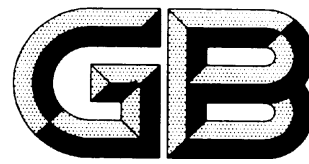


ICS 64.140.10

X 55



# 中华人民共和国国家标准

GB/T XXXXX—XXXX

## 白茶产地溯源技术规程 近红外光谱法

Technical specification for traceability of white tea by near Infrared Spectroscopy

(征求意见稿)

(本稿完成日期：2024年2月)

— XX — XX 发布

XXXX — XX —

实施

国家市场监督管理总局

发布

国家标准化管理委员会

## 前 言

本文件按照GB/T1.1-2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草单位》的规定起草。

本文件由中华全国供销合作总社提出。

本文件由全国茶叶标准化技术委员会（SAC/TC339）归口。

本标准起草单位：福建农林大学、福建融韵通生态科技有限公司、安徽农业大学、中华全国供销合作总社杭州茶叶研究院、丽水市农林科学研究院、六妙白茶股份有限公司、福建品品香茶业有限公司、黄山小罐茶业有限公司、南平市建阳区农业农村局经作站、赛默飞世尔科技（中国）有限公司、福安市茶茶产业发展中心、福鼎市张元记茶业有限公司、国家茶叶产品质量检验检测中心（四川）、广西亚热带作物研究所、大荒(福建)茶业有限公司、福建省华羽村茶业有限公司、广西茶叶学会、福建政和瑞茗茶业有限公司、福建隆合茶业有限公司、福建松溪瑞茗茶业有限公司、福建天湖茶业有限公司。

本标准主要起草人：孙威江、黄艳、张灵枝、邹腾跃、林刚、邵静娜、张亚丽、宁井铭、傅永兴、张芬、陈林海、庄长强、郝连奇、郑志强、林振传、张嘉琳、罗玉琴、商虎、周学秋、付明峰、张茂羽、刘洪刚、张礼雄、余步贵、黄家琪、林有希、魏晓惠、叶红、杨丰、周开启。

# 白茶产地溯源技术规程 近红外光谱法

## 1 范围

本文件规定了近红外光谱法进行白茶产地溯源的术语和定义、原理、仪器设备、近红外光谱模型的建立与验证、产地溯源判断、模型的维护、异常结果的确认和处理、判别准确性。

本文件适用于三年内生产、芽叶型白茶散茶产品的产地溯源。

本文件不适用于以白茶为原料的再加工产品。

本文件不适用于多产地来源的拼配型白茶产品。

## 2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 8302 茶 取样

GB/T 8303 茶 磨碎试样的制备及其干物质含量测定

GB/T 22291 白茶

GB/T 23776 茶叶感官审评方法

GB/T 32743 白茶加工技术规范

## 3 术语和定义

GB/T 22291界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

**白茶产地溯源技术** geographical traceability technology for white tea

通过捕获采集、分析白茶不同产地特征差异，鉴定或识别白茶种植产地的科学技术。

### 3.2

**白茶产地溯源模型** geographical traceability model

采集一定数量、不同产地白茶的光谱信息、有机成分、稳定同位素、矿物元素等特征，使用化学计量学方法分析上述特征，建立基于特征信息识别白茶原产地的判别模型。

### 3.3

**近红外光谱法** near-infrared spectroscopy method

通过测量物质在近红外区 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ 波数范围的吸光度，根据物质属性不同会导致谱图特征差异，采用化学计量学方法，对物质进行定性或定量分析的一种分析方法。

