

基于龙井茶香气风味特性的品质判定

戴悦雯¹, 支瑞聪^{2,*}, 赵 镭², 高海燕¹, 史波林², 汪厚银²

(1.上海大学生命科学学院, 上海 200444; 2.中国标准化研究院食品与农业标准化研究所, 北京 100088)

摘 要: 结合人工感官审评和智能感官分析对4个等级西湖龙井茶进行识别判定。通过相关性分析和主成分分析, 先后建立龙井茶香气分属性权重及龙井茶香气分属性与电子鼻传感器关联性。根据龙井茶香气分属性权重及香气分属性与传感器关联性结果, 对电子鼻传感器进行筛选。通过核Fisher判别分析法和K-最近邻算法进行进一步特征提取和模式分类, 实现了对于训练集样本100%和测试集样本97.5%的正确识别。

关键词: 西湖龙井茶; 人工感官审评; 智能感官分析; 核Fisher判别分析

Evaluation of Longjing Tea Quality Based on Aroma Characteristics

DAI Yuewen¹, ZHI Ruicong^{2,*}, ZHAO Lei², GAO Haiyan¹, SHI Bolin², WANG Houyin²

(1. College of Life Science, Shanghai University, Shanghai 200444, China;

2. Institute of Food and Agriculture Standardization, China National Institute of Standardization, Beijing 100088, China)

Abstract: A combination of artificial sensory evaluation with intelligent sensory analysis was used in discrimination and identification of 4 grades of Xihu Longjing tea. Weights of aroma attributes and the correlation between aroma attributes and electronic nose sensors were established by correlation analysis and principal component analysis (PCA) and according to the results obtained, the optimal sensors of electronic nose were selected. Kernel Fisher discriminant analysis (KFDA) and K-nearest neighbor (KNN) were utilized for further feature extraction and pattern recognition, and the correction coefficient of the training and test sets were 100% and 97.5%, respectively.

Key words: Xihu Longjing tea; artificial sensory evaluation; intelligent sensory analysis; kernel Fisher discriminant analysis

中图分类号: TS272.7

文献标志码: A

文章编号: 1002-6630 (2015) 10-0110-04

doi:10.7506/spkx1002-6630-201510022

龙井茶, 主产于浙江杭州西湖一带, 在我国已有1 200余年历史。龙井茶因色泽翠绿, 香气浓郁, 甘醇爽口, 形如雀舌, 即“色绿、香郁、味甘、形美”的特点闻名海内外。按产期的先后及采摘地的不同, 龙井茶被分为特级与1~10级, 总共11个不同的等级, 其价格也由几百元每斤到几千元每斤不等^[1]。然而, 随着茶产业的商业化, 目前市场上龙井茶质量级别混乱, 以次充好的现象时常发生, 这对龙井茶贸易和消费者权益都带来了不良的影响。如何让如今乱象丛生的龙井茶市场走上健康有序的发展道路, 这对现阶段我国茶叶质量的检测技术提出了巨大的挑战。

长期以来, 人工感官审评作为评判茶叶品质的一种传统方式, 它通过综合外形、香气、汤色、滋味和叶底五方面信息对茶叶品质做出整体且准确的评判^[2-4]。智能感官分析是通过模拟人的感官获取有关茶叶香气或滋味的特征信息, 经数据分析给出评判结果的一项新兴检测

技术。该技术因操作简便、检测时间短、重复性好等特点在茶叶品质检测领域受到越来越多的重视^[5-9]。人工感官审评和智能感官分析作为检测茶叶品质的2种不同方式, 目前主要单独地应用于茶叶品质的检测。为结合人工感官审评和智能感官分析更好地用于茶叶品质检测, 本实验对4个不同等级的西湖龙井茶分别进行香气分属性感官审评和电子鼻检测, 根据相关性分析和主成分分析(principal component analysis, PCA)结果, 以感官信息指导智能信息对电子鼻传感器进行筛选, 并通过进一步的特征提取和模式分类实现对于龙井茶等级的识别和判定。

