

# Excel97 在药物分析中的应用

于广华 朱建华 徐平<sup>1</sup> (盐城 224001 江苏盐城卫生学校;<sup>1</sup> 江苏盐城制药有限公司)

**摘要** 目的:在药物分析中,应用电子表格软件 Microsoft Excel97 for Windows。方法:利用 Excel 的数据处理功能,进行药物分析中的图表绘制、数据计算和统计处理、回归分析,特别是计算分析,并可建立分析数据库。结果和结论:Excel 操作简单,功能强大,数据分析工作直观。

**关键词** Excel;药物分析;应用

## Application of Excel97 in pharmaceutical analysis

Yu Guanghua (Yu GH), Zhu Jianhua (Zhu JH), Xu Ping (Xu P) (Yancheng Health School, Jiangsu Province, Yancheng 224001)

**ABSTRACT** **OBJECTIVE:** To apply Excel97 in pharmaceutical analysis. **METHOD:** Excel97 was used in the pharmaceutical analysis data calculation and statistics, charts drawn, calculation analyses and the data base building with the data processing function. **RESULTS AND CONCLUSION:** The application of Excel97 in pharmaceutical analysis was simple to operate with strong function.

**KEY WORDS** Excel, pharmaceutical analysis, application

电子表格处理系统 Microsoft Excel 97 for Windows (中文版)是具有强大的数据处理、图表绘制、数据库管

理及打印等功能的软件。该系统操作简单,使用方便,并且提供数据的动态显示和报告,数据分析工作非常直观。可广泛应用于药物分析中的图表绘制、数据管理,特别是数据的分析处理。

### 1 基本计算和数据统计

利用 Excel 的计算功能,可进行药物分析的溶液配制、百分含量、滴定度等计算。由于 Excel 可提供动态的数据显示,在重复计算时,只需输入有关数据,Excel 即显示计算结果,大大简化了操作过程。如使用“窗体”工具,创建有关按钮,则可使计算更加直观且简便。

应用 Excel 提供的平均值 AVERAGE、样本标准偏差 STDEV、样本方差 VAR、F 检验 FTEST、T 检验 TTEST、卡方检验 CHITEST 等统计函数或“分析工具库”,能十分方便地统计处理药物分析的数据。

### 2 绘制图表

Excel 可制作各种复杂的图表,图表中的各个对象(坐标轴、曲线等)均可进行编辑加工。如选择“XY 散点图”绘制滴定反应曲线、分光光度法中吸收曲线、测定样品浓度的标准工作曲线等,增加“趋势线”可对曲线拟合,预测曲线趋势。编辑坐标轴,对图表实现对数曲线、半对数曲线转换。绘制的曲线平滑,并能将图形、文字与表格混排,制作出图文并茂的数据分析报告。

### 3 回归分析

回归分析在药物分析中有着广泛的应用,如绘制标准工作曲线常采用一元线性回归,建立经验公式、药物的定量设计、药物分析最佳操作条件的研究常涉及多元线性回归。使用 Excel 的斜率函数 SLOPE、截距函数 INTERCEPT 和相关系数函数 CORREL 直接求得一元线性回归方程,亦可采用回归参数函数 LINEST 计算,使用线性趋势函数 TREND 可根据自变量预测因变量的值,函数 FORECAST 则可预测自变量的值。使用“分析工作库”中的“回归”工具可进行一元或多元线性回归,并能根据汇总输出,检验回归的精度。

### 4 计算分析

多组分药物成分的分析,由于各组分的干扰而使药物成分的测定变得十分困难,运用“数学分离”方法可实现无需分离过程的分光光度法的直接测定,但因为涉及到复杂繁琐的计算过程,未能普遍推广。借助于 Excel 的强大计算功能,使计算变得简单方便,分析测定条件优化,从而在普通分光光度计上实现计算分析。现介绍几种应用。

