



唯实求真
协力创新

最新动态

陈维明 (WM Chen)

上海有机化学研究所



陈维明

1953年1月出生，研究员，课题组长，计算机化学与化学信息学研究室主任

电话：021-54925247

邮箱：chenwm@mail.sioc.ac.cn

主要学习与工作经历

1972.7 -- 1975.8 贵州大学化学系学生

1975.9 -- 1978.9 贵州大学化学系教师

1978.10 -- 1981.12 中国科技大学硕士研究生

1982.1 -- 1991.2 中科院上海有机所

1991.3 -- 1993.10 美国化学文摘社美国欧洲技术研究大学博士研究生

1993.11 -- 中科院上海有机所

主要研究方向：

化学信息学，特别是化学数据处理、分析和应用技术，包括大规模数据采集、分析、加工和内容整合技术，化学数据共享技术，海量数据的结构与性能分析研究等。具体研究内容：

1. 族性化学结构的计算机处理方法研究 - 与确定化学结构 (Specified Structure) 代表一个具体化合物不同，族性化学结构 (Generic Structure/Markush Structure) 代表一组具有某些共同特征的化合物，后者主要用于专利以及化学知识 (如化学反应通式) 的表达。我们以专利文献中的族性结构为对象，从族性结构的基本性质出发，研究化学结构的一般表述方法和处理技术，先后完成一系列技术的研究，将于2007年上半年完成族性结构处理系统的测试版。
2. 化学结构唯一标识和数据整合技术研究 - 过去20多年我们建立了10多个化学数据库数据总记录数已经超过500万条记录。面向应用需求进行大规模数据的整合和集成成为未来几年的重要工作目标。鉴于所有化学数据都与化学物质有关，通过化学结构进行相关化学数据的集成与整合是切实可行的方法，其中的技术关键是化学结构的唯一标识技术。我们完成了相关技术的研究，建立了化学结构登录系统，将在未来两年完成数百万化学结构的登录工作，进一步探索大规模化

学数据的整合和集成技术。

3. 化合物名称自动翻译技术 - 已经有不少化合物名称到结构或结构到化合物名称的商品软件, 但是还未发现有化合物名称中 - 英互译的软件。我们开发了化合物英文名称到中文名称的机器翻译技术和相关知识集, 正在研究基于本体 (Ontology) 的知识表征方法和化合物中译英技术。

4. 结构性能关系方法研究 - 化合物的性质主要依赖于结构组成 (包括立体构型), 在某些场合也与其空间分布 (构象) 有关。目前的结构性能关系研究主要由计算化学家使用统计数学方法根据有限样本找出其规律。我们正在探索结构分析和统计数学相结合的方法, 建立结构性能关系研究的通用技术和方法提供实验化学家使用, 利用化学数据库的大量事实数据根据自己的需要探求结构与性能间的关系。

主要工作成就

1. “科学数据库及信息系统”项目获1997年中国科学院科技进步一等奖。
2. 作为主要技术负责人为美国化学文摘社研制的“算法结构显示软件”, 已用于国际联机检索系统 (STN) (1993年)。
3. 中国科学院科学数据库工程化学结构库1991年通过鉴定和验收, 1994年12月安装于中科院网络中心的计算机上, 提供服务。
4. “CISOC-IR红外光谱综合数据处理系统”项目分别获1991年国家科技进步 二等奖和1988年中国科学院科技进步一等奖。
5. “CISOC-STR化学结构信息处理系统”项目中1988年中国科学院科技进步三等奖。
6. 获国家教委和国务院学位委员会“做出突出贡献的中国硕士学位获得者”称号 (1991年)。

近年发表论文目录 (从95年至今)

1. 陈维明, 徐越华, 秦聿昌, 陈晓东, 郑崇直, 平面上立体化学的表示与计算, 第五届全国计算机化学学术报告会论文集, 1995年, 上海, 49 - 50。
2. 朱翠娣, 陈维明, 秦聿昌, 化学反应数据库的建立和数据转换, 《科学数据库与信息技术论文集》, 中国科学院科学数据库中心编, 中国科学技术出版社, 1996年, 北京, 104 - 112。
3. 陈维明, 徐越华, 秦聿昌, 陈晓东, 郑崇直, 二维结构显示中结构对称性的识别和再现, 《科学数据库与信息技术论文集》, 中国科学院科学数据库中心编, 中国科学技术出版社, 1996年, 北京, 153 - 159。
4. 李航, 陈维明, 王源, 郑崇直, 族性化学结构的计算机处理 - 族性结构文字描述部分的分析与存储, 计算机与应用化学, 13(1996), 257 - 262。
5. Weiming Chen, Chuantao Sun, Chongzhi Zheng, Connection table Representation of Generic Structure Variation, Proceeding of Symposium on Frontiers of Chemistry (in Conjunction with the Second Conference for Worldwide Chinese Young Chemists), 1997, Hongkong, 133-134.
6. 陈维明, 孙传涛, 郑崇直, 基于连接表的族性结构表示和比较方案, 计算机与应用化学, 13增刊 (1997), 159 - 160。
7. 王源, 陈维明, 朱翠娣, 集成型药物数据库的建立, 《科学数据库与信息技术论文集》, 中国科学院科学数据库中心编, 科学出版社, 1998年, 北京, 63 - 67。
8. 陈维明, 孙传涛, 储成桂, 郑崇直, 主要族性结构处理方法的比较, 《科学数据库与信息技术论文集》, 中国科学院科

