

Abstrakt

Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra biofyziky a fyzikální chemie

Kandidát: Iveta Voborníková

Vedoucí diplomové práce: doc. Dipl.-Math. Erik Jurjen Duintjer Tebbens, Ph.D.

Název diplomové práce: Maticové výpočty pro roztoky a směsi vícesložkové

V této práci jsme stanovili koncentrace léčiv ze směsí pomocí multikomponentní analýzy, aniž bychom je od sebe oddělili. Podmínkou byla znalost molárních absorpčních koeficientů jednotlivých léčiv při určitých vlnových délkách. K tomu jsme použili nástroje z maticových výpočtů, zejména Moore-Penroseovu inverzi, a zajímalo nás, zda dosáhneme přesnějších výsledků s využitím přesně určených systémů nebo přeurených systémů lineárních rovnic.

Na základě zjištěných výsledků jsme došli k závěru, že neexistuje závislost mezi přesností výsledků a využitým počtem vlnových délek. Pouze v některých případech se jevílo přesnější dosažení výsledků při použití přeurených systémů s vyšším počtem vlnových délek.

Klíčová slova: směsi, roztoky, lineární soustavy, problémy nejmenších čtverců, Moore-Penroseova pseudoinverze