

# 基于荧光光谱—模拟退火法年份白酒中乙酸浓度预测研究

许 蕾<sup>1</sup>, 朱卫华<sup>1\*</sup>, 姚红兵<sup>1\*</sup>, 陈国庆<sup>2</sup>, 乔 华<sup>3</sup>, 朱 峰<sup>4,5</sup>, 耿 颖<sup>5</sup>, 唐春梅<sup>1</sup>, 何 湘<sup>1</sup>

1. 河海大学理学院, 江苏 南京 210098
2. 江南大学理学院, 江苏 无锡 214122
3. 山西医科大学基础学院化学教研室, 山西 太原 030051
4. 中交建机场勘测设计研究院, 广东 广州 510000
5. 中交第四航务工程勘察设计院有限公司, 广东 广州 510000

**摘 要** 近年来年份白酒市场中行业规范有所缺失, 因此年份白酒的研究具有深远意义和市场价值。白酒中单体物质的浓度会随着白酒的年份改变, 检测白酒中单体浓度可用来鉴定白酒质量及其年份。基于国内某品牌年份原浆白酒的三维荧光光谱, 对其中乙酸浓度进行了建模研究。对原始光谱进行了小波分解和求导预处理。研究发现小波分解第一层和第二层呈噪声特征, 浓度信息主要分布在第三层和第四层信号中。不同激发波长的荧光发射光谱强度分布不同, 如何选择合适的激发波长目前还没有一个统一的方法。根据小波分解信号引入有效信号强度概念并获得了合适的建模激发波长(200 nm); 导数光谱的细节特征比原始光谱丰富, 光谱求导可以提高光谱的分辨率。研究了乙酸浓度与荧光光谱的相关性, 原始荧光光谱与乙酸浓度之间相关性较小, 小波分解光谱和导数光谱与浓度的相关性达 0.8 以上, 且呈现出更多离散化的相关性特征峰。因此, 小波分解光谱和导数光谱中包含更多乙酸浓度信息且分布比原始光谱更广。基于荧光光谱和模拟退火法研究了乙酸浓度偏最小二乘法(PLS)多元回归模型。研究发现原始光谱的乙酸浓度预测集的均方根误差高达  $70.03 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ , 模型效果较差; 小波分解光谱和导数光谱由于光谱之间多重相关性降低且分辨率提高的特点, 模型预测效果更好, 其中二阶导数光谱的乙酸浓度预测集的均方根误差和相关系数分别为  $20.32 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  和 0.999 8, 建模效果最好。基于 1 000 次循环执行模拟退火算法建模得到的光谱信息密度曲线显示出二阶导数光谱比原始光谱包含更多的乙酸浓度信息。以乙酸为例, 为年份白酒中物质浓度预测提供了一种简易的光学方法, 研究方法对研究多组分渐变体系浓度预测具有一定的参考价值。

**关键词** 荧光光谱; 年份白酒; 乙酸; 模拟退火算法

**中图分类号:** O433.4   **文献标识码:** A   **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)07-2159-07

## 引 言

由于储存年份的差别, 白酒的质量会有所不同, 一般具有一定窖藏年限的白酒的口感会比普通白酒醇厚不少。但是年份白酒制造的行业规范有所缺失, 许多商家利用勾兑劣质酒非法敛财, 使得市场上年份酒真假难辨, 因此, 年份白酒成分的研究意义深远。白酒的成分较为复杂, 其中水和乙醇的含量大约为 0.98, 而剩下含量小于 0.03 的微量物质对白酒品质的影响也不容小觑<sup>[1-2]</sup>, 如在白酒酿造过程中产生的

少量乙酸对白酒的品质有一定的影响<sup>[3-4]</sup>。一般白酒储藏年份和白酒风味密切相关。白酒中单体物质的浓度也会随着白酒的年份改变, 因此检测白酒中单体浓度可用来鉴定白酒质量及其年份。

化学分析方法和色谱分析方法是常见的酒类检测方法, 例如赵晨婕等利用液液萃取-气相色谱法测定了发酵液中己酸含量<sup>[5]</sup>, 曹荣升等探讨了液-液萃取法检测白酒中塑化剂破乳化方法<sup>[6]</sup>。传统化学分析方法及部分色谱分析方法需要借助仪器分解鉴定样品中的成分, 或者使用试剂鉴定组分, 操作繁琐, 对样品需求量过高, 且会损伤样品, 检测时间长。

