

基于 CARS 波段筛选的甲醇汽油中甲醇含量 中红外光谱检测

胡军, 刘燕德*, 欧阳爱国, 刘洪量

华东交通大学机电与车辆工程学院, 江西 南昌 330013

摘要 利用中红外光谱检测技术对甲醇汽油中的甲醇含量进行检测研究。由于中红外光谱易受外界环境干扰且数据量较大,为减小运算量并提高模型精度,采用无信息变量消除(UVE)法、竞争性自适应重加权取样(CARS)法以及遗传算法(GA算法)等来选择有效光谱波段,再建立对应的偏最小二乘(PLS)模型,最后分别建立 PLS、UVE-PLS、GA-PLS 和 CARS-PLS 模型,探索最优的甲醇含量检测模型。结果表明:CARS-PLS 模型效果最好,预测相关系数和预测均方根误差分别为 0.978 和 1.177。CARS 算法是一种有效提取甲醇含量的中红外光谱检测方法,采用中红外光谱检测技术测定甲醇汽油中的甲醇含量是可行的,可以有效简化运算模型,提高模型检测精度。

关键词 光谱学; 中红外光谱; 甲醇汽油; 无信息变量消除; 竞争性自适应重加权取样; 遗传算法

中图分类号 O657.61

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP56.233002

Mid-Infrared Spectroscopy Detection of Methanol Content in Methanol Gasoline Based on CARS Band Screening

Hu Jun, Liu Yande*, Ouyang Aiguo, Liu Hongliang

School of Mechatronics and Vehicle Engineering, East China Jiaotong University, Nanchang, Jiangxi 330013, China

Abstract The mid-infrared spectroscopy detection can be used to the determination of methanol content in methanol gasoline. The mid-infrared spectra are susceptible to external interference and yield a large amount of data. To simplify the calculation and improve the accuracy of the model, the methods of uninformative variable elimination (UVE), competitive adaptive re-weighted sampling (CARS), and genetic algorithm (GA) are used to select effective spectral bands; then, a corresponding partial least squares (PLS) model is established. Finally, the PLS, UVE-PLS, GA-PLS, and CARS-PLS models are established to explore the optimal methanol content detection model for methanol gasoline. Results show that the CARS-PLS model performs the best, with the predicted correlation coefficient and root mean square error are 0.978 and 1.177, respectively. The CARS algorithm is a very effective wavelength extraction method for the methanol content in methanol gasoline, and detection technology utilizing the mid-infrared spectrum can be applied to determining the methanol content in methanol gasoline, which can effectively simplify calculations and improve the accuracy of the model detection.

Key words spectroscopy; mid-infrared spectroscopy; methanol gasoline; uninformative variable elimination; competitive adaptive re-weighted sampling; genetic algorithm

OCIS codes 300.6390; 300.6340; 300.6170; 300.6300

收稿日期: 2019-04-12; 修回日期: 2019-05-10; 录用日期: 2019-06-03

基金项目: 国家 863 计划(SS2012AA101306)、江西省优势科技创新团队建设计划(20153BCB24002)、南方山地果园智能化管理技术与装备协同创新中心项目(赣教高字[2014]60号)、国家自然科学基金(2002017018)、江西省博士研究生创新资金(YC2019-B106)

* E-mail: jxliuyd@163.com

1 引言

汽油、柴油等传统燃料在燃烧过程中会产生对环境有害的气体及固体颗粒,这些气体和颗粒不仅会污染环境,而且会直接影响人类的健康。因此,世界各地都在探索新的能源或尝试减少燃料在燃烧过程中产生的有害物质,进而减少其对环境的影响^[1-2]。

甲醇是一种可再生的清洁燃料,含氧量高,理化性质和汽油接近,在汽油中加入适量的甲醇,能使汽油燃烧得更充分,并减少由于燃烧不充分而产生的有害物质。因此甲醇汽油受到了越来越多的关注^[3-4]。

