

# 中华人民共和国林业行业标准

LY/T 2053—2012

---

## 木材的近红外光谱定性分析方法

Standard method for near infrared qualitative analysis of wood

2012-02-23 发布

2012-07-01 实施

---

国家林业局 发布

## 前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别这些专利的责任。

本标准由全国木材标准化技术委员会(SAC/TC 41)提出并归口。

本标准起草单位：中国林业科学研究院木材工业研究所、国际竹藤网络中心、国家人造板与木竹制品质量监督检验中心、中国农业大学、北京奇峰乾元信息科技有限公司、聚光科技(杭州)股份有限公司。

本标准主要起草人：杨忠、覃道春、费本华、傅峰、吕斌、杨增玲、虞华强、程强、王戈、殷睿宇、姚建垣。

# 木材的近红外光谱定性分析方法

## 1 范围

本标准规定了应用近红外光谱分析技术对木材进行定性分析的方法。

本标准适用于木材性质的快速定性分析。

本标准不适用于仲裁检验。

## 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 14666 分析化学术语

GB/T 24895 粮油检验 近红外分析定标模型验证和网络管理与维护通用规则

## 3 术语和定义

GB/T 14666 和 GB/T 24895 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

**定标 calibration**

用标准方法获得的检测值对近红外分析的校准过程。

### 3.2

**定标模型 calibration model**

利用化学计量学方法建立的样品近红外光谱与对应标准方法实测值之间关系的数学模型。

### 3.3

**样品集 sample collection**

具有代表性的、基本覆盖相关组分含量范围的样品集合。

### 3.4

**定标样品 calibration samples**

用于建立定标模型的样品。

### 3.5

**验证样品 validation samples**

用于验证近红外主机测定结果的准确性和重复性的样品集。

## 4 原理

木材的近红外光谱(near infrared spectroscopy,简称 NIR)定性分析方法是利用木材中的 C—H、O—H 等化学键的泛频振动或转动对近红外光的吸收特性,以漫反射方式获得在近红外区的吸收光谱,通过化学计量学方法建立木材样品光谱与样品性质之间的相关关系,从而实现利用木材近红外光谱信息对样品性质的快速定性分析。

## 5 仪器

漫反射型近红外光谱仪:扫描范围包含波段 780 nm~2 500 nm(波数范围为 12 820  $\text{cm}^{-1}$ ~4 000  $\text{cm}^{-1}$ );仪器的噪音应控制在  $60 \times 10^{-6}$  AU 以下;波长准确度优于 2 nm,波长重现性优于 0.05 nm;随机软件具有近红外光谱数据的收集、存储、加工等功能。

## 6 样品的选择与制备

近红外光谱定性分析的样品选择与制备应符合附录 A 中 A.1 的要求。

## 7 测试分析

### 7.1 测试前的准备

7.1.1 测试前应按生产商规定的日常校正程序,对仪器进行噪声、波长准确度和重现性诊断。

7.1.2 测试样品的温度应控制在定标模型涵盖的温度范围内。

### 7.2 样品性质的测定

根据标准方法测定样品性质,并设定其类别。

### 7.3 定标

定标总则和程序见附录 A。

### 7.4 定标模型的升级

定标模型的升级的目的是为了扩大定标模型在 NIR 光谱上对待测样品的适应性。操作上是将新采集到的具有代表性的木材样品按附录 A 中定标样品制备方法重新制备为定标样品,扫描其近红外光谱,并用标准参考方法测定其性质,然后将这些样品加入到定标样品中,用原来的定标方法进行计算,即获得升级的定标模型。

### 7.5 未知样品的定性分析

对未知样品进行光谱数据收集,试验方法和环境条件与定标时一致。根据样品的待测性质选用对应的定标模型,然后将试样的近红外光谱代入定标模型进行计算,得到未知样品性质的定性分析结果。

## 8 结果表示

根据试样性质所包含的不同类别,结果表示为属于该类、不属于该类或不确定。

## 9 试验报告

试验报告至少应该包括以下内容:

- 本标准编号;
- 对试样的有关说明;
- 试验结果及必要的说明;
- 试验中观察到的任何异常现象;
- 本标准或引用标准中未规定的并可影响结果的任何操作。

**附 录 A**  
**(规范性附录)**  
**定标的总则和程序**

### A.1 样品的选择与制备

参与定标的样品应具有代表性,即需涵盖将来所要分析样品的特性。创建一个新的定标模型,对于样品性质中所包含的每一个类别推荐使用的最小定标样品数量为 30 个,模型外部检验样品数量至少为定标样品的 1/3。对于包含样品范围较广的模型,可适量增加样品数量。

样品可以是块状或颗粒状,但定标样品、验证样品和待测样品的制备方法应一致。块状样品的光谱采集面应光滑、平整、清洁无污染,颗粒状样品的颗粒度应根据所测试的性质特征确定合适的颗粒度。

### A.2 光谱数据收集

光谱数据的收集过程中,试验方法和环境条件应保持一致。

### A.3 光谱预处理

采用基线校正(baseline correction)和归一化(normalization)等方法进行光谱预处理。基线校正主要扣除背景或漂移对信号强度的影响,其中微分处理(derivation)可减少谱带重叠的影响,一阶导数消除基线平移,二阶导数同时消除平移和线性倾斜。归一化方法中,标准正态变量方法(standard normal variate,简称 SNV)可有效消除光谱中多元散射干扰和颗粒度的影响,多元散射校正技术(multiplicative scatter correction,简称 MSC)可补偿在反射光谱中遇到的波长依赖的光散射变化。

### A.4 定标方法

使用偏最小二乘判别分析法(partial least square-discriminant analysis,简称 PLS-DA)或 SIMCA (soft independent modeling of class analogy)模式识别方法等。PLS-DA 是以二进制虚拟变量取代样品性质的每个类别特征,通过采用偏最小二乘法计算光谱数据与类别变量的相关关系,建立定性判别定标模型。SIMCA 法是先对样品性质中每一个类别的光谱数据分别进行主成分分析(principal component analysis,简称 PCA),建立每一个类别的 PCA 模型,然后,利用 SIMCA 程序,调入 PCA 模型,对样品的近红外光谱进行计算,得到样品性质中各类别的判定结果。

### A.5 定标模型的评价

一般采用内部验证和外部验证来评价定标模型,通常正确判别率应大于或等于 85%。

---

中华人民共和国林业  
行业标准  
木材的近红外光谱定性分析方法  
LY/T 2053—2012

\*

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](http://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 0.5 字数 8 千字  
2012年5月第一版 2012年5月第一次印刷

\*

书号: 155066·2-23403 定价 14.00 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



LY/T 2053-2012