

拉曼光谱结合 PSO-LSSVM 算法检测三组分食用调和油含量

张燕君, 何宝丹, 付兴虎*, 徐金睿, 周昆鹏

燕山大学信息科学与工程学院, 河北省特种光纤与光纤传感重点实验室, 河北 秦皇岛 066004

摘要 提出了一种将拉曼光谱和基于粒子群的最小二乘支持向量机(PSO-LSSVM)算法相结合快速定量检测三组分食用调和油含量的方法。以三组分的食用调和油为研究对象, 对拉曼光谱分四步进行了预处理, 进而准确提取拉曼光谱的特征峰强度。以训练集样本的特征峰强度和调和油样品的百分比含量作为回归预测模型的输入值和输出值, 建立 LSSVM 和 PSO-LSSVM 数学模型, 通过测试集样本的相关系数和均方误差对模型的预测能力进行分析。非线性建模的最小二乘支持向量机(LSSVM)算法的核函数参数 σ 和正则化参数 γ 对模型的学习和泛化能力影响很大, 导致模型的预测精度和泛化能力过度依赖于参数——在优化步长过小时耗时较长, 过大时又无法得到全局最优值。提出的 PSO-LSSVM 算法, 利用粒子群全局优化能力和收敛速度快的特点对 LSSVM 的模型参数 σ 和 γ 进行优化, 从而克服 LSSVM 算法中耗时与盲目性的问题。分析结果表明, PSO-LSSVM 算法对三组分食用调和油中大豆油、花生油和葵花仁油定量预测模型的测试集相关系数分别为 0.967 7, 0.997 2, 0.995 3; 均方误差分别为 0.054 9, 0.009 2, 0.047 1。与 LSSVM 算法相比, PSO-LSSVM 模型的预测精度更高。因此, 该方法可以快速、准确地检测三组分食用调和油的含量。

关键词 拉曼光谱; 粒子群优化; 最小二乘支持向量机; 食用调和油; 定量检测

中图分类号: TN247 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2017)08-2440-06

引言

近年来, 食用调和油的营养搭配理念越来越受到人们的欢迎, 某些商家抓住消费者的需求, 采用便宜的油类作为食用调和油的主要部分, 甚至刻意突出某个高级油类的含量, 其余部分却是以低价的油类来代替。目前, 人们检测食用调和油的方法主要有: 同位素比值法^[1]、气相色谱法^[2]和近红外光谱法^[3]等。虽然, 这些方法可以准确检测食用调和油的掺伪问题, 但是需要进行繁琐的样本处理、耗费时间且对测试人员要求较高, 无法满足市场中快速定量检测的需求。拉曼光谱检测技术可以克服传统检测方法的缺点, 并且在样品制备方面操作简单、对样品的数量需求较小, 有效降低了测试成本^[4]。同时, 拉曼光谱可以用来分析非极性基团与骨架的对称振动, 进而红外吸收较弱或者无吸收的官能团会在拉曼散射谱中有强峰出现^[5], 因此可以检测出被测样品的成分、浓度和结构等信息。

目前, 拉曼光谱检测技术在食用油快速定量检测方面的

应用越来越受到重视。刘燕德等^[6]利用偏最小二乘法(PLS)对三组分食用调和油(菜籽油、花生油、芝麻油)进行了研究, 并建立了回归预测模型; 李冰宁等^[7]利用 SVM 分类算法对大豆油掺伪问题进行了研究; 邓之银等采用拉曼光谱和多输出最小二乘支持向量回归机(MLS-SVR)相结合的方法对食用油中 SFA, Oleic 和 Linoleic 三种脂肪酸的含量进行了检测。

在以往拉曼光谱测量食用油的应用当中, 大多数研究的是食用油的分类问题和两组分掺假问题, 但应用于多组分(三组分以上)食用油定量检测方面的研究比较少, 并且大多数是在线性情况下进行的分析。然而, 在实际过程中由于被测物品含量范围大、体系中各组分的相互作用和外界环境等因素的影响, 导致光谱数据信息与被测物品之间具有非线性的特点。LSSVM 进行非线性数学建模时, 模型中径向基核函数的核宽度 σ 和正则化参数 γ 对数学模型的预测效果影响很大。传统的优化算法一般操作步骤比较复杂、耗费时间, 具有一定的盲目性, 并且处理高维问题时其收敛速度和精度都会受到限制^[8]。LSSVM 算法采用的是网格搜索法选择模