甲醇汽油中甲醇的含量对甲醇汽油的品质影响很大。与传统汽油相比,甲醇汽油燃烧所释放的热量较低,当加入的甲醇较多时会导致发动机工作无力,目前较为常用的是 M15 甲醇汽油(甲醇的体积分数为 15%)^[5-6]。此外,甲醇汽油中甲醇的含量过高易产生气阻现象,并对发动机的供油能力产生严重影响,从而影响发动机的气密性,所以甲醇的含量是衡量甲醇汽油品质高低的一个重要指标^[6],不同类型的甲醇汽油对甲醇的含量有不同的规定。因此,探索一种可快速、无损、精准检测甲醇汽油中甲醇含量的方法显得十分重要^[7]。

欧阳爱国等^[8]利用近红外和拉曼光谱对甲醇汽油的甲醇含量进行测定,通过实验得出,所建立的偏最小二乘(PLS)模型的检测结果较优。姚捷等^[9]使用拉曼技术对甲醇汽油的品质进行检测,并使用一元线性回归法对其进行建模,实验结果表明,运用拉曼特征峰来构建模型,可以减少所使用的样品数量,节约实验成本,而且其模型效果相对于其他建模效果来说,具有较高的精确性和稳健性。李雁如等^[10]将蒸馏水萃取法与气相色谱分析技术相结合,测定了不同规格的车用甲醇汽油的甲醇含量,结果表明,该方法可以准确检测甲醇含量,但需要对样品进行复杂的前处理。滑海宁等^[11]利用汽油的介电常数来检测汽油的甲醇含量,该方法虽能满足在线检测的需求,但操作较为复杂,需要将设计的电容传感器加装到油路中,实时检测油路中车用甲醇汽油的甲醇含量。

目前,使用中红外光谱技术检测甲醇汽油的甲醇含量的研究相对较少。本文先对甲醇汽油进行不同的预处理,再利用中红外光谱技术进行检测并建立相应的 PLS 模型,为简化运算过程并提高模型预测精度,采用无信息变量消除(UVE)法^[12-13]、遗传算法(GA 算法)^[14]和竞争性自适应重加权取样(CARS)法^[15-17]等进行波段筛选,建立相应的 PLS^[18]模型,并

分别建立了 PLS、UVE-PLS、GA-PLS 和 CARS-PLS 模型,从中选择最优的甲醇含量检测模型。

2 材料与方法

2.1 实验材料

在华东交通大学周围的中国石化加油站购买实验所需的汽油(92#),实验所用的无水甲醇的纯度 $\geq 99.7\%$ 。每配制一个样品,甲醇体积分数增加 0.6%,样品的体积分数范围为 0.6%~18.6%。先按照对应的浓度梯度,计算出在不同浓度梯度下所需的甲醇体积,然后在容量瓶中加入计算出的所需甲醇,然后滴入汽油至容量瓶 50 mL 刻度处,充分摇动使得汽油与甲醇溶液充分混合。按照相同的方法依次制备其他体积分数的甲醇汽油。为减少样品制备过程中的随机误差,每个浓度梯度配制 4 组样品,共制备 120 个样品,所有样本采用随机抽取的方法,按照 3:1 的样品数量比例划分为建模集和预测集。表 1 所示为建模集和预测集样品中的甲醇含量分布,其中 N 为样品数量, R_{SD} 为标准差。

表 1 建模集和预测集样品中甲醇体积分数分布

Table 1 Methanol volume fractions of samples in calibration and prediction sets

Data set	N	Minimum / Maximum /		Mean /	R_{SD} /
		%	%	%	%
Total	120	0.60	18.60	9.41	5.37
Calibration	90	0.60	18.60	9.43	5.25
Prediction	30	0.60	18.60	9.33	5.45

2.2 光谱采集

实验所采用的中红外光谱仪型号为 WQF-510A,实验室的环境湿度 $\leq 30\%$,温度设置为恒温 25 °C 左右,测量扫描范围为:900~4000 cm^{-1} ,分辨率 $\geq 0.85 \text{ cm}^{-1}$,开机之后先对仪器预热约 30 min,待设备稳定后进行相应的操作。将样品放置在中红外水平衰减全反射(ATR)附件上,并在附件上均匀滴定对应浓度的样品溶液,然后紧闭仪器舱门,采集甲醇溶液的光谱信息,在 MATLAB 2014b 软件中利用化学计量学分析方法进行数据处理。为了减小测量过程中的随机误差,本实验对每个样品进行 5 次光谱采集,然后求其平均光谱,用平均光谱建立模型。

