

基于近红外光谱技术的乙醇固态发酵过程 参数定量检测

张 航, 刘国海, 江 辉*, 梅从立, 黄永红

江苏大学电气信息工程学院, 江苏 镇江 212013

摘要 为了提高乙醇固态发酵过程在线监测的精度,开展了基于傅里叶近红外光谱(FT-NIRS)分析技术的乙醇固态发酵过程参数快速定量检测研究。采用联合区间偏最小二乘法(siPLS)对标准正态变量变换(SNV)预处理后的光谱进行特征波长区间优选;引入遗传算法(GA)、竞争自适应重加权采样(CARS)法和迭代保留信息变量(IRIV)法从优选后波长区间中进一步筛选特征波长变量;最后,建立不同变量筛选方法所得特征波长的乙醇固态发酵过程参数(乙醇和还原糖含量)的偏最小二乘(PLS)预测模型。实验结果显示,与GA和CARS方法相比,IRIV方法所得的波长变量数最少;其中,与乙醇和还原糖相关的特征变量个数分别为43和40;在验证集中,PLS预测模型乙醇含量的验证集均方根误差(RMSEP)和预测相关系数 R_p 分别为0.2511和0.9934,还原糖含量的RMSEP和 R_p 分别为0.1730和0.9926,其预测精度亦高于其他方法所得结果。实验结果表明,利用近红外光谱分析技术实现乙醇固态发酵过程关键参数的在线检测是可行的;并且IRIV方法是一种有效近红外光谱特征波长优选方法,可提高预测模型精度。

关键词 光谱学; 近红外光谱; 固态发酵; 迭代和保留信息变量法; 联合区间偏最小二乘法; 乙醇

中图分类号 O657.33 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP54.023002

Quantitative Detection of Ethanol Solid-State Fermentation Process Parameters Based on Near Infrared Spectroscopy

Zhang Hang, Liu Guohai, Jiang Hui, Mei Congli, Huang Yonghong

School of Electrical and Information Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China

Abstract In order to improve the accuracy of on-line monitoring of ethanol solid-state fermentation process, We carried out the fast quantitative detection of ethanol solid state fermentation process parameters based on Fourier transform near infrared spectroscopy (FT-NIRS). The synergic interval partial least squares (siPLS) method was taken to select the optimal wavelength intervals from the standard normal variate transformation (SNV) preprocessing spectra. Characteristic wavelength variables were extracted from the optimal wavelength intervals by genetic algorithm (GA), competitive adaptive reweighted sampling (CARS) and iteratively retaining informative variables (IRIV). The partial least squares (PLS) forecast model of solid state fermentation process parameters (the level of ethanol and glucose) was established. The characteristic wavelength variables of these parameters were selected by different methods. The results show that compared with GA and CARS methods, IRIV method can select the fewest wavelength variables and the number of characteristic variables associated with ethanol and glucose is 43 and 40, respectively. In IRIV-siPLS model, root mean square error of prediction (RMSEP) is 0.2511 and correlation coefficient of prediction R_p is 0.9934 for ethanol, RMSEP is 0.1730 and R_p is 0.9926 for glucose in prediction set, and the prediction accuracy of the results is also higher than those of other methods. Based on the

收稿日期: 2016-10-11; **收到修改稿日期:** 2016-10-21

基金项目: 国家自然科学基金(31271875)、江苏省自然科学基金(BK20140538, BK20130531, BK20151345)、江苏省高校自然科学基金面上项目(16KJB210003)、江苏省博士后科学基金(1601038C, 1601130B)

作者简介: 张 航(1989—),男,硕士研究生,主要从事软测量控制方面的研究。E-mail: 2211407043@ujs.edu.cn

导师简介: 刘国海(1964—),男,博士,教授,主要从事智能化发酵装备方面的研究。E-mail: ghliu@ujs.edu.cn

* **通信联系人.** E-mail: h.v.jiang@ujs.edu.cn

result, on-line detection of key process parameters in the process of solid-state fermentation is feasible with the near infrared spectral technology. IRIV is an effective method to select characteristic wavelength from the near infrared spectra and improve precision of the prediction model.