收稿日期: 2016-06-22, 修订日期: 2016-10-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(61205068), 中国博士后科学基金项目(2013M541200), 河北省自然科学基金项目(F2014203125), 燕山大学“新锐工程”人才支持计划项目资助

作者简介: 张燕君, 女, 1973 年生, 燕山大学信息科学与工程学院教授 e-mail: yjzhang@ysu.edu.cn

* 通讯联系人 e-mail: fuxinghu@ysu.edu.cn

型参数并进行交叉验证,该方法得到的模型预测精度和泛化能力太过依赖于模型参数,导致了参数在选择时比较盲目。因此,为了克服参数选择问题,本文在 LSSVM 预测模型的基础上,利用粒子群算法(PSO)优化模型参数,获得最优的参数组合 (γ, σ) ,克服了传统优化算法在参数选择方法上的耗时和盲目性,提高了其泛化能力和预测精度,为以后在食用调和油方面的定量检测提供更有利的依据。

1 粒子群优化最小二乘支持向量机回归原理

1.1 最小二乘支持向量机

LSSVM 是在标准 SVM 基础上的扩展,它主要是通过把不等式的约束变成等式的约束条件,将问题转换为求解一组等式方程的问题。对于给定训练样本集 $S = (x_i, y_i)$, $i = 1, \dots, n$, 其中: $x_i \in R^m$ 为 m 维输入, $y_i \in R$ 为一维输出。

$$f(x) = w^T \varphi(x) + b \quad (1)$$

其中, $w = [w_1, \dots, w_n]^T$ 为权值系数向量; $\varphi(\cdot) = [\varphi_1(\cdot), \dots, \varphi_n(\cdot)]^T$ 为非线性映射函数。

考虑到函数拟合误差和复杂度,并依据结构风险最小化原理,将回归问题转化为一个等式约束的优化问题^[9]。其目标优化为

$$\min_{w, b, e} J(w, e) = \frac{1}{2} w^T w + \frac{\gamma}{2} \sum_{i=1}^n e_i^2, \gamma > 0 \quad (2)$$

$$\text{s.t. } y_i = w^T \varphi(x_i) + b + e_i \quad (i = 1, \dots, n) \quad (3)$$

其中,式(2)的第一项和第二项分别展示了模型的泛化能力和模型的准确度,参数 γ 可以用来调节式(2)中第一项和第二项的平衡, e_i 表示为第 i 个数据在实际值与预测值的两者之间的误差。为了解决式(2)中目标优化的转化问题,建立如下拉格朗日等式

$$L(w, b, e, \alpha) = J(w, e) - \sum_{i=1}^N \alpha_i (w^T \varphi(x_i) + b + e_i - y_i) \quad (4)$$

式中, $\alpha_i (i = 1, \dots, n)$ 。

根据 KKT 条件对式(4)求偏导得

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w} = 0 \rightarrow w = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varphi(x_i) \\ \frac{\partial L}{\partial b} = 0 \rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial e_i} = 0 \rightarrow \alpha_i = \gamma e_i \\ \frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = 0 \rightarrow w^T \varphi(x_i) + b + e_i - y_i = 0 \end{cases} \quad (5)$$

再根据 Mercer 条件定义

$$K(x_i, y_i) = \varphi^T(x_i) \varphi(y_i) \quad (6)$$

从方程组(5)消去 e_i 和 w 后,得

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & K(x_1, x_1) + \frac{1}{\gamma} & \cdots & k(x_1, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & K(x_n, x_1) & \cdots & K(x_n, x_n) + \frac{1}{\gamma} \end{bmatrix} \times$$

$$\begin{bmatrix} b \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (7)$$

然后得到 LSSVM 模型为

$$f(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i k(x, x_i) + b \quad (8)$$

