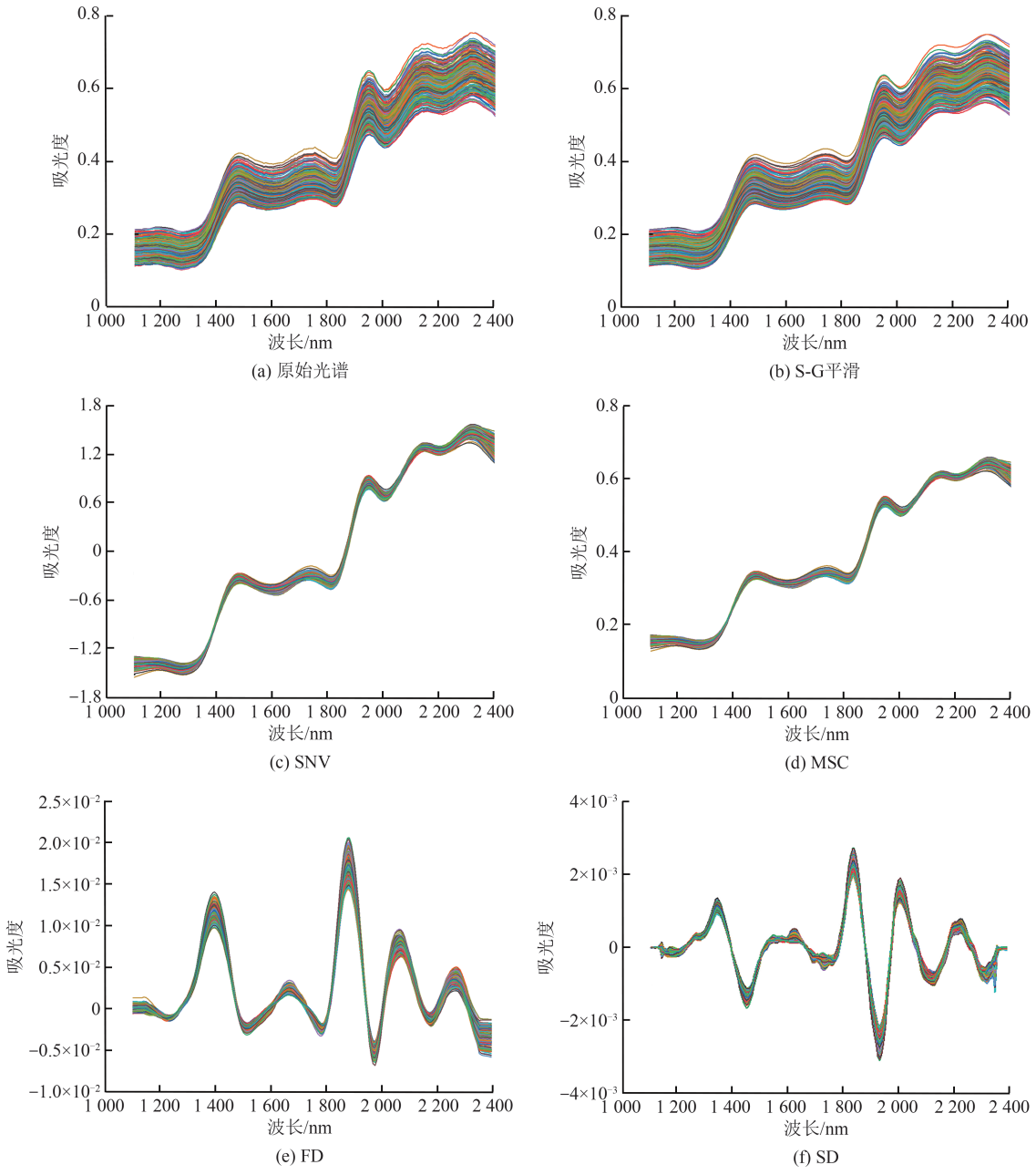


图 1　不同预处理方法下的近红外光谱

Fig. 1　NIR spectra of different pretreatment methods

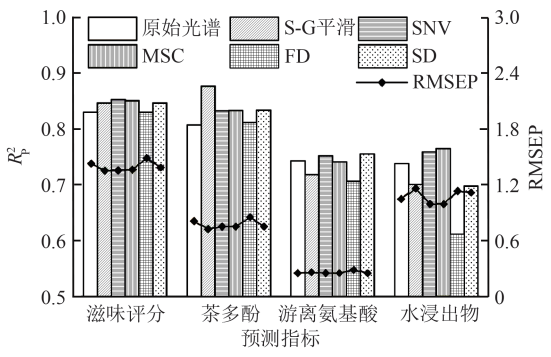


图 2　不同预处理方法下的模型性能

Fig. 2　Model performance of different pretreatment methods

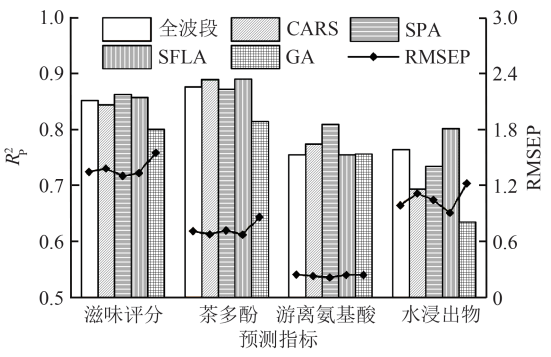


图 3　不同波长筛选算法下的模型性能

Fig. 3　Model performance of different wavelength selection algorithms

茶多酚、游离氨基酸、水浸出物、滋味评分在最佳预处理方法和波长筛选算法组合下的特征波长分布见图4。茶多酚的特征波长主要分布于1 195、1 470、1 720、2 325 nm这4个吸收峰附近，游离氨基酸的特征波长主要分布于1 470、1 940、2 150 nm这3个吸收峰附近，水浸出物的特征波长在6个吸收峰附近均有分布。在1 195、1 720、2 325 nm附近分别是C—H的二级倍频、一级倍频和合频吸收带，1 470 nm附近的波段覆盖了N—H和O—H的一级倍频吸收带，1 940、2 150 nm附近的波段分别是O—H和N—H的合频吸收带。茶多酚与红茶中的苦涩、收敛口感密切相关[29]，其中含有大量的C—H和O—H。游离氨基酸是氨基和羧基结合的产物，其中的茶氨酸是红茶中鲜爽、鲜甜滋味的重要来源[30]。