

# 汽油中乙醇光谱特征谱段的有效选取及应用



李轲<sup>1</sup>, 鲁冰<sup>2</sup>, 杜彪<sup>2</sup>, 卢小新<sup>2</sup>, 刘喆<sup>1</sup>, 李庆武<sup>1</sup>, 张正东<sup>1\*</sup>

1. 中国计量科学研究院, 北京 100029

2. 北京易兴元石化科技有限公司, 北京 101301

**【摘要】** 近红外光谱快速分析技术是检测汽油中乙醇含量的主要方法之一, 光谱谱段的选择是影响快检模型预测准确性的重要因素。本研究建立了一种基于有效特征谱段的近红外光谱快速分析方法, 提高了汽油中乙醇含量检测的准确度。通过对比不同浓度乙醇含量的汽油近红外光谱图, 确定了汽油中乙醇分子的有效特征谱段是  $4524.183 \sim 5044.869 \text{ cm}^{-1}$  和  $5985.961 \sim 7108.329 \text{ cm}^{-1}$ 。选择最优的近红外光谱预处理方法, 分别使用近红外光谱全谱段和有效特征谱段进行建模分析。使用特征谱段建立的数据模型相关参数如下: 交叉验证均方根误差 ( $RMSECV$ ) 是 0.5849, 内部交叉验证相关系数 ( $R_{CV}^2$ ) 是 0.9991, 预测均方根误差 ( $RMSEP$ ) 是 0.6090, 预测集外部验证相关系数 ( $R_p^2$ ) 是 0.9989。相较于全波长建模分析, 使用特征谱段建立模型的  $RMSECV$  降低了 30.27%,  $RMSEP$  降低了 18.58%。综上, 使用特征谱段建立的模型准确度较高, 能够满足汽油中乙醇含量快速分析的需求。

**【关键词】** 乙醇汽油; 近红外光谱; 光谱特征谱段; 乙醇含量; 油品快速分析

**DOI:** 10.12338/j.issn.2096-9015.2021.0631

**【引用本文】** 李轲, 鲁冰, 杜彪, 等. 汽油中乙醇光谱特征谱段的有效选取及应用 [J]. 计量科学与技术, 2022, 66(5): 19-24.

## Effective Selection and Application of Ethanol Characteristic Spectrum in Gasoline

LI Ke<sup>1</sup>, LU Bing<sup>2</sup>, DU Biao<sup>2</sup>, LU Xiaoxin<sup>2</sup>, LIU Zhe<sup>1</sup>, LI Qingwu<sup>1</sup>, ZHANG Zhengdong<sup>1</sup>

1. National Institute of Metrology, Beijing 100029, China

2. Beijing Yixingyuan Petrochemical Technology Co. Ltd., Beijing 101301, China

Corresponding author: ZHANG Zhengdong, Email: zhangzhengdong@nim.ac.cn

**【Abstract】** Near-infrared spectroscopy rapid analysis is one of the main methods to detect the ethanol content in gasoline, and the selection of the spectrum is an important factor affecting the prediction accuracy of the rapid detection model. In this study, a rapid analysis method of near-infrared spectroscopy based on an effective characteristic spectrum was established to improve the accuracy of detection of ethanol content in gasoline. By comparing the near-infrared spectra of gasoline with different concentrations of ethanol content, the effective characteristic spectrum of ethanol molecules in gasoline was determined to be  $4524.183 \sim 5044.869 \text{ cm}^{-1}$  and  $5985.961 \sim 7108.329 \text{ cm}^{-1}$ . The optimal pre-processing method for near-infrared spectroscopy was chosen, and modeling analysis was carried out using the full-spectrum and effective characteristic spectrum. The relevant parameters of the model established using the effective characteristic spectrum are as follows: the root-mean-square error of cross-validation ( $RMSECV$ ) is 0.5849, the internal cross-validation correlation coefficient ( $R_{CV}^2$ ) is 0.9991, the root-mean-square error of prediction ( $RMSEP$ ) is 0.6090, and the external verification correlation coefficient ( $R_p^2$ ) of the prediction set is 0.9989. Compared with the full-spectrum modeling analysis, the  $RMSECV$  was reduced by 30.27%, and the  $RMSEP$  was reduced by 18.58%. In conclusion, the quantitative analysis model established by using the characteristic spectrum has higher accuracy and can meet the need for rapid analysis of ethanol content in gasoline.