1 材料与方法

1.1 材料

实验所用茶样为采自杭州西湖产区的4个不同等级

收稿日期: 2014-09-26

基金项目: 国家高技术研究发展计划(863计划)项目(2011AA1008047); 国家自然科学基金青年科学基金项目(31201358); 北京市优秀人才培养资助项目(2012D009999000001)

作者简介: 戴悦雯(1989—), 女, 硕士研究生, 研究方向为智能感官分析。E-mail: DAIDAIDD11@163.com

*通信作者: 支瑞聪(1983—), 女, 副研究员, 博士, 研究方向为智能感官分析。E-mail: zhirc@cnis.gov.cn

(特级、1级、2级、3级)西湖龙井茶,每个等级西湖龙井茶各包含8个平行样本。实验前,不同等级的各个龙井茶样本由铝箔纸独立密封包装于-4℃条件下保存。

1.2 仪器与设备

Fox4000传感器型电子鼻(由18根气敏传感器组成:LY2/LG、LY2/G、LY2/AA、LY2/GH、LY2/gCTL、LY2/gCT、T30/1、P10/1、P10/2、P40/1、T70/2、PA/2、P30/1、P40/2、P30/2、T40/2、T40/1、TA/2) 法国Alpha MOS公司。

1.3 方法

1.3.1 人工感官审评

龙井茶感官审评由6位国家级茶叶审评专家完成。依据GB/T 14487—2008《茶叶感官审评术语》^[10]及专家讨论结果,首先将西湖龙井茶的香气分解为嫩香、清香、栗香、浓度、鲜爽度、火工度、陈气、粗气和异气9种分属性并进行详细定义(表1)。每个等级的龙井茶平行样本按相同比例进行混合调配,审评专家通过7点标度法(图1)(1:弱、2:较弱、3:稍弱、4:中等、5:稍强、6:较强、7:强)对调配后的4个等级龙井茶的香气分属性强度进行打分,每个等级样品重复审评3次。

表1 龙井茶香气分属性及其定义

Table 1 Aroma attributes of Longjing tea and their definitions

香气分属性	定义
嫩香	嫩茶所特有的愉悦细腻的香气
清香	香清爽锐
栗香	似熟栗子香
浓度	茶香对鼻腔刺激的程度
鲜爽度	新鲜爽快的程度
火工度	烘培茶叶时火力的高低
陈气	茶叶陈化的气息
粗气	粗老叶的气息
异气	茶叶加工后贮存不当产生的劣变气息或污染外来物质所产生的气息

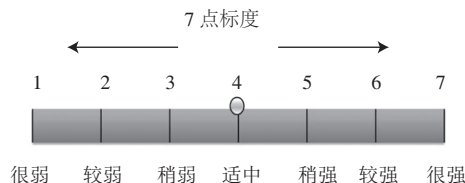


图1 7点标度法

Fig.1 The 7-point scale method

1.3.2 电子鼻检测

每个等级龙井茶由32份检测样品组成。其中,每个等级龙井茶的8个平行样本各制取4份检测样品(4×8=32),每份样品质量为1g。将1g茶叶碎末置

于20 mL顶空瓶中,加入5 mL超纯水,压盖密封置于自动进样装置。当顶空瓶被送入预热区时,在振荡器转速500 r/min和顶空温度60℃条件下加热900 s后,抽出2 mL气体以2 mL/s的进样速率注入到电子鼻传感器阵列室。在120 s响应时间内,将所引起的传感器相对电阻S作为样品的气味指纹图谱(图2)。相对电阻S按公式(1)计算:

$$S = \frac{R_0 - R}{R_0} = \frac{\Delta R}{R_0} \quad (1)$$

式中:R为传感器在待测气体中的电阻/Ω;R₀为传感器在合成干燥空气中的电阻/Ω^[11]。

信号采集过程中,每隔0.5 s记录响应数值,所以每条响应信号由241个数据点构成。根据响应信号特点,选择响应绝对值最大点,即气味指纹图谱的波峰点或波谷点,作为信号参数进行后续实验分析。