红茶的水浸出物中包含大量水溶性呈味物质，如咖啡碱、多酚、可溶性糖等[31]，这些物质中含有大量的C—H、O—H和N—H。由此可见，通过光谱预处理方法与波长筛选方法的最佳组合所筛选出的特征波长能够很好地反映红茶中主要呈味物质的化学信息。与此同时，滋味评分的特征波长筛选结果有效覆盖了红茶中茶多酚、游离氨基酸、水浸出物的红外波段，表明滋味评分预测模型的特征波长信息能够准确反映红茶的滋味品质，预测结果与人工感官审评结果基本保持一致，最佳模型下的滋味评分预测结果见图5。

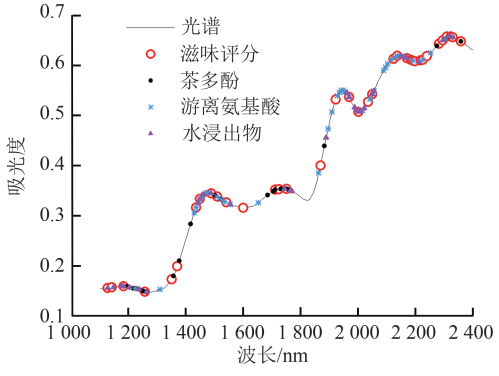


图4 各滋味品质指标的特征波长分布

Fig. 4 Distribution of characteristic wavelength for each taste quality indicator

2.4 基于近红外光谱的数字化拼配策略

以4种原料茶的拼配过程为例，根据11种‘英红九号’红茶的感官品质特点，从中选取4种具有代表性的红茶作为拼配原料茶，各拼配原料的价格与滋味得分情况见表3。其中，原料茶J1的滋味浓醇、回甜明显；原料茶J2的滋味浓醇尚爽；原料茶J3的滋味浓厚；原料茶J4的滋味浓，但青涩味较重。综合考虑4种原料茶的滋味品质和市场价格，将品质最优的原料茶J1作为基准茶，原料茶J2和J3作为调剂茶，J4作为拼带茶。基准茶J1作为拼配茶的主干，品质高于标准样，调剂茶J2和J3的品质、价格适中，主要用于调整拼配茶的整体品质以接近标准样，拼带茶J4品质相对较差，但胜在价格便宜，主要用于控制拼配成本。原料茶J1、J2、J3和J4的拼配比例分别表示为x_1、x_2、x_3和x_4。

