

## 支持向量回归方法预报偶氮染料最大吸收波长

赵 慧<sup>a</sup> 陆文聪<sup>\*,a</sup> 宋海峰<sup>b\*</sup>

(<sup>a</sup> 上海大学理学院化学系 上海 200436)

(<sup>b</sup> 华东理工大学精细化工研究所 上海 200237)

**摘要** 采用支持向量机方法建立了适用于偶氮染料的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值 (ZINDO/S 方法中用来调整分子中 轨道重叠程度的权重因子) 与其分子结构参数间的定量关系, 用留一法预报了该类染料的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值, 相对误差绝对值平均为 4.8%。利用 Hyperchem 软件计算该类染料的最大吸收波长时, 将计算机预报的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值代替软件中默认的值 0.585, 结果表明, 计算所得最大吸收波长的相对误差绝对值平均为 3.8%, 因此, 本工作所用方法为该类染料提供了一种计算机预报最大吸收波长的有效方法, 可以用作该类染料的计算机辅助分子设计。

**关键词** 偶氮染料, 支持向量机 (SVM), ZINDO/S,  $\text{owf}_{\text{pp}}$

## Support Vector Regression Applied to the Prediction of Maximum Absorption Wavelength of Azo Dye

ZHAO, Hui<sup>a</sup> LU, Wen-Cong<sup>\*,a</sup> SONG, Hai-Feng<sup>b</sup>

(<sup>a</sup> Department of Chemistry, School of Science, Shanghai University, Shanghai 200436)

(<sup>b</sup> Institute of Fine Chemicals, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

**Abstract** Support vector regression was applied to represent the relationship between the  $\text{owf}_{\text{pp}}$  value and the structural parameters of azo dye molecule, and  $\text{owf}_{\text{pp}}$  value was predicted by using leave-one method and the average absolute value of relative error was 4.8%. The default  $\text{owf}_{\text{pp}}$  value in Hyperchem was replaced with the predicted  $\text{owf}_{\text{pp}}$  value when the maximum absorption wavelength was calculated, thus the average absolute value of relative error was 3.8%. Therefore, the method can be used to predict the maximum absorption wavelength in the work of computer-aided molecular design of azo dye.

**Key words** azo dye, SVM, ZINDO/S,  $\text{owf}_{\text{pp}}$

在合成染料中, 偶氮染料是品种数量最多的一类, 目前工业生产上的染料品种半数以上都是偶氮染料, 它具有相当广泛的应用<sup>[1]</sup>。

近年来, 张笑一等<sup>[2~4]</sup>运用了量子化学方法计算染料分子的理化性质, 并研究它们与分子性能的关系。王学杰等<sup>[5,6]</sup>已证明对染料结构进行量子化学计算, 在某种程度上可以正确地预报一些染料分子的吸收波长和吸收强度。偶氮染料在工业及生活中发挥了很大的作用, 但对于其分子结构的理论研究<sup>[7,8]</sup>还不够充分, 我们发现, 仅用 ZINDO/S (Zerner's spectroscopic version of the Intermediate Neglect of Differential Overlap) 法计算偶氮染料分子的最大吸收波长时,

结果往往不够理想。原因主要是在使用 ZINDO/S 法计算有机化合物最大吸收波长时, 软件建议的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值 (ZINDO/S 方法中用来调整分子中 轨道重叠程度的权重因子) 为 0.585 (对于有机分子的缺省值), 未考虑到不同分子的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值应有所差别, 导致算出的波长与实际波长往往有较大的偏差。已有文献探讨了不同的体系应采用不同的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值<sup>[9]</sup>, 如对于过渡金属复合物应为 0.640, 然而, 即使是同一类型的有机物, 由于取代基的不同, 导致电子诱导效应、共轭效应和空间效应的差别,  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值也是有差别的。 $\text{owf}_{\text{pp}}$  值的差别对最大吸收波长的计算结果影响较大。因此, 利用已有偶氮染料的最大吸收波长的实验数据, 通过量子化学方法和数据挖掘的手

\* E-mail: wclu@mail.shu.edu.cn

Received August 7, 2003; revised November 4, 2003; accepted December 16, 2003.

