

## 基于全谱数据挖掘技术的土壤有机质高光谱预测建模研究

纪文君<sup>1</sup>, 李 曦<sup>1</sup>, 李成学<sup>2</sup>, 周 银<sup>1</sup>, 史 舟<sup>1, 3\*</sup>

1. 浙江大学农业遥感与信息技术应用研究所, 浙江 杭州 310058

2. 云南农业大学资源与环境学院, 云南 昆明 650201

3. 浙江大学唐仲英传感材料及应用研究中心, 浙江 杭州 310058

**摘 要** 可见/近红外高光谱技术与建模方法是当前土壤近地传感器研究领域的重要方向,可应用于土壤养分信息的快速获取和农田作物的精确施肥管理。以浙江省水稻土为研究对象,利用以非线性模型为核心的数据挖掘技术,包括随机森林、支持向量机、人工神经网络等方法分别建立了不同建模集和验证集的原始光谱与有机质含量的估测模型。结果表明:研究比较的 1:1, 3:1 和全部样本建模并全部验证的三种样本模式划分对建模的结果有一定的影响。相较于目前常用的偏最小二乘回归(PLSR)建模方法而言,非线性模型 RF 和 SVM 也取得了较好的建模精度,三种模式下其 RDP 值均大于 1.4。特别是采用 SVM 建模方法所得模型具有很好的预测能力,模式二下其 RDP 值达到 2.16。同时引入 ANN 方法改进建立的 PLSR-ANN 方法显著提高了 PLSR 的模型预测能力。

**关键词** 水稻土;有机质;可见近红外光谱;建模方法

**中图分类号:** TP79/S153.2 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2012)09-2393-06

### 引 言

土壤有机质作为土壤的重要组成部分,无论在土壤肥力、环境保护还是农业可持续发展等方面都发挥着重要的作用。近年来,利用可见/近红外光谱技术获取土壤有机质含量已获得越来越广泛的关注。与传统的化学和实验室分析方法相比,可见/近红外光谱技术具有快速、简便、无污染、不破坏等特点,还可直接在田间进行原位光谱采集<sup>[1,2]</sup>,节省了大量的人力物力,已逐渐成为田间土壤属性信息获取的重要手段。

20 世纪 90 年代以来,基于可见/近红外光谱技术的土壤属性研究报道越来越多。由于土壤反射光谱数据的复杂性,越来越多的多元数据分析技术被用于建立土壤属性与反射光谱之间的关系模型。其中,最普遍的是一些线性模型,例如多元逐步线性回归(MSLR)、偏最小二乘回归(PLSR)、主成分回归(PCA)等。另外,一些数据挖掘技术也逐渐被用于这方面的分析研究中,例如人工神经网络(ANN)、支持向量机(SVM)、回归树(BT)、随机森林(RF)、多元自适应回归样条(MARS)等<sup>[3]</sup>。刘磊<sup>[4-8]</sup>等采用以上方法对土壤有机质含

量进行建模研究,各自都取得了不错的预测精度。

然而,很少有人对各种多元数据处理算法进行比较,系统分析每种算法的优劣及适用范围。Viscarra 等<sup>[9]</sup>进行了这方面的研究,他对收集到的 1 104 个采自澳大利亚不同地区的土壤光谱数据,采用 PLSR, MARS, SVM, BT, RF 等算法,并结合离散小波变换和特征选择等方法对土样有机碳、粘土含量和 pH 进行了建模与比较。研究发现,对全谱数据建模, SVM 方法最优,其次是 MARS 和 PLSR,再次是 RF, BT 预测效果不佳。本研究的主要目的是:(1)利用各种数据处理算法,特别是以非线性模型为核心的三种数据挖掘技术对采自中国浙江省的 441 个水稻土样品建立可见/近红外光谱与土壤有机质之间的关系模型;(2)比较各种模型的预测精度,初步探讨这几种建模方法的可行性和建模效果,以期找到能够有效预测土壤有机质的最优算法。