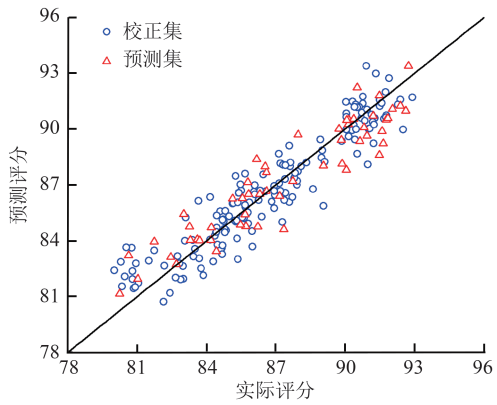


图5 最佳模型下的滋味评分预测结果

Fig. 5 Prediction results of taste scores under the optimal model

表3 各拼配原料的价格与滋味得分情况

Table 3 Prices and taste scores of the raw materials for blending

拼配原料茶	滋味审评平均得分	滋味预测平均得分	预测均方根误差	价格/（元/kg）
J1	92.45	92.34	0.964	800
J2	88.55	88.43	1.276	600
J3	86.30	86.22	0.861	400
J4	82.25	82.44	1.414	200

将红茶的数字化拼配过程分为2个步骤：第一步，以4种原料茶的近红外光谱数据作为模型输入，通过前述最佳滋味评分PLS定量预测模型得到各原料茶的滋味预测评分。由表3可知，4种原料茶滋味评分的模型预测结果与人工感官审评结果高度吻合；第二步，结合标准样的品质要求将拼配样的滋味目标评分设置为90分，并利用z-score标准化方法将滋味评分数据转化为滋味评价因

子，以最小化拼配样与标准样的滋味品质偏差和拼配成本为优化目标，将 4 种原料茶的拼配比例作为决策变量，通过 NSGA-II 实现基于近红外光谱的数字化拼配过程，实现拼配方案的自动寻优。NSGA-II 的种群规模设置为 100，最大迭代次数设置为 1 000 次。

由图 6 可知，多目标优化模型的 HV 值随迭代次数的增加而增大，经过 1 000 次迭代后 HV 值已趋于稳定，表明当前解集与真实的 Pareto 前沿解集已十分接近，优化结果趋于收敛。NSGA-II 求解过程中的可行域和 Pareto 前沿解的分布见图 7，图中每一个点代表一种拼配方案。汇总 Pareto 前沿解集中的拼配方案信息，汇总结果见图 8。由图 7~8 可知，当拼配成本低于 648 元/kg 时，随着拼配样滋味估计评分越趋近于目标评分，拼配成本和基准茶 J1 配比均呈上升趋势。综合考虑拼配方案的成本和品质，基准茶 J1 配比的最佳范围为 40%~60%。当基准茶的拼配比例低于 40% 时，虽然能够使拼配成本显著降低，但拼配样的品质将出现大幅度下降，难以达到标准样的品质要求；而当基准茶的拼配比例高于 60% 时，随着拼配成本增加，拼配样的品质高于标准样的品质要求且滋味评分估计偏差进一步扩大。

根据 4 种原料茶在拼配中的作用类型和实际拼配要求，基准茶 J1 的拼配比例应高于 2 种调剂茶，拼带茶 J4 的拼配比例应低于 2 种调剂茶比例的较大值，并尽可能保证每种原料茶的使用率。按式（4）优选 Pareto 前沿解集中的拼配方案。