国家自然科学基金 (No. 20373040) 资助项目。

段相结合的途径,准确地预报未知偶氮染料的最大吸收波长,这是一项有意义的工作.

支持向量回归(Support Vector Regression,简称 SVR)是 Vapnik<sup>[10]</sup>在长期的、系统的统计学习理论研究基础上提出的新算法,已在语音识别<sup>[11]</sup>、文字识别<sup>[12]</sup>、药物设计<sup>[13]</sup>、组合化学<sup>[14]</sup>、时间序列预测<sup>[15]</sup>等研究领域得到成功应用.我们通过最近一年多的理论和应用研究,初步表明 SVR 方法是定量建模的有效方法,在化学领域有很大的应用潜力<sup>[16,17]</sup>.本工作用支持向量机算法结合量子化学方法来研究  $owf_{pp}$  值与偶氮染料结构参数间关系,用计算机预报的偶氮染料  $owf_{pp}$  值,代替 Hyperchem 软件中计算染料最大吸收波长时所用  $owf_{pp}$  默认值 0.585,进而能较准确地预报该类化合物的最大吸收波长.

## 1 支持向量回归(SVR)的计算原理<sup>[10]</sup>

传统的化学计量学算法处理回归建模问题在拟合训练样本时,要求“残差平方和”最小,这样将有限样本数据中的误差也拟合进了数学模型,易产生“过拟合”问题,针对传统方法这一不足之处,SVR 采用“不敏感函数”来解决“过拟合”问题,即  $f(x)$  用拟合目标值  $y_k$  时,取:

$$f(x) = \sum_{SVs} (i - i^*) K(x_i, x)$$

上式中  $i$  和  $i^*$  为支持向量对应的拉格朗日待定系数,  $K(x_i, x)$  是采用的核函数<sup>[18]</sup>,  $x$  为未知样本的特征矢量,  $x_i$  为支持向量(拟合函数周围的“管壁”上的特征矢量),  $SVs$  为支持向量的数目.目标值  $y_k$  拟合在

$$\left| y_k - \sum_{SVs} (i - i^*) K(x_i, x_k) \right|$$

时,即认为进一步拟合是无意义的.这样拟合得到的不是一解,而是一组无限多个解. SVR 方法是在一定约束条件下,以  $w^{-2} (w$  与分类超平面两边的支持向量的间距有关,间距越大则其值越小)取极小的标准来选取数学模型的唯一解.这一求解策略使过拟合受到限制,显著提高了数学模型的预报能力.

设样本集为:  $(y_1, x_1), \dots, (y_l, x_l), x \in R^n, y \in R$ , Vapnik 提出运用下列不敏感损耗函数:

$$L(y) = \begin{cases} 0 & \text{for } |f(x) - y| < \\ |f(x) - y| & \text{otherwise} \end{cases}$$

通过下面的优化方程:

$$\max W(i, i^*) =$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{i=1}^l i^* (y_i - ) - i (y_i + ) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l (i^* - i) (j^* - j) K(x_i, x_j) \end{aligned} \right\}$$

在下列约束条件下

$$\begin{aligned} 0 & \leq i \leq C, i = 1, \dots, l \\ 0 & \leq i^* \leq C, i = 1, \dots, l \\ \sum_{i=1}^l (i^* - i) & = 0 \end{aligned}$$

求解,由此可得拉格朗日方程的待定系数  $i$  和  $i^*$  从而得回归方程:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (i^* - i) k(x_i, x)$$

## 2 数据来源与计算结果

本文所用偶氮染料最大吸收波长的数据由合作者宋海峰博士提供,有关化合物合成和测试结果将另文发表.

