

团 体 标 准

T/CBJ 2213—2024

白酒智能酿造 基酒分级入库 红外光谱法应用指南

Baijiu intelligent brewing—Classification and storage decision of base wine—
Application guide of infrared spectroscopy method

2024-04-08 发布

2024-05-08 实施

中国酒业协会 发布
中国标准出版社 出版

全国团体标准信息平台
中国标准出版社

目 次

前言 III

1 范围 1

2 规范性引用文件 1

3 术语和定义 1

4 技术架构 1

5 一般要求 2

6 功能要求 3

附录 A（规范性） 定标方法 6

全国团体标准信息平台
中国标准出版社

前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由中国酒业协会提出并归口。

本文件起草单位：中国食品发酵工业研究院有限公司、中国酒业协会、泸州老窖股份有限公司、贵州习酒股份有限公司、江苏今世缘酒业股份有限公司、中国农业大学、四川轻化工大学、贵州国台酒业集团股份有限公司、北京中医药大学、中粮营养健康研究院有限公司、江苏洋河酒厂股份有限公司、济南趵突泉酿酒有限责任公司、泸州智通自动化设备有限公司、普瑞特机械制造有限公司、河南仰韶酒业有限公司、山东景芝白酒有限公司、安徽宣酒集团股份有限公司。

本文件主要起草人：郭新光、杜小威、王健、王旭亮、李宗朋、黄越、张贵宇、周军、胡峰、卢君、孙莹、孙云权、赵婷、张晨曦、郑森、牛家棒、吴志生、陈晓园、陈诚、杜静怡、李明磊、李子文、熊雅婷、程亚娟、周靖、侯琦、刘雪、程凡。

全国团体标准信息平台
中国标准出版社

白酒智能酿造 基酒分级入库 红外光谱法应用指南

1 范围

本文件规定了白酒智能基酒分级入库红外光谱法应用的一般要求、功能要求。
本文件适用于指导应用红外光谱分析技术于白酒智能基酒分级入库的操作。

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 29858—2013 分子光谱多元校正定量分析通则
GB/T 32199—2015 红外光谱定性分析技术通则
GB/T 34068—2017 物联网总体技术智能传感器接口规范

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

智能基酒分级入库 intelligent base wine classification and storage

按照白酒企业的生产工艺,基于数字化检测系统、现代测控技术,用智能算法学习模拟师傅的优秀经验,实现待入库白酒的精细化和定量化控制,指导白酒的入库存储,确保白酒生产工艺执行的稳定,为白酒酿造的产量与质量打下基础。