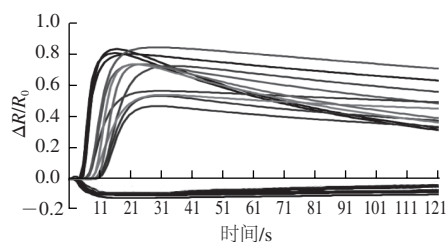


图2 电子鼻传感器响应信号

Fig.2 Response curves of electronic nose sensors

1.4 数据处理

根据人工感官审评结果,通过相关性分析建立龙井茶香气分属性权重。利用PCA建立龙井茶香气分属性与电子鼻传感器的关联性。根据香气分属性权重及香气分属性与传感器关联性结果,对电子鼻传感器进行筛选。通过核Fisher判别分析(kernel Fisher discriminant analysis, KFDA)法和K-最近邻(K-nearest neighbor, KNN)算法对数据进行进一步的特征提取和模式分类,从而实现对于龙井茶等级的识别和判定。数学统计分析由PASW Statistics 18和Matlab R2012a完成。

2 结果与分析

2.1 龙井茶香气分属性权重建立

表2 龙井茶香气分属性感官审评结果

Table 2 Sensory evaluation results of aroma attributes of Longjing tea

级别	整体香气	嫩香	清香	栗香	浓度	鲜爽度	火工度	陈气	粗气	异气
特级	6.39 ^a	5.14 ^a	3.38 ^a	3.13 ^a	4.42 ^a	4.50 ^a	4.33 ^{ab}	2.33 ^a	0.00 ^b	0.00 ^b
1级	5.96 ^b	4.08 ^b	3.00 ^{ab}	2.71 ^a	4.00 ^b	4.00 ^a	4.75 ^a	3.08 ^a	0.00 ^b	0.00 ^b
2级	5.33 ^c	3.13 ^c	2.83 ^b	2.58 ^a	3.33 ^b	3.17 ^b	3.83 ^b	3.13 ^a	0.00 ^b	0.17 ^b
3级	4.88 ^d	2.21 ^d	2.25 ^c	2.42 ^b	3.42 ^b	2.33 ^c	4.05 ^b	2.75 ^a	0.29 ^a	0.92 ^a

注:肩标不同小写字母表示差异显著(P<0.5)。

表3 龙井茶香气分属性与整体香气相关性分析结果

Table 3 Correlation analysis between aroma attributes of Longjing tea and its overall aroma

香气分属性	嫩香	清香	栗香	浓度	鲜爽度	火工度	陈气	粗气	异气
整体香气	0.996**	0.964*	0.945	0.937	0.995**	0.632	-0.442	-0.759	-0.855

注: **在0.01水平上差异极显著; *在0.05水平上差异显著。

$$W_i = \frac{|C_i|}{\sum_{i=1}^n |C_i|} \quad (i=1,2,\dots,9) \quad (2)$$

式中: W_i 为龙井茶香气分属性权重; C_i 为龙井茶香气分属性与整体香气间的相关系数; i 为龙井茶香气分属性个数。

表4 龙井茶香气分属性权重

Table 4 Weights of aroma attributes of Longjing tea

香气分属性	嫩香	清香	栗香	浓度	鲜爽度	火工度	陈气	粗气	异气
权重	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.08	0.06	0.10	0.11

龙井茶香气分属性专家审评结果见表2。通过相关性分析,得到龙井茶各香气分属性与整体香气间的相关性大小(表3),嫩香、清香、栗香、浓度、鲜爽度与龙井茶整体香气呈较高的正相关性,粗气和异气与龙井茶整体香气呈较高的负相关性。根据龙井茶香气分属性与整体香气的相关性分析结果,按公式(2)求得各香气分属性在决定龙井茶整体香气时所占的权重(表4),即各个香气分属性在龙井茶整体香气评价中的相对重要程度。由表4可知,嫩香、清香、栗香、浓度和鲜爽度在决定龙井茶整体香气时占有较高的权重,粗气和异气次之,火工度和陈气所占的权重相对较低。