Key words spectroscopy; near infrared spectroscopy; solid-state fermentation; iteratively retaining informative variables method; synergic interval partial least squares method; ethanol

OCIS codes 300.6300; 010.1030; 070.4790; 040.6070

1 引言

乙醇作为可替代化石燃料的可再生清洁能源,在全球能源匮乏,污染日趋严重,化石燃料价格持续上涨的背景下,得到了世界各国的高度重视。我国已成为世界上继巴西、美国之后第三大乙醇生产和应用国。国内乙醇行业多沿用传统的高温蒸煮和液态发酵工艺,这种方法制备效率低、能耗高,而且液态发酵废水处理是一大难题,污染比较严重^[1-3]。乙醇生料固态发酵具有节约能源,保护环境等优点,已经越来越多的应用到乙醇生产中^[4-9]。固态发酵是指在几乎没有游离水的湿固体材料上培养微生物的工艺^[10]。固态发酵具有废水及发酵残渣少、能量消耗低、简化操作工序和节约能耗等优点。在我国粮食生产中,玉米产量仅次于水稻居第二位,用玉米发酵产乙醇具有广阔的前景。

近红外光谱技术是一种快速无损的分析技术。近红外光谱的信息来源是由 C—H, O—H, N—H 等含氢基团对近红外光和频和倍频的吸收,含氢基团受分子内外环境影响较小,近红外光谱对于样本的光谱特性比中红外光谱更稳定^[11]。而玉米粉固态发酵培养基质中包含了大量含氢基团,不同基团产生的光谱吸收峰和强度有所不同。因此,将近红外光谱技术应用于乙醇固态发酵的过程状态监测中是可行的。乙醇和还原糖是生产乙醇时发酵液中的重要成分,准确测定这些成分对监测发酵过程和了解发酵质量有着重要意义^[12]。近红外光谱技术结合化学计量学方法能快速提取物质内部信息,并成功应用于乙醇和还原糖含量的快速定量检测^[13-16]。

在基于近红外光谱的定量检测模型构建过程中,特征波长变量筛选已经成为影响光谱分析模型最终检测精度的关键^[17]。迭代保留信息变量(IRIV)是 2014 年提出的一种新方法^[18],具有提取波长变量少和精度高等优点。因此,本文尝试应用 IRIV 法对乙醇固态发酵物样本的近红外光谱进行特征变量选择。由于实验中的每条光谱包含 1557 个数据点,直接采用 IRIV 方法会耗时较长,所以在运用 IRIV 法前先用联合区间偏最小二乘(siPLS)法从原光谱中选出最优特征波长区间,最终建立乙醇和还原糖含量的偏最小二乘(PLS)预测模型;并将其结果与遗传算法(GA)^[19]、竞争自适应重加权采样(CARS)法^[20]筛选得到的波长变量建立的乙醇和还原糖含量 PLS 模型结果进行比较。

2 算法

2.1 联合区间偏最小二乘法

siPLS 法是区间偏最小二乘(iPLS)法的一种延伸算法^[21-23],先把数据集分成 N 个区间,再用 PLS 回归模型从中选取 2, 3 或 4 个子区间,用校正集均方根误差(RMSECV)来评估这些子区间的优劣,选取 RMSECV 值最小的一组子区间作为最优光谱区间。

2.2 迭代保留信息变量算法

IRIV 算法把变量分为强信息变量、弱信息变量、无信息变量和干扰信息变量,强信息变量对模型有益而且明显重要,弱信息变量对模型有益效果但不明显,无信息变量对模型有坏的效果但不明显,干扰信息变量对模型有坏的效果而且明显。IRIV 方法能够移除无信息变量和干扰信息变量,保留强信息变量和弱信息变量。对于包含 N 个样本 P 个变量的数据矩阵 X ,由以下六步筛选特征变量:

- 1) 基于 P 个变量生成随机组合的二进制矩阵;
- 2) 基于 RMSECV 评估包含变量 i 和不包含变量 i 的重要性, $i=1, 2, \dots, P$;
- 3) 通过一个种群模型计算每个变量包含与不包含时的差异,通过这些差异区分不同变量;
- 4) 移除无信息变量和干扰信息变量,生成新的子集;
- 5) 返回步骤 1),直到没有无信息变量和干扰信息变量存在;
- 6) 对剩余变量进行反向删除策略。

3 实 验

3.1 样本制备

玉米粉过 60 目筛,先加入质量为玉米粉干重 45% 的 60 °C 热水润料,再加入玉米粉干重 0.5% 的酿酒曲、玉米粉干重 0.1% 的耐高温干活性干酵母、50 U/g 糖化酶,在 32 °C 恒温摇床中进行固态发酵,摇床转速设置为 200 r/min。在玉米粉固态发酵酒精过程中,每 24 h 采集 3 个发酵产物样本(采样点分别为第 0,24,48,72,96,120,144,168,192,216,240 h),整个发酵过程可收集发酵产物样本 33 个。利用相同的材料和条件发酵 4 个批次,共采集 132 个发酵过程产物样本。

3.2 理化实验分析

取 2 g 发酵样本,用 20 mL 蒸馏水稀释,在 12000 r/min 下离心 10 min,取上清液作为待测液。

利用重铬酸钾氧化比色法^[24]测定待测液乙醇浓度。取 9 支 20 mL 的试管,分别加入适量 20 mg/mL 的乙醇标准液 0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8 mL,再分别加入 2 mL 重铬酸钾试剂,并用蒸馏水定容至 4 mL,配成不同乙醇含量的反应液,将各管摇匀,置于沸水浴 10 min 后取出,用流水迅速冷却至室温,用蒸馏水定容至 20 mL,加塞后颠倒均匀,在分光光度计上进行比色。调波长 600 nm,空白调零,以乙醇质量数据绘制图 1(a)所示的乙醇标准曲线。每个待测液样本取 0.2 mL,用同样的方法测吸光度。

利用 3,5-二硝基水杨酸(DNS)比色法^[25-26]测定待测液还原糖浓度。取 11 支 20 mL 的试管,分别加入 6 mg/mL 的葡萄糖标准液 0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1.0 mL,再分别加入 1.5 mL 的 DNS 试剂,并用蒸馏水定容至 3.5 mL,配成不同葡萄糖含量的反应液,将各管摇匀,置于沸水浴 5 min 后取出,用流水迅速冷却至室温,用蒸馏水定容至 20 mL,加塞后颠倒均匀,在分光光度计上进行比色。调波长 540 nm,空白调零,以还原糖的质量数据绘制图 1(b)所示的还原糖标准曲线。每个待测液样本取 0.2 mL,用同样的方法测吸光度。