### 2.1 分子结构特征参数的计算

用分子力学方法(MM+)优化分子构型,用量子化学半经验方法(PM3)计算有关分子的特征参数.用 ZINDO/S 计算化合物的吸收光谱线和最大吸收波长,所用电子组态 CI 为单激发态(single excited),轨道能量差为 12 eV.计算过程中收集了 12 个分子结构特征参数,包括最高分子占有轨道能量、最低分子空轨道能量、最高分子占有轨道与最低分子空轨道能量差、分子轨道第二激发态能量、分子轨道第二激发态与最高分子占有轨道能量差、每个偶氮原子上的电荷分布密度、S 原子个数、N=N 键长、偶极距、两面角、分子中氮原子与氧原子个数之比等,所用 MM+, PM3 和 ZINDO/S 计算方法由 Hyperchem 7.0 软件<sup>[19]</sup>提供,所有计算在 Pentium 型微机上进行.

### 2.2 结构特征参数的筛选

分子结构特征参数的筛选是数据处理工作的一个难点,迄今为止,这方面工作主要依赖于专家的直觉和经验.本工作用 SVR(支持向量回归)的留一法预报结果来筛选变量,从计算所得的 12 个结构参数中筛选出下列 3 个特征变量:  $E(\text{HOMO})$  (最高分子占有轨道能量)、 $E(\text{LUMO})$  (最低分子空轨道能量)、Ratio(分子中氮原子与氧原子个数之比),见表 1.理论上, HOMO, LUMO 是影响最大吸收波长的比较重要的因子,氮原子与氧原子是重要的配位原子,特征参数的筛选结果与理论上一致.计算还表明:上述分子结构特征参数与其最大吸收波长的关系是非线性的.

### 2.3 支持向量机回归的计算结果

既然  $owf_{pp}$  值是校正分子中轨道间重叠程度的权重系数,则结构不同分子的共轭程度不同,相应的  $owf_{pp}$  值也应不

同.为了总结不同分子的  $\text{owf}_{\text{prp}}$  值与其结构特征参数间的关系,必须先根据化合物最大吸收波长的实验数据拟合出对应的  $\text{owf}_{\text{prp}}$  值,为此,我们在 Hyperchem 软件中的 ZINDO/S 方法中调试各已知化合物的  $\text{owf}_{\text{prp}}$  值,直至其最大吸收波长的计算结果与实验值基本相符,此时所得  $\text{owf}_{\text{prp}}$  值称为  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$ .用支持向量机回归算法总结化合物的  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  与其结构特征参数间的关系,结果表明:以化合物的  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  为目标,以  $E(\text{HOMO})$ ,  $E(\text{LUMO})$ , Ratio 为特征参数,取核函数  $K(x, z)$  为多项式形式,即

$$K(x, z) = [\langle x \cdot z \rangle + 1]^2,$$

当惩罚因子  $C$  为 100,不敏感损耗函数中的  $\epsilon$  为 0.1 时,所得化合物  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  与其分子结构参数间的定量关系的准确度较好,相应的 SVR 方程为:

$$\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.}) = \sum_i w_i \cdot [\langle x_i \cdot x \rangle + 1]^2 + 0.7069$$

其中  $w_i = w_i^* - w_i$ ,支持向量有 20 个.用上式计算  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  的相对误差绝对值平均为 4.0%.为了考察本工作中 SVR 建模的可靠性,用 SVR 的“留一法”预报了该类染料的  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$ ,结果表明:在与 SVR 建模相同的条件下(多项式核函数,  $C = 100$ ,  $\epsilon = 0.1$ ),SVR 的“留一法”预报  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  的效果最好,其预报相对误差绝对值平均为 4.8%, $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  与其预报值  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Pred.})$  的对比结果见图 1.