2.2 基于龙井茶香气风味特性的传感器筛选

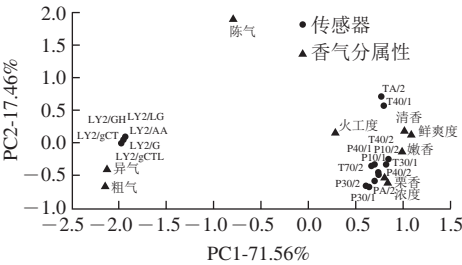


图3 龙井茶香气分属性与电子鼻传感器PCA结果

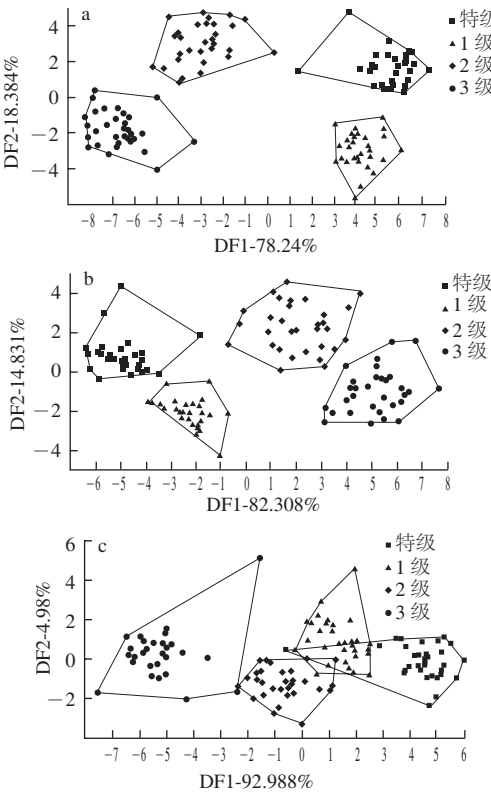
Fig.3 PCA results of aroma attributes of Longjing tea and electronic nose sensors

PCA是把多个指标转换为几个综合指标的一种统计方法,它可以将样本在高维空间的分布通过低维空间展现。经转换后得到的新指标被称为主成分,方差贡献率最大的被称为第1主成分,贡献率次之的被称为第2主成分^[12-15]。

根据龙井茶人工感官审评结果和电子鼻检测结果,通过PCA法建立龙井茶香气分属性和电子鼻传感器之间的关联性(图3)。在贡献率为89.02%(PC1为71.56%,

PC2为17.46%)的主成分得分图上,香气分属性和传感器之间的距离越近,说明两者之间的关联性越密切。由图3可知,LY型传感器与粗气和异气的关联性最为密切,P型和T型传感器则与嫩香、清香、栗香、浓度、鲜爽度和火工度的关联性最为密切。

根据香气分属性与传感器关联性结果及香气分属性权重结果可知,与P型和T型传感器关联性最为密切的嫩香、清香、栗香、浓度、鲜爽度和火工度占香气分属性权重的73%,而与LY型传感器关联性最为密切的粗气和异气只占香气分属性权重的21%。由此推测,在电子鼻总的18根传感器中,与粗气和异气关联性最为密切的LY型传感器对龙井茶等级的区分作用低于P型和T型传感器。



a. LY型、P型、T型传感器; b. P&T型穿透性传感器; c. LY型传感器。

图4 不同传感器条件下的FDA得分图

Fig.4 FDA score plots with different sensors

FDA算法是以样本的可区分性为目标,通过寻找一组线性变换以达到类内散度最小且类间散度最大^[16-17]。4个等级龙井茶在总的18根传感器(图4a)和P&T型传感器条件下(图4b)的等级区分效果相当,4个等级龙井茶都能得到有效区分。但在LY型传感器条件下(图4c),龙井茶等级的区分效果明显下降,不同等级龙井茶之间出现严重的交叉重叠现象。以上实验结果说明:LY型传感器对于龙井茶等级的区分效果不显著,剔除LY型传感器对龙井茶等级的区分效果无明显影响。

