



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 37969—2019

---

## 近红外光谱定性分析通则

Standard guidelines for near infrared qualitative analysis

2019-08-30 发布

2020-03-01 实施

---

国家市场监督管理总局  
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 原理与方法 .....	2
5 化学计量学软件 .....	3
6 仪器设备 .....	3
7 光谱测量 .....	3
8 样品 .....	3
9 近红外光谱定性分析试验步骤 .....	4
10 光谱数据预处理 .....	5
11 光谱特征变量选择 .....	6
12 类模型的建立 .....	6
13 类模型的有效性验证 .....	6
14 类模型的应用 .....	7
15 类模型的维护 .....	7
16 试验报告 .....	7
17 试验质量保证要求 .....	8
18 常见的误差类型、来源及解决途径 .....	8
19 类模型建立与验证示范实例 .....	8
附录 A (资料性附录) 近红外光谱模式识别常用方法简介 .....	9
附录 B (资料性附录) $F$ 分布临界值表 .....	18
附录 C (资料性附录) 常见的误差类型、来源和解决途径 .....	20
附录 D (资料性附录) 基于近红外光谱 PLS-DA 法判别三类性质相近药品实例 .....	21
附录 E (资料性附录) 近红外透射光谱对汽油质量等级分类 SIMCA 法实例 .....	24

## 前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

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。

本标准起草单位:上海烟草集团北京卷烟厂、北京化工大学、南开大学、石油化工科学研究院、中国食品药品检定研究院、中国检验检疫科学研究院、军事科学院评估论证研究中心、北京市农林科学院、中国农业大学、中国计量科学研究院、中检国研(北京)科技有限公司、云南中烟工业有限责任公司、云南同创检测技术股份有限公司、西派特(北京)科技有限公司。

本标准起草人:马雁军、袁洪福、王家俊、周骏、邵学广、褚小立、杜国荣、王纪华、尹利辉、田高友、马莉、李军会、宋春风、侯英、邹明强、袁天军、温亚东、许育鹏、陶鹰、宋德伟、胡爱琴、杨玉清、李伟、杨盼盼、王明锋、齐小花、王冬、王建平。

# 近红外光谱定性分析通则

## 1 范围

本标准规定了近红外光谱定性分析的基本原理和方法、使用软件、仪器设备、光谱测量、样品、定性分析试验步骤、试验数据处理、试验报告等内容的通用要求。

本标准适用于吸收范围为  $12\ 820\ \text{cm}^{-1} \sim 4\ 000\ \text{cm}^{-1}$  (即  $780\ \text{nm} \sim 2\ 500\ \text{nm}$ ) 近红外光谱定性分析。

## 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 8322 分子吸收光谱法 术语

GB/T 29858—2013 分子光谱多元校正定量分析通则

## 3 术语和定义

GB/T 8322 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

**训练样品** training samples

学习样品 learning samples

参考样品 reference samples

属性、特征或组成已知的样品。

### 3.2

**训练集** training set

学习集 learning set

参考集 reference set

训练样品的集合。

### 3.3

**验证样品** validation samples

用于验证类模型判别能力的样品,其属性、特征或组成已知。

### 3.4

**验证集** validation set

验证样品的集合。

### 3.5

**训练** training

学习 learning

找出光谱与样品属性、特征或组成之间关系的过程,即建立类模型的过程。