**收稿日期:** 2020-06-25, **修订日期:** 2020-11-02

**基金项目:** 国家自然科学基金项目(61378037, 51775253), 中央高校基本科研业务费专项基金项目(2019B02614), 河海大学大学生创新训练项目(2020102941340)资助

**作者简介:** 许 蕾, 女, 2001 年生, 河海大学理学院本科生   e-mail: hhu\_xulei@163.com

\* 通讯作者   e-mail: weihua\_zhu@126.com; 13705283569@126.com

分子荧光作为一种灵敏度高、检测速度快且比较成熟的光谱技术已经得到了广泛的应用<sup>[7]</sup>。研究表明,不同品种、同一品种不同年份的白酒在紫外光激发下能够产生不同特征的三维荧光光谱。基于光谱与成分浓度的相关性可以构建年份白酒检测技术。白酒内荧光物质种类丰富,分子荧光光谱线宽大,多种物质的荧光会出现交叉,使得光谱分辨率不高。必须使用一定的处理手段降低光谱信息的叠加及多重相关性才能建立高精度预测模型。已有研究表明光谱求导可以提高光谱的分辨率<sup>[8]</sup>,年份白酒荧光光谱具有严重相关性,求导和小波分解能降低光谱不同变量间的相关性<sup>[9]</sup>。由于偏最小二乘法具有消除自变量之间的相关性等特点,在光谱分析等领域获得了广泛的应用。本工作研究了乙酸浓度与荧光光谱的相关性,探索了乙酸浓度偏最小二乘法多元回归模型以及光谱中乙酸浓度信息分布。

### 1 实验部分

#### 1.1 仪器

Edinburgh FLS920P(英国)稳态-瞬态荧光光谱仪用来测量白酒荧光光谱。激发波长范围 200~600 nm,步长 5 nm。发射波长范围 200~600 nm,步长 1 nm。日本津岛 GC-2010 气相色谱仪用来测定不同年份白酒中乙酸浓度。

#### 1.2 样品

实验样品为 20 个国内某品牌原浆年份白酒,其中 15 个

为训练样本,5 个为预测样本。

## 2 结果与讨论

### 2.1 白酒荧光光谱

图 1 是 10 年期白酒的三维荧光光谱,其他年份白酒的三维荧光光谱总体上较为相似。实验发现激发波长不同时,二维荧光光谱明显不同;激发波长一定时,二维荧光光谱随年份的不同而有所不同。已知白酒中很多微量成分随年份的变化而变化,因此,三维荧光光谱与白酒中微量成分浓度之间存在一定的相关性。

