

S450 近红外光谱仪器模型测试报告

应用上海棱光技术有限公司生产的两台光栅扫描型 S450 近红外光谱分析仪和一台进口傅里叶变换近红外光谱分析仪，对已知粗蛋白质化学值的 72 份小麦样品进行近红外光谱采集，使用中国农业大学近红外分析实验室研发的 CAUNIRS 软件建模。测试项目包括：光谱图，仪器模型性能对比，仪器模型稳定性测试，台间仪器模型传递测试，仪器波长指标的长期稳定性。

一、光谱图对比

分别用光栅型仪器和傅里叶变换仪器重复测量小麦样品两次，原始光谱图和一阶导数光谱图对比如图 1。

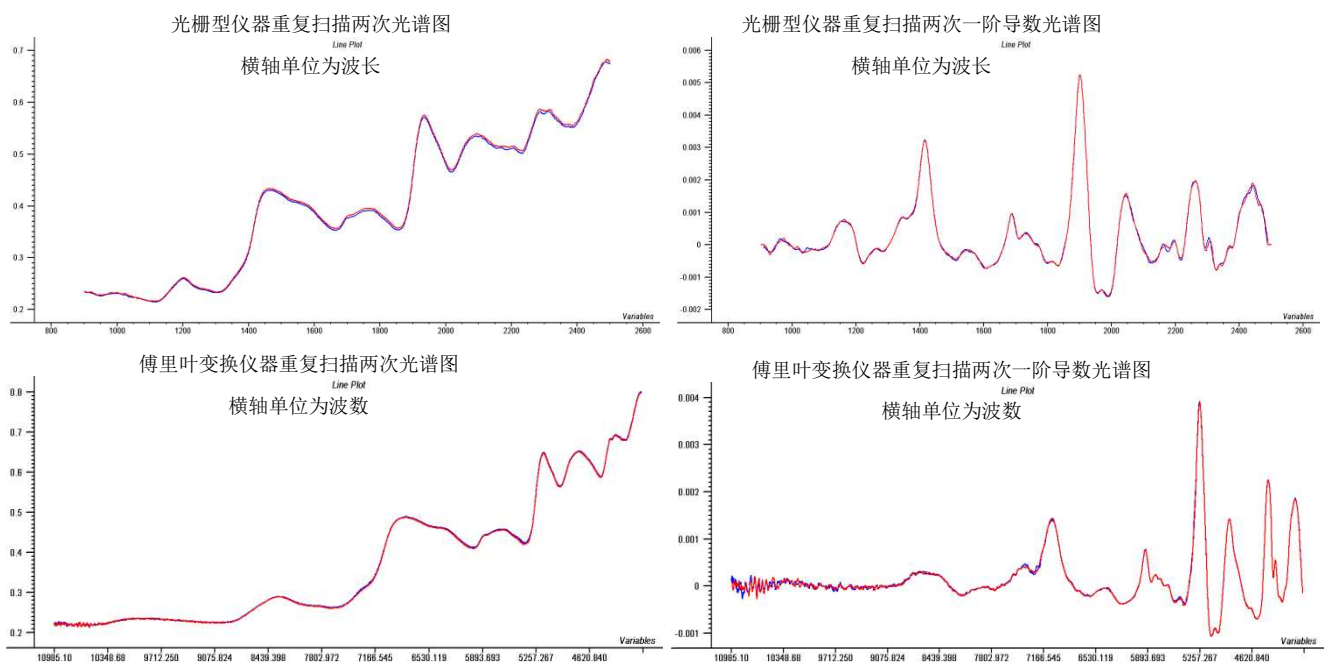


图 1：光栅型和傅里叶变换仪器光谱对比图

二、仪器模型性能对比

52 份小麦样品用于建模，20 份小麦样品用于模型外部检验。两台光栅型仪器及一台傅里叶变换型仪器建模的交叉验证结果和模型外部检验结果情况见表 1，数据散点图见图 2。建模中的光谱预处理方法为标准正态变换 (SNV) 加一阶导数 (FD)，表中的 R^2 为决定系数，SECV 为交叉验证标准差，RSD%为相对标准差，SEP 为模型外部检验标准差。

表 1：三台仪器小麦粗蛋白近红外模型结果

| 仪器编号 | 交叉验证 | | | 外部检验 | | |
|------------|-------|------|------|-------|------|------|
| | R^2 | SECV | RSD% | R^2 | SEP | RSD% |
| S450 1 号仪器 | 94.90 | 0.44 | 2.93 | 96.54 | 0.44 | 2.90 |
| S450 2 号仪器 | 94.67 | 0.44 | 3.00 | 95.59 | 0.48 | 3.17 |
| 傅里叶变换型仪器 | 95.62 | 0.40 | 2.71 | 97.39 | 0.36 | 2.39 |

