高效液相色谱柱系统推荐的总体设计*

梁鑫淼 张玉奎 黄红心 邹汉法 卢佩章

（中国科学院大连化学物理研究所、中国大连色谱技术研究开发中心，大连 116012）

关键词 专家系统、柱系统推荐、谱图库

柱系统推荐是色谱专家系统中最为重要的组成部分[1,2]，我们研制的柱系统推荐是建立在多年来发展的理论基础之上的一个软件系统，其最根本的理论基础是反相色谱溶质保留值与溶质结构参数的定量关系[1]：

$$a = l_1 + l_2V_w + l_3\mu_A^2 + l_4X_{AH},$$
$$c = m_1 + m_2V_w + m_3\mu_A^2 + m_4X_{AH},$$
$$\ln k' = a + c \cdot C_B,$$

式中 V_w、X_{AH}、μ_A 分别为溶质分子的范德华体积、氢键能和偶极矩，l_1、l_2、l_3、l_4、m_1、m_2、m_3、m_4 为常系数。由此根据样品组分的分子结构，预测其相应的保留值，然后在知识库的支持下，通过推理机推荐合适的柱系统，并对推荐的结果给予解释和谱图验证。这种以分子结构为基础的柱系统推荐在国际上还未见报道。

一、柱系统推荐的组成部分

本系统由知识库、推理机、人机接口、解释系统和谱图验证系统组成，其总体布局见图 1 。

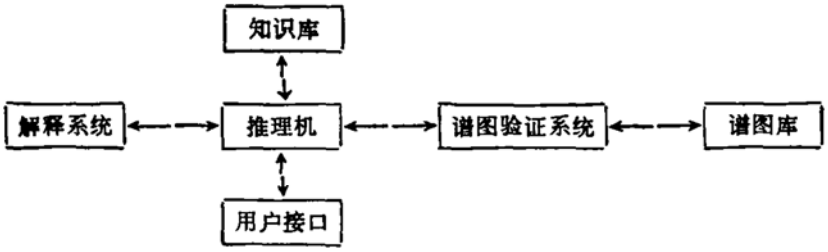

图 1 柱系统推荐的总体布局

二、知 识 库

要使液相色谱柱系统推荐具有智能性，必须给它提供大量有关该领域的高质量的知识，因此，知识库质量的好坏直接影响柱系统推荐推论的可靠性。为此，我们系统地整理了多年来发展的柱系统推荐的基本理论，总结出柱系统推荐规则，以不精确的产生式规则表示法，建立了与分子结构密切相关的知识库，其中包括分离模式、流动相、固定相，检测器以及适当的添加剂的选择规则。例如在固定相选择中有如下一条规则：

本文 1990 年 3 月 7 日收到。1990 年 7 月 1 日收到修改稿。

* 国家自然科学基金资助项目。

1）邹汉法，大连化学物理研究所博士论文，1989。

规则 10.95（如果(正相)（NH_2)），(那么|硅基键合相—CN 或—NH_2 柱|)，(因为|化合物有很强的提供氢的能力，应选择键合—CN或键合 —NH_2 作填充物|)。

规则 10 表示第 10 条规则，0.95 是该规则的可信度因子，这条规则的意思是，当样品组分含有 —NH_2，采用正向分离时应采用氰基柱或氨基柱作固定相。

三、推 理 机

在液相色谱柱系统推荐中，推理机用于整个系统中各个模块的控制及协调工作，其作用如何应用知识库规则来完成柱系统的推荐。

为了提高探索的效率，发挥不同模块的优点，我们在推理过程中采用了多重推理链的方法，见图 2．推理机首先控制进入人机接口，进行人机对话，之后在知识库的支持下推荐分离模式，决定采用反相、正相还是液固吸附色谱等，在此基础上进一步推荐固定相、流动相、检测器和适当的添加剂，并输出推荐结果。

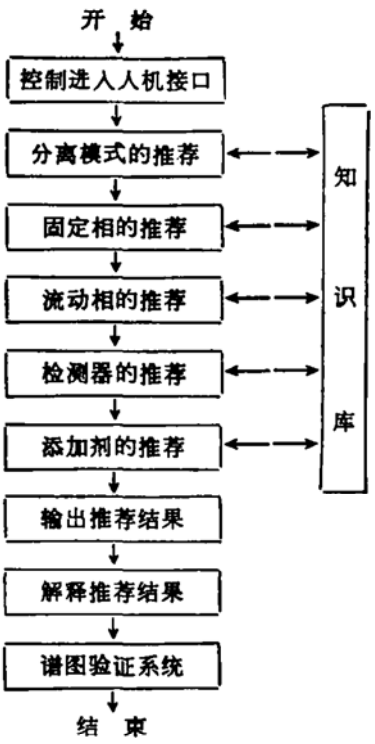

图 2　液相色谱柱系统推荐流程图

四、人 机 接 口

在人机接口的设计上，用户可以通过两个入口进行柱系统的推荐，这两个通道是：1）分子结构通道；2）样品名通道．分子结构道通就是用户首先回答计算机的提问，然后输入样品组分必要的分子结构信息，计算机就根据所提供的信息预测组分的保留值，供推理所用．样品名通道其本质与分子结构通道是一样的，所不同的是用户只需输入样品组分的化合物名即可，我们通过建立化合物的结构信息库来实现，使用户操作更为简单、方便．其流程图见图 3．