**【Key words】** ethanol gasoline, near-infrared spectroscopy, spectral characteristic spectrum, ethanol content, rapid analysis of gasoline

基金项目: 中国计量科学研究院基本科研业务费项目 (AKYZZ2131); 国家科技基础条件平台项目 (APT2101-8); 院企横向科研项目 (JSFW2102)。

作者简介: 李轲 (1990-), 中国计量科学研究院在站博士后, 研究方向: 化学计量, 邮箱: like@nim.ac.cn; 通讯作者: 张正东 (1976-), 中国计量科学研究院副研究员, 研究方向: 化学计量, 邮箱: zhangzhengdong@nim.ac.cn。

## 0 引言

据中华人民共和国国家统计局统计,截止到2020年底,我国民用汽车保有量达28087万辆,比上年末增加1937万辆。未来几年,我国汽车保有量仍将持续增长,交通运输等行业的发展对于汽柴油等能源的需求越来越大。在全球石油资源日益枯竭的背景下,世界各国都在发展传统化石能源的替代燃料<sup>[1-3]</sup>,乙醇汽油作为一种低碳、清洁的绿色燃料而备受关注<sup>[4]</sup>。乙醇汽油是将普通汽油和燃料乙醇按照一定体积比调和而成的新型替代燃料,并且燃料乙醇是一种可再生资源,乙醇汽油的广泛应用可以大大缓解巨大的能源需求压力。除此之外,乙醇汽油含氧量较高,充分燃烧可以有效降低汽车尾气中一氧化碳和碳氢化合物等有害物质的排放,乙醇汽油的使用可以有效减少传统化石能源燃烧对于环境造成的污染<sup>[5-6]</sup>。因此,乙醇汽油在成品油市场中占有的份额越来越大。随着乙醇汽油的逐步推广,其质量状况受到了越来越多的关注。通过油品质量抽查,发现市场中存在乙醇汽油含量不达标或者超标,甚至出现乙醇汽油不含乙醇的情况。有研究表明使用质量不达标的乙醇汽油有可能导致发动机转速不稳定,甚至引发发动机故障<sup>[7-8]</sup>。因此,需要保障成品油市场中的油品质量,进一步加强油品流动领域中乙醇汽油的质量抽查、监管。

GB/T 18351《车用乙醇汽油(E10)》中规定,乙醇含量的检测方法是气相色谱法<sup>[9-10]</sup>,该方法具有良好的准确性和重现性,是分析油品中乙醇含量的可靠手段。然而,气相色谱法使用的仪器体积较大,便携性差,且该方法分析时间较长,不能满足现场分析和即时检测的市场监管需求。为了满足上述需求,一些用于油品中乙醇含量的快速分析方法得到了开发,比如拉曼光谱法<sup>[11]</sup>和近红外光谱法<sup>[12-13]</sup>等。其中,近红外光谱法是一种快速、无损、绿色的分析技术,其结合偏最小二乘法、主成分分析等多元统计分析方法<sup>[14-18]</sup>,在汽油中乙醇含量的快速分析中得到了较广泛的应用<sup>[19-20]</sup>。然而,近红外光谱的吸收强度较弱,光谱谱段中含有无效或者冗余信息,使用这些谱段进行建模会使快速分析模型的预测性能和稳定性下降,导致模型预测不准确等问题。

为了提高近红外光谱建模分析的准确度,一些用于光谱谱段的变量筛选方法得到了开发和应用,比如间隔偏最小二乘法、连续投影算法、变量重要性投影算法和竞争自适应抽样方法等<sup>[20]</sup>。这些技