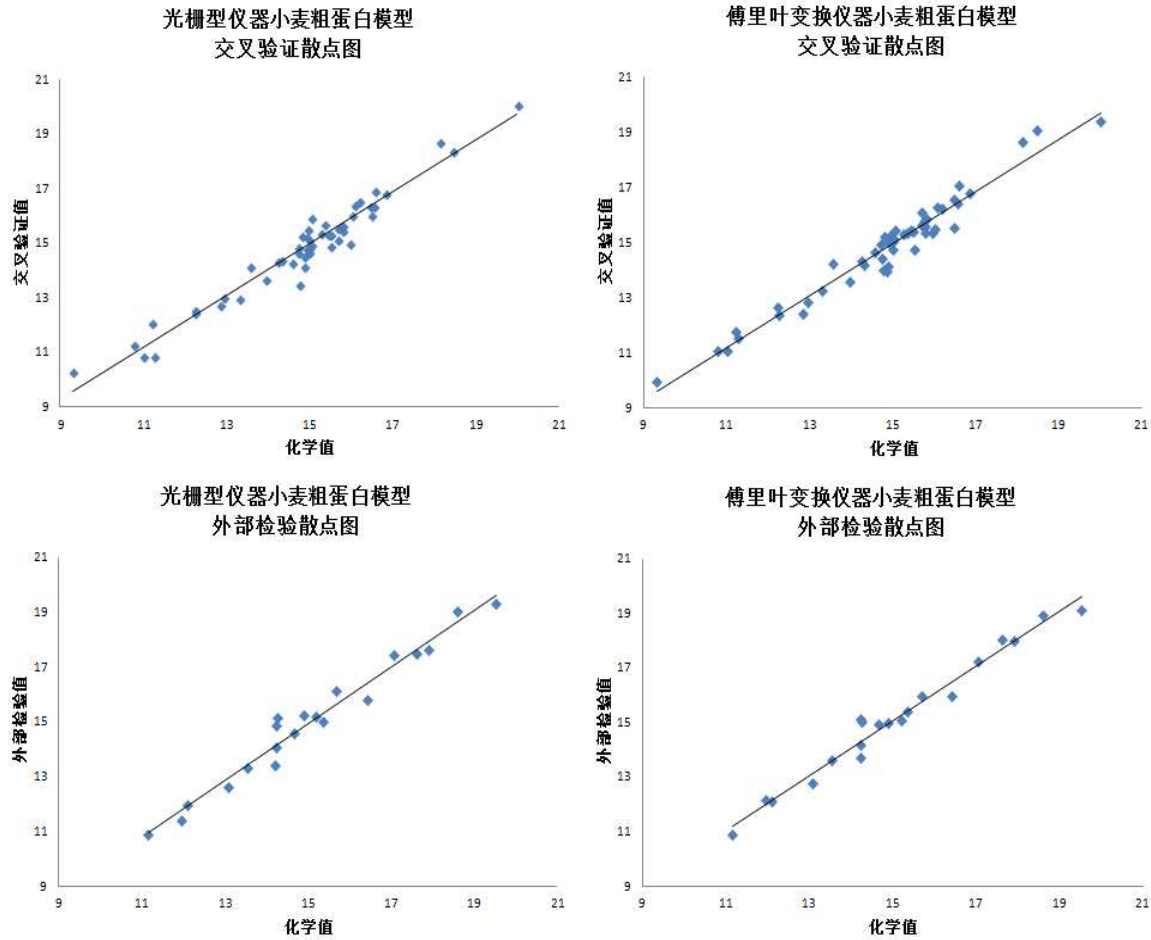


图 2：光栅型和傅里叶变换仪器模型结果散点图对比

三、仪器模型稳定性测试

选择一份小麦样品，进行 10 次重复光谱扫描测试，模型分析数据见表 2，统计数据见表 3。

表 2：小麦粗蛋白重复测试数据

| 测量序号 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| S450 1 号仪器 | 18.98 | 18.95 | 19.10 | 19.16 | 19.12 | 19.14 | 19.20 | 19.09 | 19.18 | 19.21 |
| S450 2 号仪器 | 19.33 | 19.38 | 19.30 | 19.27 | 19.27 | 19.29 | 19.07 | 19.23 | 19.13 | 19.16 |

表 3：仪器模型重复性测试

| 仪器编号 | 粗蛋白平均值 | 标准偏差 (Std) | 相对标准偏差 (RSD%) |
|----------|--------|---------------|------------------|
| S450-1 号 | 19.11 | 0.08 | 0.44 |
| S450-2 号 | 19.24 | 0.09 | 0.48 |

四、台间仪器模型传递测试

按图 3 流程对小麦样品集进行仪器台间模型分析，得出台间差异对比数据见表 4，对比散点图见图 4。



图 3：获取仪器台间差异数据流程

表 4：台间仪器模型偏差分析结果

| 对比数据集 | 决定系数 $R^2\%$ | 标准偏差 (Std) | 相对标准偏差 (RSD%) |
|------------------|-----------------|---------------|------------------|
| D(y) 对比 D(1→2) | 96.15 | 0.45 | 2.97 |
| D(y) 对比 D(2→1) | 95.95 | 0.46 | 3.05 |
| D(1→2) 对比 D(2→1) | 99.43 | 0.17 | 1.14 |

