

基于偏最小二乘回归的类模型方法用于中药牛黄的真伪鉴别

徐路^{1,2} 付海燕³ 姜宁¹ 俞晓平^{*1}

¹(中国计量学院生命科学院, 杭州 310018) ²(大理学院, 大理 671000)

(湖南大学化学化工学院, 长沙 410082)

摘 要 针对独立软模式类簇法 (SMCA) 在确定主成分数和决策区间时遇到的困难, 提出了一种基于 PLSR 的类模型方法——PLS 类模型方法 (PLSCM)。通过把类描述问题转化为常见的 PLSR 问题, 采用成熟的蒙特卡罗交叉验证法确定模型的隐变量数和决策区间。采用本方法对不同牛黄样品的近红外光谱数据 (波长范围 4000~9000 cm^{-1}) 进行分析, 可成功鉴别牛黄的真伪。本方法的可操作性和鉴别准确率均优于经典的 SMCA 方法。对于原始光谱数据, PLSCM 的训练和预测准确率均为 100%, 对于经 SNV 处理的数据, 训练和预测准确率分别为 99% 和 100%。

关键词 化学模式识别; 类模型; 独立软模式类簇法; 偏最小二乘回归类模型

1 引言

化学模式识别通过对化学对象的各种物理、化学、生物和形态等本质特征的测量数据进行信息提取和数据分析, 最终实现对研究对象的聚类 and 分类^[1]。目前, 化学模式识别方法, 尤其是分类方法已经在众多领域获得了广泛应用^[2~5]。

根据训练集包含的样品的范围, 分类方法可分为判别分析方法和类模型方法。判别分析方法的训练集包含多种类别的样品, 如线性判别分析 (LDA)、k-近邻法 (kNN)、偏最小二乘判别分析法 (PLSDA) 和支持向量机 (SVM) 等^[6]。判别分析根据训练集样品进行学习, 可将已知的两类或多类样品分类, 但是当未知样品属于训练集以外的类时, 判别分析方法将导致错误结论。类模型方法所用的训练集仅包含目标类样品, 目的是通过建立目标类的类模型, 鉴别目标类样品和所有的非目标类样品。一个典型的需要类模型的问题是原产地域产品的保护, 由于不可能对所有的非原产地域产品进行完全采样, 而分析目标是区分原产地域保护产品和其它所有非原产地域保护产品, 此时判别分析方法是不可行的。类模型的代表性方法有软独立模型类簇法 (Self independent modeling of class analogy, SMCA)^[7]、UNEQ 和势函数模型法^[8], 其中最常用的是 SMCA。SMCA 是一种基于主成分分析的类模型方法, 对于复杂量测数据, SMCA 经常遇到的问题是主成分数和决策区间的确定^[9~11]。因此, 本研究提出了基于偏最小二乘回归 (Partial least squares regression, PLSR)^[12] 的类模型方法 (PLS class model, PLSCM), 模型的隐变量 (Latent variables, LV) 数和决策区间均由蒙特卡罗交叉验证 (Monte Carlo cross validation, MCCV)^[13] 确定。

天然牛黄是牛科动物的干燥胆结石, 可用于治疗中枢神经系统、造血系统、肝脏和胆囊等器官的疾病, 也可用于预防炎症和传染性的疾病。天然牛黄是一种极珍贵的中药。本研究将 PLSCM 结合近红外光谱法用于天然牛黄样品和人工、掺杂牛黄样品的鉴别, 并与 SMCA 模型的结果进行了比较。

2 理论

2.1 SMCA 方法

SMCA 对不同类的训练集样品分别进行主成分分析, 用适当数目的显著主成分对每一类样品进行建模。对第 i 类样品, 训练集样品矩阵 $X_i (n \times p)$ 的每一行代表一个训练样品, p 为样品的特征数。假设 X_i 已进行列中心化, 经主成分分析, 用前 r 个主成分对 X_i 进行重构:

2009-06-02 收稿; 2009-10-19 接受

本文系农业部科技重大专项基金 (No. 2009ZX08012-013B) 资助项目

* E-mail: yxp@cjl.u.edu.cn

$$X_i = \overline{USV^T} \tag{1}$$

其中, X_i 是重构数据阵, U , S 和 V 的意义与通常的主成分分析中相同, 分别代表得分矩阵、奇异值对角阵和载荷矩阵, 不同之处在于上述矩阵只包含了前 r 个主要主成分, 后面的次要主成分均已被剔除。上标“T”表示矩阵的转置。假设原数据阵中未被解释的残差服从正态分布, 则其标准偏差可估计如下:

$$S_i = \sqrt{\sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^p e_{kij}^2 / [(l-r)(n-r-1)]} \tag{2}$$

其中, e_{kij} 为 X_i 和 X_i 的第 k 行、第 j 个元素的差异, l 为 $n-1$ 和 p 的较小值, s_i 也可通过主成分来计算:

$$S_i = \sqrt{\sum_{k=1}^n \sum_{j=r+1}^l t_{kij}^2 / [(l-r)(n-r-1)]} \tag{3}$$

其中, t_{kij} 为第 k 个训练样品的第 j 个主成分得分。 S_i 可视为第 i 类的训练集样品到第 i 类的 r 个主成分张成的空间的距离量度。

基于估计的 S_i , 第 i 类的置信区间可通过引入一个到上述子空间的临界距离来估计:

$$S_{crit} = \sqrt{F_{crit} S_i^2} \tag{4}$$

其中, F_{crit} 为单边 F-检验临界值, 自由度为 $l-r$ 和 $(l-r)(n-r-1)$ 。对于给定的显著性水平, F_{crit} 可从统计表中查出。一个未知样品到目标类模型的距离, s_{un} 可计算如下:

$$S_{un} = \sqrt{\sum_{j=r+1}^l t_{unj}^2 / (l-r)} \tag{5}$$

其中, t_{unj} 为未知样品的第 j 个主成分得分。如果 S_{un} 低于 S_{crit} , 未知样品即可判定为属于第 i 类, 否则即判定为不属于第 i 类。

对于每一个目标类, 过少的主成分不能完全解释由化学组成引起的数据变化, 而过多的主成分将把测量误差和其他无关的数据变化引入类模型。以上两种情况都将引起 SMCA 模型性能的退化。由于数据的复杂性和关于测量不确定性的信息的缺乏, 显著主成分数的估计一直是个难点^[14]。文献[15]中介绍的估计主成分数的方法在 15 种以上, 主成分数的估计不仅要尝试用多种不同的方法, 而且需要研究者具有丰富的经验。另外, 使用公式 (2)和 (3)中估计的标准偏差作为样品到类模型的距离的量度, 也存在一定问题, 因为训练集样品已经被用于模型的训练。根据公式 (2)和 (3)计算的距离往往偏小, 其结果是使得模型过多地拒绝属于本类的样品。文献[9~11]提出了不同的解决方法, 涉及到自由度的不同修正方法, 而不同的自由度修正方法说明该问题尚未得到满意的解决。考虑到 SMCA 方法的上述缺点, 有必要发展新的性能可靠、易于操作的类模型方法。

2 2 PLSCM 方法

PLSR^[12]一经提出, 即在多元回归的多个领域获得了广泛应用。本研究提出 PLSCM 主要是基于以下两点: (1)PLSR 作为化学计量学的核心方法之一, 其发展已非常成熟, 其统计学意义和实用价值已经获得了广泛的认同, 为 PLSCM 提供了理论基础; (2)PLSCM 意义简单明确, 易于实现。

假设对于目标类有 n 个训练集样品, 用测量光谱数据阵 X (大小为 $n \times p$) 作为预测变量, 用向量 I (大小为 $n \times 1$, 所有元素均为 1) 作为响应变量。PLSCM 在 X 和 I 向量之间建立 PLSR 模型, 并将该模型用于新样品的预测。与通常的 PLSR 不同, 在 PLSCM 中, X 并未进行列中心化, 因为若对 X 进行列中心化, 则 X 的每列均与 I 向量正交, 此时是无法用 X 预测响应变量的。PLSCM 模型可表示为:

$$I = XB_{PLS} + e \tag{6}$$

其中, b_{PLS} 为 PLSR 的回归系数, 可按照一般的 PLSR 步骤求出, e 为大小为 $n \times 1$ 的误差向量。因为 X 中所含样品均来自于同一目标类, 可以期望在选择适当的隐变量的情况下, 每一个类内样品的响应值均应接近 1。对于未知样品 x_{un} , 其响应预测值越接近 1, 则样品越有可能属于该目标类, 反之亦然。

