

天津市地方计量技术规范

JJF(津)XXXX—2026

在线式/便携式近红外光谱仪校准规范

Calibration Specification for Online/Portable Near-infrared

Spectrometers

(报批稿)

2026-XX-XX 发布

2026-XX-XX 实施

天津市市场监督管理委员会 发布

在线式/便携式近红外光谱 仪校准规范

Calibration Specification for
Online/Portable Near-infrared Spectrometers

JJF(津) XXXX—2026

归口单位：天津市市场监督管理委员会

主要起草单位：天津市计量监督检测科学研究院

天津大学精密仪器与光电子工程学院

参加起草单位：南京三迭纪医药科技有限公司

本规范委托天津市计量监督检测科学研究院负责解释

本规范主要起草人：

郭超毅 （天津市计量监督检测科学研究院）
魏树龙 （天津市计量监督检测科学研究院）
李晨曦 （天津大学精密仪器与光电子工程学院）

参加起草人：

常子栋 （天津市计量监督检测科学研究院）
邓飞黄 （南京三迭纪医药科技有限公司）
程 鹏 （天津市计量监督检测科学研究院）
付 迪 （天津市计量监督检测科学研究院）
齐 璐 （天津市计量监督检测科学研究院）

目 录

引言	(II)
1 范围	(1)
2 引用文件	(1)
3 概述	(1)
4 计量特性	(1)
5 校准条件	(2)
5.1 环境条件	(2)
5.2 测量标准及其他设备	(2)
6 校准项目和校准方法	(2)
6.1 校准前准备	(2)
6.2 波长示值误差和波长重复性	(2)
6.3 透射模式透射比示值误差和重复性	(3)
6.4 漫反射模式反射比示值误差和重复性	(4)
7 校准结果的表达	(4)
8 复校时间间隔	(5)
附录 A 在线式/便携式近红外光谱仪校准记录参考格式	(6)
附录 B 校准结果内页推荐格式	(8)
附录 C 波长示值误差的不确定度评定示例	(9)
附录 D 透射比/反射比示值误差的不确定度评定示例	(11)

引 言

JJF 1071《国家计量校准规范编写规则》、JJF 1001《通用计量术语及定义》和 JJF 1059.1《测量不确定度评定与表示》共同构成支撑本规范制定工作的基础性系列规范。
本规范为首次发布。

在线式/便携式近红外光谱仪校准规范

1 范围

本规范适用于波长范围为 780 nm～2500 nm 的在线式和便携式近红外光谱仪的校准。

2 引用文件

本规范引用了下列文件：

JJG 178—2007 紫外、可见、近红外分光光度计

JJG 1034—2008 光谱光度计标准滤光器

JJF 1601—2016 漫反射测量光谱仪校准规范

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

3 概述

在线式和便携式近红外光谱仪（以下简称光谱仪）是根据物质在近红外光谱区的吸收光谱特性和朗伯-比尔定律对物质进行定性与定量分析的仪器。

光谱仪主要由光源、光学系统、光谱检测器和数据分析系统等部分组成，主要用于对生产线或现场的物料成分进行实时测量。光谱仪的测量模式可分为透射模式和漫反射模式两种。结构示意图如图 1 所示。

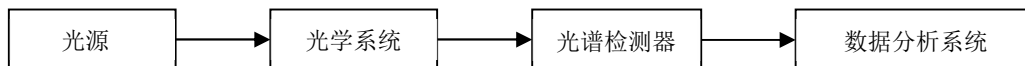


图 1 光谱仪结构示意图

4 计量特性

光谱仪的计量特性见表 1。

表 1 光谱仪计量特性

序号	计量特性	技术指标	
		透射模式	漫反射模式
1	波长示值误差	不超过 $\pm 3.0\text{ nm}$	
2	波长重复性	$\leq 1.0\text{ nm}$	
3	透射比示值误差	不超过 $\pm 3.0\%$	——
4	透射比重复性	$\leq 1.0\%$	——
5	反射比示值误差	——	不超过 ± 0.12
6	反射比重复性	——	≤ 0.04
注：以上技术指标不用于合格性判定，仅供参考。			