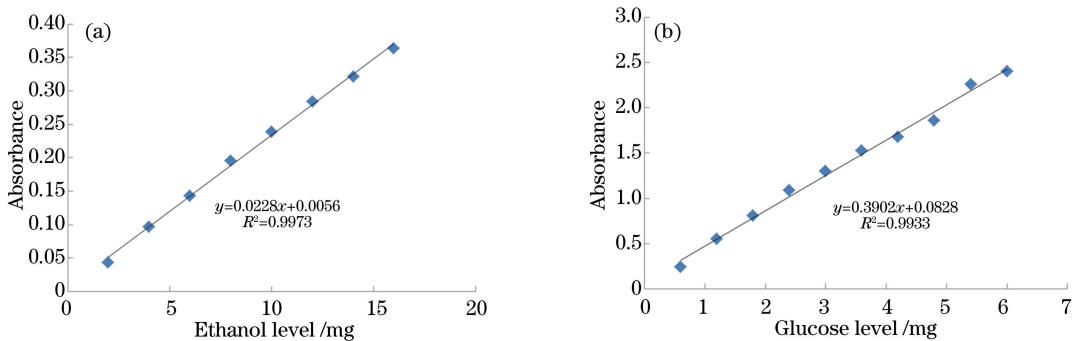


图 1 (a)乙醇标准曲线;(b)还原糖标准曲线

Fig. 1 (a) Ethanol standard curve; (b) glucose standard curve

从图 1(a)可看出,乙醇含量在 2~16 mg 的范围内与吸光度 A 之间呈线性相关,线性回归方程为 $y = 0.0228x + 0.0056$ ($R^2 = 0.9973$),其中 x 是乙醇含量, y 是吸光度。从图 1(b)可看出,还原糖含量在 0.6~6 mg 的范围内与吸光度 A 之间呈线性相关,线性回归方程为 $y = 0.3902x + 0.0828$ ($R^2 = 0.9933$),其中 x 是葡萄糖含量, y 是吸光度。两个回归方程 R^2 均大于 0.99,均可用于定量分析。根据每个待测液样本的吸光度结合乙醇和葡萄糖标准曲线,可得到每个样本待测液的乙醇和还原糖含量。表 1 显示 0.2 mL 待测液乙醇含量为 0.5232~8.4472 mg,还原糖含量为 0.7964~5.0725 mg,校正集和验证集样本数分别为 110 个和 22 个。

表 1 样本乙醇和还原糖含量在校正集和验证集中的统计描述

Table 1 Statistical description of ethanol and glucose levels in the calibration and validation sets

Procedure parameter	Sample set	Sample number	Range /mg	Mean /mg	Standard deviation
Ethanol level	Calibration set	110	0.5232-8.4472	6.0346	2.3170
	Validation set	22	0.5670-8.2721	6.3319	2.1682
Glucose level	Calibration set	110	0.7964-5.0725	3.2227	1.3568
	Validation set	22	0.8066-5.0776	3.4779	1.3021

图 2 为 4 个批次的乙醇含量在整个发酵周期的增长曲线,前 4 天乙醇含量快速增长,所产生的乙醇量占到了整个发酵周期乙醇量的 83%,第 5~9 天缓慢增长,这阶段产生的乙醇量占整个发酵周期乙醇量的 16%,第 10 天以后乙醇含量趋于稳定,发酵基本完成。

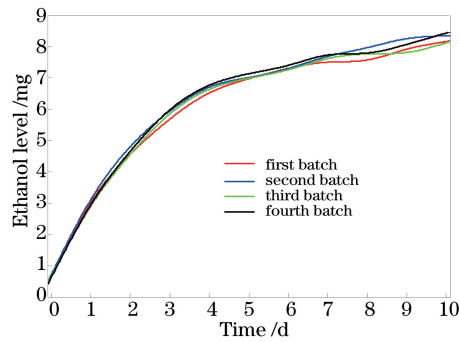


图 2 乙醇含量增长曲线

Fig. 2 Growth curves of ethanol levels in a complete fermentation cycle

3.3 近红外光谱采集

使用美国 Thermo Scientific 公司的 AntarisTM II 型傅里叶变换近红外光谱仪,采用 InGaAs 检测器,以内置参比为背景,利用智能透射附件模块采集发酵待测液样本的近红外光谱,扫描光谱波数范围为 $4000 \sim 10000 \text{ cm}^{-1}$,扫描次数为 32 次,光谱分辨率为 8.0 cm^{-1} ,这样得到的每条光谱包含 1557 个数据点。实验室温度保持在 $28 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 左右,空气湿度保持稳定。每个样本在不同的角度采集 3 次,将其平均光谱作为样本原始光谱,得到图 3(a)所示的原始光谱。采集的原始光谱除自身信息外,还包含随机噪声、基线漂移、样品背景、杂散光等无关信息,采用 SNV 光谱预处理方法来消除外界干扰,图 3(b)为 SNV 预处理光谱。