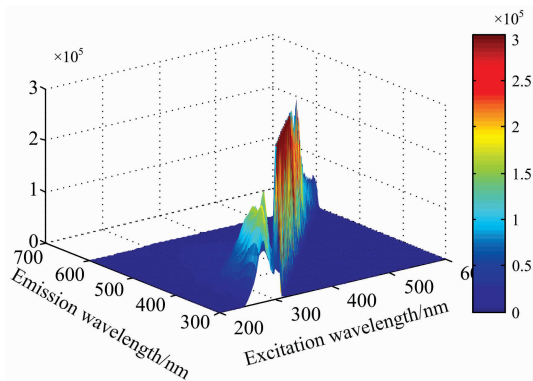


图 1 10 年期白酒三维荧光光谱

Fig. 1 3D fluorescence spectrum of ten-year liquor

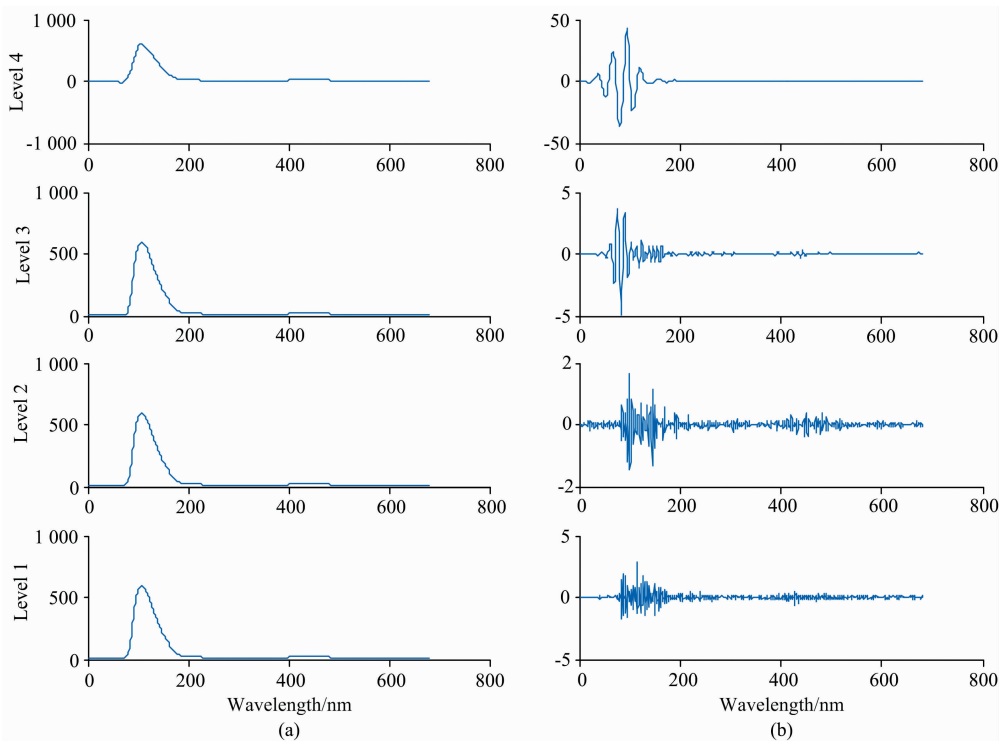


图 2 小波分解信号

(a): 近似信号; (b): 细节信号

Fig. 2 Signals of wavelet decomposition

(a): Approximate signal; (b): Detail signal

### 2.2 光谱分解与求导

虽然荧光光谱数据可以反映样品本身信息，但是如样品的背景、噪声、杂散光和仪器的响应等一些与待测样品自身性质无关的物质也会对结果产生干扰，将最终影响模型的建立和预测精度。需要运用一些如求导和小波变换等预处理方法降低与光谱数据不相关信息如噪音等物理因素带来的影响。

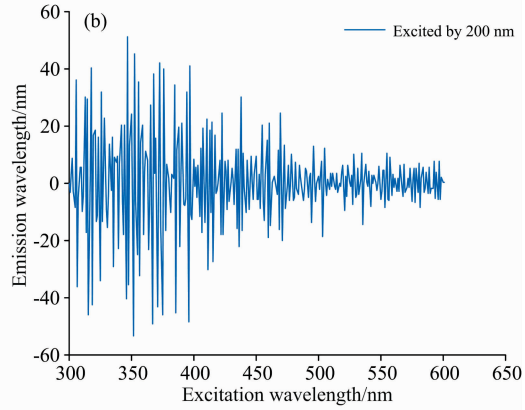
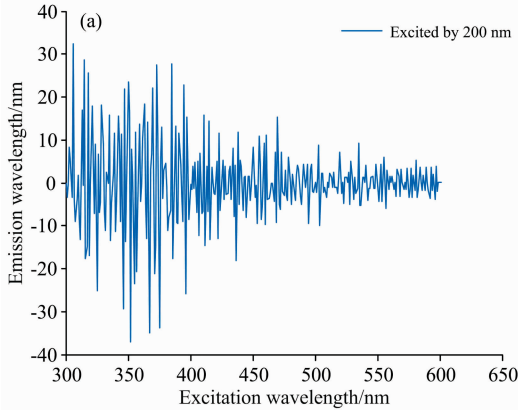


图 3 年份白酒导数光谱(激发波长 200 nm)

(a): 一阶导数光谱; (b): 二阶导数光谱

Fig. 3 Derivative spectrum of vintage liquor (excitation wavelength: 200 nm)