4 技术架构

智能基酒分级入库的技术架构见图 1。

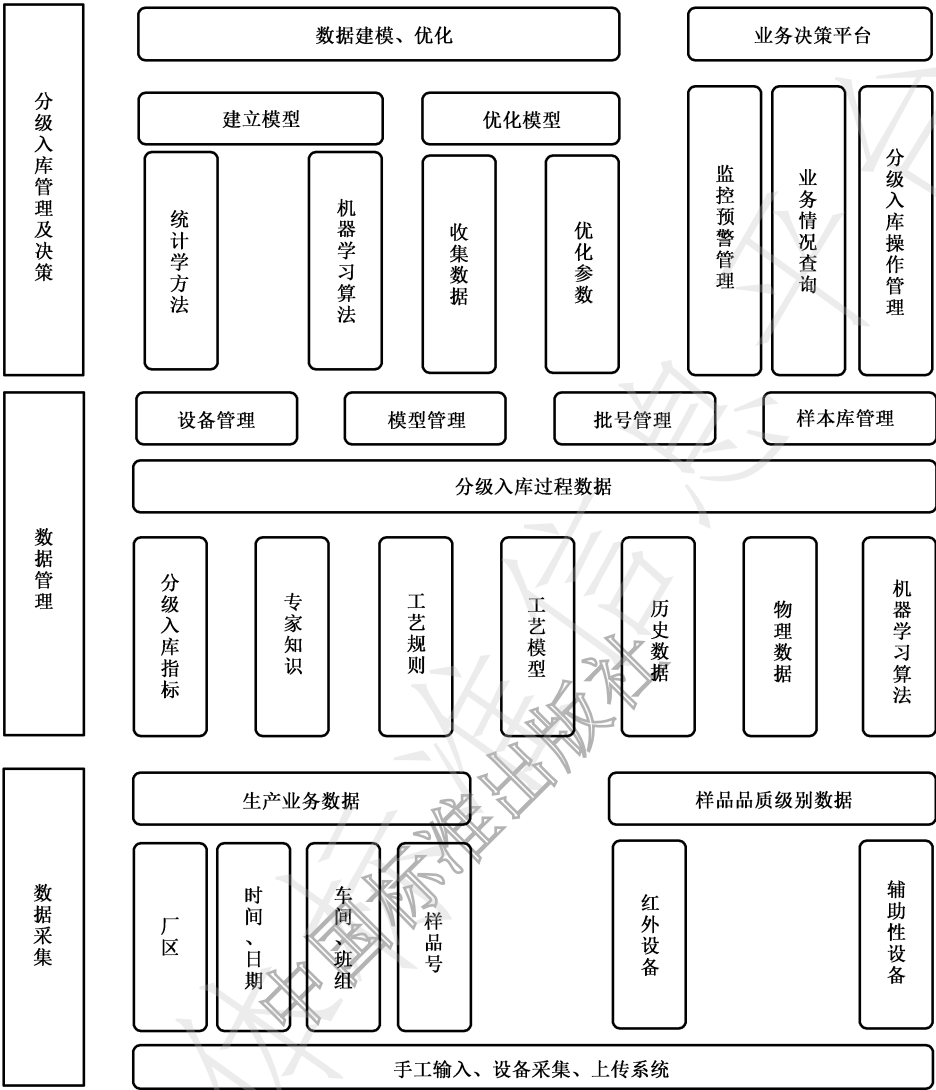


图 1 智能基酒分级入库技术架构图

5 一般要求

5.1 应用支撑

建设统一的平台、数据对接等,为后续多应用的互通基于统一的系统平台,实现各流程业务数据统一和交汇。

数据对接主要实现与相关应用系统对接。

5.2 数据接口

依据 GB/T 34068—2017 建立统一的数据接口,采用统一的数据传递及通信方式,解决不同设备、模型及系统间信息互通的问题。

5.3 一致性

制定统一的数据采集、传输、计算及交互模式,保证数据资源最大化利用,充分发挥系统整体效能。

5.4 兼容性

各种接口在遵循规范性原则的基础上,保证其可以集成不同设备厂商、系统或平台供应商、软件供应商的产品。

5.5 可靠性

保证系统具有较高的可靠性、完善的错误处理机制和数据备份机制,保证系统可提供不间断访问服务。

6 功能要求

6.1 系统硬件要求

6.1.1 数据智能采集硬件

数据采集硬件设备一般包括计算机、条码扫描器、红外光谱仪等。系统建设时应根据具体的生产条件和规模的实际情况进行选择。其中核心装备红外光谱仪的要求推荐如下:

- a) 具备扣除空气中的水蒸气和二氧化碳气体的红外吸收的功能;
- b) 波长范围宜包含 $1\,000\text{ cm}^{-1}\sim 3\,000\text{ cm}^{-1}$;
- c) 与标准检测方法的误差应满足酒厂的生产工艺要求。

6.1.2 辅助性设备

在入库分级环节中,还需要电池阀、泵、传感器等其他硬件辅助性设备。

以上设备采集的数据通过智能物联中间件,转换成统一可识别的通信协议数据(JSON 格式),通过工业物联网上传到云端进行存储、分析与管理。

6.2 系统基础功能要求

6.2.1 人员管理

用户通过该功能对系统内人员基本信息进行管理和维护,包括新增、修改、删除等功能,内容包括人员编号、姓名、职务等。

6.2.2 权限管理

对系统内角色分配以及各角色的权限管理和维护,包括角色的新增、修改、删除、角色权限分配设置等功能。

6.2.3 设备管理

对连接系统的所有相关设备进行监控和管理,查询设备使用情况、设备状态、数据采集情况等信息,具体内容包括设备编号、设备名称、设备状态等。

6.2.4 样本管理

用户可通过系统录入、查询、修改、删除样本及样本库的相关信息,样本数据进行采集并传输到系统后,数据在线实时保存于数据库中,包括样本基本信息、图像及视频信息、数字及图谱等数据信息。

6.2.5 数据传输、计算及结果管理

对系统及相关设备所产生的数据进行管理,拥有处理数据的相关模型等功能,可生成相关结果及决策建议并以报表等方式呈现。

6.3 数据分析及应用

6.3.1 系统数据的收集

系统收集的数据包括:

- a) 样品标识数据:标识一般应包括酿酒厂或车间、班组、容器号、酒度、取样日期等;
- b) 理化数据:酒精度、总酸、总酯、乙酸乙酯、己酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯、醛类等该环节工艺要求的指标数据;
- c) 鉴评数据:品评人员的感官品评数据。

6.3.2 红外识别模型的建立

利用仪器建模软件,优化各建模参数,进行光谱预处理,将红外波段光谱信息和理化指标化学测定值一一对应,采用偏最小二乘法等算法,利用化学计量学软件建立基酒各指标的定标模型。定标方法按照附录 A 及 GB/T 29858—2013 和 GB/T 32199—2015。