常用的 LSSVM 算法中的核函数主要有径向基(RBF)核函数、多项式核函数和 Sigmoid 核函数^[10]。此处选取 RBF 作为 LSSVM 预测模型中的核函数

$$K(x, x_k) = \exp\{-\|x - x_k\|^2 / 2\sigma^2\}, \sigma > 0 \quad (9)$$

式中,参数 σ 为 RBF 的核宽度。

1.2 粒子群优化最小二乘支持向量机

在 LSSVM 预测模型的基础上,利用 PSO 算法的收敛速度快和全局收敛能力强的特点对 LSSVM 两个关键参数 γ 和 σ 进行优化,并且发挥了 LSSVM 的小样本学习能力强和计算简单的特点。群体的每个粒子在每次迭代时按式(10)一式(11)对其速度和位置进行更新,即

$$v_i(t+1) = v_i(t) + c_1 \text{rand}_1(p_{\text{best}i} - x_i(t)) + c_2 \text{rand}_2(g_{\text{best}i} - x_i(t)) \quad (10)$$

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1) \quad (11)$$

式中 c_1, c_2 为学习因子,通常在 $(0, 2)$ 之间取值; $\text{rand}_1, \text{rand}_2$ 为 $(0, 1)$ 之间的随机数; $p_{\text{best}i}, g_{\text{best}i}$ 分别代表在每次迭代时粒子本身的最优解和全部粒子的最优解; x_i 和 v_i 分别代表第 i 个粒子的当前位置和速度。

基于上述理论知识,对粒子群体的学习因子、种群规模、最大迭代次数进行初始化,并设定 LSSVM 的模型参数 γ 和 σ 。粒子群中的适应度函数采用 LSSVM 模型训练集样本的均方差 MSE 作为目标函数^[11],即

$$\text{fitness}(\gamma, \sigma) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (12)$$

式中, y_i, \hat{y}_i 分别为实际值和预测值, l 为训练集样本个数。

计算每次迭代中每个粒子的适应度值,并与其本身最优适应度值进行比较,更新保存当前的速度和位置;然后,比较每个粒子的最优适应度值和全部粒子的最优适应度值,更新保存粒子的当前位置和速度,进行不断的更新产生新一代种群,直至寻优结束获得 LSSVM 最优参数组合 (γ, σ) 。

2 实验与分析

2.1 仪器与样本制备

本次实验使用必达泰克公司生产的 BWS465-785S 便携式拉曼光谱仪,其分辨率大小为 4.5 cm^{-1} 。光谱仪激光器采用 785 nm 作为激发光源,在光谱范围为 $175 \sim 3200 \text{ cm}^{-1}$ 范围内对样品进行测量,设置拉曼光谱仪激光功率百分比为 60% (最大功率为 300 mW),每个样本测量 20 次,然后取平均值,每次积分时间为 1600 ms。在必达泰克公司的通用软件 BWRam4™ 环境下进行光谱预处理,获取拉曼光谱的特征值。利用获取的光谱特征值进行模型的建立与预测,并对结果进行作图与分析。

实验采用精炼的一级大豆油、花生油和葵花仁油, 三种食用油均购自大型超市品牌纯油, 且进行了定性检验确认。将三种食用油配制成各含量体积比不同的调和油样品, 混合样品比例选择总体积 10 mL 的百分比(0~100%), 每个样品间隔 10% 附加 5% 来配置不同浓度的样品, 对每个配置样品充分混合均匀, 在室温下放于 10 mL 离心管中密封避光保存, 静置 12 h 后待测, 按此方法配置 66 个待测样品。

2.2 光谱预处理与分析

实验时, 打开拉曼光谱仪, 预热 15 min 后, 将提前配置好的样品用一次性滴管取 3 mL 放置于样品池中, 放上遮光罩, 在室温下静置 20 min 后进行测量。