学数据库中心编, 科学出版社, 1998年, 北京, 137-140。

9. 朱谷, 陈维明, 刘滨, 王源, 基于Web的文献数据库的建立和WWW检索基本功能的实现, 《科学数据库与信息技术论文集》, 中国科学院科学数据库中心编, 科学出版社, 1998年, 北京, 239-243。

10. 陈维明, 王源, 朱谷, 朱翠娣, 郑崇直, SIOC化学数据库的网络化进展, 计算机与应用化学, 16(1999), 355-356。

11. 陈维明, 张伟琪, 秦聿昌, 郑凤翔, 研究所的Extranet网络构造和IP资源管理, 计算机及其网络的应用与发展论文集第三册, 电子工业出版社, 1999年, 7-15 - 7-17。

12. 俞飞白, 程文堂, 袁永文, 陈维明, 孙艳玲, 刘延淮, 族性化学结构信息处理国内外进展简介, 计算机及其网络的应用与发展论文集第四册, 电子工业出版社, 1999年, 11-101 - 11-106。

13. CHEN Weiming, WANG Yuan, ZHU Gu, ZHU Cuidi, ZHENG Chongzhi. Web Based Chemical Databases of SIOC. Pre-Proceeding on International Workshop on Asia Pasific Advanced Network and its Application, 2000, 107-113

14. 陈维明, 孙传涛, 储成桂, 王源, 郑崇直, 药物专利数据库的需求分析和概要设计, 计算机与应用化学, 2000, 17(2), 131-132

15. 秦聿昌, 陈维明, 王源, 论数据库组装, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第五集, 中国科学院科学数据库中心编, 中国科学技术出版社, 2000, 北京, 10-16

16. 陈维明, 孙传涛, 朱翠娣, 王源, 郑崇直, 药物专利化学结构信息的表达和计算机处理, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第五集, 中国科学院科学数据库中心编, 中国科学技术出版社, 2000, 北京, 44-50

17. 朱翠娣, 陈维明, 孙传涛, 郑崇直, 化学结构的芳香键和互变异构现象及其规范化方法, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第五集, 中国科学院科学数据库中心编, 中国科学技术出版社, 2000, 北京, 51-54

18. W. M Chen, Y. Wang, G. Zhu, Web Based Chemical Database of SIOC, Pre-Proceeding on International Workshop on Asia Pacific Advanced Network and Its Application, 2000, 107

19. 徐衍波、孙传涛、朱翠娣、陈维明, 族性化学结构的色性匹配, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第六集, 中国环境科学出版社, 110-114, 2002

20. 陈维明、孙传涛、朱翠娣、郑崇直, 基于弦和路径分析的环系最小环最小集识别方法, 计算机应用化学, 19(1), 107

21. 孙传涛、朱翠娣、陈维明、郑崇直, 确定化学结构索引码的构造, 计算机与应用化学, 19(3), 237-238, 2002

22. 陈维明、孙传涛、朱翠娣、徐衍波, 确定化学结构的微机检索系统, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第六集, 中国环境科学出版社, 99-103, 2002

23. 王源, 陈维明, 论科学数据的交联性, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第六集, 中国环境科学出版社, 23-29, 2002

24. 赵英莉, 王源, 陈维明, 语义互联网的基础-后控词表的研究, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第六集, 中国环境科学出版社, 215-220, 2002

25. 陈维明, 陈湘萍, 罗强, 朱翠娣, 赵英莉, 雷小峰, 徐衍波, 化学结构的表述歧义、规范化方法和数据库集成, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第七集, 中国环境科学出版社, 134-138, 2004

26. 徐衍波, 陈维明, 族性化学结构的比较和检索, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第七集, 中国环境科学出版社, 139-143, 2004

27. 戴静芳, 陈维明, 算法结构显示中的重叠问题及其改进方法, 《科学数据库与信息技术论文集》, 第七集, 中国环境科学出版社, 150-154, 2004

28. 陈湘萍, 陈维明, 朱翠娣, 立体化学在计算机中的识别和表征, 《计算机与应用化学》, 22(1), 62-68, 2005

地址: 上海市枫林路354号 邮编: 200032 电话: (021) 54925000 传真: (021) 64166128