

UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE  
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ  
KATEDRA BIOFYZIKY A FYZIKÁLNÍ CHEMIE

## DIPLOMOVÁ PRÁCE

# MATICOVÉ VÝPOČTY PRO ROZTOKY A SMĚSI VÍCESLOŽKOVÉ



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

HRADEC KRÁLOVÉ, 2021

Iveta Voborníková

„Prohlašuji, že tato práce je mým původním autorským dílem, které jsem vypracovala samostatně pod vedením doc. Dipl.-Math. Erika Jurjen Duintjer Tebbense, Ph.D.. Všecká literatura a další zdroje, z nichž jsem při zpracování čerpala, jsou uvedeny v seznamu použité literatury a v práci řádně citovány. Práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.“

V Hradci Králové dne

Iveta Voborníková

Chtěla bych poděkovat vedoucímu diplomové práce panu doc. Dipl.-Math. Eriku Jurjen Duintjer Tebbensovi, Ph.D. za vedení, cenné poznámky, odborné připomínky, podněty a věnovaný čas.

Dále bych chtěla poděkovat Ing. Vladimíru Kubíčkovi, CSc. za odborné vedení, pomoc a rady při zpracování experimentální části této práce.

# 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

# Abstract

Charles University in Prague, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové

Department of Biophysics and Physical Chemistry

Candidate: Iveta Voborníková

Thesis supervisor: doc. Dipl.-Math. Erik Jurjen Duintjer Tebbens, Ph.D.

Title of diploma thesis: Matrix computations for mixtures and solutions

In this work, we determined drug concentrations from mixtures using multicomponent analysis without separating them. The condition was the knowledge of the molar absorption coefficients of individual drugs for certain wavelengths. To do this, we used tools from matrix calculations, especially the Moore-Penrose inverse, and we were interested in whether we would achieve more accurate results using standard, square systems or overdetermined systems of linear equations.

Based on the results, we came to the conclusion that there is no dependence between the accuracy of the results and the number of wavelengths used. Only in some cases did the results appear to be more accurate when using overdetermined systems with a higher number of wavelengths.

Keywords: mixtures, solutions, linear systems, least squares problems, Moore-Penrose pseudoinverses

# Obsah

Seznam použitých znaků	8
Seznam použitých zkratek	9
Úvod	10
<b>1 Základní maticové operace</b>	<b>12</b>
1.1 Základní pojmy	12
1.1.1 Matice	12
1.1.2 Čtvercová matice	12
1.1.3 Nulová matice	12
1.1.4 Diagonální matice	12
1.1.5 Trojúhelníková matice	13
1.1.6 Transponovaná matice	13
1.1.7 Symetrická matice	13
1.2 Základní operace s maticemi	13
1.2.1 Součet (rozdíl) matic	14
1.2.2 Násobení matic číslem	14
1.2.3 Součin matic	14
1.3 Jednotková a inverzní matice	15
1.4 Vektory	21
1.4.1 Nulový vektor	21
1.4.2 Součet vektorů	22
1.4.3 Délka vektorů	22
1.4.4 Skalární součin	22
<b>2 Řešení soustavy lineárních rovnic</b>	<b>24</b>
2.1 Řešení soustavy lineárních rovnic pomocí inverzní matice	24
2.2 Řešení soustavy rovnic s více rovnicemi než proměnnými	25
<b>3 Ultrafialová a viditelná spektroskopie</b>	<b>31</b>
3.1 Základní vztahy	31
3.2 Multikomponentní analýza	32
3.2.1 Přesně určené systémy	33
3.2.2 Přeurčené systémy	33
3.2.3 Citlivost systému lineárních rovnic vůči nepřesnostem vstupních dat	36
<b>4 Experimentální část</b>	<b>38</b>
4.1 Přístroje a léčiva	38
4.1.1 Použité přístroje	38
4.1.2 Použitá léčiva	38
4.1.3 Použitá rozpouštědla	38
4.2 Pracovní postup	38