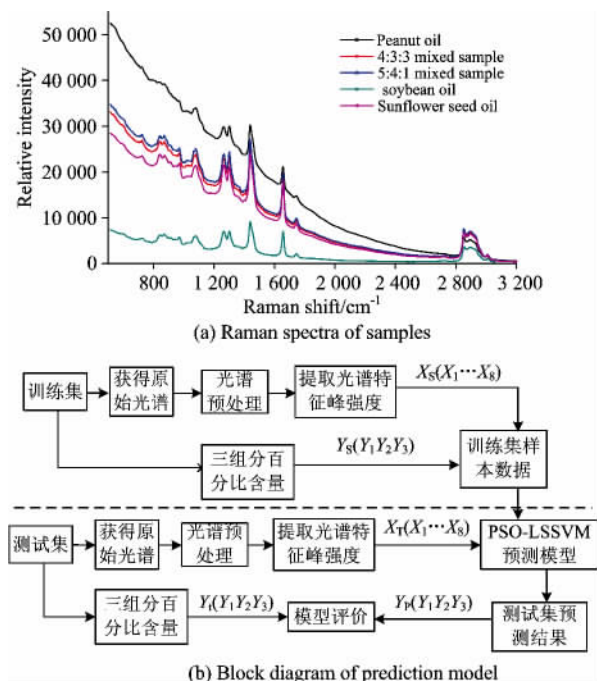


图 1 预测模型原理图

Fig 1 Principle diagram of prediction model

当以不同百分比间隔混合成不同样本时, 拉曼光谱特征峰的强度会随着分子式基团浓度的改变而发生变化。通过实验观察到 66 个样品的 8 个拉曼特征峰位移基本一致, 所以本文随机抽取了以 4:3:3 和 5:4:1 比例混合的食用油样品, 并与三种单一油品的拉曼光谱特征峰进行了对比, 如图 1(a) 所示。可以看出, 当三种食用油混合后和单一油品相比, 混合食用油样本在 870, 969, 1 080, 1 263, 1 302, 1 438, 1 656 和 1 745 cm^{-1} 处的拉曼特征峰位移基本相同, 但是这 8 个特征峰位移对应的强度却发生了变化。所以, 本文利用拉曼光谱的八个特征峰强度和样本百分比含量之间的变化关系来建立回归预测模型, 并以八个特征峰强度和样本百分比含量分别作为回归预测模型的输入值和输出值, 模型框图如图 1(b) 所示。其中, 食用油的 8 个主要拉曼特征峰的相关信息见表 1^[12], 综合考虑拉曼光谱中有效信息的分布情况, 选取信噪比较高的拉曼位移为 800~1 800 cm^{-1} 谱段作为建模分析的主要分析数据。

表 1 食用油的拉曼光谱特征峰

Table 1 Raman spectrum characteristic peaks of edible oil

特征峰位移/ cm^{-1}	分子式	官能团	振动方式
870	$-(\text{CH}_2)_n-$	C—C	伸缩振动
969	trans RHC=CHR	=C—H	弯曲振动
1 080	$-(\text{CH}_2)_n-$	C—C	伸缩振动
1 263	cis RHC=CHR	=C—H	弯曲振动
1 302	$-\text{CH}_2$	C—H	扭曲振动
1 438	$-\text{CH}_2$	C—H	剪式弯曲振动
1 656	cis RHC=CHR	C=C	伸缩振动
1 745	RC=OOR	C=O	伸缩振动

在实验过程中, 测得的光谱图往往会受到仪器的系统噪声、样本的荧光背景和外界环境的干扰, 所以采用暗电流扣除、背景扣除(基线校正)、光谱平滑和归一化处理四个预处理方法对原始光谱进行光谱预处理, 进而去除与待测样本实际光谱无关的外界干扰。图 2 为光谱背景扣除(基线校正)后的拉曼光谱图, 其中可以自动调整背景拟合参数 λ , 从而达到理想的背景扣除效果。图 3 采用的是 Savitzky-Golay 方法对图 2 处理后的光谱进行平滑处理, 其中窗口尺寸大小选取 5 作为其光谱平滑的数据点, 这种平滑方法比较常用, 不容易导致光谱失真和影响光谱的分辨率。图 4 采用光谱中拉曼特征峰 1 438.81 cm^{-1} 对应的相对强度作为最大值常量对光谱进行谱线归一化, 避免数值范围较大的属性控制数值范围较小的属性, 进而提高预测模型的精确度。

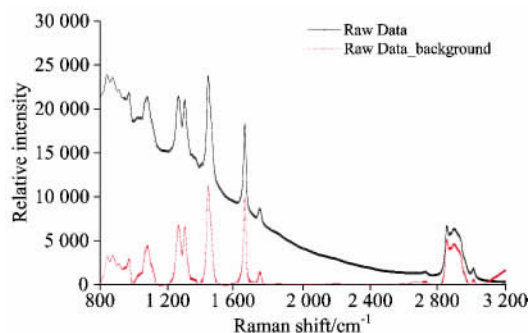


图 2 背景扣除(基线校正)后的拉曼光谱

Fig 2 Raman spectra after background removal (baseline correction)