(a): First derivative spectrum; (b): Second derivative spectrum

### 2.3 有效信号强度

小波分解得到的四层信号中，浓度信息主要存在于高频信号中，而前两层信号主要呈现噪声的特征，所以用第三和第四层高频信号之和除以总强度来表示有效信号，定义有效信号强度为<sup>[9]</sup>

$$SI = 20\lg(I_{3+4}/I_0) \quad (1)$$

式(1)中，SI 为有效信号强度，dB； $I_{3+4}$  为小波分解第三层和第四层细节信号强度之和， $I_0$  为总的光谱强度。

图 4 为某一年份白酒在激发波长分别为 200, 320 和 540 nm 下荧光光谱的有效信号强度随发射波长变化的曲线。从图 4 可以看出，在激发波长为 200 nm 时有效信号强度最好、最稳定，浮动在 -30 ~ -70 dB 范围。当激发波长增加至 320 nm 时，有效信号强度随发射波长变化呈现较大的波动，在发射波长 300 ~ 450 nm 之间，有效信号强度由 -20 dB 减少到了 -100 dB，在 580 nm 处又剧增至 -20 dB。当激发波长为 540 nm 时，在发射波长 300 ~ 350 nm 范围内，有效信号强度低于激发波长为 200 和 320 nm 的情况；在发射波长 380 ~ 500 nm 范围内，有效信号强度高于激发波长为 320 nm 时的情况，但略低于激发波长为 200 nm 的情况；在发射波长 500 ~ 550 nm 范围内，有效信号强度远高于激发波长是 320 nm 的情况，略高于 200 nm 的情况。在 550 ~ 600 nm 范围内，有效信号强度低于激发波长为 200 nm 时的情况，高于 320 nm 时的情况，且波动极大。综上分析，激发波长为 200 nm 时，在较大发射波长范围内有效信号强度均较高，因此，选择激发波长为 200 nm 的光谱进行建模。

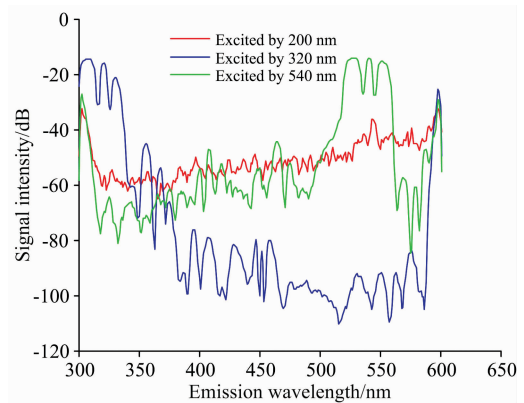


图 4 有效信号强度

Fig. 4 Diagram of effective signal intensity

### 2.4 乙酸浓度与光谱的相关性

荧光光谱是分子在紫外光激发下产生电子能级光跃迁形成的光谱。白酒样品经单色光照射后形成的光谱中分布了关于白酒中各种物质的信息，但是在不同的波段，特定物质的浓度和其荧光强度的相关性会不同。相关系数反映了浓度信息在不同波段上的分布特征，荧光强度和浓度之间的相关性可以用如式(2)表示

$$R_{y/i} = \text{abs} \left\{ \frac{\sum_{n=1}^N (x_{n/i} - \bar{x}_i)(y_n - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{n=1}^N (x_{n/i} - \bar{x}_i)^2} \sqrt{\sum_{n=1}^N (y_n - \bar{y})^2}} \right\} \quad (2)$$

其中，abs 取绝对值。

式(2)中,  $i$  是波长,  $x_{n/i}$  是荧光强度,  $y_n$  是乙酸的浓度,  $R_{Y/i}$  是  $x_{n/i}$  和  $y_n$  的相关系数,  $N$  是样本大小。分析乙酸浓度与荧光强度的相关性, 有助于了解浓度信息的分布, 为建立预测模型提供参考。

图 5 为原始三维荧光光谱与乙酸浓度的相关性图, 总体

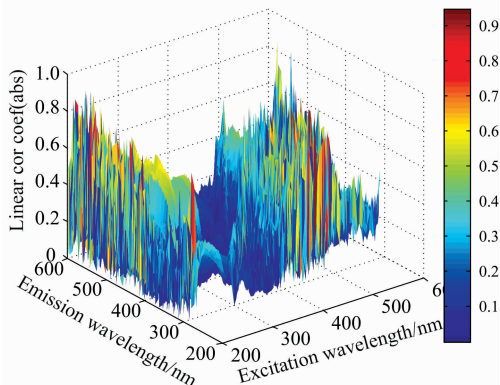


图 5 乙酸浓度与原始三维光谱的相关性  
Fig. 5 The correlation between concentration and original 3D spectra