假设, 式 (6)中的预测误差 e 服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$, 则类内样品的预测响应变量应服从正态分布 $N(1, \sigma^2)$ 。与 SMCA 类似, 在 PLSCM 模型中, 可根据式 (6)的预测误差来构造类内样品到类模型的距离量度。考虑到训练集样品已经参与了模型构建, 直接用预测均方根误差估计类内样品到类模型的距离

离容易导致偏小的估计。采用蒙特卡罗交互验证 (Monte Carlo cross validation, MCCV)^[13] 的均方根误差 (Root mean squared error of MCCV, RMSE_{MCCV}) 来估计该距离。MCCV 与一般的交互验证不同之处在于可多次从整个训练集中随机采样, 并且可通过提高留出样品的比率来避免选择过多的隐变量。因此, 在本研究中, MCCV 不仅被用于估计 PLSCM 中的隐变量数, 还被用于估计类模型对类内样品的预测误差的标准差 (σ)。 σ^2 的基于 MCCV 的估计如下:

$$\sigma^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^N n_i} \sum_{i=1}^N \|\hat{y}_i - y_i\|^2 \tag{7}$$

其中, N 为采样次数, n_i 为第 i 次 ($i=1, 2, \dots, N$) 采样时的留出样品数, $\hat{y}_i$ 和 y_i 分别对应于第 i 次采样时留出样品的预测响应值和参考响应值。对 PLSCM 而言, y_i 的元素均为 1。

对于给定的显著性水平 (α), PLSCM 接受新样品属于该目标类的预测响应变量区间为:

$$1 - z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma < \hat{y} < 1 + z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma \tag{8}$$

其中, $z_{1-\alpha/2}$ 为正态分布的临界值, $\hat{y}$ 是未知样品的预测值。本研究中 MCCV 的留出样品比率为 30%。必须指出, 当留出样品比例较高 ($\geq 50\%$) 时, MCCV 倾向于过高地估计预测误差。此时, 推荐使用改进的 MCCV^[15] 估计预测误差。

3 实验部分

3.1 仪器与样品

NEXUS 870傅里叶红外/近红外光谱仪(美国热电公司); InGaAs检测器。人工牛黄和天然牛黄样品分别购于药店。其中, 天然牛黄样品 140个, 分别来自于辽宁 (48个样品)、甘肃 (46个样品) 和陕西 (46个样品); 人工牛黄样品 140个; 掺杂牛黄样品 80个, 由天然牛黄样品和人工样品 (购于长沙九芝堂) 以 1:1 的比例混合而成。

3.2 光谱测量

将牛黄样品碾碎成粉末, 用紫外灯烘干, 置于薄玻片上进行漫反射光谱测量, 测量波长区间为 4000~9000 cm^{-1} , 分辨率为 8 cm^{-1} , 每个样品扫描 50次。

4 结果与讨论

将 140个天然牛黄样品用 DUPLEX 方法^[16]划分为代表性的训练集 (含 114个样品) 和测试集 1 (含 26个样品), 220个人工牛黄和掺杂牛黄样品作为测试集 2。DUPLEX 方法首先计算所有样品之间的距离, 将最大距离的两个样品划入训练集, 再将剩余样品中最大距离的两个样品划入测试集, 依此类推, 直至获得足够的测试集样品, 则将所有剩余样品归入训练集。用 SMCA 和 PLSCM 分别基于原始光谱和标准正态变量法 (Standard normal variate, SNV)^[17] 处理的光谱数据进行建模和鉴别分析。