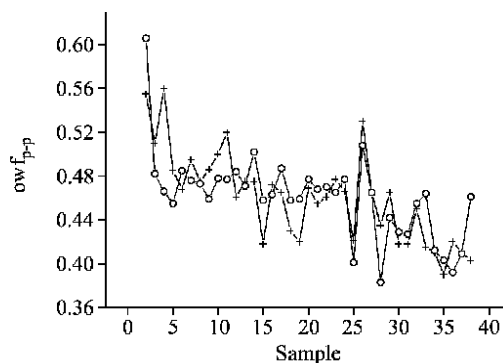


图 1 拟合值  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  与预报值  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Pred.})$  的比较

Figure 1 Comparison of  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$  and  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Pred.})$

+ —  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Cal.})$ ; —  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Pred.})$

将  $\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Pred.})$  代替 ZINDO/S 算法中的  $\text{owf}_{\text{prp}}$  缺省值 0.585,计算化合物的最大吸收波长 (Pred. 1),结果见表 1.为便于比较,表 1 同时列出了用  $\text{owf}_{\text{prp}}$  缺省值直接计算所得化合物最大吸收波长 (Pred. 2).由表 1 结果可得, (Pred. 1), (Pred. 2) 的相对误差绝对值平均分别为 3.8%, 16.3%,与实验值的相关系数分别为 0.84, 0.62.由此可见,计算所得 (Pred. 1) 的结果显著优于 (Pred. 2),它们与实验值 (Exp.) 的对比见图 2.本工作所用 SVR 计算软件为自编的基于 Windows 的应用软件<sup>[17]</sup>,所有计算在 Pentium 型微机上实现.最大吸收波长的实验值和预报值的对比如图 2.

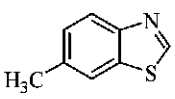
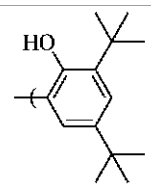
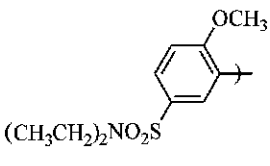
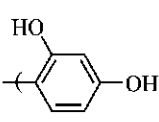
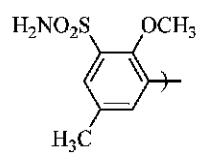
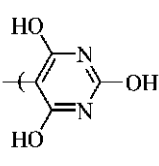
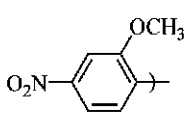
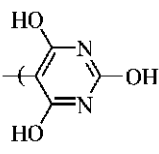
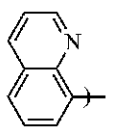
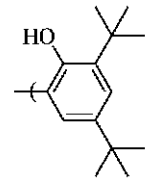
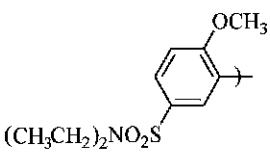
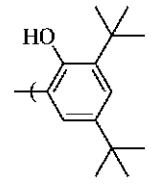
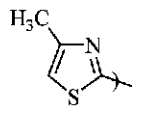
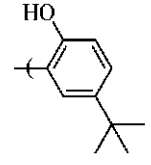
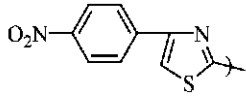
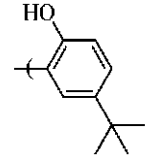
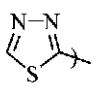
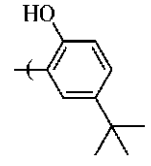
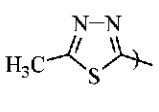
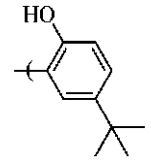
表 1 38 个样本的特征参数及其最大吸收波长的实验值和预报值

Table 1 Features of thirty-eight samples and their experimental and predicted wavelengths of maximum absorption

$$R^1 - N = N - R^2$$

No.	$R^1$	$R^2$	$E(\text{HOMO}) / \text{eV}$	$E(\text{LUMO}) / \text{eV}$	Ratio	$\text{owf}_{\text{prp}}(\text{Pred.})$	(Exp.) <sup>a/</sup> nm	(Pred. 1) <sup>b/</sup> nm	(Pred. 2) <sup>c/</sup> nm
1 <sup>d</sup>			- 8.798	- 1.2	3	0.48	333.4	412.05	354.8
2			- 8.933	- 0.6317	0.75	0.598	335.8	314.3	320.2
3			- 8.734	- 0.8763	1	0.482	391.8	410.4	354.2