术利用统计筛选的方法获取与性质指标相关性较大的光谱变量,在一定程度上可以提高模型的稳定性和准确性。但这些方法仍然无法摆脱由于环境、仪器性能等因素引发的光谱与性质变量之间假相关性的问题。正因为此,未见上述方法在乙醇汽油快检分析的推广应用。目前,汽油中乙醇含量的快检方法大多采用全光谱谱段或笼统选取有明显信号吸收的谱段进行建模,这种方法会引入噪声或者其他成分对应谱段的干扰,对汽油中乙醇含量的预测精度产生重要影响。因此,为了提高近红外光谱技术快速分析汽油中乙醇含量的准确性,促进其在油品快速分析领域的应用,需要建立一种高效的特征谱段筛选方法。

本研究建立了一种基于有效光谱谱段的乙醇含量快速分析方法,通过提取乙醇分子结构组成对应的特征光谱谱段进行建模,对汽油中的乙醇含量进行检测,并且与全波长建立模型的检测结果进行比较,以验证该方法的准确性。

## 1 实验方法

### 1.1 乙醇-汽油样品的配制

在北京市的不同加油站采购涵盖不同品牌的多种92#和95#汽油,包括中石油、中石化和中化集团旗下多家加油站的不同批次汽油,其加工工艺不同,成分组成差异较大,且采购的汽油中均不含有乙醇。使用上述汽油作为溶剂,配制44种系列乙醇(分析纯,购于福晨(天津)化学试剂有限公司)浓度的乙醇汽油。通过对不同来源的汽油进行配制,可以确保每种样品的基底成分不同,增加样品的复杂性,提高建模效果的普适性和稳健性。样品中乙醇的浓度(体积分数)分别为0.5%、1%、2%、3%、4%、…、28%、29%、30%、32%、34%、36%、38%、40%、45%、50%、…、70%、75%和80%,选择浓度为2%、5%、8%、11%、14%、17%、20%、23%、26%、29%、34%、40%、55%和70%的14个样品作为预测集样本,其余30个样品作为校正集样本。

### 1.2 光谱的采集和处理

通过Antaris II型傅立叶变换近红外光谱仪(赛默飞世尔科技(中国)有限公司)采集乙醇汽油的光谱图。选择1 mm光程的比色皿,以空气作为背景,使用透射模式采集汽油样品的光谱信号,扫描范围 $10000 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ ,扫描次数32次,分辨率 $4 \text{ cm}^{-1}$ ,每种样品平行采集3次,取平均值。

利用 origin 9.1 软件和 The Unscrambler X 软件对光谱数据进行处理, 选择 Savitzky-Golay 卷积平滑、一阶导数、多元散射校正、矢量归一化和标准正态变换等光谱数据预处理方法对光谱数据进行消噪处理, 并比较处理效果。其中一阶导数预处理方法可以消除近红外光谱可能产生的漂移和某些背景信号的干扰; 标准正态变换可以消除光谱采集过程中样品表面可能存在的散射以及光程变化产生的影响; 矢量归一化有助于增强光谱特征吸收峰在建模中的作用; 多元散射校正可以消除汽油样品中机械杂质等颗粒引发散射现象而造成样品光谱的干扰; Savitzky-Golay 卷积平滑处理可以有效降低光谱信号中的噪声影响, 提高信噪比。

### 1.3 模型评价

通过偏最小二乘法建立近红外光谱特征谱段和全谱段的汽油中乙醇含量校正模型。选用内部交叉验证相关系数( $R_{CV}^2$ )和交叉验证均方根误差( $RMSECV$ )作为评价校正模型好坏的依据<sup>[21-22]</sup>,  $R_{CV}^2$ 越接近于 1,  $RMSECV$  越小, 说明建立的校正模型精密密度越好。预测均方根误差( $RMSEP$ )和预测集外部验证相关系数( $R_p^2$ )通常作为评价模型预测能力的指标<sup>[23]</sup>,  $R_p^2$ 越接近于 1,  $RMSEP$  越小, 模型预测的准确度越好。除此之外,  $RMSECV$  和  $RMSEP$  越接近, 建立模型的稳定性越好。因此, 本研究选用  $RMSECV$ 、 $R_{CV}^2$ 、 $RMSEP$  和  $R_p^2$  四种参数来比较两种谱段所建立模型的效果。