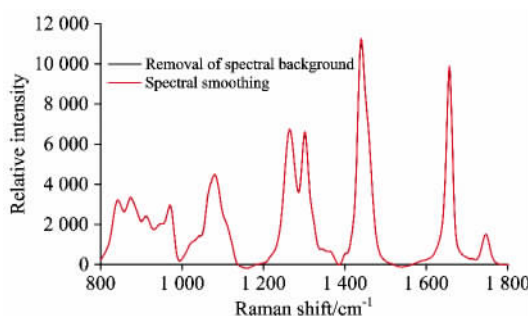


图 3 平滑处理后的拉曼光谱

Fig 3 Raman spectra after spectral smoothing

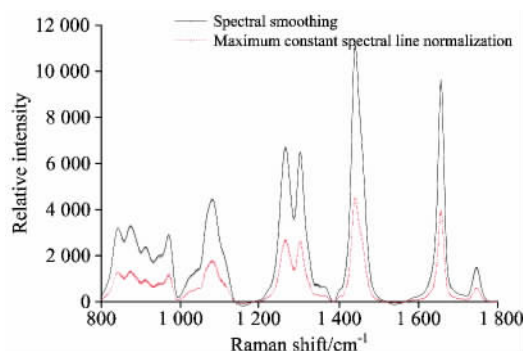


图 4 最大值常量归一化后的拉曼光谱

Fig 4 Raman spectra after maximum constant normalization

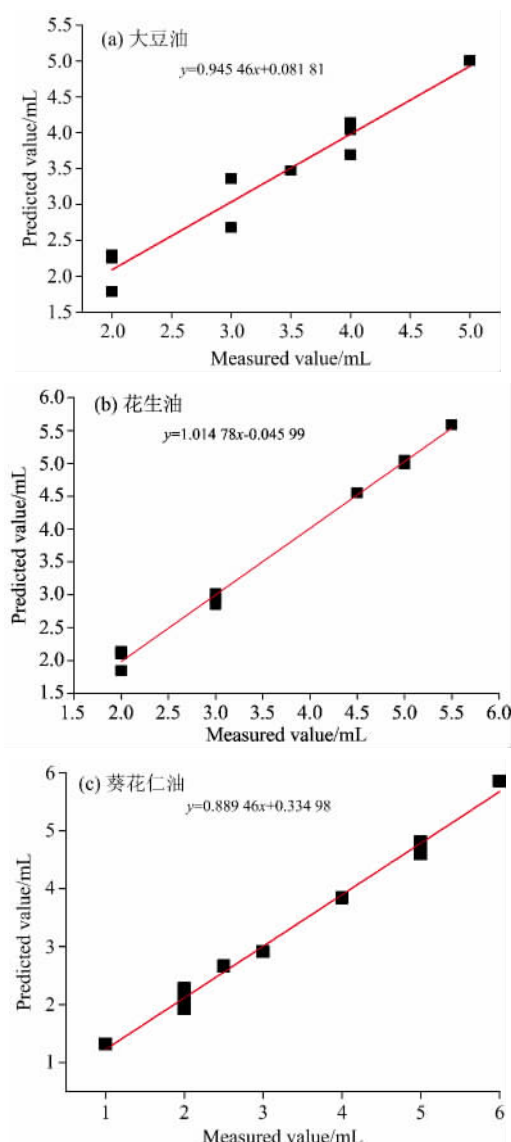


图 5 PSO-LSSVM 模型测试集中实际值与预测值之间的相关性曲线

Fig 5 Correlation curves between PSO-LSSVM model predictions and actual values

2.3 PSO-LSSVM 定量模型结果分析

以食用调和油样品的拉曼特征峰峰值作为预测模型的输入,大豆油、花生油、葵花仁油的含量作为预测模型的输出,通过 PSO 迭代优化得到的模型参数 γ 和 σ 作为最优参数组合,建立 PSO-LSSVM 定量预测模型。通过测试集样本数据的相关系数(R)和均方误差(MSE)对模型进行评价,计算公式如式(13)~式(14)示

$$R = \frac{l \sum_{i=1}^l y_i \hat{y}_i - \sum_{i=1}^l y_i \times \sum_{i=1}^l \hat{y}_i}{\sqrt{l \sum_{i=1}^l y_i^2 - (\sum_{i=1}^l y_i)^2} \times \sqrt{l \sum_{i=1}^l \hat{y}_i^2 - (\sum_{i=1}^l \hat{y}_i)^2}} \quad (13)$$