图 1 中 a, b, c 分别显示了来自辽宁、甘肃和山西的牛黄样品的原始近红外光谱图, 图 2 中 a 和 b 分别显示了掺杂牛黄和人工牛黄的原始近红外光谱图, 图 3 显示了经 SNV 处理过的各种样品的光谱数据。不难发现, 不同的牛黄样品的原始近红外光谱有相似的吸收模式, 其主要差别在于吸收峰位置和相对强度不同。上述现象也初步说明, 近红外光谱确实能够反映不同种类牛黄样品的化学组成。但是, 由于光谱的相似性, 必须依靠化学模式识别方法从光谱数据中提取相关化学信息, 才能实现天然牛黄的鉴别。

对原始数据, 分别用 SMCA 和 PLSCM 对训练集进行建模, SMCA 和 PLSCM 模型的显著性水平都取 95%, 其意义是模型对于类内样品的接受概率为 95%。针对 SMCA 模型, 为确定主成分数。本研究参考了 ND 法、累积方差、RSD 和不同的交互验证法^[19], 都给出了不同的主成分数估计。考虑到 SMCA 法对主成分数的敏感, 为了估计 SMCA 模型的性能, 建立了 2~7 个主成分的 SMCA 模型, 其训练和鉴别的结果列于表 1 中。错误训练的样本数为 6~24 个, 说明 SMCA 模型对于类内样品的学习并不充分; 测试集 1 中的样品全部为天然牛黄样品, 被错误地拒绝的样品数在 1~6 之间; 测试集 2 中的样品均为掺杂牛黄或人工牛黄, SMCA 模型全部正确地拒绝此类样品。对 PLSCM 模型, 采用 MCCV 确定其

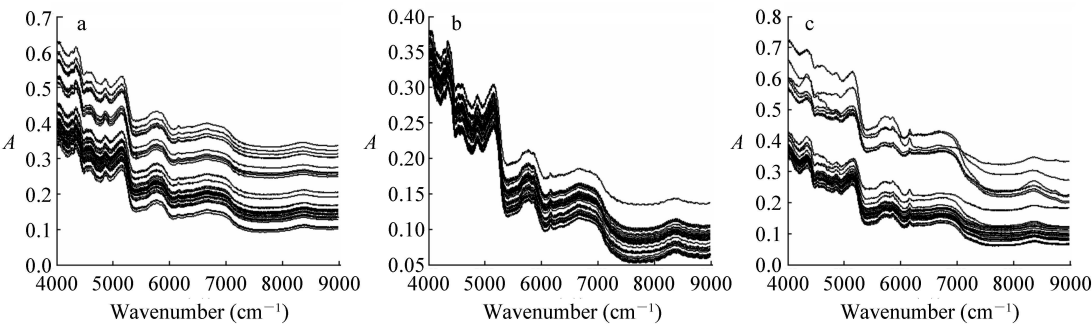


图 1 产自辽宁 (a)、甘肃 (b)和陕西 (c)的天然牛黄样品的近红外光谱

Fig 1 NIR spectra of naturalbezoar samples from Liaoning (a), Gansu (b) and Shanxi (c)

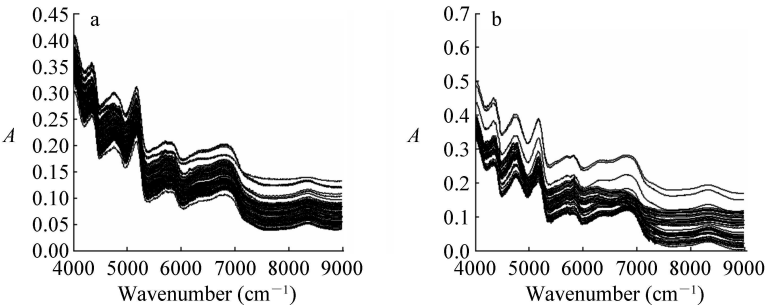


图 2 掺杂牛黄样品 (a)和人工牛黄样品 (b)的原始近红外光谱

Fig 2 Raw NIR spectra of adulterated bezoar samples (a) and artificial bezoar sample(b)