续表

No.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	<i>E</i> (HOMO) / eV	<i>E</i> (LUMO) / eV	Ratio	owf <sub>pp</sub> (Pred.)	(Exp.) <sup>a/</sup> nm	(Pred. 1) <sup>b/</sup> nm	(Pred. 2) <sup>c/</sup> nm
4			- 8.948	- 1.408	3	0.473	400.2	456.9	385.8
5			- 9.034	- 1.16	0.6	0.467	405.6	416.2	352.4
6			- 9.433	- 1.365	0.83	0.480	407.6	399.0	342.7
7			- 9.562	- 1.8	0.83	0.479	415.2	428.9	362.1
8			- 8.728	- 1.189	3	0.475	418.4	418.9	358.1
9			- 9.041	- 1.201	0.75	0.467	421.2	435.5	363.1
10			- 9.071	- 1.398	3	0.483	424.6	443.1	382.3
11			- 9.221	- 1.803	1.33	0.476	428.2	462.5	391.9
12			- 9.261	- 1.583	4	0.484	428.6	411.8	357.8
13			- 9.192	- 1.758	4	0.471	429.8	432.0	367.5

续表

No.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	$E(\text{HOMO}) /$ eV	$E(\text{LUMO}) /$ eV	Ratio	$\text{owf}_{\text{PP}}$ (Pred.)	(Exp.) <sup>a/</sup> nm	(Pred. 1) <sup>b/</sup> nm	(Pred. 2) <sup>c/</sup> nm
14			- 9.161	- 1.994	3	0.503	431.6	415.5	376.7
15			- 9.051	- 1.402	1	0.458	439.8	433.1	363.1
16			- 9.167	- 1.71	0.75	0.467	449.8	452.9	376.8
17			- 9.166	- 1.894	1	0.487	452.2	437.4	382.3
18			- 9.055	- 1.474	1	0.456	455.6	434.7	363.3
19			- 8.849	- 1.242	1.33	0.459	458.6	423.6	351.2
20			- 8.971	- 1.377	3	0.451	458.8	472.4	384.8
21			- 9.086	- 1.739	4	0.468	459.2	448.3	375.3
22			- 9.135	- 1.789	4	0.471	459.8	450.1	377.9
23			- 8.987	- 1.595	2.5	0.465	465.6	476.2	398.4

续表

No.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	<i>E</i> (HOMO) / eV	<i>E</i> (LUMO) / eV	Ratio	owf <sub>pp</sub> (Pred.)	(Exp.) <sup>a/</sup> nm	(Pred. 1) <sup>b/</sup> nm	(Pred. 2) <sup>c/</sup> nm
24			- 9.164	- 1.832	1.33	0.480	466	458.4	391.6
25			- 8.441	- 1.037	1	0.403	466.6	481.5	365.3
26			- 9.231	- 2.065	1.5	0.508	469.4	483.3	434.5
27			- 8.878	- 1.839	4	0.465	477.4	477.6	399.9
28			- 8.64	- 1.578	1	0.397	484.6	532.6	372.8
29			- 8.716	- 1.476	3	0.446	491.2	509.6	410.4
30			- 8.765	- 1.253	0.75	0.430	491.8	478.9	373.4
31			- 8.782	- 1.326	0.75	0.429	499.6	488.8	379.0
32			- 8.938	- 1.767	0.75	0.460	500.2	491.0	399.3
33			- 8.403	- 1.109	3	0.461	501.8	460.3	383.4

续表									
No.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	$E(\text{HOMO}) /$ eV	$E(\text{LUMO}) /$ eV	Ratio	$\text{owf}_{\text{pp}}$ (Pred.)	(Exp.) <sup>a</sup> / nm	(Pred. 1) <sup>b</sup> / nm	(Pred. 2) <sup>c</sup> / nm
34			- 8.527	- 1.104	1	0.412	502	500.1	379.4
35			- 8.267	- 1.531	5	0.402	502.6	492.8	381.6
36			- 8.167	- 1.176	4	0.391	504.4	533.2	394.4
37			- 8.45	- 1.289	2	0.408	517.8	521.8	398.2
38			- 9.026	- 1.387	1.25	0.561	525.6	459.7	372.9

