

化学计量学在我国的发展

李远军, 朱琳

(西昌学院, 四川 西昌 615013)

【摘要】 评述了化学计量学在我国近年来的发展,包括多元校正与分辨、稳健方法、化学模式识别、化学定量构效关系、分子模拟与优化、化学专家系统与数据库等主要分支,其中特别对近年来得到飞速发展的新技术如高维数据解析方法、人工神经网络、小波变换给出了较详细的介绍。

【关键词】 化学计量学; 发展; 中国

【中图分类号】 O655.29 **【文献标识码】** A **【文章编号】** 1673-1891(2005)04-0087-03

0 前言

化学计量学(Chemometrics)在我国发展已有20多年的历史,是一门化学与统计学、数学、计算机科学交叉所产生的新兴的化学学科分支。它运用数学、统计学、计算机科学以及其他相关学科的理论与方法,优化化学量测过程,并从化学量测数据中最大限度地提取有用的化学信息^[1]。它与基于量子化学的计算化学(Computational Chemistry)的不同点只在于化学计量学是以化学量测量为其基点,实质上是化学量测的基础理论与方法学^[2]。

由于“十年动乱”的影响,使我国在化学计量学的发展方面略迟于欧美,但在化学界前辈的积极倡导和国家自然科学基金委的支持下,80年代以来,我国的化学计量学研究得到了飞速发展,到现在已发展成为一门在国际上有一定影响的独立的化学学科分支,已出版了多本化学计量学方面的专著和相应的教材^[3],并在中国科学院的多个研究所和国内多个知名大专院校建立了队伍稳定的化学计量学研究小组,取得了一批具有国际先进水平的成果。8年前,我们曾在第二届斯堪的那维亚国际化学计量学大会上对我国的化学计量学发展主要成果进行过一次综述^[4],在此,仅就近10年来化学计量学在我国的发展情况作出简要介绍。

1 化学计算的发展为化学测量提出了理论的方法

化学计量学为化学量测提供理论和方法,为各

类波谱及化学量测数据的解析,为化学化工过程的机理研究和优化提供新途径,它涵盖了化学量测的全过程,包括采样理论与方法、试验设计与化学化工过程优化控制、化学信号处理、分析信号的校正与分辨、化学模式识别、化学过程和化学量测过程的计算机模拟、化学定量构效关系、化学数据库、人工智能与化学专家系统等,是一门内涵相当丰富的化学学科分支。化学计量学的发展为化学各分支学科、其中特别是分析化学、环境化学、药物化学、有机化学、化学工程等,提供了不少解决问题的新思路、新途径和新方法。

到20世纪80年代,在分析测试或化学量测中,人们第一次发现,取得数据甚至大量数据已不是最困难的一步。最难解决的瓶颈问题是这些数据的解析及如何从中提取所需的有用化学信息。化学家与分析化学家首次遇到类似行为科学家或经济学家所遇到的大量数据如何处理的问题。化学家与分析化学家比较幸运。因为大量现代分析测试仪器出现带来“数据爆炸时代”,也正是计算机普及的时代。这就构成了化学计量学发展的第二个条件。为了对极为复杂的化学量测数据(其中负载着在分子水平上表征物质世界的信息)进行解析,化学家、分析化学家利用可在计算机上实现的许多强有力的数学方法,包括一些相关学科发展的数据与信号处理新方法,从多维化学量测数据中提取有用的相关化学信息。如果说经典分析化学是得首先依赖费时而麻烦的化学或物理的方法来对很多复杂化学体系进行纯组分分离,即采用单变量校正方法进行定性定量分析的话,