4.2.1	Příprava roztoků léčiv . . . . .	38
4.2.2	Měření spekter zásobních roztoků léčiv . . . . .	39
4.2.3	Výpočet molárních absorpčních koeficientů . . . . .	40
4.2.4	Příprava vícesložkových roztoků léčiv . . . . .	42
4.2.5	Dopočet výsledných koncentrací v kyvetě pro směsi léčiv . . . . .	43
4.2.6	Odečtené hodnoty absorbancí vícesložkových roztoků při stanovených vlnových délkách . . . . .	44
4.2.7	Výpočet relativní chyby poměru . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Přehled výsledků</b>	<b>47</b>
5.1	Ukázkový výpočet dvousložkové směsi fenacetin - triclosan pro plánovaný poměr 1:1 . . . . .	47
5.2	Výsledky dvousložkových směsí . . . . .	49
5.2.1	Směs fenacetin - triclosan . . . . .	49
5.2.2	Směs kodein - pitofenon . . . . .	52
5.2.3	Směs diazepam - triclosan . . . . .	55
5.3	Výsledky tříložkových soustav . . . . .	58
5.3.1	Směs fenacetin - metamizol - kodein . . . . .	58
5.3.2	Směs diazepam - triclosan - pitofenon . . . . .	62
	<b>Závěr</b>	<b>66</b>
	<b>Literatura</b>	<b>68</b>
	<b>Seznam obrázků</b>	<b>70</b>
	<b>Seznam tabulek</b>	<b>71</b>

# Seznam použitých znaků

$\kappa$	číslo podmíněnosti
$\ v\ $	délka vektorů
$\det(\mathbf{A})$	determinant matice $\mathbf{A}$
$\oplus$	direktní suma
$\Leftrightarrow$	ekvivalence; právě tehdy, když
$\mathbf{A}^{-1}$	inverzní matice k matici $\mathbf{A}$
$N(\mathbf{A})$	jádro matice $\mathbf{A}$
$\mathbf{I}, \mathbf{I}_n$	jednotková matice, jednotková matice $n$ -tého řádu
$\equiv$	je definován jako
$<$	je menší
$\approx$	je přibližně rovno; je aproximováno
$>$	je větší
$\perp$	kolmý k
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{P}$	matice
$\mathbf{A}_n$	matice $n$ -tého řádu
$\mathbf{A}^T$	matice transponovaná k matici $\mathbf{A}$
$\ \mathbf{A}\ $	maticová norma
$\leq$	menší nebo roven
$\mathbb{C}$	množina komplexních čísel
$\mathbb{R}$	množina reálných čísel
$\varepsilon$	molární absorpční koeficient
$\mathbf{A}^\dagger$	Moore-Penroseova pseudoinverze
$\in$	náležet, být prvkem
$\neq$	nerovná se
$R(\mathbf{A})$	obor hodnot matice $\mathbf{A}$
$Y^\perp$	ortogonální doplněk prostoru $Y$
$d _{R(\mathbf{A})}$	ortogonální projekce vektoru $d$ v $R(\mathbf{A})$
$\partial$	parciální derivace
$\pm$	plus-minus
$\emptyset$	prázdná množina
$a_{i,j}$	prvek matice v $i$ -tém řádku a $j$ -tém sloupci
$\phi_0$	původní zářivý tok
$\sum_{j=1}^n$	součet řady; součet přes $j$ od 1 do $n$
$m \cdot n$	typ matice - $m$ řádků a $n$ sloupců
$\alpha$	úhel mezi vektory
$\delta$	velikost chyby měření
$\lambda$	vlnová délka
$\phi$	zářivý tok, který prošel kyvetou



# Seznam použitých zkratek

D	diazepam
F	fenacetin
K	kodein
M	metamizol
P	pitofenon
RCHP	relativní chyba poměru
RP	reálný poměr
T	triclosan
UV	ultrafialová oblast záření
VIS	viditelná oblast záření
VP	vypočítaný poměr

# Úvod

Multikomponentní analýza je spektrofotometrická metoda, kterou využijeme v případě, pokud chceme stanovit koncentrace více látek ze vzorku, aniž bychom je od sebe dopředu oddělili. Předpokladem je znalost jednotlivých složek vzorků a jejich molárních absorpčních koeficientů při zvolených vlnových délkách pro všechny složky roztoku. V mnoha případech se tak může jednat o jednodušší způsob analýzy vzorku. Multikomponentní analýza byla již testována například na stanovení koncentrací barviv ve směsích, viz [11] a [17]. Ve farmacii bychom tuto metodu mohli využít například při stanovení koncentrací léčiv ve vícesložkovém přípravku nebo například pro identifikaci vzorku na základě zjištění poměrů složek. Při multikomponentní analýze vznikají přesně určené nebo přeurčené systémy lineárních rovnic.