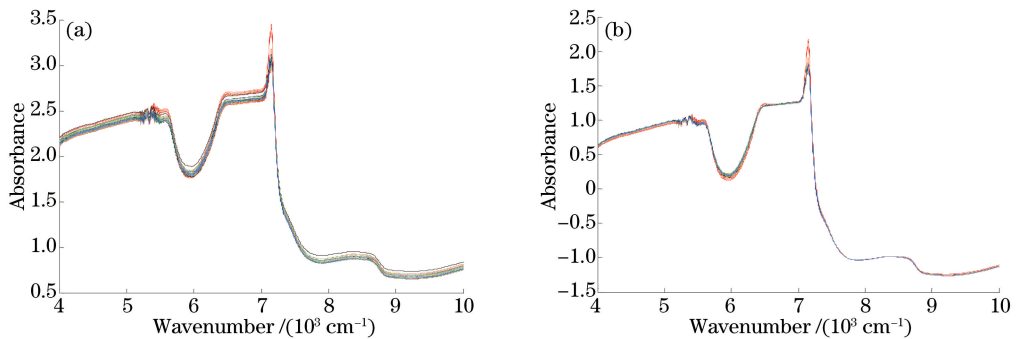


图 3 (a) 发酵样本的原始光谱;(b) SNV 预处理光谱

Fig. 3 (a) Raw spectrum of fermentation sample; (b) SNV preprocessed spectrum

4 实验结果

4.1 siPLS 变量筛选

每条初始光谱包含 1557 个波长变量,直接用 IRIV 方法筛选初始光谱变量耗时较长,所以先采用 siPLS 方法选择最佳光谱区间,以降低数据维度提高模型预测精度。先把光谱波长划分为 10~25 个区间,再分别从这些区间中选择 2,3 和 4 个子区间,计算每一组子区间的 RMSECV 值,选择 RMSECV 最小的一组子区间作为模型筛选出的最优波长区间。关于乙醇的光谱最优子区间是从光谱划分的 11 个子区间中选择的第 8,9,10,11 四个区间,即 $10001.03 \sim 7829.58 \text{ cm}^{-1}$ 波长范围的光谱区间,共 564 个特征波长变量,此时 RMSECV 最小为 0.3343;关于还原糖的光谱最优子区间是从光谱划分的 19 个子区间中选择的第 6,7,11,19 四个区间,即 $10001.03 \sim 9692.47, 7474.74 \sim 7162.33, 6209.66 \sim 5580.98 \text{ cm}^{-1}$ 波长范围的光谱区间,共 327 个特征波长变量,此时 RMSECV 最小为 0.2055。

4.2 IRIV 变量筛选

用 IRIV 方法从 siPLS 筛选的变量中进一步提取最优特征波长变量,选取了关于乙醇和还原糖的特征

波长变量。由于 IRIV 方法每次选取的特征变量有一定随机性,所以运行 10 次,选取 RMSEP 最小的一次作为最终结果。IRIV 的参数设置为 5 折交叉验证,最大主因子数为 10。IRIV 方法从与乙醇相关包含 564 个变量的最优光谱联合区间中选取了 43 个最优特征波长变量,从与还原糖相关的包含 327 个变量的最优光谱联合区间中选取了 40 个最优特征波长变量。

4.3 PLS 建模

利用 IRIV 方法筛选的与参数乙醇和还原糖相关的特征波长变量建立 PLS 预测模型。作为对比,分别利用 GA 和 CARS 这两种方法从 siPLS 筛选的最佳光谱区间中进一步提取最优特征波长变量,再利用筛选出的与参数乙醇和还原糖相关的特征波长变量分别建立 PLS 预测模型。图 4 为 IRIV-siPLS 预测模型的验证集样本乙醇和还原糖含量的预测值与测量值散点图。由图 4(a)可知,在验证集中,关于参数乙醇的 IRIV-siPLS 预测模型的 RMSEP 和 R_p 分别为 0.2511 和 0.9934;由图 4(b)可知,关于参数还原糖的 IRIV-siPLS 预测模型的 RMSEP 和 R_p 分别为 0.1730 和 0.9926。