隐变量数, 15 个隐变量可获得最小的 RMSE M C C V 值, P L S C M 的训练和对两个测试集的正确率均为 100%。另外, 考虑了 P L S C M 对隐变量数的敏感性, 8~ 20 个隐变量的 P L S C M 模型均给出类似的结果。由此可见, P L S C M 的训练和预测结果均好于 S M C A, 并且对隐变量数的敏感性较低。

对 S N V 处理的光谱数据, 3、7 和 9 个主成分分别解释了 95%、98% 和 99% 的数据方差, 对应的 S M C A 模型的结果也列于表 1 中。S M C A 对测试集 2 的预测完全正确。但是, 无论是训练还是对测试集 1 的预测, S M C A 均给出较多的错误鉴别, 其中 3 个主成分的 S M C A 模型对测试集 1 的错误鉴别率达到 42.3% (11/26), 不能令人满意。对 P L S C M, 隐变量数由 M C C V 确定为 11, P L S C M 模型仅仅在学习时错误地拒绝一个天然牛黄样品, 学习准确率为 99%, 对两个测试集的预测则完全正确。

表 1 S M C A 对天然牛黄、人工和掺杂牛黄的鉴别错误的样品数

P C n ^a	原始光谱 Original spectra			标准正态变量处理光谱 Standard normal variate spectra		
	训练集 Training set	测试集 1 Prediction set 1	测试集 2 Prediction set 2	训练集 Training set	测试集 1 Prediction set 1	测试集 2 Prediction set 2
2	13	2	0			
3	6	2	0	23	11	0
4	6	1	0			
5	24	6	0			
6	20	5	0	15	5	0
7	13	4	0			
9				13	4	0

^a S M C A 类模型的主成分数 (Number of P C s in S M C A).

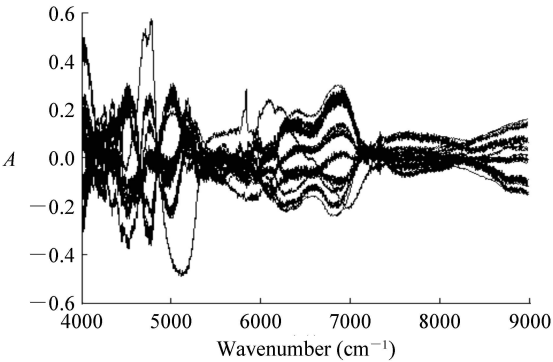


图 3 经 S N V 预处理的牛黄样品的近红外光谱

Fig 3 Standard normal variate (S N V)-preprocessed NIR spectra of various bezoar samples

表 2 PLSCM 对天然牛黄、人工和掺杂牛黄的鉴别错误的样品数
Table 2 Numbers of wrongly identified samples by partial least square class model(PLSCM)

Lvn ^a	原始光谱 Original spectra			标准正态变量处理光谱 Standard normal variate spectra		
	训练集 Training set	测试集 1 Paediction set 1	测试集 2 Paediction set 2	训练集 Training set	测试集 1 Paediction set 1	测试集 2 Paediction set 2
8	0	0	0			
10	0	0	0			
11				1	0	0
15	0	0	0			
20	0	0	0			

^a PLSCM 类模型的隐变量数 (Number of latent variables in PLSCM)。

References

1 Kowalski B R, Bender C E. *Naturwissenschaften*, **1975**, 62(1): 10~ 14

2 SUN Guo-Xiang (孙国祥), ZHANG Jing-Xian (张静娴). *Chinese J. Anal. Chem.* (分析化学), **2009**, 37(8): 1183~ 1187

3 LI Yong (李勇), WEI Yi-min (魏益民), PAN Jia-Rong (潘家荣), Guo Bo-Li (郭波莉). *Spectroscopy and Spectral Analysis* (光谱学与光谱分析), **2009**, 29(3): 647~ 651

4 YAO Wei-Feng (姚卫锋), HU Yu-Zhu (胡育筑), MOU Ling-Li (牟玲丽), YU Bo-Yang (余伯阳). *Chinese J. Anal. Chem.* (分析化学), **2009**, 37(3): 383~ 388