## 2 结果与讨论

### 2.1 光谱分析

汽油的主要成分是 C5 ~ C12 的链状烷烃、环状烷烃、烯烃和芳烃, 在近红外光谱谱段范围内, 汽油中各组分的 C-C 键和 C-H 键等基团均有较强的吸收性, 而乙醇在该谱段的吸收峰主要源于分子结构中的 C-H 键和 O-H 键。图 1 是含有不同浓度乙醇的汽油样品近红外光谱图, 不同颜色的光谱图分别对应体积分数为 0.5% ~ 80% 的乙醇汽油样品, 汽油中乙醇的体积分数越大, 样品的吸光强度越强。在汽油基质中, 乙醇 O-H 键的吸收峰受其他组分影响较小, 如图 1 所示, 随着汽油中乙醇浓度的增加, 4524 ~ 5045  $\text{cm}^{-1}$  和 5986 ~ 7108  $\text{cm}^{-1}$  波长范围内的吸收强度逐渐增强, 这两段波长区域分别是乙醇的 O-H 键一级伸缩振动与弯曲振动的组合频吸收峰谱区, 和 O-H 键一级伸缩振动倍频吸收峰谱区, 这两段光

谱区域能够有效反映乙醇浓度的变化。因此, 本研究选择 4524 ~ 5045  $\text{cm}^{-1}$  和 5986 ~ 7108  $\text{cm}^{-1}$  的光谱区域作为乙醇汽油快速分析模型中检测乙醇含量的特征谱段。

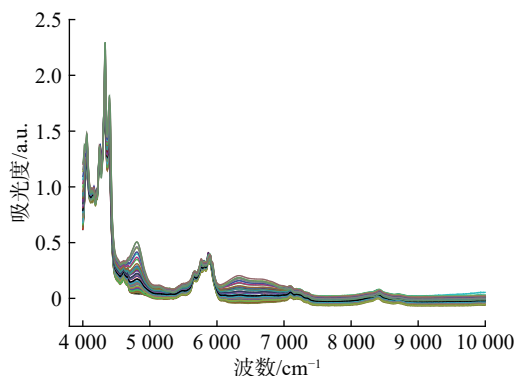


图 1 乙醇汽油的近红外光谱图  
Fig.1 Near-infrared spectra of ethanol gasoline

### 2.2 最佳光谱预处理方法

用一阶导数、标准正态变换、矢量归一化、多元散射校正和 Savitzky-Golay 卷积平滑等方法对不同浓度乙醇含量的汽油样品光谱进行预处理。不同预处理方法对光谱信号的处理效果不同, 进而影响模型的预测结果(见表 1)。光谱经不同方法预处理后, 建立乙醇汽油快检模型的  $RMSECV$  均优于原始光谱建立模型的对值。一阶导数法处理后光谱建立模型的  $R_{CV}^2$  最佳, 优于原始光谱建立模型的  $R_{CV}^2$ 。在预测集样本的外部验证中, 一阶导数法处理后的光谱建立的模型可以获得最小的  $RMSEP$ , 较原始光谱建立的模型, 其  $RMSEP$  从 1.4163 减小到 0.7480,  $R_p^2$  从 0.9942 增大到 0.9982, 可以说明, 经一阶导数法处理后, 光谱建立模型的预测准确度更高, 线性相关性更显著。因此, 最终选择一阶导数法对乙醇汽油样品的近红外光谱进行预处理。

表 1 不同预处理方法的全波长建模模型性能比较

Tab.1 Performance comparison of full-spectrum modeling models with different pre-processing methods

预处理方法	校正集		预测集	
	$RMSECV$	$R_{CV}^2$	$RMSEP$	$R_p^2$
原始光谱	1.8817	0.9980	1.4163	0.9942
一阶导数	0.8388	0.9984	0.7480	0.9982
标准正态变换	1.1763	0.9909	1.6889	0.9792
矢量归一化	1.4365	0.9944	1.6948	0.9918
多元散射校正	1.3668	0.9952	2.1895	0.9862
Savitzky-Golay卷积平滑	0.8606	0.9980	1.3472	0.9948