2.3 模型评估

首先对样品的中红外光谱进行校正处理,然后建立 PLS 模型,通过 PLS 模型对其预处理方法进行评价,选择最优的预处理方法,并对经过最佳预处理的甲醇汽油的中红外光谱分别建立 PLS 光谱检测模型。建

模集与预测集的样品数量约为 3 : 1, 预测相关系数和预测均方根误差(RMSEP)参数是本模型的关键评价参数。检测模型的好坏由预测集 R 和 RMSEP 系数共同决定, 检测模型的 RMSEP 系数越小、相关系数越大, 则模型的精度越高。此外, 校正标准偏差(RMSEC)与 RMSEP 越接近, 则建立的模型越稳定。图 1 所示为甲醇汽油中甲醇含量检测模型的流程图。

3 实验结果与分析

3.1 甲醇汽油的中红外光谱图谱分析

图 2(a) 为未添加甲醇溶液的汽油中红外光谱图, 图 2(b) 为无水甲醇样品的原始中红外光谱图, 图 3 为不同比例的甲醇汽油原始光谱图, 在 $1500 \sim 2750 \text{ cm}^{-1}$ 和 $3050 \sim 3500 \text{ cm}^{-1}$ 范围内, 中红外光谱与甲醇汽油中的甲醇含量有较好的相关关系。由图 3 可知, 在 1375 cm^{-1} 、 1480 cm^{-1} 、 1690 cm^{-1} 附近出现特征峰, 这可能是因为样品中甲基(CH_3)的一级倍频在 1695 cm^{-1} 位置, 合频在 1360 cm^{-1} 和 1435 cm^{-1} 的位置。在 $1000 \sim 1500 \text{ cm}^{-1}$ 以及

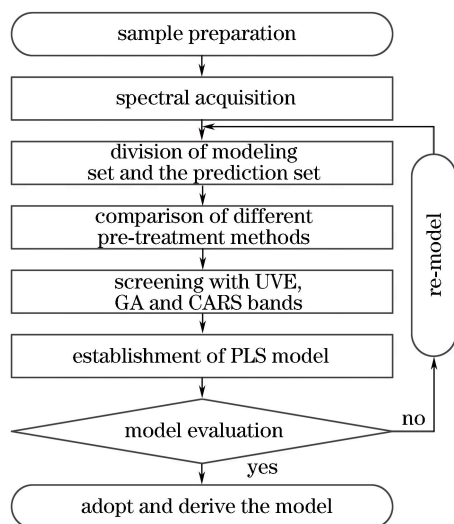


图 1 甲醇汽油中甲醇含量的中红外检测模型的流程图
Fig. 1 Flow chart of mid-infrared detection model for determining methanol content of methanol gasoline

$3500 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ 范围内, 中红外光谱与甲醇含量的相关性较差, 这可能是由汽油中烃类物质官能团产生的吸收峰重叠造成的。

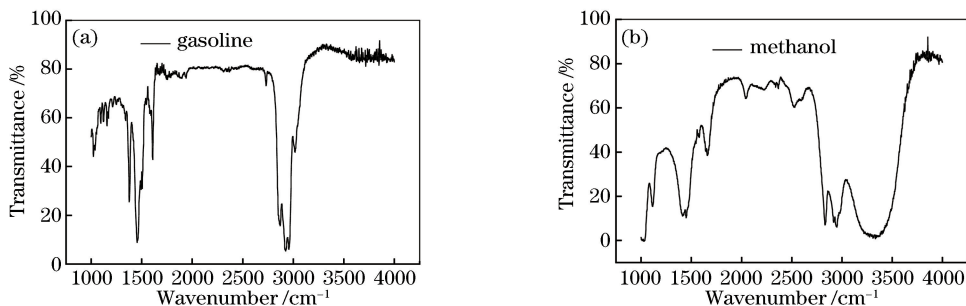


图 2 汽油和无水甲醇样品的原始中红外光谱。(a) 汽油中红外光谱; (b) 无水甲醇中红外光谱

Fig. 2 Original mid-infrared spectra of gasoline and absolute methanol. (a) Mid-infrared spectrum of gasoline; (b) mid-infrared spectrum of absolute methanol