而言, 两者的相关性较小。从图 5 还可发现, 在年份白酒三维光谱荧光峰的位置(激发波长 300 nm, 发射波长 320 nm)处, 原始光谱荧光强度与浓度相关系数低于 0.2。表明该年份白酒三维荧光光谱荧光峰处乙酸的浓度信息包含较少, 浓度信息分布的波长范围较广, 需要利用多元回归方法才能获取高精度的预测模型。

图 6(a,b) 分别为一阶导数与二阶导数光谱与乙酸浓度的相关性, 大部分波长处的相关性在 0.8 以上。与原始光谱(图 5)相比, 一阶导数光谱和二阶导数光谱中浓度信息分布更加丰富且离散性好。

图 7(a,b) 分别给出了第三层和第四层小波分解高频信号与乙酸浓度的相关程度。与导数光谱一样, 小波分解光谱也包含有更多的乙酸浓度信息, 且第三层包含更多的乙酸浓度信息。

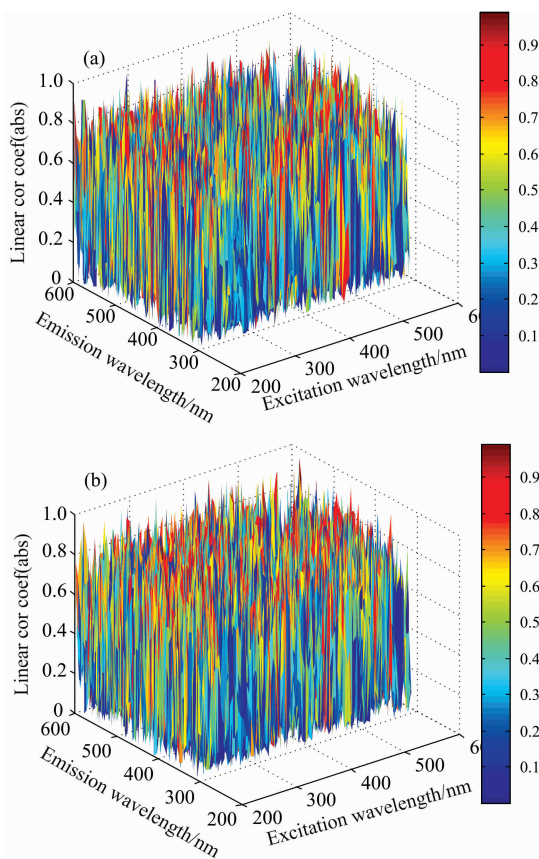


图 6 导数光谱与乙酸浓度相关性  
(a): 一阶导数光谱; (b): 二阶导数光谱

Fig. 6 The correlation between derivative spectra and concentration  
(a): First order derivative spectra;  
(b): Two order derivative spectra

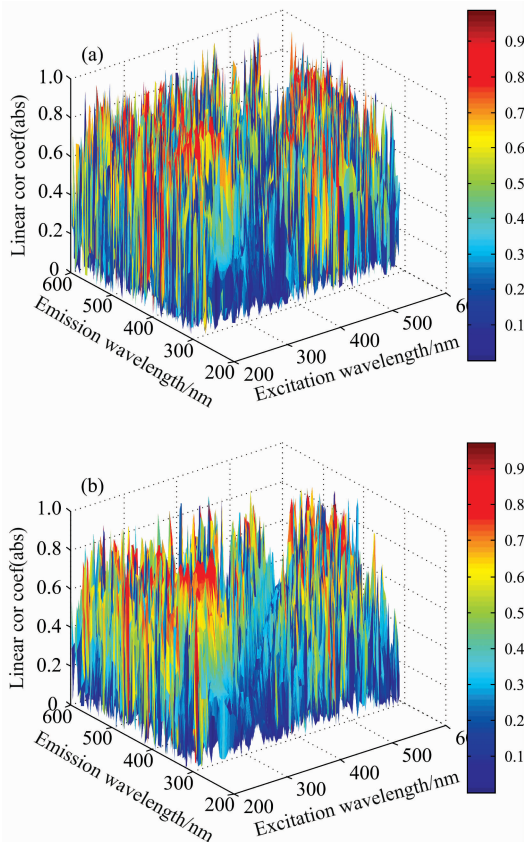


图 7 小波分解光谱与乙酸浓度相关性图  
(a): 第三层细节信号; (b): 第四层细节信号

Fig. 7 The correlation between wavelet decomposition spectra and concentration  
(a): Detail signal in the 3rd layer;  
(b): Detail signal in the 4th layer

