

偏最小二乘法建立血府逐瘀胶囊中芍药苷近红外定量模型

FTIR-052

摘要：采用偏最小二乘法 (PLS) 建立测定血府逐瘀胶囊中芍药苷含量的近红外 (NIR) 光谱定量分析模型。应用多种光谱预处理方法分别对血府逐瘀胶囊固体粉末样品的 NIR 光谱进行预处理，并采用预处理后的光谱建立定量分析模型，结果表明定量分析模型稳健性好和测定精度高，在中药有效成分定量分析方面有很好的应用前景。

关键词：偏最小二乘法 近红外光谱 定量模型

血府逐瘀胶囊由桃仁、红花、赤芍、川芎、枳壳、柴胡等 11 味中药制成，具有活血祛瘀，行气止痛之功效。用于气滞血瘀所致的胸痹、头痛日久、痛如针刺而有定处、内热烦闷、心悸失眠、急躁易怒。

血府逐瘀胶囊中芍药苷的常规测量方法为高效液相色谱法，该方法通常需要经过超声波等方法进行提取，前期预处理非常繁琐、费时。近红外光谱 (NIR) 技术具有方便、快捷、无前期预处理、无污染、无破坏性等众多优点，然而 NIR 光谱有效信息率低，对复杂样品进行 NIR 光谱分析需从复杂、重叠、变动的光谱中提取微弱

信息，非常困难。偏最小二乘法 (PLS) 由于具有较强的提供信息的能力而成为化学计量学中最受推崇的多变量校正方法，目前是最有效的分析方法之一，它从自变量矩阵和因变量矩阵中提取偏最小二成分，有效地降维，并消除自变量间可能存在的复共线关系，明显改善数据结果的可靠性和准确度。

本文采用近红外光谱结合偏最小二乘法建立测定血府逐瘀胶囊中芍药苷含量的定量分析模型具有较高的预测精度，为中药中有效成分含量的测定提供一种新方法。

实验部分

1.1 仪器

岛津 IRTracer-100 傅里叶红外光谱仪

岛津近红外 NIR Kit

PIKE 近红外积分球

1.2 仪器条件及参数

波长范围：3800~12500 cm^{-1}

分辨率：8 cm^{-1}

扫描次数：64

1.3 光谱采集

采用傅里叶变换近红外光谱及近红外积分球采集 13 种不同浓度血府逐瘀胶囊样品的近红外光谱，每个样品取平行样品并扫描 3 次光谱曲线。对采集数据进行多元散射校正、平均值归一化等必要预处理结果见图 1。

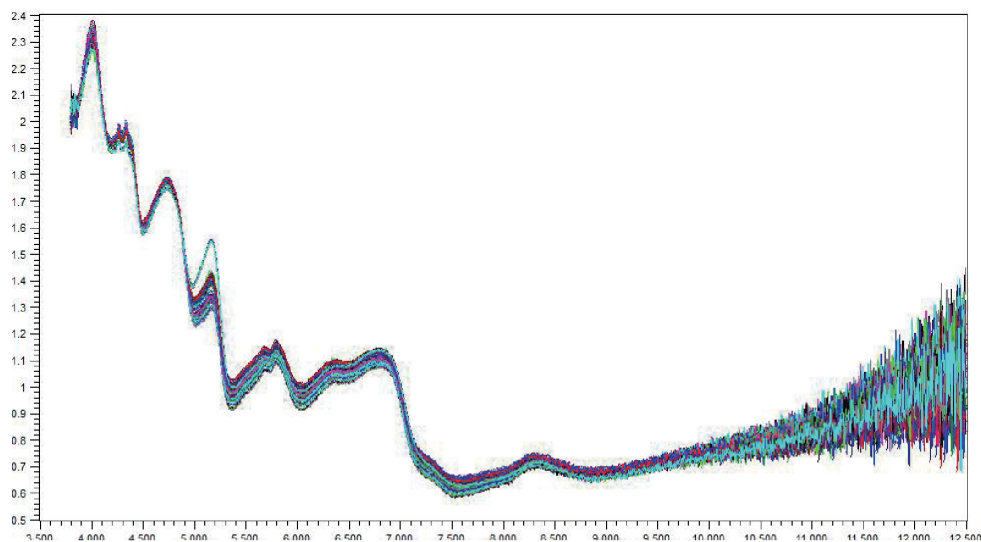


图1 血府逐瘀胶囊样品近红外图谱

■ 结果讨论

2.1 变量选择

从全部数据中通过变量重要性投影 VIP(PLS) 法提取与回归建模属性相关性高，预测能力强的数据特征，简单来说即是从无信息或干扰信息中挑选出对建模有用的信息（变量）。图 2 中共选出 425 个变量（阈值 = 1）。