### 2.3 特征光谱谱段与全波长建模对比

使用不同方法预处理后,通过比较特征谱段建立的模型性能(见表2)可以看出,一阶导数法处理后光谱建立的模型效果最好。通过一阶导数法对乙醇汽油的近红外光谱进行预处理,图2是预处理后的结果。分别使用乙醇汽油的近红外光谱全波长和乙醇的特征谱段建模,对比分析两种谱段建立模型的效果。以一阶导数法处理后光谱建立的模型为例,如表1和表2所示,相较于全波长建模,特征谱段建立模型的RMSECV由0.8388减小到0.5849,  $R_{CV}^2$ 从0.9984增加到0.9991,特征谱段建立的模型的内部验证误差降低,线性相关性增强,该模型的性能更好。使用特征谱段建立的模型进行预测集样本的验证也取得了较好的结果。预测集样本的RMSEP由0.7480降低到0.6090,  $R_p^2$ 由0.9982增加到0.9989,使用特征谱段建立的模型预测准确性更好。

表2 不同预处理方法的特征谱段建模模型性能比较

Tab.2 Performance comparison of characteristic spectrum modeling models with different pre-processing methods

预处理方法	校正集		预测集	
	RMSECV	$R_{CV}^2$	RMSEP	$R_p^2$
原始光谱	0.9681	0.9984	0.9848	0.9986
一阶导数	0.5849	0.9991	0.6090	0.9989
标准正态变换	0.9524	0.9932	1.6504	0.9922
矢量归一化	0.9765	0.9985	1.4466	0.9934
多元散射校正	0.9583	0.9950	1.2998	0.9882
Savitzky-Golay卷积平滑	0.7011	0.9989	0.8940	0.9977

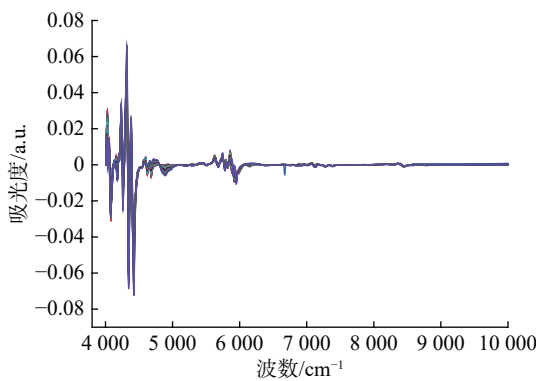


图2 使用一阶导数处理后的近红外光谱图

Fig.2 Near-infrared spectra processed with first order derivative

此外,从表1和表2的结果对比中也可以发现,无论选用哪种预处理方法,特征谱段光谱建立的模型参数均优于全光谱谱段建立的模型参数,说

明通过特征谱段能建立更为有效的模型,实现预测样本的准确分析。这可能是由于特征谱段可以规避复杂汽油组分中其他成分和光谱无用信息的干扰,因此更能准确反映汽油中的乙醇含量。

### 2.4 有效特征谱段光谱建模的应用

主成分数是对光谱数据进行降维处理后所获得的能够代表绝大部分光谱信息和性质变量的潜变量数目。最佳主成分数目的选择对于模型预测性能有重要影响,主成分数目过少,会导致原始光谱信息重要变量的丢失,产生欠拟合现象;主成分数目过多,会引入不必要的光谱噪声信号,导致过拟合现象<sup>[24-25]</sup>。解释方差代表了降维后各主成分的方差值,解释方差数值越大,说明该主成分越重要。对于模型中解释方差和主成分数之间的关系进行了探究,优化了模型的主成分数。

光谱数据(X变量)和乙醇浓度数据(Y变量)的解释方差和主成分数相关关系分别如图3和图4所示。X变量中2个主成分的解释方差数达99.66%,几乎可以解释全部光谱的有效信息;Y变量取2个主成分时,解释方差达到99.91%,说明2个主成分可解释99.91%的因变量。无论是自变量还是因变量,当主成分数大于2时,随着主成分数的继续增多,解释方差值基本达到恒定,为了降低模型的复杂度,提高其运行速度和精度,最终选择该模型的最优主成分数是2。