5 CHEN Nian-Yi (陈念贻). *Applications of Pattern Recognition Methods to Chemistry and Chemical Engineering* (模式识别方法在化学化工中的应用). Beijing (北京): Science Press (科学出版社): **2000**, 10~ 120

6 Lavine B, Workman J. *Anal. Chem.*, **2008**, 80(12): 4519~ 4531

7 Wold S. *Pattern Recognition*, **1976**, 8(3): 127~ 139

8 Forina M, Oliveri P, Lanteri S, Casale M. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **2008**, 93(2): 132~ 148

9 Wold S, Sjostrom M. *Journal of Chemometrics*, **1987**, 1(4): 243~ 245

10 Kvalheim O M, Oygard K, Gahrn-Nielsen O. *Anal. Chim. Acta*, **1983**, 150: 145~ 152

11 Gamperline P J, Webber L D, Cox F O. *Anal. Chem.*, **1989**, 61(2): 138~ 144

12 Wold S, Martens H, Wold H. *The Multivariate Calibration Method in Chemistry Solved by the PLS Method*. Ruhe A, Kvalheim B (eds). In: *Proceedings on the Conference on Matrix Pencils, Lecture Notes in Mathematics*. Heidelberg: Springer-Verlag, **1983**, 286~ 293

13 Xu Q S, Liang Y Z. *Chemom. Intell. Lab. Syst., Lab. Inf. Manag.*, **2001**, 56(1): 1~ 11

14 Malinowski E R. *Factor Analysis in Chemistry*, 3rd ed., New York: Wiley, **2002**, 86

15 Xu Q S, Liang Y Z, Du Y P. *Journal of Chemometrics*, **2004**, 18(2): 112~ 120

16 Snee R D. *Technometrics*, **1977**, 19: 415~ 428

17 Barnes R J, Dhanoa M S, Lister S J. *Appl. Spectrosc.*, **1989**, 43(5): 772~ 777

A New Class Model Based on Partial Least Square Regression and Its Applications for Identifying Authenticity of Bezoar Samples

XU Lu¹, FU Hai-Yan², JIANG Ning¹, YU Xiao-Ping^{* 1}
¹(College of Life Sciences, China Jiliang University, Hangzhou 310018)
²(College of Pharmacy, Dali University, Dali 671000)
³(College of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University, Changsha 410082)

Abstract SMCA (self independent modeling of class analogy) is a classical class modeling method for chemical pattern recognition. Although widely used, SMCA suffers difficulties in selecting a proper number of principal components and determining the decision region. A new class modeling technique based on partial least squares regression, partial least squares class model (PLSCM), is proposed, where the number of latent

variables and decision region can be readily estimated by the routine methods in multivariate calibration, e.g. Monte Carlo cross validation. PLSCM is successfully applied to identify trueborn bezoar samples from artificial and adulterated bezoar samples based on infrared spectra measured in the range of $4000-9000\text{ cm}^{-1}$. It is demonstrated that PLSCM outperforms SMCA in terms of both maneuverability and identification accuracy. For the raw spectra, both the training and prediction accuracy of PLSCM are 100%. For the standard normal variate-processed data, the training and prediction accuracy of PLSCM is 99% and 100%, respectively.

Keywords Chemical pattern recognition; Class model; Soft independent modeling of class analogy; Partial least squared class model

(Received 2 June 2009; accepted 19 October 2009)

国家自然科学基金委化学科学部 十二·五分析化学学科发展战略研讨会纪要

由国家自然科学基金委员会化学科学部主办,中国科学院武汉物理与数学研究所承办,于 2009 年 7 月 22~26 日在武汉召开了“十二·五分析化学学科发展战略研讨会”。来自全国各地 60 余名专家学者参加了研讨会,另有 24 名代表列席了会议。参加会议的柴之芳、陈洪渊、汪尔康、俞汝勤、姚守拙、叶朝辉六位院士;获得杰出青年基金的代表 22 名;教育部长江特聘教授 3 名。国家自然科学基金委化学科学部副主任梁文平和陈拥军研究员全程参加了会议,湖北省政府相关部门负责人和中国科学院武汉分院领导也参加了会议。

