

ICS 01.040.17
N 04



中华人民共和国国家标准

GB/T 29858—2013

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

中华人民共和国
国家标准
分子光谱多元校正定量分析通则
GB/T 29858—2013

*

中国标准出版社出版发行
北京市朝阳区和平里西街甲2号(100013)
北京市西城区三里河北街16号(100045)
网址 www.spc.net.cn
总编室:(010)64275323 发行中心:(010)51780235
读者服务部:(010)68523946
中国标准出版社秦皇岛印刷厂印刷
各地新华书店经销

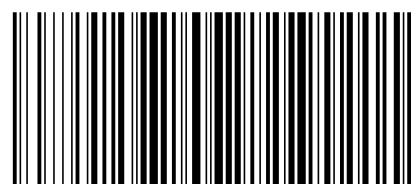
*

开本 880×1230 1/16 印张 3.75 字数 110 千字
2014年3月第一版 2014年3月第一次印刷

*

书号: 155066·1-48056 定价 51.00 元

如有印装差错 由本社发行中心调换
版权专有 侵权必究
举报电话:(010)68510107



GB/T 29858—2013

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 |

- [35] ASTM E 334 Standard practice for general techniques of infrared microanalysis
- [36] ASTM E 1252 Standard practice for general techniques for obtaining infrared spectra for qualitative Analysis
- [37] ASTM E 1790 Standard practice for near infrared qualitative analysis
- [38] ASTM E 1866 Standard guide for establishing spectrophotometer performance tests
- [39] ASTM E 2617 Standard practice for validation of empirically derived multivariate calibrations
- [40] Burns D. A., Ciurczak E. W.. Handbook of near-infrared analysis (Third edition). CRC Press, Boca Raton, Florida , 2007.
- [41] Williams P., and Norris K., Eds..Near infrared technology in the agricultural and food industries(Second edition).American Association of Cereal Chemists, St.Paul, Minnesota,USA, 2001.
- [42] Wang Y.D., Veltkamp D.J., Kowalski B.R.Multivariate instrument standardization.Anal. Chem,1991,63:2750-2756.
- [43] Wang Y.D., Kowalski B.R.Calibration transfer and measurement stability of near-infrared spectrometers.Appl.Spectrosc,1992,46:764-771.
- [44] Wang Y. D., Lysaght M. J., Kowalski B. R.. Improvement of multivariate calibration through instrument standardization.Anal.Chem,1992, 64: 562-564.
- [45] Wang Y. D., Kowalski B. R.. Temperature-compensating calibration transfer for near-infrared filter instruments.Anal.Chem,1993, 65:1301-1303.

参 考 文 献

- [1] GB/T 386 柴油十六烷值测定法
- [2] GB/T 3358.2 统计学词汇及符号 第2部分:应用统计
- [3] GB/T 3359 数据的统计处理和解释 统计容忍区间的确定
- [4] GB/T 3361 数据的统计处理和解释 在成对观测值情形下两个均值的比较
- [5] GB/T 4756 石油液体手工取样法
- [6] GB/T 6040 红外光谱分析方法通则
- [7] GB/T 6379.1 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第1部分:总则与定义
- [8] GB/T 6379.4 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第4部分:确定标准测量方法正确度的基本方法
- [9] GB/T 6379.5 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第5部分:确定标准测量方法精密度的可替代方法
- [10] GB/T 6379.6 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第6部分:准确度值的实际应用
- [11] GB/T 11147 沥青取样法
- [12] GB 17930 车用汽油
- [13] GB/T 19616 烟草成批原料取样的一般原则
- [14] GB/T 21186 傅立叶变换红外光谱仪
- [15] GB/T 28043 利用实验室间比对进行能力验证的统计方法
- [16] GJB/J 5127 傅立叶变换红外光谱仪检定规程
- [17] JJF 1319 傅立叶变换红外光谱仪校准规范
- [18] JJG 001 傅立叶变换红外光谱仪检定规程
- [19] JJG 178 紫外、可见、近红外分光光度计检定规程
- [20] SH/T 0233 液化石油气采样法
- [21] SN/T 0826 进出口石油及液体石油产品取样法(手工取样)
- [22] YC/T 159 烟草及烟草制品 水溶性糖的测定 连续流动法
- [23] YC/T 160 烟草及烟草制品 总植物碱的测定 连续流动法
- [24] YC/T 161 烟草及烟草制品 总氮的测定 连续流动法
- [25] YC/T 162 烟草及烟草制品 氯的测定 连续流动法
- [26] YC/T 173 烟草及烟草制品 钾的测定 火焰光度法
- [27] 梁逸曾,俞汝勤.分析化学手册:化学计量学(第十分册,第二版).北京:化学工业出版社,2005.
- [28] 梁逸曾,许青松.复杂体系仪器分析——白、灰、黑分析体系及其多变量解析方法.北京:化学工业出版社,2012.
- [29] 许禄,邵学广.化学计量学方法(第二版).北京:科学出版社,2004.
- [30] 陆婉珍,袁洪福等.现代近红外光谱分析技术(第二版).北京:中国石化出版社,2006.
- [31] 严衍祿.近红外光谱分析基础与应用.北京:中国轻工业出版社,2005
- [32] ISO 15063 Plastics—Polyols for use in the production of polyurethanes—Determination of hydroxyl number by NIR spectroscopy
- [33] ISO 21543 Milk products—Guidelines for the application of near infrared spectrometry
- [34] ASTM E 168 Standard practices for general techniques of infrared quantitative analysis

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。