五、解 释 系 统

专家系统的设计者和使用者都需要系统地对作出的决策给予解释．在本系统中，在每条需要解释的规则后预先给定规则的解释来实现，上文例举的规则中的因为之后的一句子就是对该规则的解释．这样，推理机完成柱系统推荐后就能对推荐的结果给予其相应的解释．

六、谱图验证系统

在完成柱系统方法推荐之后，显示一张或多张与用户分析样品有关的色谱图以证明知识库的启发式规则推理是否正确，也就是验证知识库中的知识是否正确，以便对系统的效率及可靠性进行测试．图 4 为谱图验证系统框图．

首先谱图推荐程序根据柱系统推荐过程中积累的事实信息和样品组分的结构信息，在谱图关系数据库的支持下，推荐并输出关系数据，然后调用谱图显示程序，谱图显示程序就根据

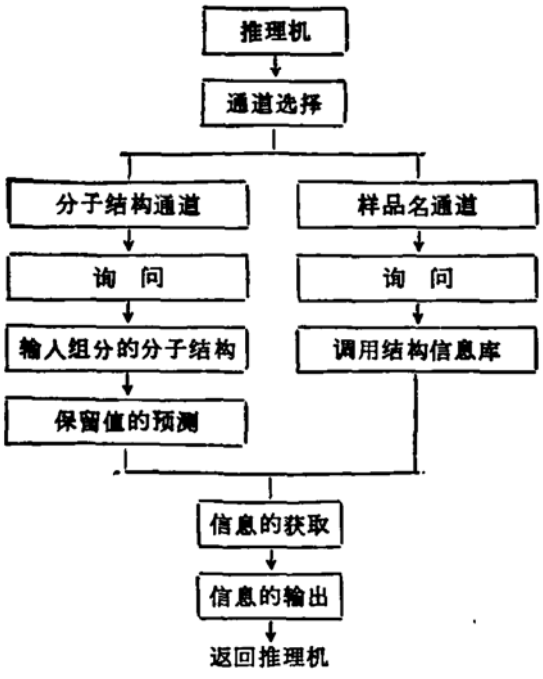

图 3 人机接口程序框图

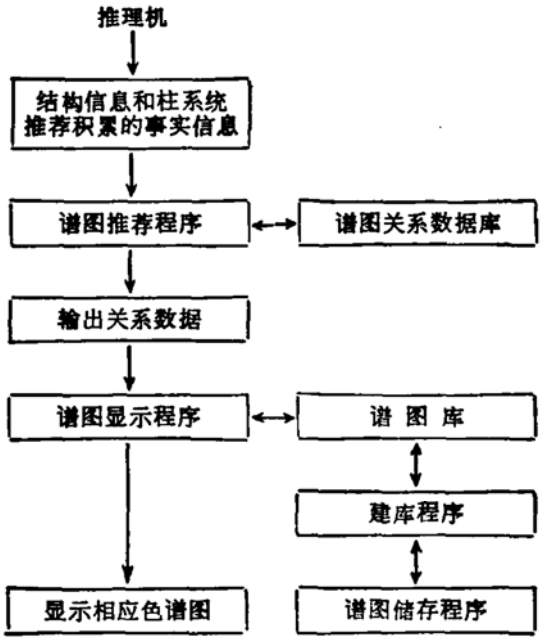

图 4 谱图验证系统框图

输出得到的关系数据，在谱图库的支持下，显示相应的色谱图。

七、结 果 讨 论

本软件是根据人工智能原理，采用编译型 Lisp 语言和 Quick Basic 语言编程，在 IBM PC/XT 微机上研制成功的[3,4]。

在知识库方面，我们根据色谱理论，提取了与分子结构密切相关的 80 多条规则，已经基本上满足了各种柱系统的推荐。

我们根据谱图选择原则，从 2000 多篇文献中精选出分离结果最佳，操作条件有等度、梯度等各种色谱图 200 余幅，并按分子结构特性建立了谱图库。

推理机、人机接口程序和谱图验证系统中的所有程序均已开发出来，各项功能均已实现。并以氨基酸、维生素、核酸、糖类等 20 多类大量的化合物验证了本系统，推荐结果表明，知识库中的知识是正确的，推荐结果是可靠的。

液相色谱柱系统推荐是 2030 型智能高效液相色谱仪的重要组成部分，已经通过了中国科学院院级鉴定，专家们认为，这种以分子结构为基础的柱系统推荐在国际上是处于领先水平，属首创性工作，应用前景广阔，能够节省大量的人力、物力、财力和时间。

参 考 文 献

[1] Lu Peichang, Huang Hongxin, *J. Chromatogr.*, 452(1988), 175.
[2] 梁鑫淼等，第七次全国色谱学术报告会文集，北京，1989，556.
[3] 梁鑫淼等，色谱，8(1990)，4：201.
[4] 梁鑫淼等，色谱，8(1990)，4：215.