2.3 特征提取及模式分类

传感器的筛选实现了对于智能感官信息的压缩,但在剩余信息中哪些信息真正有助于龙井茶等级的区分还不得而知。特征提取能够从剩余信息中提取出更有代表性的特征信息,挖掘数据空间内在的结构特征,从而进一步提高龙井茶等级识别的准确性和有效性。KFDA是将核方法引入到FDA中所产生的一种新的非线性特征提取方法^[18-19]。设 x_i 和 x_j ($i, j=1, 2, \dots, n$) 为数据空间中的样本点,数据空间到特征空间的映射函数为 Φ ,核方法的主要思想就是实现向量的内积变换: $(x_i, x_j) \rightarrow K(x_i, x_j) = \Phi(x_i)^T \Phi(x_j)$ 。KFDA不但能在训练样本类别已知的基础上以样本的可区分性为目标,更能通过核方法实现对于非线性数据的降维^[20-22]。模式分类是指在特征提取的基础上,利用分类算法将数据样本判断为某一模式类别的过程。KNN算法是经典且被广泛运用的一种模式分类算法。在分类过程中,对于新给定样本, KNN通过寻找训练样本集中与测试样本距离最近的 K 个样本,根据这 K 个样本所属的类别判定测试样本的类别^[23-26]。

实验过程中,以每个等级的22个样本为训练样本,剩余的10个样本为测试样本。所以训练集共有88个($22 \times 4 = 88$)茶叶样本,测试集共有40个(10×4)茶叶样本。表5为通过交互验证方法对KFDA特征提取维数(1~10)和KNN数($K=1, 3, 5, 7, 9$)优化后对龙井茶等级的识别结果。由表5可知,龙井茶数据信息经KFDA-KNN模型进行进一步的特征提取和模式分类后,对训练集样本和测试集样本的正确识别率最高达到可达到100%和97.5%。

表5 KFDA-KNN模型条件下龙井茶等级识别结果

Table 5 Recognition results of Longjing tea grades with KFDA-KNN model

序号	KFDA 特征维数	K值	正确识别率/%	
			训练集	测试集
1	3	1	100	97.5
2	3	3	100	97.5
3	4	5	100	97.5
4	2	7	100	95
5	3	9	100	95

3 结 论

本实验在对4个等级西湖龙井茶进行人工感官审评和智能感官分析的基础上,通过相关性分析建立龙井茶香气分属性权重,并通过PCA建立香气分属性与电子鼻传感器之间的关联性。根据香气分属性权重及香气分属性与传感器的关联性结果,对电子鼻传感器进行了筛选。通过KFDA-KNN模型的进一步特征提取和模式分类,实现了对于训练集样本100%的正确识别和测试集样本97.5%的正确识别。结果表明,人工感官审评和智能

感官分析能相互结合共同用于龙井茶等级的识别判定, KFDA-KNN模型的应用能进一步提升对于龙井茶等级的识别判定效果。

参考文献:

- [1] YU Huichun, WANG Jun, ZHANG Hongmei, et al. Identification of green tea grade using different feature of response signal from E-nose sensors[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2008, 128(2): 455-461.
- [2] 国家质量监督检验检疫总局, 国家标准化管理委员会. GB/T 23776—2009 茶叶感官审评方法[S]. 北京: 中国标准出版社, 2009.
- [3] 龚淑英. 名优绿茶感官审评方法及技术要点[J]. 中国茶叶加工, 2001(1): 44-46.
- [4] 卢福娣, 童梅英. 试验茶感官审评的方法与技巧[J]. 茶叶通报, 2004, 26(1): 39-40.
- [5] 史波林, 赵镭, 汪厚银, 等. 智能感官分析技术在茶叶品质检测中的应用[J]. 食品科学, 2009, 30(19): 351-355.
- [6] DUTTA R, MINES E L, GARDNER J W, et al. Tea quality prediction using a tin oxide-based electronic nose: an artificial intelligence approach[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2003, 94(2): 228-237.
- [7] CHEN Quansheng, ZHAO Jiewen, VITTAYAPADUNG S. Identification of the green tea grade level using electronic tongue and pattern recognition[J]. Food Research International, 2008, 41(5): 500-504.
- [8] QIN Zihan, PANG Xueli, CHEN Dong, et al. Evaluation of Chinese tea by the electronic nose and gas chromatography-mass spectrometry: correlation with sensory properties and classification according to grade level[J]. Food Research International, 2013, 53(2): 864-874.
- [9] YU Huichun, WANG Yongwei, WANG Jun. Identification of tea storage times by linear discrimination analysis and back-propagation neural network techniques based on the eigenvalues of principal components analysis of E-nose sensor signals[J]. Sensors, 2009, 9(10): 8073-8082.
- [10] 国家质量监督检验检疫总局, 国家标准化管理委员会. GB/T 14487—2008 茶叶感官审评术语[S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [11] 史波林, 赵镭, 支瑞聪, 等. 西湖龙井茶品质的智能嗅觉识别[J]. 农业机械学报, 2012, 43(12): 130-135.
- [12] 陈哲, 赵杰文. 基于电子鼻技术的碧螺春茶叶品质等级检测研究[J]. 农机化研究, 2012(11): 133-137.
- [13] 贺玮, 胡小松, 赵镭, 等. 电子舌技术在普洱散茶等级评级中的应用[J]. 食品工业科技, 2009, 30(11): 125-131.
- [14] CAMACHO J, PICO J, FERRER A. Data understanding with PCA: structural and variance information plots[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2010, 100(1): 48-56.
- [15] SEGRETO T, SIMEONE A, TETI R. Principal component analysis for feature extraction and NN pattern recognition in sensor monitoring of chip form during turning[J]. CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology, 2014, 7(3): 202-209.
- [16] HAI Zheng, WANG Jun. Electronic nose and data analysis for detection of maize oil adulteration in sesame oil[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2006, 119(2): 449-455.
- [17] BALLABIO D, CONSONNI V, COSTA F. Relationships between apple texture and rheological parameters by means of multivariate analysis[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2012, 111(1): 28-33.
- [18] 吴晓辉, 王颂, 方晓明, 等. 基于核Fisher判别分析技术的电力变压器DGA故障诊断模型研究[J]. 高压电器, 2007, 43(3): 214.
- [19] 王昕, 范九伦. 基于多样本的多核Fisher判别分析研究[J]. 现代电子学报, 2012, 35(11): 73-76.
- [20] BAUDAT G, ANOUAR F. Generalized discriminant analysis using a kernel approach[J]. Neural Computation, 2000, 12(10): 2385-2404.
- [21] MA Bo, QU Huiyang, WONG H S. Kernel clustering-based discriminant analysis[J]. Pattern Recognition, 2007, 40(1): 324-327.
- [22] LIU Jing, ZHAO Feng, LIU Yi. Learning kernel parameters for kernel Fisher discriminant analysis[J]. Pattern Recognition Letter, 2013, 34(9): 1026-1031.
- [23] SAINI I, SINGH D, KHOSLA A. QRS detection using K-nearest neighbor algorithm (KNN) and evaluation on standard ECG databases[J]. Journal of Advanced Research, 2013, 4(4): 331-344.
- [24] LI Yuan, ZHANG Xinmin. Diffusion maps based K-nearest-neighbor rule technique for semiconductor manufacturing process fault detection[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2014, 136: 47-57.
- [25] 陈全胜, 江水泉, 王新宇. 基于电子舌技术和模式识别方法的茶叶质量等级评判[J]. 食品与机械, 2008, 24(1): 124-126.
- [26] WANG Ziqiang, SUN Xia. Multiple kernel local Fisher discriminant analysis for face recognition[J]. Signal Processing, 2013, 93(6): 1496-1509.