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^l (y_i - \hat{y}_i)^2}{l} \quad (14)$$

其中, y_i 为实际值, \hat{y}_i 为预测值, l 为样本的个数。

基于 LSSVM 和 PSO-LSSVM 模型的食用调和油中三组分测试集样本数据的相关系数和均方误差如表 2 所示。基于 PSO-LSSVM 预测模型的食用调和油中三组分的实际值和预测值两者之间的相关性结果分析如图 5 所示。

表 2 不同定量分析模型测试集结果比较

Table 2 Comparison of different quantitative analysis model training set

	大豆油		花生油		葵花仁油	
	R	MSE	R	MSE	R	MSE
LSSVM	0.966 7	0.059 5	0.996 9	0.010 1	0.993 6	0.047 8
PSO-LSSVM	0.967 7	0.054 9	0.997 2	0.009 2	0.995 3	0.047 1

从图 5 和表 2 分析可知, PSO-LSSVM 对三组分食用调和油中大豆油、花生油和葵花仁油测试集样本数据的相关系数分别为 0.967 7, 0.997 2 和 0.995 3; 均方误差分别为 0.054 9, 0.009 2 和 0.047 1。由此结果可知, 三组分食用调和油中花生油和葵花仁油的预测结果均达到 0.99 以上, 大豆油达到 0.96 以上。并且 PSO-LSSVM 模型建立的时间为 0.013 4 s, 与 LSSVM 算法相比节省了预测时间, 提高了预测精度。所以, PSO-LSSVM 算法可以在短时间内寻得全局最优参数组合(γ , σ), 克服了 LSSVM 参数选择耗时和盲目性的缺点, 提高了模型的预测精度。由此可知, PSO-LSSVM 建立的定量预测模型可以较好的预测食用调和油中三组分的含量, 为以后快速定量检测更多组分的食用调和油提供了依据。

3 结 论

提出了一种将拉曼光谱和 PSO-LSSVM(基于粒子群的最小二乘支持向量机)算法相结合快速定量检测三组分食用调和油含量的方法。采用暗电流扣除、背景扣除(基线校正)、归一化处理、光谱平滑四个预处理方法对样品的拉曼光谱进行了光谱预处理, 利用 PSO 全局优化能力和收敛速度快的特点对 LSSVM 的模型参数 σ 和 γ 进行优化, 寻得了

最优参数组合 (γ, σ) , 并且大豆油预测模型的相关系数在 0.96 以上, 花生油和葵花仁油在 0.99 以上, 获得了可行性的预测结果。因此, 该方法可以准确、快速地定量检测三组

分食用调和油含量, 为以后检测更多组分的食用调和油提供了可行性的依据。

References

- [1] TAN Meng-ru, LIN Hong, SHEN Chong-yu, et al(谭梦茹, 林宏, 沈崇钰, 等). Journal of Chinese Mass Spectrometry Society(质谱学报), 2015, 36(4): 334.
- [2] HE Rong, SHAN Xiao-lin, DONG Fang-yuan, et al(何榕, 山晓琳, 董方圆, 等). Chinese Journal of Analytical Chemistry(分析化学), 2015, (9): 1377.
- [3] CHEN Ting, LIU Qing-jun, WU Yan-wen, et al(陈婷, 刘清珺, 武彦文, 等). Food Safety and Quality Detection Technology(食品安全质量检测学报), 2015, (3): 836.
- [4] Boyaci I H, Uysal R S, Temiz T, et al. Biology of the Cell, 2014, 238(5): 53.
- [5] YANG Jin-mei, ZHANG Hai-ming, WANG Xu, et al(杨金梅, 张海明, 王旭, 等). Physics and Engineering, 2014, 24(4): 26.
- [6] LIU Yan-de, JIN Tan-tan, WANG Hai-yang(刘燕德, 靳昙昙, 王海阳). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2015, 23(9): 2490.
- [7] LI Bing-ning, WU Yan-wen, WANG Yu, et al(李冰宁, 武彦文, 汪雨, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2014, 34(10): 2696.
- [8] XU Jun, LU Hai-yan, SHI Gui-juan(许君, 鲁海燕, 石桂娟). Journal of Computer Applications(计算机应用), 2015, 35(3): 668.
- [9] ZHOU Xia, LIU Shan-jian(周霞, 柳善建). Computer Measurement & Control(计算机测量与控制), 2014, 22(10): 3101.
- [10] ZHOU Jin-ming, WANG Chuan-yu, HE Bang-qiang(周金明, 王传玉, 何帮强). Computer Engineering and Applications(计算机工程与应用), 2015, 51(4): 133.
- [11] GONG Wen-long, YAO Jian-gang, JIN Xiao-ming(龚文龙, 姚建刚, 金小明). Journal of Electrical Engineering, 2014, 2(1): 1.
- [12] Zhang Xiaofang, Qi Xiaohua, Zou Mingqiang, et al. Analytical Letters, 2011, 44(12): 2209.

