



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 29858—2013

---

## 分子光谱多元校正定量分析通则

Standard guidelines for molecular spectroscopy  
multivariate calibration quantitative analysis

2013-11-12 发布

2014-04-15 实施

---

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局  
中国国家标准化管理委员会 发布

# 目 次

前言 .....	I
1 范围 .....	1
2 规范性引用文件 .....	1
3 术语和定义 .....	1
4 方法概述 .....	3
5 仪器 .....	4
6 光谱测量 .....	4
7 校正样品的选择 .....	5
8 验证样品的选择 .....	5
9 参考方法和参考值 .....	6
10 可行性模型的建立 .....	7
11 数据预处理 .....	7
12 校正模型的建立 .....	8
13 校正模型的评价与优化方法 .....	8
14 异常样品的统计与识别 .....	10
15 校正模型的验证 .....	11
16 预测值的精密度 .....	12
17 未知样品的预测 .....	13
18 校正和预测误差的主要来源 .....	13
19 校正模型的维护 .....	14
20 校正模型的更新 .....	15
21 模型传递及仪器标定 .....	15
22 分析报告 .....	15
23 校正模型建立和验证流程 .....	16
24 校正模型建立和验证及模型传递范例 .....	16
附录 A (资料性附录) 统计学处理 .....	17
附录 B (资料性附录) 校正模型建立和验证流程 .....	22
附录 C (资料性附录) 傅立叶变换近红外透射光谱测定汽油质量的建模与验证实施例 .....	23
附录 D (资料性附录) 傅立叶变换近红外漫反射光谱测定烟草成分建模与验证实施例 .....	34
附录 E (资料性附录) 傅立叶变换中红外光谱测定柴油十六烷值的建模与验证实施例 .....	41
附录 F (资料性附录) 柴油十六烷值近红外光谱校正模型传递实施例 .....	48
参考文献 .....	54

## 前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准使用重新起草法参考美国材料与试验协会标准 ASTM E 1655—05《红外多元定量分析通则》编制,与 ASTM E 1655—05 的一致性程度为非等效。

本标准由中华人民共和国科学技术部提出。

本标准由全国仪器分析测试标准化技术委员会(SAC/TC 481)归口。

本标准负责起草单位:北京化工大学。

本标准参加起草单位:石油化工科学研究院、中国食品药品检定研究院、中国人民解放军总后勤部油料研究所、北京市农林科学院、国家粮食局科学研究院、中国农业大学、浙江大学、中国石油石油化工研究院、中国农业科学院、中国计量科学研究院、红云红河烟草(集团)有限责任公司。

本标准主要起草人:袁洪福、王家俊、田高友、褚小立、戴连奎、王艳斌、宋春风、胡爱琴、尹利辉、王纪华、闵顺耕、薛雅琳、张萍、李红梅。

# 分子光谱多元校正定量分析通则

## 1 范围

本标准规定了采用分子光谱多元校正定量测定样品成(组)分浓度(含量)或样品性质的指导原则。

本标准适用于中红外光谱(约  $4\,000\text{ cm}^{-1}\sim 400\text{ cm}^{-1}$ )和近红外光谱(约  $780\text{ nm}\sim 2\,500\text{ nm}$ )范围的分子光谱。

## 2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件,仅注日期的版本适用于本文件。凡是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 3358.1 统计学词汇及符号 第1部分:一般统计术语与用于概率的术语

GB/T 6379.2 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第2部分:确定标准测量方法重复性与再现性的基本方法

GB/T 8322 分子吸收光谱法 术语

GB/T 27407 实验室质量控制 利用统计质量保证和控制图技术 评价分析测量系统的性能

## 3 术语和定义

GB/T 3358.1、GB/T 8322 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

#### **校正 calibration**

将一组样品的成分浓度或性质与其光谱进行关联,建立模型的过程。

### 3.2

#### **校正模型 calibration model**

表达一组样品的成分浓度或性质与其光谱之间关联关系的数学表达式。

### 3.3

#### **校正样品 calibration samples**

用来建立校正模型的样品,其成分浓度或性质数据已知。

### 3.4

#### **预测 estimate**

用校正模型和样品的光谱计算样品成分浓度或性质的过程。

### 3.5

#### **预测值 estimate values**

用校正模型和样品光谱计算所得到的样品成分浓度或性质数据。

### 3.6

#### **验证样品 validation samples**

用来验证模型性能的样品,其成分浓度或性质数据已知。