### 1 实验部分

#### 1.1 土壤样品采集

实验土样均为浙江省 0~20 cm 耕层水稻土,其基本信息如表 1 所示。每个样品经自然风干、研磨并通过 2 mm 孔

收稿日期:2012-03-30, 修订日期:2012-07-18

基金项目:国家(863 计划)项目(2011AA100705),教育部新世纪优秀人才支持计划项目(NCET-10-0694)和浙江大学唐氏基金项目资助

作者简介:纪文君,女,1987 年生,浙江大学农业遥感与信息技术应用研究所博士研究生 e-mail:30239000@qq.com

\* 通讯联系人 e-mail:shizhou@zju.edu.cn

筛,用四分法分成两份供化学分析和光谱测试用。土壤有机质的测量采用重铬酸钾容量法-外加热法。表 1 为供试土壤样品的有机质含量统计特征。

Table 1 Basic properties of soil samples

地点	土壤类型	样本数	有机质含量/%			
			最大值	最小值	均值	均方差
浙江	水稻土	441	5.88	0.45	2.51	1.21

## 1.2 光谱数据采集与预处理

光谱测量采用美国 ASD 公司的 FieldSpec 3 型野外光谱辐射仪,其波长范围是 350~2 500 nm,采样间隔为 1.4 nm (350~1 000 nm 区间)和 2 nm (1 000~2 500 nm 区间)。除了 1 000 和 1 800 nm 附近的接缝处以及边缘波段噪声较大外,其他波段信噪比很高,约为 1 000:1。光谱测量在暗室内进行,光源是功率为 50 W 的卤素灯,距土壤样品表面 70 cm,天顶角 30°,采用 25°视场角探头,探头位于土壤样本表面垂直上方 15 cm 处。每个土样采集 10 条光谱曲线,进行拼接校正后,取其平均曲线,并去除噪声较大的 350~399 和 2 451~2 500 nm 边缘波段。采用小波去噪法对光谱数据进行去噪处理<sup>[10]</sup>。

为了使模型建立与验证更具说服力,更全面的解释各模型优劣,采用三种不同的数据集划分模式来进行结果比较:将土壤样品按有机质含量高低排序后,分别按每隔一个样本取出一个作为验证样本(即建模样本与验证样本之比为 1:1,模式 1),每隔三个取出一个作为验证样本(即建模样本与验证样本之比为 3:1,模式 2),以及全部样本建模并全部验证(模式 3)。

## 2 模型建立与验证

### 2.1 建模方法

采用二种类型函数进行模型构建,一种是线性模型 PLSR;另一种是以非线性模型为核心的数据挖掘技术,包括 RF, SVM 和 PLSR 结合 ANN 的方法进行土壤有机质的预测。其中,PLSR 结合 ANN 的方法是将 PLSR 提取的主分量作为神经网络的训练输入,表示为 PLSR-ANN。建模过程中交叉验证方法采用 leave-one-out Cross Validation。

#### 2.1.1 偏最小二乘回归(PLSR)

PLSR 吸收了主成分分析中提取主成分的思想,实现了数据结构的简化<sup>[8]</sup>,解决了自变量之间多重相关的问题,同时又克服了主成分分析对自变量有较强解释能力,但是对因变量解释能力不够的缺点,适合用于光谱分析这种自变量较多的情况。

#### 2.1.2 随机森林(RF)

RF 包含多重分类与回归树,是一个包含多个决策树的组合分类器。通过自助重采样技术,不断生成训练样本和测试样本,由训练样本生成多个分类树组成随机森林<sup>[5]</sup>。

#### 2.1.3 支持向量机(SVM)

SVM 理论基础是内核统计学理论。基于内核的研究方

法,使用隐式将输入数据映射到一个被定义为内核函数的高维特征空间以期找到一个满足分类要求的超平面,并且使训练集中的点距离分类面尽可能的远<sup>[10]</sup>。SVM 的关键在于核函数。只要选用适当的核函数,就可以得到高维空间的分类函数。