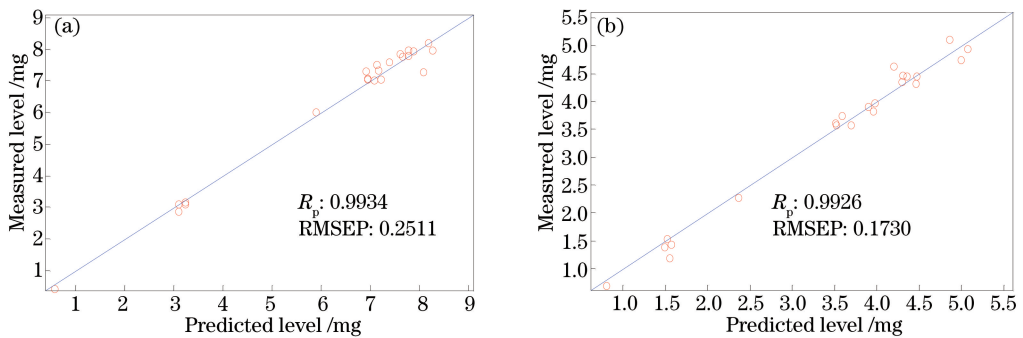


图 4 IRIV-siPLS 模型验证集预测结果。(a)乙醇含量;(b)还原含量

Fig. 4 Prediction results of IRIV-siPLS model in validation set. (a) Ethanol levels; (b) glucose levels

4.4 结果比较与分析

表 2 列出了关于参数乙醇和还原糖的不同 PLS 预测模型结果。GA、CARS 和 IRIV 方法从最佳光谱区间中筛选的与参数乙醇相关的变量个数分别为 101, 63, 43;利用 GA、CARS 和 IRIV 方法筛选出的与乙醇相关的波长变量建立的 PLS 预测模型中,验证集的 RMSEP 分别为 0.2693, 0.2551, 0.2511, R_p 分别为 0.9922, 0.9931, 0.9934;从表 2 中可以看出 IRIV 方法筛选的与参数乙醇相关的变量个数是最少的,而且其 PLS 模型关于参数乙醇含量的预测结果也是三种模型中最好的。

表 2 关于参数乙醇和还原糖的不同 PLS 预测模型结果

Table 2 Results of different PLS prediction models for ethanol and glucose

Compound	Model	Variable number	Principle component	Calibration set		Validation set	
				R_c	RMSECV	R_p	RMSEP
Ethanol	GA-siPLS	101	8	0.9954	0.2219	0.9922	0.2693
	CARS-siPLS	63	8	0.9961	0.2034	0.9931	0.2551
	IRIV-siPLS	43	8	0.9971	0.1762	0.9934	0.2511
Glucose	GA-siPLS	82	7	0.9864	0.2224	0.9785	0.2744
	CARS-siPLS	53	8	0.9897	0.1940	0.9868	0.2186
	IRIV-siPLS	40	8	0.9968	0.1084	0.9926	0.1730

GA、CARS 和 IRIV 方法从最佳光谱区间中筛选的与参数还原糖相关的变量个数分别为 82, 53, 40 个;利用 GA、CARS 和 IRIV 方法筛选出的与还原糖相关的波长变量建立的 PLS 预测模型中,验证集的 RMSEP 分别为 0.2744, 0.2186, 0.1730, R_p 分别为 0.9785, 0.9868, 0.9926;从表 2 中可以看出 IRIV 方法筛选的与参数还原糖相关的变量个数是最少的,而且其 PLS 模型关于参数还原糖含量的预测结果也是三种模型中最好的。IRIV 方法在这里只用于光谱数据筛选并取得很好的效果,但是 IRIV 是一种通用方法,结合回归和分类模型可用在其他数据集,比如基因组学、生物信息学、代谢组学和定量构效关系(QSAR)^[27]。

5 结 论

利用近红外光谱分析技术实现了乙醇固态发酵过程关键参数的在线快速检测。对 GA, CARS, IRIV 这三种变量筛选方法做了比较分析。结果显示, IRIV 方法能有效筛选出与参数乙醇和还原糖相关的特征波长变量, IRIV 方法筛选的与乙醇和还原糖相关的特征变量个数分别为 43 和 40, 结果优于 GA 和 CARS 方法; IRIV-siPLS 模型关于参数乙醇的 RMSEP 和 R_p 分别为 0.2511 和 0.9934, 关于参数还原糖的 RMSEP 和 R_p 分别为 0.1730 和 0.9926, 结果优于 GA-siPLS 和 CARS-siPLS 模型。因此, 利用近红外光谱分析技术能有效地对乙醇固态发酵过程关键参数乙醇和还原糖含量进行预测; 并且 IRIV 方法能有效地筛选近红外光谱特征波长, 可提高模型预测精度。