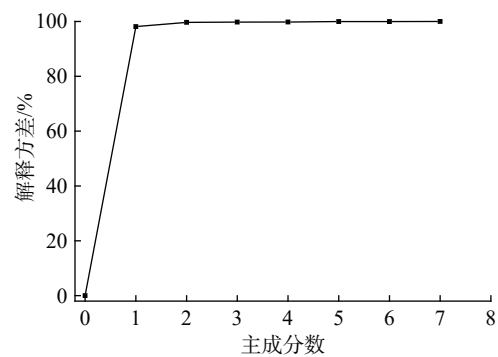


图3 X变量解释方差和主成分相关关系图

Fig.3 Correlation between the X-variable explained variance and the principal component

在最优的条件下,使用偏最小二乘法构建乙醇含量的校正模型(见图5),模型的RMSECV和 $R_{CV}^2$ 分别是0.5849和0.9991, RMSECV值较小说明该模型具有良好的内部验证能力,  $R_{CV}^2$ 值接近于1说明建立的校正模型线性相关性显著。进一步使用预测集样品检验校正模型的外部验证能力(见图6),可以看出该模型的RMSEP和 $R_p^2$ 分别可以达到0.7480和

0.9989。当使用不包含在建模样本中的未知样本进行预测时,  $RMSEP$  值较小, 说明该模型具有较准确的预测能力;  $R_p^2$  大于 0.99, 说明获得了良好的线性相关性。如图 6 所示, 预测集样本的点都能落在拟合曲线上, 表明乙醇含量的预测值与实际含量有良好的对应关系, 进一步说明了建立的校正模型预测的准确度较高。

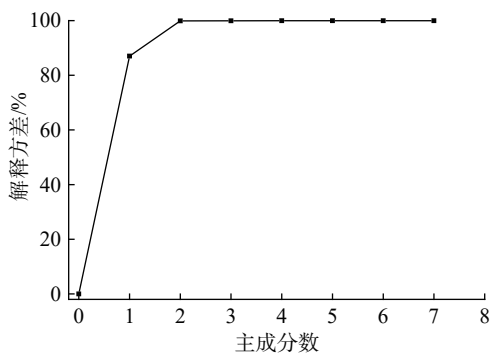


图 4 Y 变量解释方差和主成分相关关系图  
Fig.4 Correlation between explained variance and principal component of the Y-variable

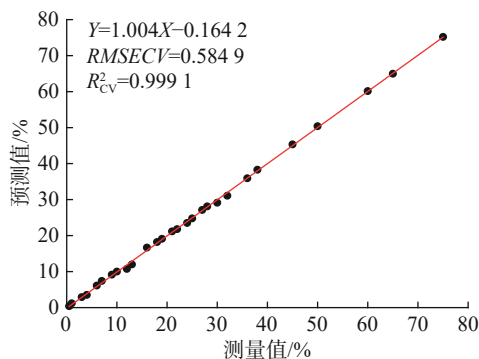


图 5 乙醇含量校正模型的回归曲线  
Fig.5 Regression curve of ethanol content correction model

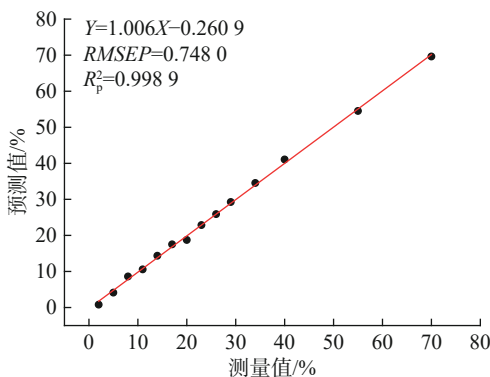


图 6 预测集乙醇含量的预测结果  
Fig.6 The prediction results of the ethanol content in the prediction set