### 2.5 建模与分析

采用模拟退火算法选择波长, 用偏最小二乘法(PLS)构建多元预测模型。PLS 理论参考文献[11-12], 模拟退火算法是一种寻找全局最优的方法, 在退火过程中每个种群随着温度控制的概率进行进化和被选择<sup>[10]</sup>。在 300~600 nm 区间

的 300 个发射波长中随机选择 20 个波长的组合作为初状态。模拟退火算法的参数设置为：初始温度和终止温度分别为 120 和 10 °C，退火比例为 0.9%，种群数量为 20，变异个数为 2。

表 1 给出了模拟退火法对原始光谱、导数光谱和小波光谱循环执行 1 000 次模拟退火算法获得的最佳建模的结果。由表 1 可知，原始光谱建模的预测集均方根误差 RMSEV 高达 70.03 mg · L<sup>-1</sup>，建模效果较差，这是因为原始光谱中存在较高的噪声以及变量间存在高相关性。第四层小波分解光谱建模效果较好，其预测集的 RMSEV 和 R<sub>v</sub> 分别为 25.04 mg · L<sup>-1</sup> 和 0.997 5。二阶导数光谱预测集的 RMSEV 和 R<sub>v</sub> 分别为 20.32 mg · L<sup>-1</sup> 和 0.999 8，模型效果最好。图 8 为 200 nm 波长光激发下二阶导数光谱建模散点图，散点处数字为白酒年份，乙酸浓度信息较分散分布在 300~600 nm 发射波段中。预测集均方根误差最小的波长组合确定为最优建模波段，二阶导数光谱最佳建模波段为 322, 331, 345, 354, 367, 373, 382, 420, 429, 433, 443, 475, 519, 522, 528, 529, 545, 553, 558 和 594 nm。

表 1 模拟退火法建模结果

Table 1 Modeling result of simulated annealing method

	R <sub>c</sub>	R <sub>v</sub>	RMSEC/ (mg · L <sup>-1</sup> )	RMSEV/ (mg · L <sup>-1</sup> )
原始光谱	0.930 0	0.991 4	105.63	70.03
第三层高频信号	0.893 6	0.991 3	128.97	52.89
第四层高频信号	0.978 2	0.997 5	59.67	25.04
一阶导数光谱	0.950 8	0.998 7	89.35	31.00
二阶导数光谱	0.898 8	0.999 8	125.97	20.32

注：R<sub>c</sub> 和 R<sub>v</sub> 分别是训练集和预测集的相关系数；RMSEC 和 RMSEV 分别是训练集和预测集的均方根误差

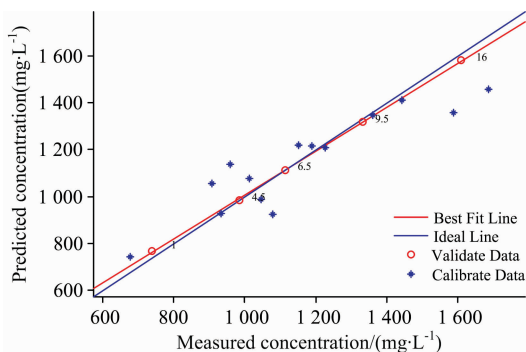


图 8 二阶导数光谱建模结果散点图

Fig. 8 Scatter diagram of second derivative spectral modeling results

References

[ 1 ] XIONG Yan-fei, MA Zhuo, PENG Yuan-song, et al(熊燕飞, 马卓, 彭远松, 等). China Brewing(中国酿造), 2019, 38(11): 1.  
 [ 2 ] HUANG Wei, CHENG Ping-yan, ZHANG Jian, et al(黄魏, 程平言, 张健, 等). Liquor-Making Science & Technology(酿酒科技), 2020, (4): 85.  
 [ 3 ] SONG Xin-shu, CHEN Guo-qing, ZHU Zhuo-wei, et al(宋鑫澍, 陈国庆, 朱焯炜, 等). Laser Technology(激光技术), 2018, 42(4): 531.