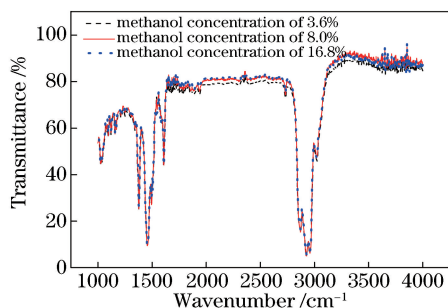


图 3 不同甲醇体积分数的甲醇汽油的原始中红外光谱图

Fig. 3 Original mid-infrared spectra of methanol gasoline with different methanol volume fractions

3.2 甲醇汽油样品的中红外光谱校正处理

由于中红外光谱仪对环境的要求较为苛刻,

为避免实验过程中仪器振动、噪声等导致的中红外光谱漂移、光散射等现象, 可进行适当的预处理。本实验主要采用 Savitzky-Golay(S-G) 卷积平滑、多元散射校正(MSC)、标准正态变量变换(SNV)等方法进行校正处理, 并通过 PLS 模型评价校正效果。

对甲醇汽油的中红外光谱进行预处理后建立 PLS 模型。通过比较建模集与预测集的相关系数和均方根误差, 对校正处理效果进行评价。表 2 为甲醇汽油的中红外光谱校正处理 PLS 建模效果, 其中 PC 为主成分因子数, R_c 为建模集相关系数, R_p 为预测集相关系数。可以看到, 经 S-G 卷积平滑校正处理的建模效果最佳, PLS 模型的 R_p 为 0.944, RMSEP 为 1.772。

表2 甲醇汽油的中红外光谱校正处理 PLS 建模效果
Table 2 Calibration effect of PLS corrected by middle infrared spectra of methanol gasoline

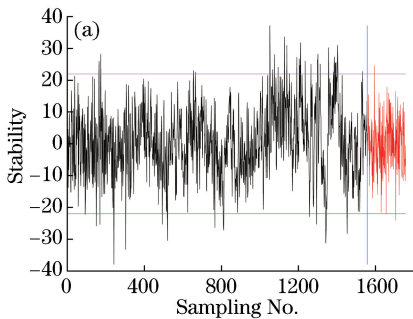
Pretreatment method	PC	R_c	RMSEC	R_p	RMSEP
Original	9	0.981	1.029	0.933	1.925
S-G	13	0.997	0.375	0.944	1.772
MSC	10	0.996	0.450	0.940	1.843
SNV	3	0.962	1.440	0.873	2.871

3.3 甲醇汽油中甲醇含量中红外光谱波段筛选

由于采集到的光谱信息中包含了噪声和环境变化对光谱的影响,因此必须对所采集的光谱进行筛选处理,从而消除噪声以及微小光程差对光谱的影响。其中一个非常有效的处理方法是对所采集的光谱进行波段筛选,以提高模型运算效率。

3.3.1 采用 UVE 方法筛选波段

无信息变量消除(UVE)法是基于 PLS 回归系数构建的波长选择算法,其将回归系数作为波长挑选的重要衡量指标。将一定数量的随机变量组合成随机变量矩阵,加入到光谱矩阵中,再通过交互验证



方法建立 PLS 模型,计算回归系数平均值与标准差之间的比值,挑选有效的甲醇汽油中红外光谱信息。通过 UVE 方法进行波段筛选,可以较较好地去掉冗余数据,提高数据处理效率^[12-13]。

对全谱进行 UVE 筛选,图 4(a)为全谱范围内采用 UVE 方法进行波段选择,竖线左边为中红外光谱的波长信息,右边为干扰噪声。位于阈值上端和下端的变量为筛选的有用信息,予以保留,通过 UVE 运算后,有 135 个波长变量被选择,将筛选之后的波长信息作为输入建模,从而简化模型,提高建模效率。图 4(b)所示为全谱范围内采用 UVE 方法挑选的波段点。

3.3.2 采用 CARS 方法筛选波段

CARS 方法是一种应用于变量筛选、剔除的方法,它是基于自然界中生物的适者生存法则而建立的,把每个波长变量当成一个独立的个体,对波长进行逐步淘汰。将回归系数的绝对值作为波长重要性的衡量指标,引入指数衰减函数来控制波长的保留数量。利用该方法能够有效地选出最优波段组合^[15-17]。