Raman Spectra Combined with PSO-LSSVM Algorithm for Detecting the Components in Ternary Blended Edible Oil

ZHANG Yan-jun, HE Bao-dan, FU Xing-hu*, XU Jin-rui, ZHOU Kun-peng

School of Information Science and Engineering, The Key Laboratory for Special Fiber and Fiber Sensor of Hebei Province, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China

Abstract The paper presents a method which combines the Raman spectrum and the least square support vector machine (LSSVM) based on particle swarm optimization (PSO) to detect the content of three components of edible blend oil rapidly and quantitatively. In this paper, three components of edible oil were investigated. The characteristic peak intensity of Raman spectra was extracted by four pretreatments of the spectra. Then in the training samples, the characteristic peak intensity and the percentage of mixed oil samples were used as the input values and the output values of the regression analysis model. The mathematical models of LSSVM and PSO-LSSVM were established after different pretreatments. The predictive ability of the model was analyzed by the correlation coefficient and mean square error in the test samples. The traditional LSSVM algorithm for nonlinear modeling has many issues, such as its kernel parameter σ and the regularization parameter γ have great influences on the learning model and generalization ability. The fitting precision and generalization ability of the model are dependent on its related parameters, and the time consuming is too long while the optimal step size is too little; however, the global optimal values are hardly to get while the optimization step size is large. Yet, the PSO-LSSVM algorithm has the PSO algorithm advantages of fast convergence and global search capability, which can overcome the problems of time consuming and blindness in LSSVM algorithm. So the kernel parameters σ and γ of LSSVM algorithm are optimized by Global optimization ability and fast convergence characteristics of PSO algorithm. In the quantitative analysis of the three components of edible blend oil, the validation set correlation coefficients of the model for soybean oil, peanut oil and sunflower kernel oil were 0.967 7, 0.997 2 and 0.995 3, respectively; in addition, the mean square errors were 0.054 9, 0.009 2 and 0.047 1, respectively. Compared with the LSSVM algorithm, the prediction accuracy of PSO-LSSVM model is higher and the convergence rate is faster which has been verified by the experiments. Thus, the method can detect the content of the three components of edible oil accurately.

Keywords Raman spectroscopy; Particle swarm optimization; Least square support vector machine; Blended edible oil; Quantitative detection

* Corresponding author

(Received Jun. 22, 2016; accepted Oct. 15, 2016)

《光谱学与光谱分析》投稿简则

《光谱学与光谱分析》是由中国科协主管,中国光学学会主办,钢铁研究总院、中国科学院物理研究所、北京大学、清华大学共同承办的专业学术期刊。国内外公开发行,从 2004 年起为月刊,大 16 开本,2017 年仍为月刊,每期 332 页。《光谱学与光谱分析》主要报道我国光谱学与光谱分析领域内具有创新性科研成果,及时反映国内外光谱学与光谱分析的进展和动态;发现并培育人才;推动和促进光谱学与光谱分析的发展。为科教兴国服务。读者对象为从事光谱学与光谱分析的科研人员、教学人员、分析测试人员和科研管理干部。