为了比较乙酸浓度在光谱中信息分布，图 9 给出了 1 000 次退火算法建模获得原始光谱和二阶导数光谱信息密度分布曲线，其他光谱信息密度分布曲线变化大致相同。由图 9 可知，次数 N(横坐标值)越高，信息密度越小，这表明浓度信息主要存在于少量的波长内。从图 9 可以发现原始光谱的低次信息密度较高，如 40 次信息密度为 0.72，而二阶导数光谱 40 次信息密度为 0.67；高次信息密度则是二阶导数光谱更高，如二阶导数光谱的 100 次信息密度为 0.16，原始光谱的 100 次信息密度为 0.12，二阶导数光谱 200 次信息密度为 0.026，而原始光谱 200 次信息密度为 0.013。因此，二阶导数光谱比原始光谱包含有更丰富的乙酸浓度信息。

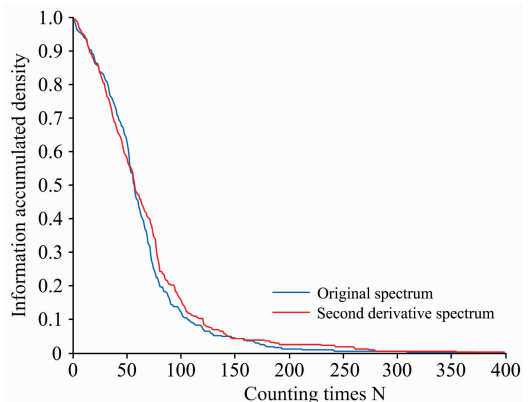


图 9 光谱信息密度分布曲线

Fig. 9 The curve of information density distribution of spectrum

3 结论

(1)小波分解第一层和第二层高频信号主要呈现噪声的特征，浓度信息主要分布在三、四层高频信号中。不同激发波长的荧光发射光谱强度分布不同，有效信号强度概念可以获得比较合适的建模激发波长。

(2)年份白酒原始荧光光谱与乙酸浓度之间的相关性较小，小波分解光谱和导数光谱与乙酸浓度有较高的相关性且浓度信息分布范围广且离散性更好。

(3)基于模拟退火算法—偏最小二乘法研究了年份白酒中乙酸浓度的预测模型。原始光谱建模效果较差；小波分解光谱和导数光谱建模效果比较理想，其中小波第四层光谱模型的乙酸浓度预测误差为 25.04 mg · L<sup>-1</sup>；二阶导数光谱建模效果最好，预测集均方根误差为 20.32 mg · L<sup>-1</sup>。光谱信息密度曲线表明二阶导数光谱比原始光谱包含更多的乙酸浓度信息。

- [ 4 ] HAI Chao(海 超). Liquor Making(酿酒), 2020, 47(3): 14.
- [ 5 ] ZHAO Chen-jie, PAN Ming, LIU Nian, et al(赵晨婕, 潘 明, 刘 念, 等). Food Research and Development(食品研究与开发), 2020, 41(2): 160.
- [ 6 ] CAO Rong-sheng, WANG Shao-lei, WANG Ling-hong, et al(曹荣升, 王少磊, 王灵红, 等). Liquor-Making Science & Technology(酿酒科技), 2019, (11): 79.
- [ 7 ] QIU Xiu-zhen, PENG Cui-hong, WANG Shao-ling, et al(丘秀珍, 彭翠红, 王少玲, 等). Journal of Instrumental Analysis(分析测试学报), 2015, 34(12): 1403.
- [ 8 ] HE Xin-long, WANG Ji-fen(何欣龙, 王继芬). Laser Technology(激光技术), 2020, 44(3): 333.
- [ 9 ] ZHU Wei-hua, CHEN Guo-qing, ZHU Zhuo-wei, et al(朱卫华, 陈国庆, 朱焯炜, 等). Measurement, 2017, 97: 156.
- [10] Levent Aydin, Seçil Artem H, Selda Oterkus. Designing Engineering Structures using Stochastic Optimization Methods. Boca Raton: CRC Press, 2020. 10.
- [11] Krakowska B, Custers D, Deconinck E, et al. Analyst, 2016, 141(3): 1060.
- [12] Olivieri A C. A Practical Approach. Cham: Springer International Publishing, 2018. 103.