#### 4.1 系数倍率光度法

对二组分的混合液,在一定波长范围内,以每间隔

1 nm 或 0.5 nm 测出一系列浓度的纯组分溶液的吸收值,绘制吸收曲线,Excel 拖曳计算各个比例系数  $K$ ,并筛选出小于 2 的值(一般比例系数宜小于 2),从吸收曲线上选择  $|\Delta A|$  较大的适宜波长对,此时定量信息  $\Delta A$  仅与其中一个组分的浓度成正比。三组分的混合液,采用类似的原理,根据设定的阈值和有关公式,通过计算和数据筛选,找出最佳波长对,并可计算比例系数,绘制工作曲线,计算样品浓度。如果仅依靠吸收曲线寻找波长对,特别是最佳波长对,则费时费力。

#### 4.2 多波长直线回归

二组分的混合液,预先分别用二个组分的一系列浓度的标准溶液,在同一波长处测定吸收值,将浓度与吸收值进行线性回归,得二个回归方程。将混合溶液的吸收值代入其中,即可得到两个组分的浓度。用函数 TREND 能直接计算出混合液中各组分的浓度。

多波长直线回归过去采用多波长作图法,使用 Excel 绘图代替手工作图并进行回归处理,其数据处理精度远比手工作图法好,且省却了中间过程。该法计算简单,还可以直观地用相关系数、回归标准偏差等来检验可靠性。

#### 4.3 多元线性方程组

含多组分的混合液,根据各单一组分的吸收曲线,在所选择的各个合适波长处,测定一系列标准浓度溶液的吸收值,将吸收值与浓度进行线性回归,建立多元线性回归方程组。测定待测混合液样品在所选各个波长的吸收值,代入方程。采用 Excel 的矩阵行列式函数 MDETERM,或矩阵的乘积函数 MMULT 和矩阵的求逆函数 MINVERSE 求该方程组的解,即为各个组分的浓度。也可以用“规划求解”工具求解,方法是:将其中一个方程作为目标式,其余方程作为约束条件,“规划求解选项”对话框中选中“线性模型”,求解可得各组分的浓度。用工具计算更简便且易操作。

#### 4.4 P-矩阵光度法

P-矩阵光度法的基本原理是将朗伯-比尔定律的矩阵形式看成:

$$C = PA \quad (1)$$

$$P = CA^T(AA^T)^{-1} \quad (2)$$

C 为 M 个样品中的 n 个组分的浓度矩阵,A 为 m 个波长下测得的吸收值矩阵,P 为比例系数矩阵。该法特别适用于手动紫外-可见分光光度计对多组分混合物的分析。

Excel 的计算方法为:将各组分标准液的一系列浓度值及其在所选的不同波长下测定的吸收值数据按行列形式输入到工作表中,分别看成浓度矩阵 C 和吸收值矩阵 A(如考虑非零截距,则矩阵 A 中可增加末行

“1”) ,并定义两个数据区域数组名各为 C、A。复制吸收值(A)数据,并选择性粘贴(转置),形成转置矩阵  $A^T$ 。根据矩阵的运算法则,积的矩阵如  $CA^T$  和  $AA^T$ ,用矩阵的乘积函数 MMULT 计算;逆矩阵  $(AA^T)^{-1}$ ,函数 MINVERSE 计算;也可用函数 TRANSPOSE 求转置矩阵  $A^T$ 。如输入公式:“=MMULT{MMULT[C,TRANSPOSE(A),MINVERSE(MMULT(A,TRANSPOSE(A))]}”后,按 Shift + Ctrl + Enter 键,即可求出比例系数矩阵 P,并定义数组名为 P。由样品混合液测定的吸收值和矩阵 P,用函数 MMULT 按式(1)计算得各个组分的浓度。

数据处理过程中,如觉得该计算过程繁琐,可运用 Excel“宏”功能,将操作中的一系列过程记录下来,以便作为程序多次调用,从而避免频繁的操作。

Excel 还具有数据排序、检索、汇总等数据管理功能,利用这些功能进行数据的组织管理,建立药物分析的数据库。利用 Excel 提供的 VBA 语言编程,能够开发出适用范围更广、更加有效的药物分析专用软件,并可以方便地定义软件中的菜单行、菜单、命令与工具栏。

收稿日期:1998 - 06 - 29