栏目设置和要求

1. 研究报告 要求具有创新性的研究成果,一般文章以 8000 字(包括图表、参考文献、作者姓名、单位和中文、英文摘要,下同)为宜。

2. 研究简报 要求在前人研究的基础上有重大改进或阶段性研究成果,一般不超过 5000 字。

3. 评述与进展 要求评述国内外本专业的发展前沿和进展动态,一般不超过 10000 字。

4. 新仪器装置 要求介绍新型光谱仪器的研制、开发、使用性能和应用,一般不超过 5000 字。

5. 来稿摘登 要求测试手段及方法有改进并有应用交流价值,一般以 3000~4000 字为宜。

稿件要求

1. 投稿者请经本刊编委(或历届编委)一人或本专业知名专家推荐,并附单位保密审查意见及作者署名顺序,主要作者介绍。文章有重大经济效益或有创新者,请说明,同时注明受国家级基金或国家自然科学基金资助情况。

2. 来稿要观点明确、数据真实可靠、层次分明、言简意明、重点突出。来稿必须是网上在线投稿(含各种符号和外文字母大写、小写、正体、斜体;希腊字母、拉丁字母;上角、下角标位置应标清楚)。中文摘要以 500 字为宜,英文摘要以 2500 字符(相当于 400 个英文单词)为宜;另附关键词。要求来稿应达到“齐、清、定”,中文、英文文字通顺,方可接受送审。

3. 为了进一步统一和完善投稿方式、缩短论文发表周期,本刊只接收网上在线投稿,不接收以邮寄方式或 e-mail 方式的投稿,严禁“一稿多投”,对侵权、抄袭、剽窃等学术不端行为,一经发现,取消三年投稿资格。

4. 文中插图要求完整,图中坐标、线条、单位、符号、图注等应标注准确、完整。如作者特殊要求需出彩色插图者,必须在投稿时事先加以说明,并承担另加的彩印费用。图幅大小:单栏图 7.5cm(宽)×6cm(高);双栏图:14cm(宽)×6cm(高);图中数字、图题、表题全部用中文、英文对照,图中数字、中文、英文全用 6 号字(电子文档中除实物图外,曲线图尽可能用 Matlab, Excel, Visio 或 Origin 等软件制作,稿件中图片的原图并转成相应的文件格式(.fig, .xls, .vsd, .obj),非“.jpg”格式的文档,随电子版修改稿一同发送到本刊的修改稿专用邮箱)。

5. 文中出现的单位必须按“中华人民共和国计量标准”及有关 GB 标准规定缮写。物理量符号一律用斜体,单位符号和词头用正体字母。

6. 名词术语,请参照全国科学技术名词规定缮写。

7. 参考文献,采用顺序编码制,只列主要文献;以 15~20 条为宜。内部资料、私人通讯、未经公开发表的一律不能引用。日文、俄文等非英文文献,请用英文表述;中文文献和中文图书采用中、英文对照表述,文献缮写格式请参照本刊。

8. 请在投稿第一页左下角写明投稿联系人的电话和两个 e-mail,以便及时联系。

稿件处理

1. 自收到稿件之日起,一个月内作者会收到编辑部的稿件处理意见。请根据录用通知中所提出的要求认真修改,希望修改稿在 30 天内寄回编辑部,并作为作者最终定稿(当作者接到样校时,以此修改稿为准进行校对,请勿再做大的改动),若二个月内编辑部没收到修改稿,将视为自行撤稿处理。

2. 有重大创新并有基金资助者可优先发表;不录用的稿件,编辑部将尽快通知作者,底稿一律不退,请自留底稿。

3. 来稿一经发表将酌致稿酬并送样刊 2 册。

4. 遵照“中华人民共和国著作权法”,投稿作者须明确表示,该文版权(含各种媒体的版权)授权给《光谱学与光谱分析》期刊社。国内外各大文献检索系统摘录本刊刊出的论文;凡不同意被检索刊物无稿酬摘引者,请在投稿时事先声明,否则,本刊一律认为已获作者授权认可。

5. 修改稿请寄:100081 北京市海淀区学院南路 76 号,《光谱学与光谱分析》期刊社(收)

电话:010-62182998 或 62181070

传真:010-62181070

e-mail: chngpxygpfx@vip.sina.com;

修改稿专用邮箱: gp2008@vip.sina.com 网址: <http://www.gpxygpfx.com>