## Prediction of Acetic Acid Concentration in Chinese Liquors Based on Fluorescence Spectrum and Simulated Annealing Algorithm

XU Lei<sup>1</sup>, ZHU Wei-hua<sup>1\*</sup>, YAO Hong-bing<sup>1\*</sup>, CHEN Guo-qing<sup>2</sup>, QIAO Hua<sup>3</sup>, ZHU Feng<sup>4,5</sup>, GENG Ying<sup>5</sup>, TANG Chun-mei<sup>1</sup>, HE Xiang<sup>1</sup>

1. College of Science, Hohai University, Nanjing 210098, China

2. School of Science, Jiangnan University, Wuxi 214122, China

3. Department of Chemistry, Basic College of Shanxi Medical University, Taiyuan 030051, China

4. CCCC Airport Investigation and Design Institute Co., Ltd., Guangzhou 510000, China

5. CCCC-FHDI Engineering Co., Ltd., Guangzhou 510000, China

**Abstract** In recent years, the industry of vintage liquor market is not standardized. It is of deep significance and market value to study year liquor. The concentration of monomer in liquor will change with liquor age, so the detection of monomer concentration in liquor can be used to identify liquor quality and age. In this paper, based on the three-dimensional fluorescence spectrum of a certain domestic puree liquor brand, the concentration prediction model of acetic acid is studied. The main contents and innovations are as follows: Firstly, wavelet decomposition and derivative preprocessing are performed on the original spectrum. It is found that the first layer and the second layer of the wavelet mainly present the characteristics of noise, the concentration information is mainly distributed in the third and fourth layer signals. The intensity distribution of fluorescence emission spectra with different excitation wavelengths is different. At present, there is no unified method to select the appropriate excitation wavelength. According to wavelet decomposition signal, this article introduced effective signal strength and obtained the proper modeling excitation wavelength (200 nm). The derivative spectrum has more detailed features than the original spectrum, which can improve the spectral resolution. Secondly, the correlation between acetic acid concentration and fluorescence spectrum was studied. In general, the correlation between the original fluorescence spectrum and the concentration of acetic acid is not high. The correlation between the wavelet decomposition spectrum and derivative spectrum and the concentration is more than 0.8 and shows more discrete correlation peaks. Therefore, the wavelet decomposition spectrum and derivative spectrum contain more information about the acetic acid concentration, which has a wider distribution than the original spectrum's. Finally, the partial least squares (PLS) multiple regression model of acetic acid concentration was studied based on fluorescence spectra and simulated annealing. The results show that the root means square error of the prediction set of acetic acid concentration in the original spectrum is as high as  $70.03 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ , so its model's effect is poor. Wavelet decomposition spectrum and derivative spectrum have better prediction effect because the multiple correlations between the spectra is reduced, and the resolution is improved. The second derivative spectral modeling is the best. The root mean square error of the prediction set is  $20.32 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ , and the correlation coefficient is 0.9998. The spectral information density curve based on 1000 simulated annealing algorithms shows that the second derivative spectrum contains more acetic acid concentration information than the original spectrum. This study provides a simple optical method for predicting the concentration of substances in the year liquor. The research methods have a certain reference value for studying the concentration prediction of multi-component gradual change system.

**Keywords** Fluorescence spectrum; Year liquor; Acetic acid; Simulated annealing algorithm

\* Corresponding authors

(Received Jun. 25, 2020; accepted Nov. 2, 2020)

## 《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。国内外公开发行人,从 2004 年起为月刊,大 16 开本,2020 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 800 字为宜,英文摘要(建议经专业英语翻译机构润色)与中文摘要要对照;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,曲线图要用 Matlab, Excel, Visio 或 Origin 等软件制作,稿件中图片的原图并转成相应(可编辑)的文件格式(.fig, .xls, .vsd, .opj),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(当作者接到校样时,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(南院西北门),《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