

光谱学与光谱分析

近红外光谱用于盐酸左氧氟沙星针剂的定量分析

宋岩^{1, 2}, 谢云飞¹, 张勇^{3, 4}, 李志士¹, 丛茜³, 赵冰^{1*}

1. 吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室, 吉林 长春 130012
2. 长春中医药大学新药研发中心, 吉林 长春 130117
3. 吉林大学地面机械仿生技术教育部重点实验室, 吉林 长春 130022
4. 吉林工程技术师范学院信息工程学院, 吉林 长春 130052

收稿日期 2008-10-22 修回日期 2009-1-26 网络版发布日期 2009-10-1

摘要 目前常用的盐酸左氧氟沙星注射液含量的测定方法是高效液相色谱法,但此法不能应用于在线分析。文章利用近红外光谱分析技术分别与偏最小二乘(PLS)以及人工神经网络(ANN)的方法相结合,对同一厂家的35个不同批号的针剂样品分别建立了定量校正模型,并对随机抽取的12个样品进行了预测。首先,利用PLS的方法建立模型,得出模型的决定系数(R^2)和预测集样本的标准偏差(RMSEP)分别为0.964和0.242 8,同时利用小波变换技术对光谱变量进行了高效的压缩,并利用了前馈神经网络建立了盐酸左氧氟沙星针剂的定量分析模型,利用该模型所得的 R^2 和RMSEP分别为0.944和0.572 2。文章详细比较了两种方法的建模过程,相关参数选取的优化方法,实验结果令人满意,从比较结果来看,PLS方法略优于ANN方法,可以快速准确的给出该针剂的含量,具有无损,简单,快捷的特点,为近红外光谱技术应用于针剂的定量检测提供了一个新的有效方法。

关键词 [近红外光谱](#) [偏最小二乘](#) [人工神经网络](#) [盐酸左氧氟沙星](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)10-2665-04](#)

通讯作者:

赵冰 zhaobing@jlu.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1266KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“近红外光谱”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [宋岩](#)
- [谢云飞](#)
- [张勇](#)
- [李志士](#)
- [丛茜](#)
- [赵冰](#)