6.3.3 智能基酒分级入库决策模型的建立

利用机器学习算法建立,基于仪器自动检测的数据以及其他相关数据,获得智能基酒分级入库决策模型。决策算法可以表示为公式(1):

$$Y = A \times X \quad \dots\dots\dots (1)$$

式中:

- A ——白酒级别相关指标含量,一般包括:感官数据、酒精度、总酸、总酯、己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯等、乙酸、己酸、正丙醇、仲丁醇、异丁醇、正丁醇、异戊醇、醛类等指标;
- X ——各指标权重系数,由已有样品训练计算得出,训练算法有偏最小二乘算法、人工神经网络算法、支持向量机算法等;
- Y ——对应的样品入库级别。

6.3.4 模型应用

在入库分级环节中实现了待入库白酒的精细化和定量化控制,指导白酒的入库存储,确保白酒生产工艺执行的稳定,为保证白酒的产量与质量打下基础。

6.4 结果管理要求

6.4.1 数据传递

监测数据可通过检测设备实时自动上传,数据通过模型自动计算并输出结果,结果可通过系统处理并提交。

6.4.2 结果查询

用户可通过系统对检测项目的结果数据进行查询,系统提供多种查询条件进行筛选,包括样品批次、样品检测时间、样品编号、测样人、供应商等,并可导出为 excel 表格等形式。

6.4.3 结果汇总

用户可通过系统对检测结果数据进行统计,系统应具有数据柱状图、饼状图等多种统计形式展示功能,所展示的统计数据可进行筛选查看,包括样品结果统计、决策建议等。

6.4.4 报告管理

系统应具备按照不同用户权限自动生成不同检测报告、批次报告、日报表等各类型报告的功能。

系统可按用户要求,支持自动编辑的模板生成各类报告。

用户可查看系统自动生成的报表数据,以列表等多种形式展示所有报表基本信息。可通过查看、下载和打印的形式进行相关数据的查阅。

6.5 决策管理要求

6.5.1 预警分析

通过分析统计数据库中的异常数据信息,分类汇总出各类型的预警数据统计,可通过不同批次、不同日期等信息进行筛选和查询,用户可通过此功能及时掌握异常情况发生的原因。

6.5.2 追溯分析

根据系统报表等形式展示异常样本来源情况,用户可按照时间、批次等信息进行筛选及查看,具体可展示为检测样本来源、供应商、日期等多种模型,也可根据用户具体要求开发其他功能,并可与现有数据库中样本数据进行对比生成报表及相关建议。

6.5.3 预警提醒

用户可通过模型自主设定预警条件参数,当系统检测数据满足预先设备的预警条件参数时,系统自动报警,并发送预警信息通知各权限用户,适用于系统内各种监督管理工作。

附 录 A

(规范性)

定标方法

A.1 定标样品的选择

参与定标的样品应具有代表性,即需涵盖将来所要分析样品的特性,包括浓度、环节、季节、班组等。创建一个新的白酒定标模型,推荐最少的样品数通常不少于 300 个。建立稳定的定标,一般期望收集比实际更多的光谱数据。

A.2 定标样品光谱数据的采集

光谱数据采集过程中,设定仪器扫描次数为 32 次,同一样品通过重新分样和重新装样检测 3 次。传统方法化学值的测定尽量与样品扫描缩小时间间隔。

A.3 定标样品化学值的测定

采用常规分析方法测定定标样品中醇、酸、酯等指标的含量。为防止样品理化的变化,光谱扫描后应立即进行化学值的测定。

A.4 定标方法

使用偏最小二乘法回归法(partial least squares regression,PLSR)该方法提取回归变量时同时考虑光谱和化学分析值的信息,是目前红外分析常用的方法。

A.5 定标模型的评价及验证

A.5.1 定标模型的评价

预测样品相关系数 R^2 越接近于 1 越好,定标标准偏差(SEC)与预测标准偏差(SEP)两者越接近且越小越好。定标模型评价公式见公式(A.1)和公式(A.2)。

$$SEC(SEP) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - y_i)^2}{n-1}} \quad \dots\dots\dots (A.1)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad \dots\dots\dots (A.2)$$

式中:

Y_i —— 定标样品或预测样品 i 的组分模型测定值;

y_i —— 定标样品或预测样品 i 的组分标准值;

$\bar{y}$ —— 定标样品或预测样品的组分标准值的平均值;

n —— 定标样品或预测样品样本数。

A.5.2 定标模型的验证

定标模型的验证方法是直接比较验证样品的 y_i 和 Y_i 的差异是否满足实际需要。

全国团体标准信息平台
中国标准出版社

全国团体标准信息平台
中国标准出版社

全国团体标准信息平台
中国标准出版社