5 校准条件

5.1 环境条件

5.1.1 环境温度： $(15\sim 35)\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。

5.1.2 相对湿度：不大于 85%。

5.1.3 工作环境应通风良好，无强光直射，光谱仪周围无强烈的机械振动和电磁干扰，不得存放易挥发、易燃、易爆和强腐蚀性的物质。

5.2 测量标准及其他设备

5.2.1 近红外波长滤光片：波长不确定度不大于 1.0 nm ($k=2$)；

5.2.2 近红外反射波长标准板：波长不确定度不大于 1.0 nm ($k=2$)；

5.2.3 近红外透射比滤光片：透射比不确定度不大于 0.8% ($k=2$)；

5.2.4 近红外漫反射比标准板/高漫反射比标准白板：反射比不确定度不大于 0.04 ($k=2$)。

6 校准项目和校准方法

6.1 校准前检查

光谱仪各部分能正常工作，不应有影响计量特性及功能的缺陷。

6.2 波长示值误差和波长重复性

设定合适的光谱仪波长扫描范围，慢速扫描，根据计量标准器使用要求选择合适的

分辨率及光谱带宽，扫描次数透射模式为 15 或漫反射模式为 256。待光谱仪稳定后，设置透射模式以空气本底为背景扫描近红外波长滤光片，测量 6 个主要吸收峰；或设置漫反射模式以空气本底为背景扫描近红外反射波长标准板，测量 6 个主要反射峰。重复测量 3 次，取算术平均值作为测量结果。按式（1）计算波长示值误差。按式（2）计算波长重复性。

$$\Delta_{\lambda} = \bar{\lambda} - \lambda_s \quad (1)$$

式中：

Δ_{λ} ——波长示值误差，nm；

$\bar{\lambda}$ ——3 次波长测量算术平均值，nm；

λ_s ——波长标准值，nm。

$$\delta_{\lambda} = \lambda_{\max} - \lambda_{\min} \quad (2)$$

式中：

δ_{λ} ——波长重复性，nm；

$\lambda_{\max}$ ——3 次波长测量最大值，nm；

$\lambda_{\min}$ ——3 次波长测量最小值，nm。

6.3 透射模式透射比示值误差和重复性

按 6.2 条件设定光谱仪参数，待光谱仪稳定后，扫描透射比标称值为 10%，20%，30% 的近红外透射比滤光片，分别测量 800 nm、1000 nm、2000 nm 处透射比值，重复测量 3 次，取算术平均值作为测量结果。按式（3）计算透射比示值误差。按式（4）计算透射比重复性。

$$\Delta_T = \bar{T} - T_s \quad (3)$$

式中：

Δ_T ——透射比示值误差，%；

$\bar{T}$ ——3 次透射比测量算术平均值，%；

T_s ——透射比标准值，%。

$$\delta_T = T_{\max} - T_{\min} \quad (4)$$

式中：

δ_T ——透射比重复性，%；

$T_{\max}$ ——3 次透射比测量最大值，%；

$T_{\min}$ ——3 次透射比测量最小值，%。

6.4 漫反射模式反射比示值误差和重复性

按 6.2 条件设定光谱仪参数，待光谱仪稳定后，扫描近红外漫反射比标准板或高漫反射比标准白板，分别测量 800 nm、1000 nm、2000 nm 处反射比值，重复测量 3 次，取算术平均值作为测量结果，按式（5）计算反射比示值误差。按式（6）计算反射比重复性。

$$\Delta_\rho = \bar{\rho} - \rho_s \quad (5)$$

式中：

Δ_ρ ——反射比示值误差；

$\bar{\rho}$ ——3 次反射比测量算术平均值；

ρ_s ——反射比标准值。

$$\delta_\rho = \rho_{\max} - \rho_{\min} \quad (6)$$

式中：

δ_ρ ——反射比重复性；

$\rho_{\max}$ ——3 次反射比测量最大值；

$\rho_{\min}$ ——3 次反射比测量最小值。

7 校准结果的表达

校准结果应在校准证书上反映，校准证书应包括以下信息：

- a) 标题：“校准证书”；
- b) 实验室名称和地址；
- c) 进行校准的地点；
- d) 校准证书编号，页码及总页数的标识；
- e) 客户的名称和地址；