#### 2.1.4 人工神经网络(ANN)

ANN 可以称之为“黑箱子”模型,能模拟任何非线性输入变量和输出变量的关系<sup>[11]</sup>。具有自学习、自组织与自适应能力,很强的容错能力,分布储存与并行处理信息的功能及强大的非线性逼近能力,可实现许多常规方法难以达到的求解精度。

### 2.2 模型验证

模型的验证主要选用决定系数( $R^2$ )、均方根误差(RMSE)以及测定值标准偏差与标准预测误差的比值 RPD 为模型评价参数,对不同的建模集和验证集分别进行验证。建模集交互验证决定系数( $R_{cv}^2$ )越大,交叉验证均方根误差( $RMSE_{cv}$ )越小,说明模型越稳定,模型精度越好;验证集决定系数( $R_p^2$ )及 RPD 越大,均方根误差( $RMSE_p$ )越小,说明预测效果越好。另外,当  $RPD > 2$  时表明模型具有极好的预测能力,当  $1.4 < RPD < 2$  时表明模型可对样品作粗略估测,而  $RPD < 1.4$  则表明模型无法对样品进行预测。从模型的预测能力来看,对于建模样本效果较好的模型并不一定有好的有机质含量预测能力。

PLSR 建模和验证以及 PLSR-ANN 中的主分量计算和选择是在 Unscrambler X10.1 中完成,其余方法的建模和验证以及小波去噪在 Matlab R2009a 软件中完成。

## 3 结果与讨论

### 3.1 土壤样本光谱曲线特征分析

将所有土壤样品按照有机质含量高低进行分级,然后将每个级别内所有土壤光谱曲线求其平均,得到不同有机质含量下光谱反射曲线(见图 1)。从图中可以看出水稻土的反射光谱曲线有三个明显的水分吸收谷,即 1 400, 1 900 和 2 200 nm。从全波段范围内来看,整体光谱曲线表现平缓,光谱反射率随波长而增大,在 400~900 nm 波段反射率增加较快,而在近红外的 900~2 450 nm 波段反射率增加较缓。

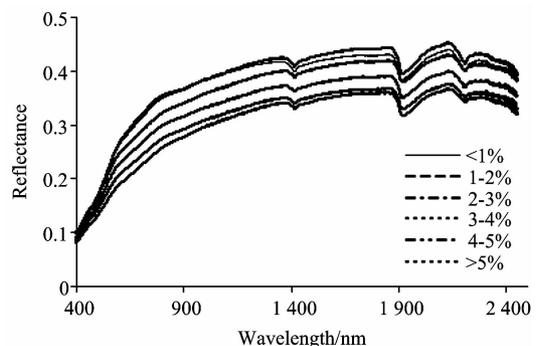


Fig. 1 Reflectance spectra of paddy soils with different soil organic matter

随着土壤有机质含量的增加,光谱反射率减小。如图 1 所示,有机质<1%与 1~2%两个级别的反射光谱曲线在近红外区域内有交叉,这说明在有机质含量较低(<2%)时,土壤的反射光谱还可能受到来自其他因素的影响,从而影响到有机质光谱预测模型的精度。

### 3.2 RF 和 SVM 建模方法在不同建模样本数量下建模结果比较

#### 3.2.1 不同建模样本数量下 RF 建模结果

把水稻土的 441 个土壤样本进行 1:1 与 3:1 和全部样本建模并全部验证三种样本模式的划分,三种处理方式下的

水稻土 RF 建模及模型验证结果如表 2 所示。从表 2 可以看出,样本模式 1, 2, 3 随着建模样本数量的增加,其建模组决定系数  $R_{cv}^2$  也逐渐增大,当所有样本都参与建模时,其建模组决定系数高达 0.922。而样本模式 1 的验证组决定系数  $R_p^2$  则要高于模式 2 的值。当所有样本都参与验证时,其验证组决定系数仅为 0.389。从 RPD 来看,样本模式 1 的值为 1.74,略大于模式 2 的 1.61 和模式 3 的 1.40,但三种样本模式下 RPD 值均大于 1.4,说明都能较好的进行模型的验证,预测有机质的含量。