参 考 文 献

- [1] Zhang Huaidong. Studies on strains breeding of sweet potato alcohol fermentation and liquid fermentation technology [D]. Guizhou: Guizhou University, 2009: 4-9.
张怀东. 红薯酒精发酵菌种的选育及液体发酵工艺研究[D]. 贵州: 贵州大学, 2009: 4-9.
- [2] Zhao Zhiyong. Studies on liquid fuel ethanol production by sweet sorghum fermentation [D]. Shihezi: Shihezi University, 2009.
赵志永. 甜高粱液态发酵制备燃料乙醇的研究[D]. 石河子: 石河子大学, 2009.
- [3] Wei Jie, Chen Qingfu, Guo Juhui. Liquid fermentation technology for buck wheat wine production by germinated common buckwheat seeds[J]. China Brewing, 2014, 33(8): 43-46.
尉杰, 陈庆富, 郭菊卉. 普通荞麦发芽种子的液态发酵荞麦酒工艺研究[J]. 中国酿造, 2014, 33(8): 43-46.
- [4] Han Bing, Fan Guifang, Li Shizhong, *et al.* Comparison of ethanol production from different sugar feedstocks by solid state fermentation with two yeast strains[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2012, 28(5): 201-206.
韩冰, 范桂芳, 李十中, 等. 不同糖质原料和菌株固态发酵制取乙醇的特性比较[J]. 农业工程学报, 2012, 28(5): 201-206.
- [5] Li S Z, Li G M, Zhang L, *et al.* A demonstration study of ethanol production from sweet sorghum stems with advanced solid state fermentation technology[J]. Applied Energy, 2013, 102(2): 260-265.
- [6] Ma Wenchao. Studies on alcoholic fermentation using uncooked corn flour[D]. Wuxi: Jiangnan University, 2005.
马文超. 玉米生料发酵酒精的研究[D]. 无锡: 江南大学, 2005.
- [7] Yu M H, Li J H, Li S Z, *et al.* A cost-effective integrated process to convert solid-state fermented sweet sorghum bagasse into cellulosic ethanol[J]. Applied Energy, 2014, 115(4): 331-336.
- [8] Horita M, Kitamoto H, Kawaide T, *et al.* On-farm solid state simultaneous saccharification and fermentation of whole crop forage rice in wrapped round bale for ethanol production[J]. Biotechnology for Biofuels, 2015, 8(1): 9.
- [9] Yu M H, Li J H, Chang S, *et al.* Optimization of ethanol production from NaOH-pretreated solid state fermented sweet sorghum bagasse[J]. Energies, 2014, 7(7): 4054-4067.
- [10] Xu Fujian, Chen Hongzhang, Li Zuohu. New developments in engineering aspects of solid-state fermentation [J]. Journal of Chinese Biotechnology, 2002, 22(1): 44-48.
徐福建, 陈洪章, 李佐虎. 固态发酵工程研究进展[J]. 中国生物工程杂志, 2002, 22(1): 44-48.
- [11] Blanco M, Villarroya I. NIR spectroscopy: a rapid-response analytical tool[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2002, 21(4): 240-250.
- [12] DiEgidio V, Sinelli N, Giovanelli G, *et al.* NIR and MIR spectroscopy as rapid methods to monitor red wine fermentation[J]. European Food Research and Technology, 2010, 230(6): 947-955.
- [13] Cui Jicheng, Ding Dong, Zhang Hongyan, *et al.* New determination and analysis of near-infrared spectra of glucose solution[J]. Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory, 2003, 20(2): 257-259.
崔继承, 丁东, 张洪艳, 等. 葡萄糖溶液近红外光谱的测量与分析[J]. 光谱实验室, 2003, 20(2): 257-259.
- [14] Gong Zhiyuan, Li Yifan, Liu Yande, *et al.* Study on influence of irradiation angle on detection of sugar content of apple by near infrared spectroscopy[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(2): 023004.
龚志远, 李轶凡, 刘燕德, 等. 光源照射角度对苹果糖度近红外光谱检测的影响研究[J]. 激光与光电子学进展,

2016, 53(2): 023004.