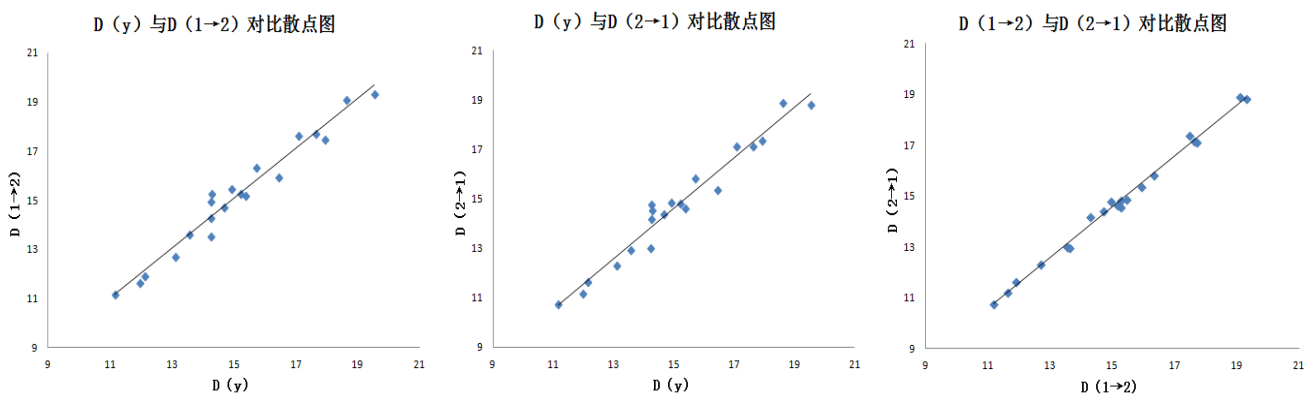


图 4：台间仪器模型偏差分析散点图

五、仪器波长指标的稳定性

光谱仪器的波长准确性容易受到环境温度的影响。S450 内置聚苯乙烯波长标准片，确保了仪器波长指标的长期稳定性。使用近红外波长标准物（GBW(E)130551），重复测试仪器的波长准确性，用时 3 个月获得上千条图谱，测试环境温度从 16℃ 到 34℃，波长准确性均达到 ±0.2nm 的指标要求。

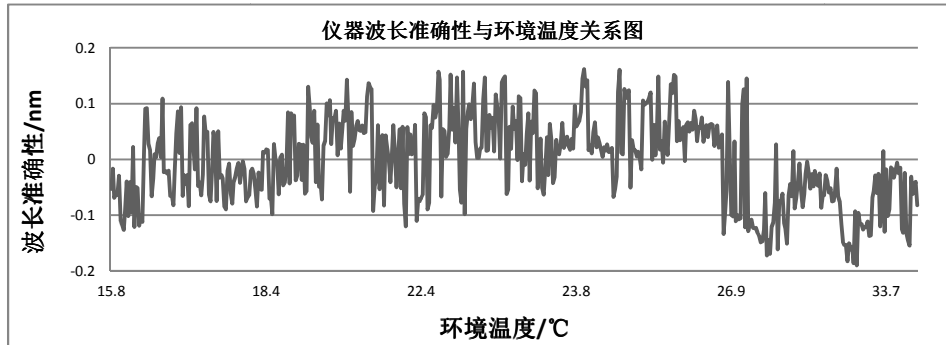


图 5 仪器波长准确性与环境温度关系图

六、总结

- S450 近红外光谱分析仪模型性能接近进口傅里叶变换型仪器的水平。
- 良好的台间仪器模型传递能力，大幅降低实际应用中的建模工作量。
- 仪器波长指标的长期稳定性，为建立稳定、实用的近红外模型提供重要硬件基础。

S450 近红外光谱分析仪结合近红外光谱分析软件 CAUNIRS，所建立的模型性能指标、稳定性和传递能力均可满足近红外光谱分析技术的实际应用需求。



| 参数指标 | S450 近红外光谱分析仪 |
|-------|--|
| 测量方式 | 积分球漫反射样品池 |
| 光谱带宽 | 12nm |
| 波长范围 | 900nm~2500nm |
| 波长准确性 | ≤0.2nm |
| 波长重复性 | ≤0.05nm |
| 杂散光 | ≤0.1% |
| 吸光度噪声 | ≤0.0005Abs |
| 分析时间 | 1 分钟（可调节） |
| 光源寿命 | 大于 5000 小时 |
| 样品量 | 大杯 Φ90 约 120g、中杯 Φ60 约 60g、 小杯 Φ30 约 12g、方杯 50×30 约 30g |
| 定标技术 | 定量分析：LPLS 局部偏最小二乘算法 定性分析：DPLS 数字化偏最小二乘算法 |
| 分析指标数 | 不限，支持定量定性同时分析 |
| 尺寸 | 540×380×220 (mm) |
| 重量 | 18Kg |