<sup>a</sup> (Exp.) 是实验测定的化合物最大吸收波长. <sup>b</sup> (Pred. 1) 是将  $\text{owf}_{\text{pp}}$  (Pred.) 代替 ZINDO/S 算法中的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  缺省值后计算所得最大吸收波长. <sup>c</sup> (Pred. 2) 是用  $\text{owf}_{\text{pp}}$  缺省值直接计算得到化合物最大吸收波长. <sup>d</sup> 变量筛选时,发现样本 1 是很明显的离群点,对计算结果影响较大,因此决定剔除该样本,使之不参与建模.

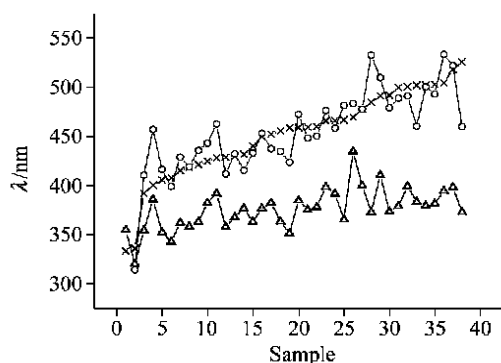


图 2 最大吸收波长的实验值和预报值比较

**Figure 2** Comparison of experimental and predicted maximum absorption wavelength

× — (Exp.); ○ — (Pred. 1); △ — (Pred. 2)

### 3 结果与讨论

在 ZINDO/S 方法中,  $\text{owf}_{\text{pp}}$  的默认值是 0.585, 为经验常

数,应用于一些简单有机体系较为成功,但若不考虑不同结构分子其共轭程度不同,将之用于所有分子中,特别是较复杂的有机分子,理论上不够严谨,计算结果往往也不够理想. 本文将量子化学方法和数据挖掘技术(支持向量机算法)相结合,总结了偶氮染料体系中不同结构分子的  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值与其结构参数的关系,并用留一法较准确地预报了  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值,相对误差绝对值平均为 4.8%,使  $\text{owf}_{\text{pp}}$  值体现了不同分子的结构特点,将此预报值代替 ZINDO/S 中  $\text{owf}_{\text{pp}}$  的默认值(0.585)计算该类染料的最大吸收波长,相对误差绝对值平均为 3.8%,显著优于用  $\text{owf}_{\text{pp}}$  的默认值直接计算最大吸收波长的方法. 本方法解决了采用 ZINDO/S 法时,  $\text{owf}_{\text{pp}}$  默认值未反映不同分子的共轭程度的差别,直接计算最大吸收波长时偏差较大的问题,达到了较准确地预报偶氮染料最大吸收波长的目的. 支持向量机方法属于“机器学习”方法,只要有若干学习样本(某类染料的最大吸收波长的数据),就可以利用支持向量机方法预测该类染料的最大吸收波长. 综上所述,支持向量机算法预报偶氮染料最大吸收波长的方法比较可靠,可以对该类染料分子的设计工作进行指导,并有望推广应用到其它染料分子性能的预报工作中.