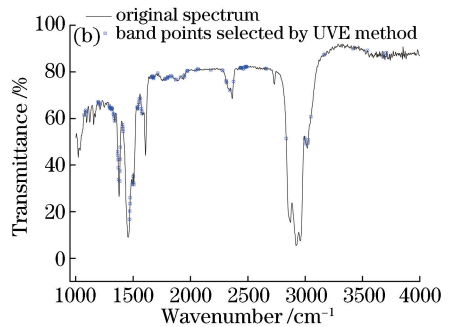


图4 采用 UVE 方法筛选得到的波段。(a)在全谱范围内进行波段选择;(b)在全谱范围内挑选的波段点

Fig. 4 Band selected by UVE method. (a) Band selection in full spectrum; (b) band points selected in full spectrum

图 5 为基于 CARS 算法的波长变量筛选过程图,图 5(a)为选择的变量个数与采样次数的关系。在筛选过程的前期,随着采样次数的增加,筛选出的变量数快速减少,到后期即使增加采样次数,波长数也很难再减少。图 5(b)为 RMSECV 值与运行次数的关系。当运行次数在 1~23 之间,所得到的 RMSECV 值与运行次数呈负相关,并且当运行次数到达 23 次时, RMSECV 的值最小。随后随着运行次数的递增,变量数量有所减少,但速度比较缓慢, RMSECV 的值也在稳定增加,这说明 1 至 23 次的变量筛选过程中,淘汰了与甲醇含量无关的中红外波长变量,在第 23 次变量筛选后, RMSECV 值又有所升高,这表明与甲醇含量相关的波长变量可能在筛选运算过程中也被淘汰了,

造成 RMSECV 值逐步增大、模型的精度下降。图 5(c)为回归系数与运行次数的关系。对比图 5(b)和图 5(c)可得出,当运行次数达到 23 次时, RMSECV 的值达到最小,保留了 118 个甲醇汽油中红外光谱变量。图 6 所示为全谱范围内采用 CARS 方法挑选的波段点。

3.3.3 采用 GA 算法筛选波段

GA 算法是根据生物的自然生存法则和优胜劣汰的遗传机制所得到的一种搜索最优解的方法。它根据适应性原则,通过比较个体适应能力的强弱来选择个体,并且利用遗传学中的原理对个体进行组合交叉和变异,从而产生一群更适应环境的个体,不断繁衍进化。因此利用 GA 算法对甲醇含量的光谱信息进行优化处理来消除无量纲是可行的,并且这

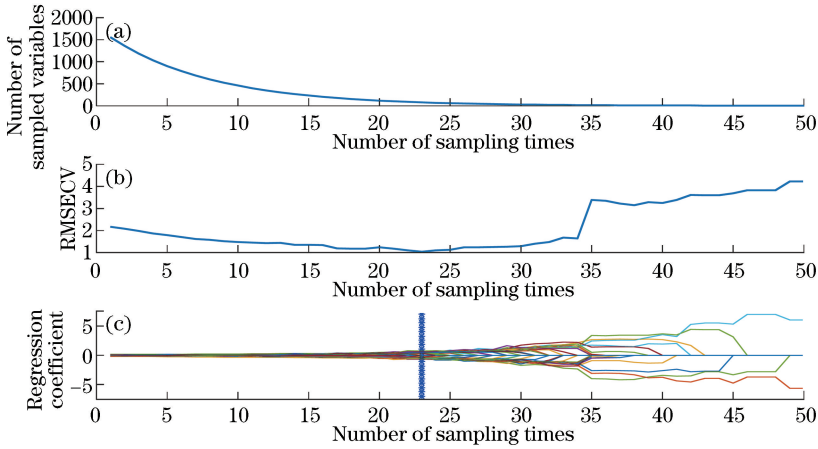


图 5 基于 CARS 算法的波长变量筛选过程。(a) 变量个数与采样次数的关系；
(b) RMSECV 值与采样次数的关系；(c) 回归系数与采样次数的关系

Fig. 5 Wavelength variable screening based on CARS algorithm. (a) Number of variables versus sampling times; (b) RMSECV value versus sampling times; (c) regression coefficient versus sampling times