Table 2 Summary for the RF models of different calibration datasets

模式	总样本数	建模组			验证组			
		样本数	RMSE <sub>CV</sub>	$R_{cv}^2$	样本数	RMSE <sub>P</sub>	$R_p^2$	RPD
样本模式 1	441	221	0.352	0.907	220	0.719	0.459	1.74
样本模式 2	441	330	0.332	0.915	111	0.806	0.400	1.61
样本模式 3	441	441	0.338	0.922	441	0.859	0.389	1.40

图 2 是采用 RF 方法对三种样本集划分模式的预测拟合结果图,从图中也可以看出,三种模型的数据点都较为均匀

的分布在 1:1 直线的两侧,预测效果较好,这与上面的分析结果相一致。

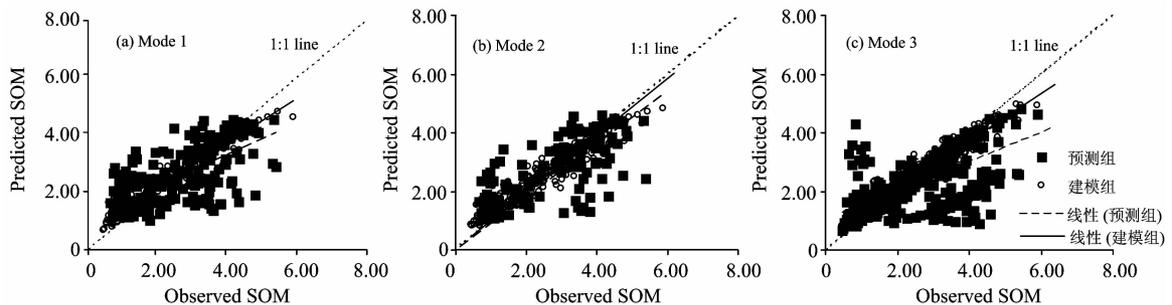


Fig. 2 Comparison between observed and predicted SOM of paddy soil based on RF of different calibration datasets

#### 3.2.2 不同建模样本数量下 SVM 建模结果

对于 SVM 建模方法,其核函数与模型参数的选择十分重要。根据本研究样本特征,选择 rbf 核函数进行建模。而目前对 SVM 最佳参数的选择只有通过大量调试,使得建模和预测效果最优。研究对三种模式划分的水稻土采用 SVM 方法进行建模分析,结果见表 3。

从表 3 可以看出,建模组样本模式 2 的 RMSE<sub>CV</sub> 最小,仅为 0.308,  $R_{cv}^2$  的值最大,达到 0.927。且验证组样本模式 2

的 RMSE<sub>P</sub> 也小于其他两种模式的值,  $R_p^2$  大于其他两种模式的相应值。由此可以说明,样本模式 2 比其他两种模式的建模效果好,且模式 2 的预测效果也比其他两种模式的效果好。从 RPD 来看,三种样本模式下的值均大于 1.4,并且模式 2 的 RPD 值超过了 2,说明三种样本模式下该模型均能对样品作估测,并且样本模式 2 具有极好的预测能力。同样,也可以从拟合图来看样本各模式下的建模和预测情况(见图 3)。

Table 3 Summary for the SVM model of different calibration datasets

模式	总样本数	建模组			验证组			
		样本数	RMSE <sub>CV</sub>	$R_{cv}^2$	样本数	RMSE <sub>P</sub>	$R_p^2$	RPD
样本模式 1	441	221	0.360	0.903	220	0.887	0.328	1.41
样本模式 2	441	330	0.308	0.927	111	0.599	0.640	2.16
样本模式 3	441	441	0.333	0.924	441	0.858	0.392	1.41