- [15] Zhang Shuming, Yang Yang, Liang Xuejun, *et al.* NIR spectroscopy analysis of main parameters in red wine fermentation[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Machinery, 2013, 44(1): 152-156.
张树明, 杨 阳, 梁学军, 等. 葡萄酒发酵过程主要参数近红外光谱分析[J]. 农业机械学报, 2013, 44(1): 152-156.
- [16] Li Yanping, Xu Hongxian, Qian Ying, *et al.* New methods for NIRS analysis of alcohol in fermentation broth[J]. Food and Fermentation Industries, 2008, 34(7): 136-140.
李燕萍, 许宏贤, 钱 莹, 等. 发酵液中乙醇含量的近红外光谱 NIRS 定量分析与验证[J]. 食品与发酵工业, 2008, 34(7): 136-140.
- [17] Zhang X, Li W, Yin B, *et al.* Improvement of near infrared spectroscopic (NIRS) analysis of caffeine in roasted arabica coffee by variable selection method of stability competitive adaptive reweighted sampling (SCARS)[J]. Spectrochimica Acta Part A, 2013, 114: 350-356.
- [18] Yun Y H, Wang W T, Tan M L, *et al.* A strategy that iteratively retains informative variables for selecting optimal variable subset in multivariate calibration[J]. Analytica Chimica Acta, 2014, 807(1): 36-43.
- [19] 武广号, 文 毅, 乐美峰. 遗传算法及其应用[M]. 北京: 人民邮电出版社, 1996.
- [20] Li H D, Liang Y Z, Xu Q S, *et al.* Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration[J]. Analytica Chimica Acta, 2009, 648(1): 77-84.
- [21] Wu Xiaohong, Sun Jun, Wu Bin, *et al.* Qualitative analysis model of near infrared spectra of pork based on synergy interval partial least squares discriminant analysis[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(4): 043003.
武小红, 孙 俊, 武 斌, 等. 基于联合区间偏最小二乘判别分析的猪肉近红外光谱定性建模分析[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(4): 043003.
- [22] Norgaard L, Saudland A, Wagner J, *et al.* Interval partial least-squares regression (iPLS): a comparative chemometric study with an example from near-infrared spectroscopy[J]. Applied Spectroscopy, 2000, 54(3): 413-419.
- [23] Dong Yongfang, Meng Yaoyong, Zhang Pingli, *et al.* Accurate age estimation of bloodstains based on visible reflectance and genetic algorithm interval partial least squares[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(8): 0830001.
董永芳, 孟耀勇, 张平丽, 等. 基于可见反射光谱和遗传区间偏最小二乘法的血迹年龄预测研究[J]. 光学学报, 2015, 35(8): 0830001.
- [24] Mu Jianlou, Wang Jie, Zhang Wei, *et al.* Methods for determination of alcohol[J]. Liquor Making, 2006, 33(2): 46-48.
牟建楼, 王 颖, 张 伟, 等. 乙醇的测定方法综述[J]. 酿酒, 2006, 33(2): 46-48.
- [25] 宁正祥. 食品成分分析手册[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 1998.
- [26] Yang Junhui, Zheng Lan, Ma Yaohong, *et al.* Comparison of different determination of reducing sugar in potato[J]. Food Research and Development, 2011, 32(6): 104-108.
杨俊慧, 郑 岚, 马耀宏, 等. 马铃薯中还原糖不同测定方法的比较[J]. 食品研究与开发, 2011, 32(6): 104-108.
- [27] Goodarzi M, Heyden Y V, Funar-Timofei S. Towards better understanding of feature-selection or reduction techniques for quantitative structure-activity relationship models[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2013, 42(1): 49-63.