### 3 结论

通过分析乙醇汽油的近红外光谱, 结合乙醇的分子结构, 确定了乙醇特异性响应的近红外光谱有效谱段, 优化了近红外光谱的预处理方法和校正模型的主成分数, 建立了基于光谱有效特征谱段的汽油中乙醇含量快速分析校正模型, 使用该模型实现了预测样本的准确分析。与传统的全波长建模方法进行了比较, 校正模型的  $RMSECV$  和  $RMSEP$  分别降低了 30.27% 和 18.58%, 说明通过特征谱段建立的模型具有更准确的预测能力。基于有效特征谱段的油品快速分析方法是一种准确性较高的特异性分析方法, 该方法有望应用于汽、柴油等复杂样品体系更多性能指标的快速分析中。

### 参考文献

- [1] FERNANDES H L, RAIMUNDO I M, PASQUINI C, *et al.* Simultaneous determination of methanol and ethanol in gasoline using NIR spectroscopy: Effect of gasoline composition[J]. *Talanta*, 2008, 75(3): 804-810.
- [2] ARDEBILI S M S, SOLMAZ H, IPCI D, *et al.* A review on higher alcohol of fusel oil as a renewable fuel for internal combustion engines: Applications, challenges, and global potential[J]. *Fuel*, 2020, 279: 11851.
- [3] 谭宁. 核燃料棒长度自动测量系统有效性验证研究 [J]. *计量科学与技术*, 2021, 65(3): 58-62.
- [4] AWAD O I, MAMAT R, ALI O M, *et al.* Alcohol and ether as alternative fuels in spark ignition engine: A review[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, 82: 2586-2605.
- [5] ZHAO Q H, WU X P, CHEN D Z. Emissions effect of gasoline and ethanol gasoline on vehicle exhaust CO/HC[J]. *Applied Mechanics and Materials*, 2014, 442: 197-200.
- [6] IKHSANIA A, ILMINNAFIK N, FACHRI B A. Heating ethanol-gasoline fuel mixtures to improve performance and reduce exhaust emissions at gasoline engine - A Review[C]. *International Conference on Climate Change and Sustainability in ASEAN*, AIP Conference Proceedings. New York: AMER INST PHYSICS, 2020: 0200241-0200247.
- [7] HU J, LIU Y, HAO Y, *et al.* Qualitative discrimination and quantitative determination model research of methanol gasoline and ethanol gasoline[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(5): 1640-1644.
- [8] ARAPATSAKOS C I, KARKANIS A N, SPARE P D. Gas emissions and engine behavior when gasoline - alcohol mixtures are used[J]. *Environmental Technology*, 2003, 24: 1069-1077.
- [9] 国家质量监督检验检疫总局. 车用乙醇汽油 (E10): GB/T 18351-2017 [S]. 北京: 国家标准出版社, 2017.