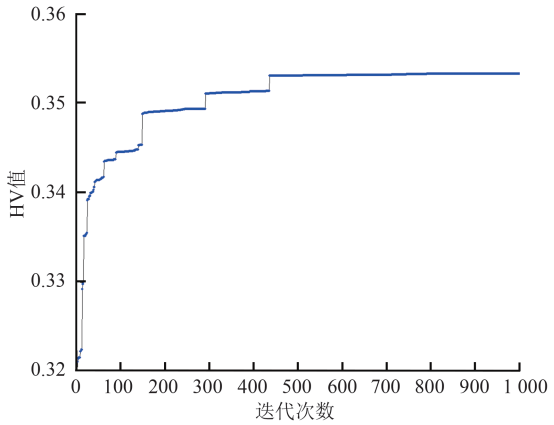


图 6 HV 值随迭代次数的变化情况

Fig. 6 Variation of HV value with the number of iterations

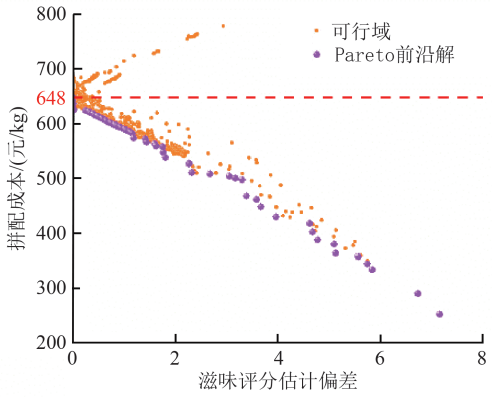


图 7 基于 NSGA-II 的拼配方案优化结果

Fig. 7 Optimization results of the blending recipes based on NSGA-II

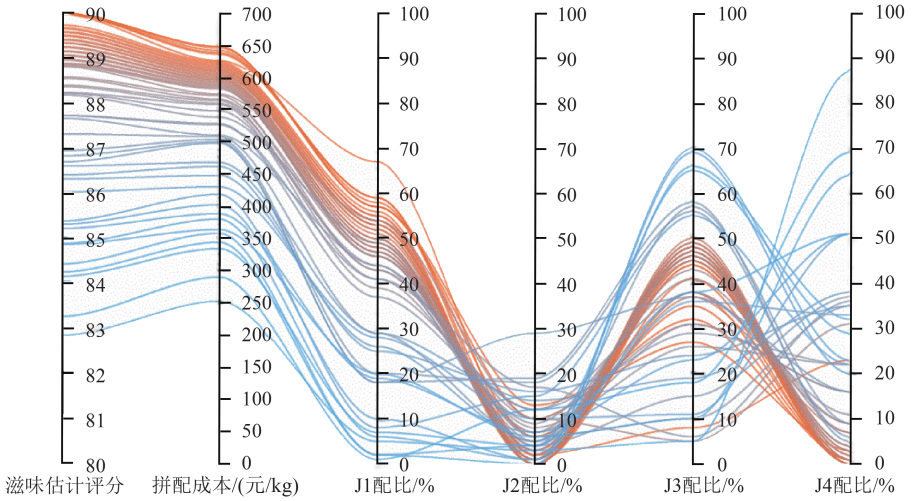


图 8 拼配方案的 Pareto 前沿解集

Fig. 8 Pareto frontier solution set for blending recipes

$$\begin{cases} 0 < x_2 \leqslant x_1 \\ 0 < x_3 \leqslant x_1 \\ 0 < x_4 \leqslant \max(x_2, x_3) \end{cases} \quad (4)$$

式中：

x_1——基准茶J1的拼配比例，%；

x_2——调剂茶J2的拼配比例，%；

x_3——调剂茶J3的拼配比例，%；

x_4——拼带茶J4的拼配比例，%。

此外，对于解集中配比相似（各原料的配比差异≤5%）的方案，选取其中拼配成本最低的方案为代表方案。共得到7个满足要求的拼配方案，对每个方案进行人工感官审评，以验证模型优化结果的可靠性，结果见表4。

从整体上看，7种拼配方案的滋味估计评分和滋味审评评分存在一定差距，主要由于拼配茶品质的影响因素较为复杂，为了将复杂的拼配问题数学化，需要对品质偏差目标函数的计算进行必要的简化，以量化各原料茶在不同拼配比例下对最终成品茶的品质增益。虽然无法避免引入误差，但通过多目标优化模型能够形成一系列兼顾成本和品质的优势拼配方案，其中所包含的各原料的配比信息可作为实际拼配过程中的参考依据，显著提高拼配效率。