- f) 被校光谱仪的制造单位、名称、型号及编号;
- g) 校准单位校准专用章;
- h) 校准日期;
- i) 校准所依据的技术规范名称及代号;
- j) 本次校准所用测量标准的溯源性及有效性说明;
- k) 校准时的环境温度、相对湿度;
- l) 校准结果及其测量不确定度;
- m) 对校准规范的偏离的说明(若有);
- n) “校准证书”的校准人、核验人、批准人签名及签发日期;
- o) 校准结果仅对被校仪器本次测量有效的声明;
- p) 未经实验室书面批准, 部分复制证书或报告无效的声明。

8 复校时间间隔

光谱仪的复校间隔建议不超过 1 年。由于复校时间间隔的长短是由光谱仪的使用情况、使用者、光谱仪本身质量等诸因素所决定的, 因此送校单位可根据实际使用情况自主决定复校时间间隔。如果对光谱仪的检测数据有怀疑或光谱仪更换主要部件及修理后, 应对光谱仪重新校准。

附录 A

在线式/便携式近红外光谱仪校准记录参考格式

委托单位					
委托单位地址					
仪器名称		型 号			
制 造 厂		出厂编号			
环境温度		相对湿度			
证书编号		记录编号			
校准员		核验员			
校准日期		校准地点			
校准依据					
校准使用的标准器					
名 称	测量范围	不确定度/准确度等级/ 最大允许误差	设备编号	检定/校准 证书编号	有效期至

A.1 校准前检查： ☐ 已就绪 ☐ 未就绪

A.2 波长示值误差和重复性：

A.2.1 透射模式

标准值 nm	示值/nm			平均值 nm	示值误差 nm	重复性 nm
	1	2	3			

A.2.2 漫反射模式

标准值 nm	示值/nm			平均值 nm	示值误差 nm	重复性 nm
	1	2	3			

A.3 透射比示值误差和重复性：

波长 nm	标准值	示值			平均值	示值误差	重复性
		1	2	3			

A.4 反射比示值误差和重复性：

波长 nm	标准值	示值			平均值	示值误差	重复性
		1	2	3			

以下空白

附录 B

校准结果内页推荐格式

标准项目			校准结果			
			标准值	示值误差		重复性
				测量结果	扩展不确定度 U ($k=2$)	
透射模式	波长					
	透射比	800 nm				
		1000 nm				
		2000 nm				
反射模式	波长					
	透射比	800 nm				
		1000 nm				
		2000 nm				

以下空白

附录 C

波长示值误差的不确定度评定示例

C.1 概述

C.1.1 测量方法：按光谱仪说明书操作，光谱仪调试正常。设定合适的光谱仪波长扫描范围，慢速扫描，根据计量标准器使用要求选择合适的分辨率及光谱带宽，扫描次数透射模式为 15 或漫反射模式为 256。待光谱仪稳定后，设置透射模式以空气本底为背景扫描近红外波长滤光片，测量 6 个主要吸收峰；或设置漫反射模式以空气本底为背景扫描近红外反射波长标准板，测量 6 个主要反射峰。重复测量 3 次，取算术平均值作为测量结果。

C.1.2 测量模型

$$\Delta_{\lambda} = \bar{\lambda} - \lambda_s \quad (\text{C.1})$$

式中：

Δ_{λ} ——波长示值误差，nm；

$\bar{\lambda}$ ——3 次波长测量平均值，nm；

λ_s ——波长标准值，nm。

C.1.3 不确定度传播律

被测量的估计值 $\Delta\lambda$ 与输入量的估计值 $\bar{\lambda}$ 之间的测量模型为线性模型，并且全部输入量彼此间独立不相关，不确定度可由式 (C.2) 计算：

$$u_c(\Delta_{\lambda}) = \sqrt{c^2(\bar{\lambda})u^2(\bar{\lambda}) + c^2(\lambda_s)u^2(\lambda_s)} \quad (\text{C.2})$$