会议开幕式由陈拥军副主任主持,梁文平副主任首先就基金委安排这次发展战略研究的意义和要求,以及这次会议的重要性作了发言。陈拥军副主任就化学、特别是分析化学的战略发展谈了自己的意见。各位与会院士都作了发展战略报告。会议期间,与会代表围绕分析化学学科的战略地位、发展规律和研究特点、研究现状和动态、十二·五期间的发展布局 and 优先资助领域以及与其他学科交叉的重点方向、发展的保障措施、开展国际合作的需求和优先领域,以及对加强国际合作与交流的政策需求和保障措施展开了热烈的讨论,达成了广泛的共识,为十二·五期间的学科发展奠定了好的基础。

分析化学是研究物质的组成和结构,确定物质在不同状态和演变过程中化学成份、含量和时空分布的量测科学。或者说,分析化学是发展和应用各种方法、仪器和策略获得有关物质在空间和时间方面组成和性质的一门科学。众所周知,分析化学是科学的眼睛。无论从历史上众多诺贝尔化学奖得主的成就(1/3 是与分析方法有关的),还是社会经济的发展(美国每年用于产品质量控制的费用超过 500 亿元);无论从人类基因组计划的提前完成,还是方兴未艾的蛋白质组学和代谢组学等多种组学的研究,分析化学都起了很重要的作用。当前生命科学、材料科学、能源科学、环境科学和空间科学等前沿学科的发展,都离不开分析化学。比如,蛋白质组学和代谢组学的研究中,分离和鉴定技术发挥着关键的作用;在食品安全、医疗诊断和环境保护领域离不开各种光谱、电化学、色谱和质谱分析方法;而在空间探测和国土安全方面,更是需要分析化学提供先进的分析检测技术。可以说,分析化学是整个科学发展的重要支柱。当然,分析化学的发展也离不开相关学科的支持,分析化学也只有通过与相关学科进行深入的交叉和合作研究,才能得到更好地发展。

会议一致认为,十一·五期间,广大分析化学家立足学科的发展,推进基础研究,着力提高原始创新能力,坚持为建设创新型国家服务。在国家基金委和有关部门的大力支持下,我国分析化学学科在前沿领域和应用领域都取得了令人瞩目的成绩;在人才队伍和学术环境的建设方面,初步形成了一支以年轻科学家为主体的、稳定的、站在学科前沿的研究队伍,初步形成了公平竞争、学术自由、团结合作、和谐发展的研究氛围。

会议指出,我国分析化学(甚至包括整个基础科学研究工作)在过去的若干年里,虽然也有原始创新的工作,但主要还是以跟踪世界科学前沿为主,以“引进、吸收、创新”为主。经过这么多年的发展,目前已经有了一支较强的队伍和相当的研究积累。应该说,我们的研究工作发展到了一个关键的转折点,即以“跟踪前沿,追逐热点为主”向“原始创新,自成体系为主”转变。在国际合作交流中,则是以“请进来”“虚心学习”向“走出去”“平等合作”的转变。只有完成了这个战略转变,我们才有可能成为世界科学强国。为此,十二·五期间的分析化学研究,要紧紧围绕这个转变展开。我们要坚持长期积累,实现厚积薄发;鼓励前瞻研究,支持原始创新;结合国家需求,解决重大问题;净化学术环境,鼓励学科交叉;加强国际合作,注重平等交流。国家自然科学基金要加强对原创性研究工作得支持,以引导分析化学家,从相关学科的基本原理出发,而不是仅仅追踪文献热点,从分析化学本身的发展规律出发,而不仅仅是跟踪别人的工作,真正实现我国分析化学的“可持续发展”。我们要坚持“更加侧重基础”和“更加侧重人才”的方针,既要在原始创新上下大功夫,又要为国家经济建设服务,力争将我国的分析化学发展成为国际上有重要影响的学科。

撰稿人:庄乾坤、刘虎威