表4 拼配方案的筛选结果

Table 4 Screening results of the blending recipes

方案编号	原料茶拼配比例/%				拼配目标函数		感官审评结果	
	J1	J2	J3	J4	滋味估计评分	拼配成本/（元/kg）	滋味审评评分	滋味审评评语
1	57	13	27	3	90.00	648	93.00	浓厚，甘爽
2	53	3	37	7	89.33	604	91.67	浓厚，带甜
3	43	7	43	7	88.59	572	89.67	浓醇，尚爽
4	43	10	31	16	88.37	560	85.00	浓尚醇，带苦涩
5	39	12	38	11	88.23	558	87.00	浓尚醇，稍带涩
6	44	8	26	22	88.22	548	83.33	尚浓，带苦涩
7	37	12	29	22	87.72	528	83.33	尚浓，带苦涩

在上述7种拼配方案中，编号1~3的拼配方案由于拼入了高比例的基准茶J1和较少的拼带茶J4，在感官审评中得分较高，滋味整体表现为浓醇、浓厚且有爽、甜感。在编号为4~7的拼配方案中，基准茶J1的拼配比例较低且拼带茶J4的拼配比例在10%以上，虽然拼配成本明显下降，但拼配茶普遍苦涩味较重且醇厚度降低，整体品质达不到标准样的要求。因此，综合考虑拼配方案1~3的品质与成本，确定方案3为最佳拼配方案，即原料茶J1、J2、J3和J4的拼配比例分别为43%、7%、43%和7%，拼配成本为572元/kg，成本比原料茶J1降低了28.5%。上述结果表明：将近红外光谱定量预测建模与NSGA-II结合，能够实现红茶拼配过程的数字化，快速生成优势配方，简化拼配过程，可作为茶叶拼配中的有效辅助手段。

3 结论

将近红外光谱定量分析技术与NSGA-II结合，提出了一种基于近红外光谱技术的红茶滋味品质评价与数字化拼配策略。采用PLSR建模方法，对比不同光谱预处理方法和特征波长筛选算法下的预测模型性能，确定红茶中茶多酚质量分数、游离氨基酸质量分数、水浸出物质量、滋味评分这4个滋味品质指标的最佳预测模型，并探讨各滋味品质指标在最佳模型下的特征波长分布。

建模结果表明：滋味评分特征波长筛选结果能有效反映红茶中主要呈味物质的化学信息，进一步验证了将近红外光谱技术应用于红茶滋味评分定量预测的可靠性，确定了SNV预处理方法结合SPA特征波长筛选算法为滋味评分预测模型的最佳算法组合，最佳滋味评分预测模型的R_P^2和RMSEP分别为0.863、1.307。以4种原料茶的拼配过程为例，基于近红外光谱数据预测各原料茶的滋味评分并转化为评价因子，将各原料茶的拼配比例作为决策变量，以最小化拼配成本以及拼配样与标准样的滋味品质偏差为优化目标，通过NSGA-II对拼配方案进行全局寻优，成功建立了兼顾成本与品质的数字化拼配多目标优化模型，优化所得的拼配方案在人工感官审评中取得了令人满意的效果。

目前，传统的红茶拼配主要依靠人工经验，往往需要投入大量的人力、物力和时间成本。课题组采用低成本、快速的近红外光谱检测手段对红茶的滋味品质进行预测与评价，并进一步提出了一种将茶叶品质智能评价与多目标优化算法结合的数字化拼配方法，可作为拼配过程中的有效辅助手段，助力优势配方的快速形成，显著提高拼配效率。值得一提的是，由于在实际拼配过程中，需要综合考虑茶叶的外形、滋味和香气等品质因素，而近红外光谱信息主要反映与茶叶滋味相关的信息，因此，诸如电子鼻、电子眼等智能感官检测技术在茶叶品质评价中的综合运用有助于构建更加完备的茶叶数字化拼配体系。

参考文献

[1] 许姗姗，李姝寰，宁井铭．茶叶加工中拼配技术的研究进展[J]．中国茶叶加工，2020(1)：34-37，59．
XU S S，LI S H，NING J M．Research progress of blending technology in tea processing[J]．China Tea Processing，2020(1)：34-37，59．(in Chinese)