C.1.4 灵敏系数

$$c(\bar{\lambda}) = \frac{\partial \Delta_{\lambda}}{\partial \bar{\lambda}} = 1 \quad c(\lambda_s) = \frac{\partial \Delta_{\lambda}}{\partial \lambda_s} = -1$$

C.2 标准不确定度的来源及评定

以透射模式为例进行波长示值误差的不确定度评定。

C.2.1 测量重复性引入的标准不确定度 $u_1(\bar{\lambda})$

以透射模式测量 1679.7 nm 波长为例，使用被校仪器对近红外波长滤光片进行 10 次

重复性测量,测得值为 1680.32 nm, 1680.27 nm, 1680.25 nm, 1680.54 nm, 1680.23 nm, 1680.39 nm, 1680.48 nm, 1680.22 nm, 1680.34 nm, 1680.50 nm。

测量结果标准偏差为:

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\lambda_i - \bar{\lambda})^2}{n-1}} = 0.118 \text{ nm}$$

根据校准规范,进行波长示值误差测量时,每一个校准点重复测量 3 次,则由测量重复性引入的标准不确定度为:

$$u_1(\bar{\lambda}) = \frac{s}{\sqrt{3}} = \frac{0.118 \text{ nm}}{\sqrt{3}} = 0.0682 \text{ nm}$$

C.2.2 仪器分辨力引入的标准不确定度 $u_2(\bar{\lambda})$

仪器分辨力为 0.01 nm, 由分辨力引入的标准不确定度为:

$$u_2(\bar{\lambda}) = \frac{0.01 \text{ nm}}{2\sqrt{3}} = 0.0029 \text{ nm}$$

由于 $u_2(\bar{\lambda})$ 小于 $u_1(\bar{\lambda})$, 仪器分辨力引入的标准不确定度可忽略。

C.2.3 标称值引入的标准不确定度 $u(\lambda_s)$

根据校准证书,近红外波长滤光片在 1679.7 nm 处的扩展不确定度 $U=0.7 \text{ nm}(k=2)$, 则:

$$u(\lambda_s) = \frac{U}{2} = \frac{0.7 \text{ nm}}{2} = 0.35 \text{ nm}$$

C.3 不确定度的合成

根据不确定度传播律,合成标准不确定度用式 (C.2) 计算, 则:

$$u_c(\Delta_\lambda) = \sqrt{c^2(\bar{\lambda})u^2(\bar{\lambda}) + c^2(\lambda_s)u^2(\lambda_s)} = 0.357 \text{ nm}$$

C.4 扩展不确定度的表示

取 $k=2$, 则波长示值误差测量结果扩展不确定度为:

$$U = ku_c = 2 \times 0.357 \text{ nm} = 0.713 \text{ nm} \approx 0.8 \text{ nm}$$

附录 D

透射比/反射比示值误差的不确定度评定示例

D.1 概述

D.1.1 测量方法：按仪器说明书操作，仪器调试正常。设定合适的光谱仪波长扫描范围，慢速扫描，根据计量标准器使用要求选择合适的分辨率及光谱带宽，扫描次数透射模式为 15 或漫反射模式为 256。待光谱仪稳定后，在透射模式下扫描透射比标称值为 10%，20%，30% 的红外透射比滤光片，分别测量 800 nm，1000 nm，2000 nm 处透射比值，重复测量 3 次，取算术平均值作为测量结果。或在漫反射模式下扫描近红外漫反射比标准板或高漫反射比标准白板，分别测量 800 nm，1000 nm，2000 nm 处反射比值，重复测量 3 次，取算术平均值作为测量结果