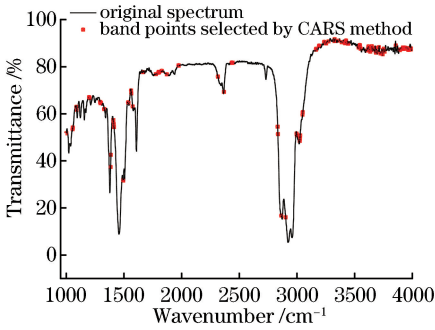


图 6 全谱范围内采用 CARS 方法挑选的波段点
Fig. 6 Band points selected by CARS method within full spectrum

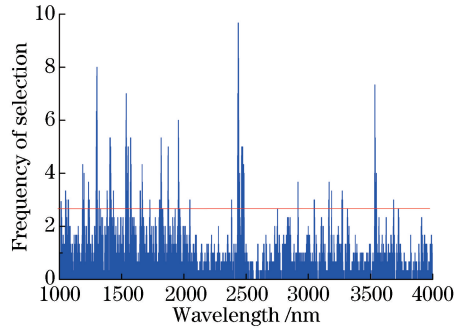


图 7 每个波长点被“入选”的频次

Fig. 7 Frequency of each wavelength being selected

种方法在缩减参与建模的光谱波长数方面起到很好的作用,可以显著提升所建模型的运算效率和精度,以便得到更好的建模效果。利用 GA 算法对甲醇含量的所有光谱的 1557 个波长进行筛选、剔除之前,必须预先设定与其相应的参数数值^[14]。

首先将交叉概率设置为 0.05,迭代次数设置为 200,变异概率设置为 0.01,初始群体大小设置为 30。将 RMSECV 值作为适应性函数,当迭代次数达到设定值时则停止迭代。随后,按照频数由小到大的原则,把获得的所有变量按照一定的规律进行排序。然后依据该排序的顺序将所有的变量用于构建其相应的 PLS 模型,获取最佳变量数的原则为 RMSECV 达到最小值。图 7 所示为每个波长点被“入选”的频次,可以看到,所“入选”的频次 ≥ 2.26 的波长变量的数量为 130。图 8 所示为 RMSECV 值与波长变量数的关系,可以看到:当波长变量数小于 130 时, RMSECV 值与波长变量数呈负相关,即

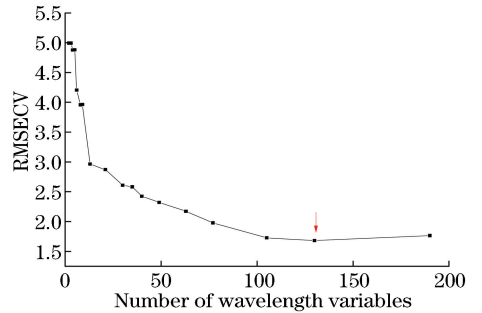


图 8 RMSECV 值随选取变量数的变化的趋势
Fig. 8 RMSECV varying with number of variables

RMSECV 的值随着波长变量数的增大而减小;当波长变量数大于 130 时 RMSECV 的值随着波长变量数的增加而略微增加。因此,当波长变量数为 130 时, RMSECV 的值最小。

3.4 甲醇汽油中甲醇含量光谱定量模型对比

PLS 模型是多元线性回归、主成分分析和典型相关分析的完美结合,可同时对光谱阵和浓度阵进行分解,并在分解时考虑到两者之间的关系,增强对应计算

关系,从而保证获得最佳的校正模型。表3所示为不同波长筛选方法结合PLS模型的建模效果对比^[18]。

表3 不同波长筛选方法结合PLS模型的建模效果对比

Table 3 Comparison of calibration effects of different wavelength screening methods combined with PLS method

Method	Number of wavelengths	PC	R_c	RMSEC	R_p	RMSEP
PLS	1557	13	0.997	0.375	0.944	1.772
UVE-PLS	135	10	0.972	1.232	0.948	1.777
CARS-PLS	118	9	0.994	0.563	0.978	1.177
GA-PLS	130	11	0.983	0.994	0.956	1.527