[2] 郑际雄．外销滇红工夫茶精制加工与拼配技术[J]．中国茶叶加工，2017(5/6)：57-60．
ZHENG J X．Refining and blending technology of Dianhong Kungfu tea for export[J]．China Tea Processing，2017(5/6)：57-60．(in Chinese)

[3] FOMENI F D．A multi-objective optimization approach for the blending problem in the tea industry[J]．International Journal of Production Economics，2018，205：179-192．

[4] 于杰，王雅洁，杨冰，等．基于线性规划的抹茶智能拼配研究[J]．贵州科学，2020，38(5)：80-84．
YU J，WANG Y J，YANG B，et al．Intelligent blending of matcha tea based on linear programming[J]．Guizhou Science，2020，38(5)：80-84．(in Chinese)

[5] 宁井铭，李姝寰，王玉洁，等．基于高光谱成像技术的工夫红茶数字化拼配[J]．食品科学，2019，40(4)：318-323．
NING J M，LI S H，WANG Y J，et al．Hyperspectral imaging for quantitative quality prediction model in digital blending of Congou black tea[J]．Food Science，2019，40(4)：318-323．(in Chinese)

[6] 宋彦，汪小中，赵磊，等．基于近红外光谱技术的眉茶拼配比例预测方法[J]．农业工程学报，2022，38(2)：307-315．
SONG Y，WANG X Z，ZHAO L，et al．Predicting the blending ratio of Mee Tea based on near infrared spectroscopy[J]．Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering，2022，38(2)：307-315．(in Chinese)

[7] NING J M，SUN J J，LI S H，et al．Classification of five Chinese tea categories with different fermentation degrees using visible and near-infrared hyperspectral imaging[J]．International Journal of Food Properties，2017，20(Suppl. 2)：1515-1522．

[8] 李跑，申汝佳，李尚科，等．一种基于近红外光谱与化学计量学的绿茶快速无损鉴别方法[J]．光谱学与光谱分析，2019，39(8)：2584-2589．
LI P，SHEN R J，LI S K，et al．Nondestructive identification of green tea based on near infrared spectroscopy and chemometric methods[J]．Spectroscopy and Spectral Analysis，2019，39(8)：2584-2589．(in Chinese)

[9] 李杰，李尚科，蒋立文，等．基于近红外光谱技术与化学计量学的绿茶无损鉴别方法研究[J]．分析测试学报，2020，39(11)：1344-1350．
LI J，LI S K，JIANG L W，et al．A nondestructive method identifying varieties of green tea based on near infrared spectroscopy and chemometrics[J]．Journal of Instrumental Analysis，2020，39(11)：1344-1350．(in Chinese)

[10] REN G X，NING J M，ZHANG Z Z．Intelligent assessment of tea quality employing visible-near infrared spectra combined with a hybrid variable selection strategy[J]．Microchemical Journal，2020，157：105085．

[11] REN G X，NING J M，ZHANG Z Z．Multi-variable selection strategy based on near-infrared spectra for the rapid description of Dianhong black tea quality[J]．Spectrochimica Acta Part A：Molecular and Biomolecular Spectroscopy，2021，245：118918．

[12] LI L Q，WANG Y J，JIN S S，et al．Evaluation of black tea by using smartphone imaging coupled with micro-near-infrared spectrometer[J]．Spectrochimica Acta Part A：Molecular and Biomolecular Spectroscopy，2021，246：118991．

[13] 马健．基于近红外光谱和聚类法的信阳毛尖的年份鉴别[J]．信阳农林学院学报，2015，25(3)：108-111．
MA J．Years identification of Xinyang Maojian tea based on NIR and clustering method[J]．Journal of Xinyang College of Agriculture and Forestry，2015，25(3)：108-111．(in Chinese)

[14] 张龙，潘家荣，朱诚．基于近红外光谱的西湖龙井茶产地的精细判别[J]．红外，2015，36(12)：41-46．
ZHANG L，PAN J R，ZHU C．Precise discrimination of Xihu Longjing tea from different producing regions based on near-infrared spectra[J]．Infrared，2015，36(12)：41-46．(in Chinese)

[15] ZHUANG X G，SHI X S，WANG H F，et al. Rapid determination of green tea origins by near-infrared spectroscopy and multi-wavelength statistical discriminant analysis[J]. Journal of Applied Spectroscopy，2019，86（1）：76-82.