收稿日期:2005-10-16

作者简介:李远军(1965-),男,副教授,主要从事化学研究工作。

那么,现代分析化学家面对的则是各种将分析分离技术集于一体的高维仪器所产生的巨量分析信号,藉化学计量学发展的新型分析信号的多元校正与分辨方法^[5]来进行复杂多组分体系的定性定量解析,高维数据解析的化学计量学方法现已进入可用来解决分析化学中实际难题的程度,将这些方法用于复杂环境样本、中草药中单位药及复方分析等,取得了很多令人振奋的结果。继续进行高维数据、特别是针对可产生三维数据的新型仪器的化学计量学算法的研究现仍是一个研究的热点,我国的化学计量学研究在此方面取得了居于国际先进水平的成果。多元校正与分辨一直就是分析化学计量学研究的主要内容,在此方面,中国科技大学、清华大学、石油化工科学研究院、沈阳药科大学、中国药科大学、同济大学、天津大学、厦门大学、兰州大学、江西大学、西北大学、华中理工大学、湖南大学等单位做了大量的研究工作。另外,有关人工神经网络(artificial neural networks, ANN)新技术、基于自然计算的全局最优算法如模拟退火(simulated annealing, SA)和遗传算法(genetic algorithm, GA),信息科学中的图象分析(image analysis, IA)方法,统计学中研究热烈的稳健方法(robust methods, RM)等新型化学计量学方法的引入也取得很多可喜的成果。采样理论这一重要的化学计量学研究分支,过去未引起必要的重视,近期有关研究小组如南开大学等单位倡导开展了这方面研究。

化学模式识别的研究提供的是对决策和过程优化很有实用价值的信息,为我国石油化工、材料化学等带来了解决研究难题的新思路,人工神经网络的新方法,为化学模式识别提供了研究的新机遇。无论在化学模式识别的方法和应用方面,我国都取得了不少优秀成果,中国科学院上海冶金研究所的化学计量学研究小组先后用化学模式识别的方法成功地解决了50多个石油化工过程优化、材料设计等方面的实际难题。化学模式识别方法用于分析化学、物理化学、无机化学、药物化学、食品化学、农业化学、医药化学和环境化学等学科的研究在我国也取得了不少成果,浙江大学、中国科技大学、沈阳药科大学、中国药科大学、同济大学、中国科学院长春应用化学研究所、湖南大学等单位在此方面做了大量工作^[14]。

化学定量构效关系(QSAR)的研究,是一个涉及到化学学科的一个带根本性的问题,即如何从物质的化学成分与结构来定量预测其化学特性,也可以

说是理论化学研究中的一个最重要目标,目前,由于药学发展的需要,将基于量子化学计算的分子模拟与QSAR研究结合起来,为寻求有生物和药理活性的先导化合物提供了一个新途径,我国在这方面也已取得引人注目的成就。将全局最优算法如模拟退火和遗传算法的引入分子力学的寻优,以指导最佳先导化合物的寻找,是化学计量学家的贡献,现已在QSAR的研究中得到了广泛的应用。在QSAR研究中,化合物结构的拓朴表征是另一个重要的课题,如何采用图论和数值方法来表征各种化合物分子,并将所得数值结果与实际量测的化合物的物理、化学和生物学特性连接起来,也是目前化学计量学研究的一个重要问题。我国的化学计量学工作者在此方面也做了不少有意义的工作。

波谱化学是分析化学与有机化学家都十分关注的一个领域,怎样利用现存波谱数据库,如质谱、红外光谱、核磁共振谱、色谱的保留时间库以及吸收与发射光谱等为复杂分析体系进行快速定性定量分析,一直是分析化学家们努力的目标;而如何利用上述各种波谱为新合成的有机化合物定结构,则是有机化学家们手中必不可少的解析手段。计算机技术,其中特别是智能数据库与化学专家系统技术为此提供了进行上述解析的新途径。我国的化学计量学工作者在此方面也做了大量富有成果的工作。中国科学院上海有机化学研究所、中国科学院大连化学物理研究所、中国科学院长春应用化学研究所、中国科学院化工冶金研究所,南开大学、南京大学、东北师范大学、厦门大学、湖南大学等单位都先后建立了多种波谱的数据库和专家系统,如¹³C NMR谱图数据库和结构解析专家系统(ESESOC)、高效液相色谱专家系统、红外、质谱数据库与专家系统、ICP发射光谱专家系统等,他们用计算机进行各类波谱(包括核磁共振谱、质谱、红外光谱等)模拟,并用联合波谱库和专家系统进行结构自动解析与推导,选择各类仪器(色谱与光谱)的最佳量测和分离条件、进行各类波谱数据库的知识开发,并在各类数据库的网络化上也做了大量工作。