从表3可以看出,在4种建模方法中,通过CARS-PLS建模所取得的效果最优,图9所示为经过CARS波长筛选后甲醇含量的PLS模型预测结果,其中图9(a)为建模集;图9(b)为预测集。在单个变量筛选方法中,与全波段PLS模型相比,UVE-PLS、CARS-PLS、GA-PLS模型的 R_p 和

RMSEP指标都有一定程度的提高,并且筛选出的变量数量也都有一定程度的降低,可减少计算量,并对模型进行优化。其中,CARS-PLS模型的预测效果最优,预测集的 R_p 和RMSEP值分别为0.978和1.177,该模型可以很好地实现甲醇汽油中甲醇含量的测定。

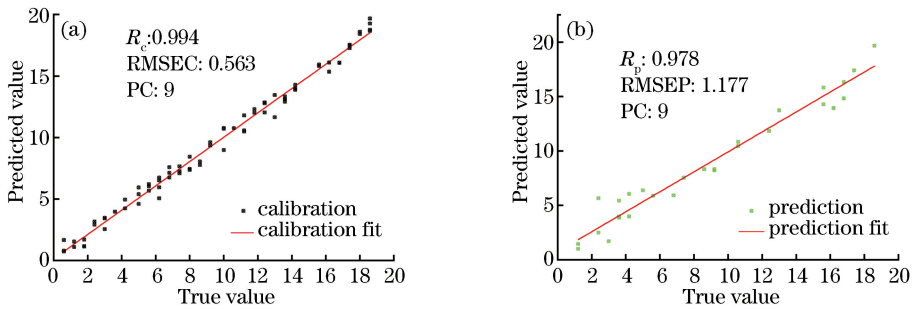


图9 CARS-PLS预测甲醇汽油中甲醇含量的散点图。(a)建模集;(b)预测集

Fig. 9 Scatter plots of methanol content in methanol gasoline predicted by CARS-PLS model.

(a) Calibration set; (b) prediction set

4 结 论

甲醇是一种可再生的清洁燃料,甲醇汽油中甲醇体积分数是影响其质量的关键因素之一。利用中红外光谱检测技术对甲醇汽油中甲醇含量进行测定,为简化模型、减少干扰,分别采用UVE、GA和CARS方法进行波长变量筛选,建立对应的PLS模型。通过对各模型进行对比与分析,发现建模效果最佳的模型是CARS-PLS,其所需的波长数为118, R_p 和RMSEP分别为0.978和1.177。在众多的波长筛选方法中,CARS是最为有效的甲醇汽油的甲醇含量中红外波段筛选方法之一。采用中红外光谱检测技术结合CARS算法对甲醇汽油中的甲醇含量进行光谱检测的方法是可行的,并且能够得到很好的建模结果。该检测技术可以为甲醇汽油产业提供甲醇含量检测的新方法,具有较大的应用潜力。

参 考 文 献

[1] Han Z Z, Wan J H, Liu K W. Model optimization in prediction of gas octane value by NIR [J]. Chinese

Journal of Analysis Laboratory, 2015, 34(11): 1268-1271.

韩仲志, 万剑华, 刘康炜. 基于近红外光谱的汽油辛烷值预测与模型优化[J]. 分析实验室, 2015, 34(11): 1268-1271.

[2] Ouyang A G, Zhang Y, Tang T Y, *et al.* Analysis of methanol/ethanol diesel identification and content determination based on the mid-infrared spectra [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(9): 093003.

欧阳爱国, 张宇, 唐天义, 等. 基于中红外光谱的甲醇/乙醇柴油鉴别与含量测定方法分析[J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(9): 093003.

[3] Ding H Y, Huang R H, Wang Z W, *et al.* Simulations and applications of bubble/dew curve for different ethanol-gasoline blends [J]. Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2012, 40(6): 113-116.

丁红元, 黄荣华, 王兆文, 等. 不同含量乙醇汽油泡点/露点曲线模拟及应用[J]. 华中科技大学学报(自然科学版), 2012, 40(6): 113-116.