[16] WU T H，TUNG I C，HSU H C，et al. Quantitative analysis and discrimination of partially fermented teas from different origins using visible/near-infrared spectroscopy coupled with chemometrics[J]. Sensors，2020，20（19）：5451.

[17] LI L Q，JIN S S，WANG Y J，et al. Potential of smartphone-coupled micro NIR spectroscopy for quality control of green tea[J]. Spectrochimica Acta Part A：Molecular and Biomolecular Spectroscopy，2021，247：119096.

[18] WANG Y J，LIU Y，CUI Q Q，et al. Monitoring the withering condition of leaves during black tea processing *via* the fusion of electronic eye（E-eye），colorimetric sensing array（CSA），and micro-near-infrared spectroscopy（NIRS）[J]. Journal of Food Engineering，2021，300：110534.

[19] JIN G，WANG Y J，LI L Q，et al. Intelligent evaluation of black tea fermentation degree by FT-NIR and computer vision based on data fusion strategy[J]. LWT-Food Science and Technology，2020，125：109216.

[20] WANG Y J，LI L Q，LIU Y，et al. Enhanced quality monitoring during black tea processing by the fusion of NIRS and computer vision[J]. Journal of Food Engineering，2021，304：110599.

[21] JIN G，WANG Y J，LI M H，et al. Rapid and real-time detection of black tea fermentation quality by using an inexpensive data fusion system[J]. Food Chemistry，2021，358：129815.

[22] WANG Y J，LI T H，LI L Q，et al. Evaluating taste-related attributes of black tea by micro-NIRS[J]. Journal of Food Engineering，2021，290：110181.

[23] JIA J M，ZHOU X F，LI Y，et al. Establishment of a rapid detection model for the sensory quality and components of Yuezhou Longjing tea using near-infrared spectroscopy[J]. LWT-Food Science and Technology，2022，164：113625.

[24] GUO Z M，BARIMAH A O，YIN L M，et al. Intelligent evaluation of taste constituents and polyphenols-to-amino acids ratio in matcha tea powder using near infrared spectroscopy[J]. Food Chemistry，2021，353：129372.

[25] WANG Y J，LI M H，LI L Q，et al. Green analytical assay for the quality assessment of tea by using pocket-sized NIR spectrometer[J]. Food Chemistry，2021，345：128816.

[26] DEB K，PRATAP A，AGARWAL S，et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm：NSGA-II[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation，2002，6（2）：182-197.

[27] TIAN Y，CHENG R，ZHANG X Y，et al. PlatEMO：a MATLAB platform for evolutionary multi-objective optimization[J]. IEEE Computational Intelligence Magazine，2017，12（4）：73-87.

[28] 刘鹏，吴瑞梅，杨普香，等. 基于计算机视觉技术的茶叶品质随机森林感官评价方法研究[J]. 光谱学与光谱分析，2019，39（1）：193-198.
LIU P，WU R M，YANG P X，et al. Study of sensory quality evaluation of tea using computer vision technology and forest random method[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2019，39（1）：193-198.（in Chinese）

[29] 桑嘉玘，温靖，刘昊澄，等. 不同品种英德红茶的品质比较分析[J]. 现代食品科技，2021，37（4）：157-162.
SANG J Q，WEN J，LIU H C，et al. Comparison of the quality of different varieties of Yingde black tea[J]. Modern Food Science and Technology，2021，37（4）：157-162.（in Chinese）

[30] 王雷刚，徐奕鼎，刘丹丹，等. 3个小区域茶园秋季红茶品质与生化成分分析[J]. 山东农业科学，2021，53（9）：46-50.
WANG L G，XU Y D，LIU D D，et al. Analysis of quality and biochemical components of autumn black tea in three small regional tea gardens[J]. Shandong Agricultural Sciences，2021，53（9）：46-50.（in Chinese）

[31] TURGUT S S，ENTRENAS J A，TAŞKIN E，et al. Estimation of the sensory properties of black tea samples using non-destructive near-infrared spectroscopy sensors[J]. Food Control，2022，142：109260.

（责任编辑：金文苑）