### 3.4

#### 白茶光谱库 spectral library for white tea

对不同产地白茶进行近红外光谱扫描，建立由若干数量白茶样品组成的近红外光谱数据集合，样品数据按一定比例划分为训练集和验证集。

### 3.5

#### 白茶训练集 training set for white tea

具有代表性的、基本覆盖不同产地范围的白茶近红外光谱集合，作为参考基准，训练溯源模型。

### 3.6

#### 白茶验证集 validation set for white tea

用于衡量和评价产地判别模型的准确性和重复性的白茶近红外光谱集合。

### 3.7

#### 训练集样品 samples from training set

用于建立溯源模型的样品，其产地、年份等信息数据已知。

### 3.8

#### 验证集样品 samples from validation set

用于验证溯源模型性能的样品，其产地、年份等信息数据已知。

### 3.9

#### 待测样品 samples to be measured

需要通过溯源模型进行检测的样品，其产地信息不清。

### 3.10

#### 模型验证 model validation

用验证集样品来检验溯源模型所预测产地与实际产地信息一致性的过程。

## 4 原理

利用白茶化学成分中含C-H、N-H、O-H等化学键的倍频和合频振动信息，以漫反射测量方式获得在近红外区的吸收光谱，用化学计量学方法建立不同产地白茶的近红外光谱校正模型，将未知白茶近红外光谱信息导入校正模型，实现用茶叶近红外光谱信息快速判别其产地。

## 5 仪器设备

### 5.1 近红外光谱仪

傅里叶变换近红外光谱分析仪,能进行漫反射光谱的采集,扫描波数范围为  $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ ,分辨率优于  $4\text{ cm}^{-1}$ ,波数准确性 $\pm 0.03\text{ cm}^{-1}$ ;仪器自身的波数重现性 $<0.006\text{ cm}^{-1}$ (10次测量),仪器间波数重现性 $<0.05\text{ cm}^{-1}$ 。配置具有光谱采集、存储、建模分析等功能的近红外光谱分析软件。

## 5.2 植物粉碎机

用于茶叶样品粉碎成粉末。

# 6 近红外光谱模型的建立与验证

## 6.1 样品要求

6.1.1 白茶样品应按照GB/T 32743的规定加工,符合GB/T 22291的要求。

6.1.2 不同产地白茶样品数量应分布均匀,每个产地具有代表性的样品数量不少于30份,建模样品总量不少于300个。

## 6.2 近红外光谱测定

### 6.2.1 工作环境

室温  $15^{\circ}\text{C}\sim 30^{\circ}\text{C}$ ,相对湿度 $\leq 80\%$ 。扫描光谱前,先将仪器预热60 min,保持仪器系统内部稳定;待预热完毕后,对仪器进行自检,仪器运行正常即可进行光谱采集。

### 6.2.2 样品处理

按 GB/T 8302的规定取样,充分粉碎样品,粒度要求过80目筛。

### 6.2.3 近红外光谱采集

将样品置于样品池中,采集近红外光谱。波数  $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ ,扫描间隔  $3.856\text{ cm}^{-1}$ ,扫描次数64次,分辨率  $8.0\text{ cm}^{-1}$ 。为确保近红外光谱检测数据的可靠性,样品采集前扫描1次背景,扣除空气背景光谱以降低环境因素对光谱数据的影响,每个样品采集3次光谱图,取其平均光谱作为该样品的原始光谱数据。

## 6.3 产地溯源模型的建立

### 6.3.1 校正集和验证集

运用 Kennard-Stone 算法按3:1的比例将6.1.2的样品集合划分为训练集样品和验证集样品。

### 6.3.2 模型的建立

筛除特征信息不显波段(波数 $7200\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ ),利用线性判别分析法(Linear discriminant analysis, LDA)基于对应样品的产地信息对训练集保留的特征波段(波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 7200\text{ cm}^{-1}$ )进行谱图特征提取,结合分类器K-近邻算法(k-nearest neighbor, KNN)、随机森林(random forest, RF)、支持向量机(support vector machines, SVM)进行模型参数优化后建立模型,以不同产地作为模型的类别名。模型建立的过程中需对光谱预处理方法和光谱范围进行优化,优化方法可使用导数、平滑、微分、多元散射校正等;建立好的模型存储在Python软件中,可随时调用。

## 6.4 模型的验证

以验证集检验产地溯源判别模型的准确性。利用验证集样品的光谱图，经6.3.2所建产地溯源模型一致的预处理后，与溯源模型光谱库中的光谱进行比较，测定差异，检验溯源信息判别是否准确。使用识别正确率(Recognition Accuracy, RA)、受试者工作特征曲线下面积(Area Under the Curve, AUC)以及混淆矩阵作为模型精度及性能的评价指标，其中RA值应 $\geq 90\%$ 。