- [10] 国家能源局. 汽油中醚类和醇类的测定 气相色谱: NB/SH/T 0663-2014 [S]. 北京: 中国石化出版社, 2014.
- [11] HEILMANN J, HEUMANN K. Sulfur trace determination in petroleum products by isotope dilution ICP-MS using direct injection by thermal vaporization (TV-ICP-IDMS)[J]. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2009, 393: 393-397.
- [12] TEIXEIRA L S G, OLIVEIRA F S, DOS SANTOS H C, *et al.* Multivariate calibration in Fourier transform infrared spectrometry as a tool to detect adulterations in Brazilian gasoline[J]. *Fuel*, 2008, 87(3): 346-352.
- [13] 欧阳爱国, 刘军, 王亚平. 乙醇汽油含量的近红外光谱检测研究 [J]. *激光与红外*, 2012, 42(8): 901-904.
- [14] MOREIRA M, FELICIO A, DE FRANCA J. Evaluation of the influence of sample variability on the calibration of a NIR photometer for quantification of ethanol in gasoline[J]. *Measurement Science and Technology*, 2019, 30(7): 075501.
- [15] LUTZ O M D, BONN G K, RODE B M, *et al.* Reproducible quantification of ethanol in gasoline via a customized mobile near-infrared spectrometer[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2014, 826: 61-68.
- [16] OUYANG A G, LIU J. Classification and determination of alcohol in gasoline using NIR spectroscopy and the successive projections algorithm for variable selection[J]. *Measurement Science and Technology*, 2013, 24(2): 025502.
- [17] MABOOD F, BOQUE R, HAMAED A, *et al.* Near-Infrared spectroscopy coupled with multivariate methods for the characterization of ethanol adulteration in premium 91 gasoline[J]. *Energy Fuels*, 2017, 31(7): 7591-7597.
- [18] CARNEIRO H S P, MEDEIROS A R B, OLIVEIRA F C C, *et al.* Determination of ethanol fuel adulteration by methanol using partial least-squares models based on fourier transform techniques[J]. *Energy Fuels*, 2008, 22(4): 2767-2770.
- [19] PRIETO N, PAWLUCZYK O, DUGAN M E R, *et al.* A Review of the Principles and applications of near-infrared spectroscopy to characterize meat, Fat, and Meat Products[J]. *Applied J Spectroscopy*, 2017, 71(7): 1403-1426.
- [20] 刘喆, 宋小卫, 吴晓凤, 等. 正己烷中石油类标准物质的探讨及分析 [J]. *计量科学与技术*, 2021, 65(6): 39-44.
- [21] YUN Y H, LI H D, DENG B C, *et al.* An overview of variable selection methods in multivariate analysis of near-infrared spectra[J]. *Trends in Analytical Chemistry*, 2019, 103: 102-115.
- [22] HOSSEINI E, GHASEMI J B, DARAEI B, *et al.* Near-infrared spectroscopy and machine learning-based classification and calibration methods in detection and measurement of anionic surfactant in milk[J]. *Journal of Food Composition and Analysis*, 2021, 104: 104170.
- [23] 褚小立, 王艳斌, 陆婉珍. 近红外光谱定量校正模型的建立及应用 [J]. *理化检验·分析手册*, 2008, 44(8): 796-800.
- [24] 魏传喆, 潘江, 宋夏红, 等. 一种直接驱动式振动管密度测量装置的研制 [J]. *计量学报*, 2021, 42(10): 1294-1298.
- [25] SCHLEGEL L B, SCHUBERT-ZSILAVECZ M, ABDEL-TAWAB M. Quantification of active ingredients in semi-solid pharmaceutical formulations by near infrared spectroscopy[J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2017, 142: 178-189.

本文编辑: 石亚楠

(上接第 72 页)

- [11] 周琪. 高科技领域的竞争正改变大国战略竞争的主要模式 [J]. *太平洋学报*, 2021, 29(1): 1-20.
- [12] 杨宇田, 陈峰. 列入美国技术出口管制部门受限名单的企业单位分析 [J]. *情报杂志*, 2018, 37(10): 90-96.
- [13] 靖德果. 从瓦森纳及美国两用清单看我国航天军民融合的发展 [J]. *军民两用技术与产品*, 2018(19): 32-37.
- [14] 李晓萌, 李丽, 潘峰, 等. 面向计量科研的 NSTL 科技文献战略保障研究 [J]. *计量技术*, 2020(5): 123-127.
- [15] 段宇宁, 刘旭红. 漫谈国际单位制变革 [J]. *计量技术*, 2019(5): 3-7.
- [16] 高蔚, 蔡娟. 国际计量体系及 SI 重新定义后的新格局 [J]. *计量技术*, 2019(5): 72-80.
- [17] 房芳, 张爱敏, 李天初. 时间: 从天文时到原子秒 [J]. *计量技术*, 2019(5): 7-10.
- [18] 张金涛, 林鸿, 冯晓娟, 等. 国内对温度单位重新定义的研究 [J]. *计量技术*, 2019(5): 43-46, 54.
- [19] 冯晓娟, 张金涛, 林鸿, 等. 温度单位变革的历程 [J]. *计量技术*, 2019(5): 52-54.

本文编辑: 霍伟炜