2 化学计量学的发展前景

1997年,在国家自然科学基金委的全力支持下,由湖南大学与挪威Bergen大学合作,在张家界举行了我国的第一次国际化学计量学会议,与会代表120

多人,其中来自欧美及亚洲各地14个国家的境外代表60多人,会议的议题几乎覆盖了前述化学计量学研究的各个领域,还特别为化学计量学在工业中的应用开辟了一个专门议题。该会议已在国际化学计量学刊物“Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems”出版了会议论文专辑,收集了44篇会议论文发表,其中我国作者占了28篇,第一次较系统地向国际化学计量学界展示了我国的化学计量学研究的实力,说明我国的化学计量学研究已与国际接轨。

化学计量学诞生至今,已有近30年历史,其发展前景亦是一个令人关注的问题。从分析化学与化学计量学的关系可以看出,化学计量学的发展将对分析化学产生深刻影响,已构成分析化学第二层次基础理论和方法学的重要组成部分,特别值得提出的是,化学计量学的发展还将为分析仪器的智能化提供新理论和新方法,为新型高维联用仪器的构建提

供新思路和新方法,是21世纪分析仪器软件主体化发展的新突破口。此外,随着微型计算机和网络技术的飞速发展,对于化学波谱库的建立与检索方法以及化学人工智能和专家系统的研究也将取得长足进步。在采用计算机网络技术将多种波谱仪器连接的基础上,将数值化计算技术(近年来化学计量学方法学发展的主体)与传统的基于经验的逻辑推理方法的有机结合,可望解决化合物结构自动解析的难题,并使得长期困扰分析化学家的混合物波谱同时定性定量解析成为可能。在分析化学领域中,化学计量学的发展前景十分诱人。另外,化学计量学与其他化学学科分支,如环境化学、食品化学、农业化学、医药化学、化学工程等学科,将产生更密切的联系,得到更广泛的应用。随着各化学分支学科的发展,可以预期,化学计量学也将继续得到更蓬勃的发展。

参考文献:

- [1] S Wold. Chemometrics: what do we mean with it, and what do we want from it? Paper of InCINC'94. <http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/incinc/homepage.html>.
- [2] 俞汝勤. 化学计量学导论. 长沙: 湖南教育出版社, 1991.
- [3] 罗旭, 俞汝勤, 陈念贻, 许志宏, 刘洪霖, 徐桦, 王乐栅, 相秉仁, 许禄, 郭传杰, 卢佩章, 张玉奎, 梁鑫森, 许禄, 陆晓华, 梁逸曾, 周声劭, 梁亮, 梁逸曾, 刘洪霖, 包宏, 梁逸曾, 俞汝勤. 化学统计学基础. 沈阳: 辽宁出版社, 1985//现代分析化学的信息理论基础. 长沙: 湖南大学出版社, 1987//化学计量学方法. 北京: 科学出版社等.
- [4] Yu R Q (俞汝勤). Chemometrics in china. Chemom. and Intell. Lab. Sys., 1992, 14:15.
- [5] 袁洪福, 陆婉珍. 现代科学仪器, 1998, (5):6~8; 徐广通, 袁洪福, 陆婉珍. 现代科学仪器, 1997, (3): 9; Shen H L (沈海林), and Liang Y Z (梁逸曾). Chemom. and Intell. Lab. Sys., 1999, 45: 323~328; Wang hongyan (王洪艳)等.

Initial Study on the Way of Chemometrics into our Country

Li Yuan-jun, ZHU Lin

(Xichang College, Xichang 615013, Sichuan)

Abstract: This paper narrates and comments the way of Chemometrics into our country recent years, the main branches such as many Yuan adjustments and the resolution, the robust methods, chemistry pattern recognition, chemistry quota construction effect realtions, the molecular simulation and optimized, chemistry expert system and the database included. Particular mention the new technical like high dimension according to the analysis method, artificial neural networks, wavelet transformation has been highly developed in recent years.

Key words: Chemometrics; Way; China

(责任编辑:李道华)