综合以上分析结果可以看出,样本模式 3 将全部样本参与建模,这样建模运行时间较长,不是最优方案。再对比样本模式 1 和模式 2 的精度,虽然 RF 方法的模式 1 较模式 2

的预测精度稍高,但作为目前研究较少的 RF 方法,其本身的普适性和稳定性还需进一步研究和讨论,因此综合分析来看,模式 2 还是比模式 1 更优。并且样本模式 2 所选择样品数

量适当,既避免了数据量过多造成的重复、冗余,又能保证样品分布均匀、有代表性,能取得较好的建模效果。因此选用将土壤样本进行 3:1 划分的模式 2 进行下一步的不同建模方法选择的分析。

### 3.3 不同建模方法精度比较

结合 3.2 节分析所得结果,在模式 2 下,进行不同建模

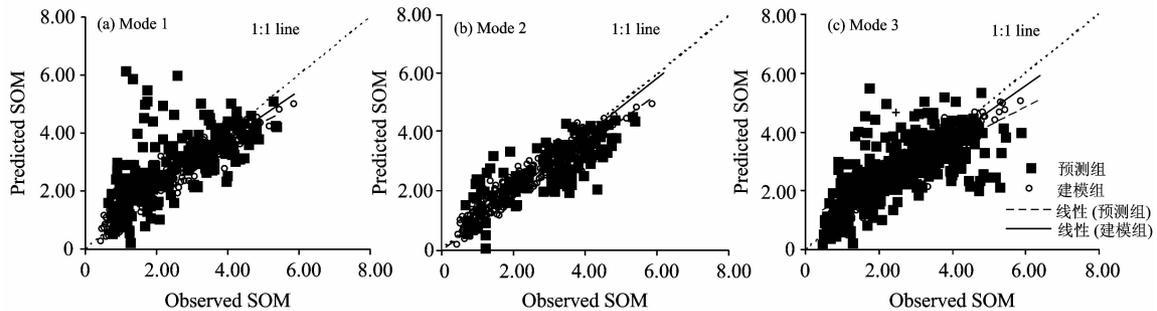


Fig. 3 Comparison between observed and predicted SOM of paddy soil based on SVM of different calibration datasets

Table 4 Accuracy comparison of different modeling of mode 2

建模方法	样本模式	建模组		验证组		
		RMSE <sub>CV</sub>	R <sub>CV</sub> <sup>2</sup>	RMSE <sub>P</sub>	R <sub>P</sub> <sup>2</sup>	RPD
PLSR	模式 2	0.602	0.720	0.753	0.662	1.72
RF		0.332	0.915	0.806	0.400	1.61
SVM		0.308	0.927	0.599	0.640	2.16

从表 4 中可以明显看出,两种非线性模型:RF 和 SVM 的建模组决定系数均超过了 0.9,建模效果较好。从 RPD 来看,此种模式下,三种方法的 RPD 值都超过 1.4,说明三种建模方法所建模型都能进行有机质的估测。其中,SVM 建模方法得到的 RPD 值达到了 2.16,大于 2,说明所得模型具有极好的预测能力。

利用 PLSR 提取的 20 个主分量作为神经网络的训练输入节点,在 Matlab 中进行 ANN 的训练,输出节点为 1 即土壤有机质的含量。采用常用的 Tansig 函数作为隐层传递函数,学习速率设为 0.01,最大训练次数为 8000 次,模型期望