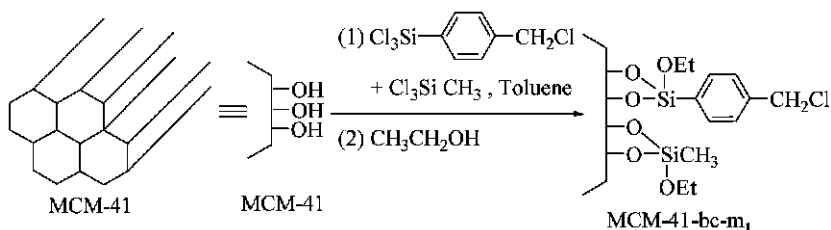
## References and Note

- Hou, Y.-F.; Zhu, Z.-H.; Wang, R.-Z. *Dyestuff Chemistry*, Chemical Industry Press, Beijing, **1994** (in Chinese).  
(侯毓汾, 朱振华, 王任之, 染料化学, 化学工业出版社, 北京, **1994**.)
- Zhang, X.-Y.; Lan, W.; Pan, Y.-S.; Ren, D.-G.; Du, G.-Y.; Duan, Z.-K.; Liu, Z.-C.; Yao, S. *Chem. J. Chin. Univ.* **1999**, 20(2), 268 (in Chinese).  
(张笑一, 兰薇, 潘渝生, 任大恭, 都国友, 段正坤, 刘志春, 姚莎, 高等学校化学学报, **1999**, 20(2), 268.)
- Wang, S.-R.; Li, P.; Wu, Z.-W. *Dyestuff Industry* **1999**, 34(4), 1 (in Chinese).  
(王世荣, 李鹏, 吴祖望, 染料工业, **1999**, 34(4), 1.)
- Lin, T.; Peng, B.-X. *Acta Phys.-Chim. Sin.* **1998**, 14(6), 493 (in Chinese).  
(林童, 彭必先, 物理化学学报, **1998**, 14(6), 493.)
- Wang, X.-J. *Spectrosc. Spect. Anal.* **2002**, 22(1), 9 (in Chinese).  
(王学杰, 光谱学与光谱分析, **2002**, 22(1), 9.)
- Wang, X.-J. *Comput. Appl. Chem.* **2000**, 17(4), 324 (in Chinese).  
(王学杰, 计算机与应用化学, **2000**, 17(4), 324.)
- Cao, Y.; Lü, C.-X.; Zhang, J.-S.; Cai, C.; Zhang, Y.-S.; *Dyestuff Industry* **2002**, 39(5), 16 (in Chinese).  
(曹阳, 吕春绪, 张劲松, 蔡春, 张耀叔, 染料工业, **2002**, 39(5), 16.)
- Cao, Y.; Lü, C.-X.; Cai, C.; Cai, M.-M.; Li, B.-D. *Dyestuff Industry* **2002**, 39(2), 29 (in Chinese).  
(曹阳, 吕春绪, 蔡春, 蔡敏敏, 李斌栋, 染料工业, **2002**, 39(2), 29.)
- Cory, M.; Stavrev, K.; Zerner, M. *Int. J. Quantum Chem.* **1997**, 63(3), 781.
- Vapnik, N. V. *The Nature of Statistical Learning Theory*, Springer, Berlin, **1995**.
- Wan, V.; Campbell, W. M. *Neural Networks for Signal Processing- Proceedings of the IEEE Workshop 2*, Sydney, **2000**, p. 775.
- Thorsten, J. *Ph. D. Dissertation*, Universitaet Dortmund, **2001**.
- Burbidge, R.; Trotter, M.; Buxton, B.; Holden, S. *Comput. Chem.* **2001**, 26(1), 5.
- Trotter, M. W. B.; Buxton, B. F.; Holden, S. B.; *Measurement and Control* **2001**, 34(8), 235.
- Van, G. T.; Suykens, J. A. K.; Baestaens, D. E.; Lambrechts, A.; Lanckriet, G.; Vandaele, B.; De, M. B.; Vandewalle, J. *IEEE Transactions on Neural Networks* **2001**, 12(4), 809.
- Chen, N.-Y.; Lu, W.-C. *Comput. Appl. Chem.* **2002**, 19(6), 673 (in Chinese).  
(陈念贻, 陆文聪, 计算机与应用化学, **2002**, 19(6), 673.)
- Lu, W.-C.; Chen, N.-Y.; Ye, C.-Z.; Li, G.-Z. *Comput. Appl. Chem.* **2002**, 19(6), 697 (in Chinese).  
(陆文聪, 陈念贻, 叶晨州, 李国正, 计算机与应用化学, **2002**, 19(6), 697.)
- Nello, C.; John, S. T. *An Introduction to Support Vector Machines and Other Kernel-based Learning Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, **2000**.
- Release 7.0 for Windows Molecular Modeling System, Hypercube Inc. **2002**.