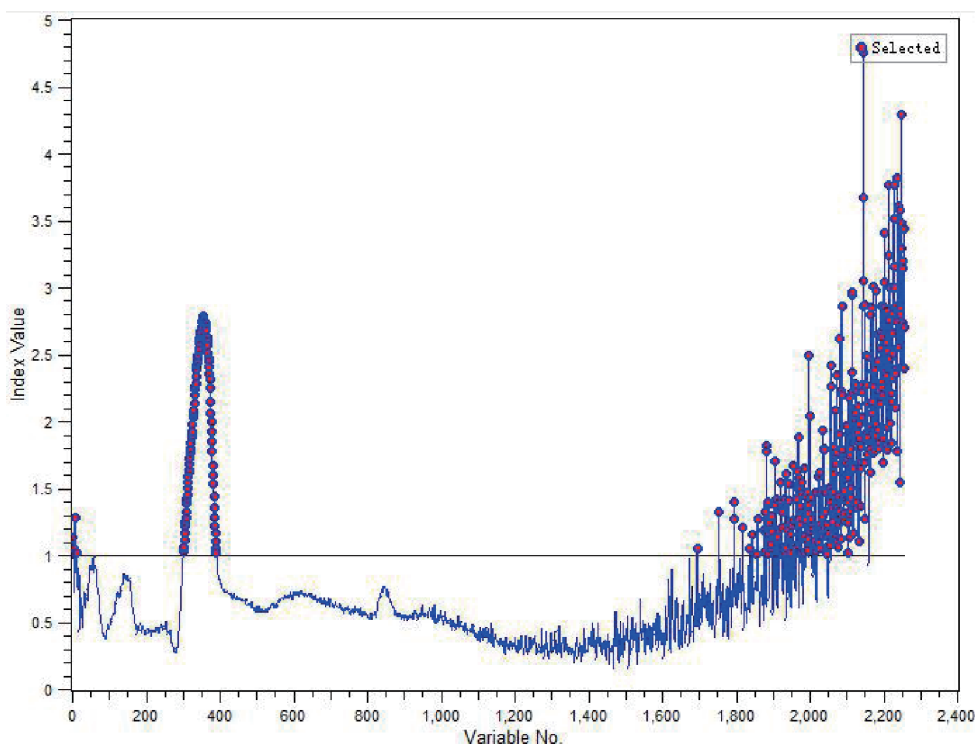


图2 变量选择-VIP(PLS)

2.2 模型优化

选择最大潜在变量 10，自动推荐主成分为 6。其中预测均方根误差 (RMSEP) 最小，说明预测能力较强，相关系数相对较高，说明拟合度较好。

2.3 模型预测

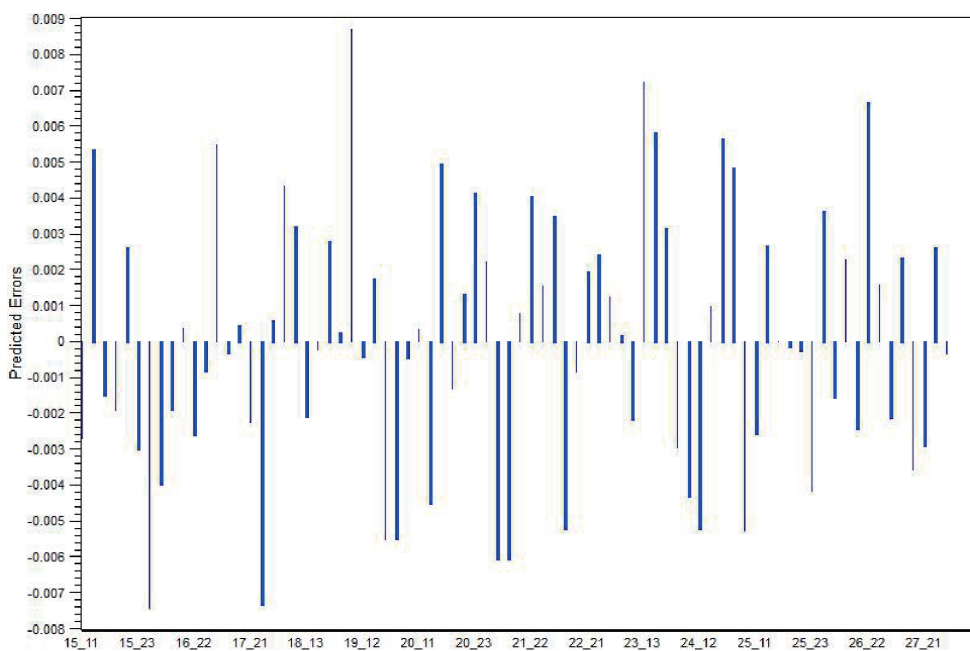


图6 样本预测值偏差

将样本已知数据与预测值进行比对，最大预测偏差 0.0087 mg/ 粒（参考值 0.19 mg/ 粒，预测值 0.1813 mg/ 粒），平均绝对预测误差 0.0029 mg/ 粒。

■ 结论

应用偏最小二乘法 (PLS) 方法结合近红外 (NIR) 光谱建立了测定血府逐瘀胶囊中芍药苷含量的定量分析模型，模型经过校正集样品的内部交互验证和预测集对模型预测能力的检验，选择有效的光谱预处理方法和最适的主因子数，得到最优的定量分析模型。该模型具有较好的稳健性、拟合度和较高的预测精度，可在中药有效成分检测方面推广应用。