## 7 产地溯源判定

7.1 待测定的茶样按照 6.2.2 进行测前准备，按照 6.2.3 规定采集光谱。

7.2 将采集的光谱数据与 6.3.2 建立模型进行比对，获得产地判别结果。

## 8 模型的维护

8.1 下列情况之一，需对已有模型进行维护：

- a) 近红外光谱模型更新后，或更换仪器时；
- b) 样品特征发生重大改变时；
- c) 仪器维修或更换光源等配件后；
- d) 其他需要验证时；
- e) 每年根据新样品更新模型，并进行至少1次验证。

8.2 维护时期，采用的样品应来自不同产地、季节的代表性白茶实物标准样，覆盖训练集样品的产地。并在一定时间段内，将光谱信息加入到溯源模型光谱库中，完善模型信息结构，对模型进行校正并更新。

## 9 异常结果的确认和处理

9.1 异常结果的来源包括但不限于：

- a) 样品来源与溯源模型要求不匹配；
- b) 仪器故障；
- c) 样品光谱测量条件与溯源模型要求不匹配；
- d) 样品光谱测量参数与建模时参数不匹配。

### 9.2 异常结果的处理

对结果有争议的样品，由三名以上的国家一级评茶师或有经验的高级职称人员，按 GB/T 23776 规定的方法进行感官评判，产地判别结果以此结果为准。

## 10 判别准确性

### 10.1 重复性

在同一检测点，由同一操作者使用相同的仪器设备，按相同测试方法，并在24 h内通过重新分样和重新装样，对同一被测样品相互独立进行测试，2次独立判别的结果应相同。

### 10.2 再现性

在不同检测点，由不同操作人员使用不同设备，按相同的测试方法，对相同的样品，2次独立判别的结果应相同。

## 11 白茶产地溯源判别实例

参见附录 A。

## 附录 A

### （资料性附录）

### 白茶产地溯源判别实例

#### A.1 近红外光谱模型的建立

根据第6章的要求，建立涵盖不同省份（DPC）包括福建、广西、贵州、湖南、四川、云南、浙江，福建省不同产区（DDFP）包括福鼎、福安、政和、松溪、建阳、柘荣判定的模型。模型放入在线判别平台http://222.76.112.205:34500/accounts/login/#，直接使用。

#### A.2 样品制备

按6.2.2要求制备待测样品。

#### A.3 近红外光谱数据的收集与处理

将待测样品茶粉置于样品池中，扫描范围 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ ，采集待测样品近红外光谱。光谱数据格式首行为波数，首列lable为样品标签，可为数字、字母或组合。

#### A.4 测试判定

A.4.1 登录A.1在线判别平台中选择账号，进行登陆。

A.4.2 选择添加数据，选择“选用判别模型”并上传光谱数据文件，点击开始上传，即可等待结果。判别模型选择如下：

- a) 全谱段DPC为波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围不同省份；
- b) 全谱段DDFP为波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围福建省不同产区；
- c) 全谱段AFWT为波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 10000\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围福鼎产区；
- d) 4000-7200DPC为波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 7200\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围不同省份；
- e) 4000-7200DDFP为波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 7200\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围福建省不同产区；
- f) 4000-7200AFWT为波数 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 7200\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围福鼎产区。

#### A.4 判别与结果输出

判别模型输出判别结果（附图A.1），根据判别结果，填写送检样品测试报告。样品测试报告的格式参考附表A.1。

标签	状态	结果	结果备注	创建时间	修改时间
10	判别完成	贵州		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
9	判别完成	福建		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
8	判别完成	贵州		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
7	判别完成	福建		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
6	判别完成	贵州		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
5	判别完成	福建		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
4	判别完成	贵州		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
3	判别完成	云南		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
2	判别完成	福建		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27
1	判别完成	福建		2023-09-08 15:01:27	2023-09-08 15:01:27

附图 A.1 输出判别结果

附表 A.1 样品测试报告

样品名称	送样单位	测试单位	设备信息	测试结果

测试者\_\_\_\_\_

审核者\_\_\_\_\_

测试日期\_\_\_\_\_