误差为 0.001,设定隐含层神经元数目为 14,从而建立了由 20 个输入节点、14 个隐含层节点和 1 个输出节点组成的三层 BP 网络模型。模型对本研究中不同模式下水稻土有机质有较好的预测结果(见表 5)。从表 5 可以看出,对模式 1、模式 2 采用 PLSR-ANN 方法得到的模型验证的决定系数 R<sup>2</sup> 分别达到 0.739 和 0.821,可以明显看出,不论是模式 1 还是模式 2 的情况下,结合 ANN 的 PLSR-ANN 方法得到的 R<sup>2</sup> 均大于 PLSR 得到的该值,并且 PLSR-ANN 方法得到的 RMSE<sub>P</sub> 均小于 PLSR 得到的对应值。

Table 5 Comparison of prediction accuracy between PLSR and PLSR-ANN of paddy soil under two modes

模式	总样本数	建模样本数/ 验证样本数	PLSR				PLSR-ANN			
			因子数	RMSE <sub>P</sub>	R <sup>2</sup>	RPD	因子数	RMSE <sub>P</sub>	R <sup>2</sup>	RPD
模式 1	441	220/220	20	1.034	0.314	1.21	20	0.637	0.739	1.96
模式 2	441	330/111	20	0.753	0.662	1.72	20	0.549	0.821	2.36

通过对水稻土两种样本划分模式下的 PLSR 和 PLSR-ANN 两种建模方法进行模型预测精度的比较,可以看出,不论从 RMSE<sub>P</sub>,R<sup>2</sup>,RPD 哪种指标上看,单独使用 PLSR 方法进行建模的预测效果不如结合了人工神经网络 ANN 后的预测效果,结合 ANN 会提高模型的预测能力。而对 ANN 模型自身来说,则存在一定的不稳定性。这种模型不稳定的一个原因是训练的样本选择对模型影响很大,另外,即使同一训练样本进行多次训练往往也会产生不同的预测结果,这是

ANN 模型所特有的性质之一,从而造成模型具有一定的震荡性。

### 3.4 讨论

(1)对于建模组和验证组数据的选择,每三个样本作为建模样本后选择一个样本作为验证样本的模式 2,在保证建模样本数据分布的均匀性和代表性的同时,有效避免了建模数据的过度冗余,对于各种线性及非线性数据处理算法都能取得不错的预测精度。

(2)在全谱范围内,三种线性和非线性算法都可以成功进行土壤有机质含量的预测,预测精度却各有不同。其中,SVM预测效果最好,RMSE<sub>p</sub>最小且RPD高达2.16,而RF预测效果较差。与复杂的非线性数据挖掘技术相比,运用传统的PLSR达到了相当不错的预测效果。而这一结果也与Viscarra<sup>[9]</sup>的研究结论相一致。

(3)将PLSR提取出的主成分带入ANN进行训练,也即PLSR-ANN相结合的算法,与PLSR算法相比有效提高了模型的预测精度。再结合3:1的样本划分模式,RPD高达2.36,模型预测效果甚至好于非线性的SVM,这与ANN对非线性交互数据强大的处理能力有关。

## 4 结 论

在实验室内基于Vis/NIR对研究区土样的有机质进行了定量预测,取得了较为满意的结果。但是影响土壤反射率的因素除了有机质含量以外还有很多,如粘粒含量、氧化铁含量等,此外,利用高光谱遥感进行野外原位测量时,还需考虑更多的因素,如光照、大气、土壤水分含量等。因此,在下一步工作中还需要从实验室内向野外原位测量推进,深入了解野外条件下土壤的反射率特征以及外界因素对其影响。采集更为丰富的样本,对不同地区和不同类型的土壤进一步研究,以提高有机质光谱预测模型的可靠性和普适性。