D.1.2 测量模型

$$\Delta_T = \bar{T} - T_s \quad (\text{D.1})$$

式中：

Δ_T ——透射比示值误差，%；

$\bar{T}$ ——3 次透射比测量平均值，%；

T_s ——透射比标准值，%。

$$\Delta_\rho = \bar{\rho} - \rho_s \quad (\text{D.2})$$

式中：

Δ_ρ ——反射比示值误差；

$\bar{\rho}$ ——3 次反射比测量平均值；

ρ_s ——反射比标准值。

D.1.3 不确定度传播律

被测量的估计值 Δ_T 与输入量的估计值 $\bar{T}$ 之间的测量模型为线性模型，并且全部输入量彼此间独立不相关，不确定度可由式 (D.3) 计算：

$$u_c(\Delta_T) = \sqrt{c^2(\bar{T})u^2(\bar{T}) + c^2(T_s)u^2(T_s)} \quad (\text{D.3})$$

被测量的估计值 Δ_ρ 与输入量的估计值 $\bar{\rho}$ 之间的测量模型为线性模型，并且全部输入

量彼此间独立不相关，不确定度可由式（D.4）计算：

$$u_c(\Delta_\rho) = \sqrt{c^2(\bar{\rho})u^2(\bar{\rho}) + c^2(\rho_s)u^2(\rho_s)} \quad (\text{D.4})$$

D.1.4 灵敏系数

$$c(\bar{T}) = \frac{\partial \Delta_T}{\partial \bar{T}} = 1 \quad c(T_s) = \frac{\partial \Delta_T}{\partial T_s} = -1$$

$$c(\bar{\rho}) = \frac{\partial \Delta_\rho}{\partial \bar{\rho}} = 1 \quad c(\rho_s) = \frac{\partial \Delta_\rho}{\partial \rho_s} = -1$$

D.2 标准不确定度的来源及评定

以透射模式为例进行透射比示值误差的不确定度评定。

D.2.1 测量重复性引入的标准不确定度 $u_1(\bar{T})$

以透射模式测量 20%透射比为例，使用被校仪器对透射比标称值为 20.85%的红外透射比滤光片在 800 nm 处进行 10 次重复性测量，测量值为 20.62%、20.66%、20.65%、20.67%、20.63%、20.65%、20.63%、20.61%、20.64%、20.67%。

单次测量结果实验标准偏差为：

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (T_i - \bar{T})^2}{n-1}} = 0.02\%$$

根据校准规范，进行透射比示值误差校准时，每一个校准点重复测量 3 次，则由测量重复性引入的标准不确定度为：

$$u_1(\bar{T}) = \frac{s}{\sqrt{3}} = \frac{0.02\%}{\sqrt{3}} = 0.012\%$$

D.2.2 仪器分辨力引入的标准不确定度 $u_2(\bar{T})$

仪器分辨力为 0.01%，由分辨力引入的标准不确定度为：

$$u_2(\bar{T}) = \frac{0.01\%}{2\sqrt{3}} = 0.0029\%$$

由于 $u_2(\bar{T})$ 小于 $u_1(\bar{T})$ ，仪器分辨力引入的标准不确定度可忽略。

D.2.3 标称值引入的标准不确定度 $u(T_s)$

红外透射比滤光片的证书给出透射比标称值的相对不确定度为 $U_{\text{rel}}=0.7\%$ ($k=2$)，

则:

$$u(T_s) = \frac{0.7\% \times 20.85\%}{2} = 0.073\%$$

D.3 不确定度的合成

根据不确定度传播律，合成标准不确定度用公式（D.3）计算，则：

$$u_c(\Delta_T) = \sqrt{c^2(\bar{T})u^2(\bar{T}) + c^2(T_s)u^2(T_s)} = 0.074\%$$

D.4 扩展不确定度的表示

取 $k=2$ ，则透射比示值误差测量结果扩展不确定度为：

$$U = ku_c = 2 \times 0.074\% = 0.148\% \approx 0.2\%$$