- [4] Liu Y D, Wu M M, Sun X D, *et al.* Simultaneous detection of surface deficiency and soluble solids content for *Amygdalus persica* by online visible-near infrared transmittance spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2016, 32(6): 289-295.
刘燕德, 吴明明, 孙旭东, 等. 黄桃表面缺陷和可溶性固形物光谱同时在线检测[J]. 农业工程学报, 2016, 32(6): 289-295.
- [5] Dan T N, Dai L K. Spectral wavelength selection based on PLS projection analysis[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(2): 351-354.
淡图南, 戴连奎. 基于 PLS 投影分析的光谱波段选择方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(2): 351-354.
- [6] Zu Q, Zhang S F, Cao Y, *et al.* Research on identification of cabbages and weeds combining spectral imaging technology and SAM taxonomy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(2): 479-485.
祖琴, 张水发, 曹阳, 等. 结合光谱图像技术和 SAM 分类法的甘蓝中杂草识别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(2): 479-485.
- [7] Ouyang A G, Tang T Y, Zhou X, *et al.* Methanol content determination in methanol diesel with mid infrared spectroscopy analysis using least square support vector machine [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2016, 37(10): 1253-1258.
欧阳爱国, 唐天义, 周鑫, 等. 最小二乘支持向量机结合中红外光谱测定甲醇柴油甲醇含量[J]. 发光学报, 2016, 37(10): 1253-1258.
- [8] Ouyang A G, Liu J. On quantitative analysis of methanol content in methanol gasoline by near infrared and Raman spectroscopy [J]. Journal of Southwest China Normal University(Natural Science Edition), 2012, 37(9): 98-101.
欧阳爱国, 刘军. 基于近红外与拉曼光谱的甲醇汽油定量分析[J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2012, 37(9): 98-101.
- [9] Yao J, Dai L K, Lin Y L. Determination of methanol ratio in methanol gasoline based on Raman characteristic peaks [J]. The Journal of Light Scattering, 2013, 25(1): 59-65.
姚捷, 戴连奎, 林艺玲. 基于拉曼特征峰的甲醇汽油甲醇含量测定[J]. 光散射学报, 2013, 25(1): 59-65.
- [10] Li Y R, Sun R Q, Wang Y M. Determination of methanol in methanol gasoline for motor vehicles by gas chromatography[J]. Modern Chemical Industry, 2013, 33(2): 113-115.
李雁如, 孙瑞卿, 王永苗. 气相色谱法测定车用甲醇汽油中的甲醇含量[J]. 现代化工, 2013, 33(2): 113-115.
- [11] Hua H N, Xue K, Shi B W, *et al.* A real-time online detection method for the methanol content in vehicular methanol gasoline [J]. Automobile Parts, 2016(3): 74-76.
滑海宁, 薛康, 史本伟, 等. 车用甲醇汽油中甲醇含量的实时在线检测方法[J]. 汽车零部件, 2016(3): 74-76.
- [12] Cai W S, Li Y K, Shao X G. A variable selection method based on uninformative variable elimination for multivariate calibration of near-infrared spectra [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2008, 90(2): 188-194.
- [13] Soares S F C, Gomes A A, Araujo M C U, *et al.* The successive projections algorithm [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2013, 42: 84-98.
- [14] Cerrada M, Zurita G, Cabrera D, *et al.* Fault diagnosis in spur gears based on genetic algorithm and random forest [J]. Mechanical Systems and Signal Processing, 2016, 70/71: 87-103.
- [15] Tang G, Huang Y, Tian K D, *et al.* A new spectral variable selection pattern using competitive adaptive reweighted sampling combined with successive projections algorithm [J]. The Analyst, 2014, 139(19): 4894-4902.
- [16] Li Q Q, Huang Y, Song X Z, *et al.* Moving window smoothing on the ensemble of competitive adaptive reweighted sampling algorithm [J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2019, 214: 129-138.
- [17] Yang Y, Jin Y, Wu Y J, *et al.* Application of near infrared spectroscopy combined with competitive adaptive reweighted sampling partial least squares for on-line monitoring of the concentration process of Wangbi tablets [J]. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2016, 24(2): 171-178.
- [18] Henseler J, Ringle C M, Sinkovics R R. The use of partial least squares path modeling in international marketing [M] // Sinkovics R, Ghauri P. New challenges to international marketing. Advances in international marketing. UK: Emerald Group Publishing Limited, 2009, 20: 277-319.