## References

- [1] Viscarra Rossel R A, Cattle S R, Ortega A, et al. *Geoderma*, 2009, 150: 253.
- [2] JI Wen-jun, SHI Zhou, ZHOU Qing, et al(纪文君, 史舟, 周清, 等). *Journal of Infrared and Millimeter Waves(红外与毫米波学报)*, 2012, 31(3): 277.
- [3] Stenberg B, Viscarra Rossel R A, Mouazen A M, et al. *Advances in Agronomy*, 2010, 107: 163.
- [4] LIU Lei, SHEN Run-ping, DING Guo-xiang(刘磊, 沈润平, 丁国香). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2011, 31(3): 762.
- [5] SHEN Run-ping, DING Guo-xiang, WEI Guo-shuan, et al(沈润平, 丁国香, 魏国栓, 等). *Acta Pedologica Sinica(土壤学报)*, 2009, 46(3): 391.
- [6] ZHENG Li-hua, LI Min-zan, SUN Hong, et al(郑立华, 李民赞, 孙红, 等). *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(农业工程学报)*, 2010, 26: 81.
- [7] Joel B S, David J B, Melisa L B, et al. *Geoderma*, 2008, 148: 149.
- [8] Volkan Bilgili A, van Es H M, Akbas F, et al. *Journal of Arid Environments*, 2010, (74): 229.
- [9] Viscarra Rossel R A, Behrens T. *Geoderma*, 2010, 158: 46.
- [10] ZHANG Juan-juan, TIAN Yong-chao, ZHU Yan, et al(张娟娟, 田永超, 朱艳, 等). *Scientia Agricultura Sinica(中国农业科学)*, 2009, 42(9): 3154.
- [11] Tormod N, tomas I, Tom F, et al. *Auser-Friedly Guide to Multivariate Calibration and Classification*. Chicester, UK: NIR Publications, 2002. 27.

# Using Different Data Mining Algorithms to Predict Soil Organic Matter Based on Visible-Near Infrared Spectroscopy

JI Wen-jun<sup>1</sup>, LI Xi<sup>1</sup>, LI Cheng-xue<sup>2</sup>, ZHOU Yin<sup>1</sup>, SHI Zhou<sup>1, 3\*</sup>

1. Institute of Remote Sensing and Information Technology, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China

2. College of Resources and Environment, Yunnan Agricultural University, Kunming 650201, China

3. Cyrus Tang Center for Sensor Materials and Applications, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China

**Abstract** Using visible/near infrared spectroscopy to model soil properties is very important in current soil sensing research. It can be applied to rapidly access soil information and precision management. In the present study, paddy soil in Zhejiang Province is treated as the research samples. The nonlinear models such as random forests (RF), supported vector machines (SVM) and artificial neural networks (ANN) were used respectively to build models to predict soil organic matter based on different selection of calibration and validation datasets. The results show that there is a certain impact on prediction results under the division of different sample modes. Compared to the commonly used linear model PLSR, the nonlinear model RF and SVM have comparable prediction accuracy, especially predictions by SVM using all Vis-NIR wavelengths produced the smallest RMSE values. It shows that the model constructed by SVM method has a good predictive ability. In addition, a combined method, PLSR-ANN (with the introduction of ANN into PLSR), significantly improves the predictive ability of PLSR. Even though ANNs are “black box”

systems the combination of PLSR and nonlinear modelling helps achieve good predictions and interpretability.

**Keywords** Paddy soil; Soil organic matter; Vis-NIR spectroscopy; Modeling

\* Corresponding author

(Received Mar. 30, 2012; accepted Jul. 18, 2012)

## 第十七届全国分子光谱学学术会议 (第一轮通知)

由中国化学会和中国光学学会联合主办, 韶关学院和韶关市化学化工学会联合承办的“第 17 届全国分子光谱学术报告会”, 将于 2012 年 10 月 19—22 日在广东韶关召开。