(A0308079 SHEN, H.; LU, Z. S.)



### Synthesis and Characterization of Chlorobenzyl Functionalized and Chlorobenzyl-methyl Bi-functionalized MCM-41

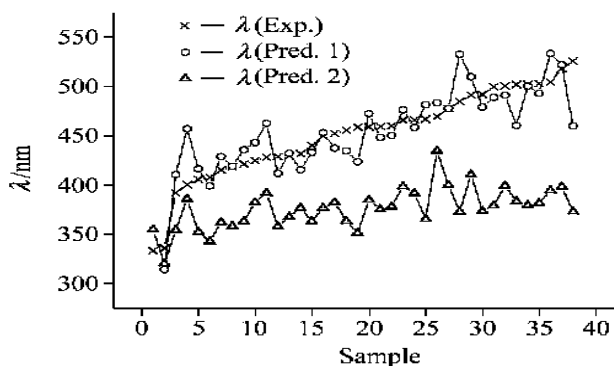


YANG, Heng-Quan; ZHANG, Gao-Yong;  
ZHOU, Mao-Xing; ZHU, Yir-Yan; HONG,  
Xin-Lin

*Acta Chimica Sinica* **2004**, 62 (7), 641

The mixture of  $\text{Cl}_3\text{SiC}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{Cl}$  and  $\text{Cl}_3\text{SiCH}_3$  was used to silylate mesoporous molecular sieves MCM-41, introducing both hydrophobic methyl and chlorobenzyl groups in one pot. As a result, the hydrothermal stability of chlorobenzyl functionalized MCM-41 was improved by introduction of methyl groups and the loading of chlorobenzyl groups was adjustable.

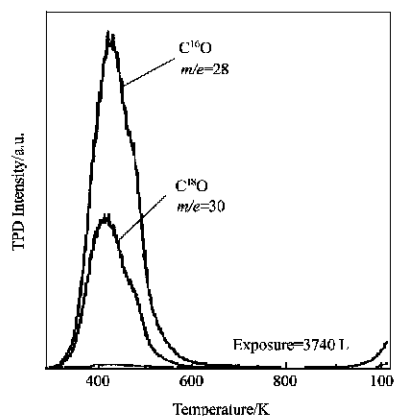
### Support Vector Regression Applied to the Prediction of Maximum Absorption Wavelength of Azo Dye-stuff



ZHAO, Hui; LU, Wen-Cong; SONG, Hai-Feng  
*Acta Chimica Sinica* **2004**, 62 (7), 649

The maximum absorption wavelength of azo dye-stuff molecule is predicted by Support Vector Regression (SVR) combined with ZINDO/S method, with the default  $\text{owf}_{\text{rp}}$  value replaced by the predicted value using SVR. The result shows that (Pred. 1, from this method) is much better than (Pred. 2) only using ZINDO/S method with the default  $\text{owf}_{\text{rp}}$  value.

### Mechanism of Adsorption and Desorption of CO on SrO(001) Surface



WANG, Yang; MENG, Liang

*Acta Chimica Sinica* **2004**, 62 (7), 657

The desorption behaviors of  $\text{C}^{18}\text{O}$  on the particle surface of  $\text{SrO}(001)$  were investigated by the method of Temperature Programmed Desorption (TPD). The mechanism responsible for desorption process and the relationship between adsorption and desorption were discussed.  $\text{C}^{16}\text{O}$  formed due to the exchange of oxygen isotopes and escaped from the surface of  $\text{SrO}$  particles during heating the particles pretreated with the absorption of  $\text{C}^{18}\text{O}$  gas. A small amount of  $\text{C}^{18}\text{O}$  also desorbed from the particle surface and the activation energy of  $\text{C}^{18}\text{O}$  desorption was approximate to that of  $\text{C}^{16}\text{O}$  desorption. With the increasing of the exposure amount of  $\text{C}^{18}\text{O}$  gas, the desorption amount of  $\text{C}^{16}\text{O}$  was increased and the peak desorption temperature was decreased.