本次会议是我国分子光谱界的又一次聚会和高水平、高信息容量的学术交流。本着继往开来、与时俱进的精神, 本次会议将全力展示我国在分子光谱及相关领域所取得的最新研究进展及成果, 增进广大分子光谱科学工作者和支持分子光谱事业的人们之间的交流与合作, 促进我国分子光谱事业的发展。届时会议将邀请国内外知名专家学者就分子光谱有关学术领域的前沿热点问题作大会报告, 同时会议还将组织各类专题讨论和学术交流。竭诚欢迎全国高等院校、科研机构 and 产业部门从事分子光谱研究和应用开发的同事和朋友们来广东韶关参加会议, 交流最新研究成果, 推进分子光谱基础研究和应用技术在国民经济和高新技术开发中的广泛应用和技术转化。我们真诚期待着国内外同行在 2012 年 10 月相聚在美丽的韶关。

### 征文范围

分子光谱理论研究, 红外光谱、拉曼光谱、荧光光谱、磷光光谱、紫外一可见吸收光谱、激光光谱、光谱成像等各类光谱技术在物理、化学、生物、材料科学、表面/界面科学、医药、环境、工业过程、催化学、地学、农林及其他领域的基础理论与应用研究的最新科研成果。同时也欢迎相关的光谱技术(如质谱、核磁共振等)的最新研究成果。

### 论文要求

1. 论文内容必须是未在期刊杂志上发表过或其他全国或国际会议宣读过。
2. 提交论文扩展摘要一份, 纸张大小用 A4 纸版式(用 Office word 软件排版, 页边距为 2 cm, 单倍行距)。
3. 扩展摘要按以下顺序排版: 文题(三号黑体居中); 作者(四号仿宋居中); 单位(小四号宋体居中, 含所在省市、邮政编码、电子邮址(如有)); 论文的创新性, 研究意义与结果(五号宋体); 关键词和主要参考文献(自版芯左起, 五号宋体)。文稿中可穿插主要论据的图、表和照片, 图题、图注和表题、表注一律用英文表述。摘要的字数, 包括图、表, 参考文献, 总共不能超过 4 500 字。
4. 具体投稿要求可参看模板及《光谱学与光谱分析》征稿简则。稿件一经录用, 将由《光谱学与光谱分析》以增刊形式发表会议论文摘要集。
5. 论文截稿日期: 2012 年 4 月 30 日, 尽量通过电子版, 一般不接受手写稿。

### 论文提交方式

欢迎大家通过网站提交论文, 请您注册登陆中国光谱网(<http://www.sinospectroscopy.org.cn>) 点击论文提交上传您的论文。论文将采用网上评审的方式, 你可在网上浏览对您论文的评审结果和修改意见。请您通过电子邮件方式提交论文。请发往: gphy2012@126.com; 若以信件方式投稿, 请以挂号邮寄, 信封上请注明“第十七届全国分子光谱学学术会议征文”字样; 收稿地址: 邮编 512005 广东省韶关市浈江区大塘路九公里, 韶关学院化学系, 黄冬兰收。

### 报告形式

为充分利用会议时间, 提高学术交流的效率, 本次会议仍采用“口头报告”和“墙报展示”两种方法进行学术交流。无论是口头报告还是墙报展示, 均属大会同等学术交流, 无水平高低之分。对内容好, 制作精良的报展颁发奖励。为尊重个人意见和便于组委会的安排, 请投稿人注明选择自己的稿件为“口头报告”或“墙报”的字样。在安排“口头报告”和“墙报”时, 将充分考虑作者的意见。同时会议还将邀请国内外知名专家学者就分子光谱有关学术领域的前沿热点问题作大会报告和主题报告。主要报告形式有:

1. 大会邀请报告: 主要邀请国内外知名专家学者报告光谱分析的前沿技术在各个领域的最新进展。
2. 论坛主题报告: 本次会议将选择光谱技术的热点应用领域, 开设多个专题论坛, 邀请在该领域的知名专家作论坛主题报告。
3. 论坛邀请报告: 邀请专家学者围绕论坛主题进行学术交流。
4. 墙报展示: 作为本次会议的主要交流和展示形式之一, 会议将统一安排墙报的讲解时间, 希望作者能按时到位。

(下转 2408 页)