Řešíme-li soustavu lineárních rovnic se stejným počtem rovnic jako neznámých a vzniklá matice je regulární, pak má tato soustava jediné správné řešení. Pokud takovou soustavu aplikujeme v multikomponentní analýze, předpokládáme, že jsme našli správné řešení hledaných koncentrací. Pokud ale sestavíme soustavu při použití jiných vlnových délek, předpokládáme, že kvůli nepřesnostem v měření nikdy nedosáhneme naprosto shodných hodnot hledaných koncentrací. Můžeme proto dospět k závěru, že i přesto, že rovnice poskytuje správné řešení, každé řešení se liší v závislosti na tom, za jakých vlnových délek jsme měření provedli, i přesto, že hledáme jedinou správnou hodnotu koncentrací složek ve směsích.

Řešíme-li soustavu lineárních rovnic s více rovnicemi, než je počet neznámých, nelze obvykle nalézt jediné přesné řešení. Hledáme proto řešení, které se nejvíce přibližuje přesnému řešení. Pokud tuto soustavu aplikujeme v multikomponentní analýze, měli bychom s nějakou odchylkou nalézt hodnoty, které se přibližují skutečným koncentracím v roztoku. Opět kvůli nepřesnostem v měření pravděpodobně zjistíme, že při použití různých kombinací vlnových délek nalezneme různá řešení.

Podle matematického modelu bychom očekávali, že bude výhodnější stanovení koncentrací složek v roztoku pomocí lineárních soustav se stejným počtem rovnic jako neznámých. Obecným pohledem naopak předpokládáme, že výhodnější se bude jevit stanovení při větším počtu měření, tedy při využití systému lineárních rovnic s více rovnicemi, než je počet neznámých. Tyto hypotézy zkusíme dokázat, případně vyvrátit, provedeným měřením.

V první kapitole si vysvětlíme základní pojmy týkající se matic a základní maticové operace. Uvedeme pojmy jako čtvercová matice, diagonální matice, transponovaná matice. Vysvětlíme si součet (rozdíl) matic a součin matic. Další podkapitolu věnujeme jednotkové a inverzní matici, kde zmíníme pojem determinant matice a ukážeme si, co platí pro inverzní matice. Poslední podkapitolu věnujeme vektorům. Kromě definice vektoru si představíme základní operace s vektory - součet vektorů a skalární součin vektorů. Ukážeme si, jak vypočítat délku vektorů.

Ve druhé kapitole se budeme zabírat řešením soustavy lineárních rovnic. V první podkapitole budeme řešit soustavu lineárních rovnic pomocí inverzní matice za podmínky, že máme stejný počet rovnic jako neznámých. Druhá podkapitola se bude věnovat případu, kdy řešíme soustavu rovnic s více rovnicemi, než je počet neznámých. Tuto situaci budeme řešit metodou nejmenších čtverců. Vysvětlíme si pojmy jako obor

hodnot matice, jádro matice, ortogonální doplněk, ortogonální projekce.

Třetí kapitola představuje téma ultrafialová a viditelná spektrofotometrie. V první podkapitole si vysvětlíme princip této metody a uvedeme základní pojmy jako absorpance, transmitance, Lambert-Beerův zákon. Další podkapitolu věnujeme multikomponentní analýze. V multikomponentní analýze využijeme buď přesně určené systémy lineárních rovnic, nebo přeuračené systémy s řešením pomocí problému nejmenších čtverců. Ukážeme si možnost řešení problému nejmenších čtverců pomocí parciální derivace a dokážeme, že toto řešení je ekvivalentní k řešení pomocí matic. Navíc ukážeme, že z maticového pohledu bychom očekávali, že lineární soustavy se čtvercovými maticemi jsou méně citlivé vůči chybám měření, než odpovídající problémy nejmenších čtverců.

Čtvrtou kapitolu zasvětime experimentální práci. Uvedeme si použitá léčiva i přístroje a popíšeme si pracovní postup. Ukážeme si, jaké směsi léčiv jsme použili pro stanovení koncentrací pomocí multikomponentní analýzy, výpočet a přehled jejich molárních absorpčních koeficientů a dále přehled naměřených absorbancí jednotlivých směsí.

Pátá kapitola se týká přehledu výsledků. V první podkapitole předvedeme vzorový výpočet dvousložkové směsi. Druhá podkapitola se týká výsledků dvousložkových směsí a třetí podkapitola výsledků tříložkových směsí.

Na závěr uvádíme původní zadání práce: Výpočet koncentrací a hmotností látky ve směsích nebo roztocích vede k systému s několika lineárními rovnicemi. V závislosti na počtu neznámých systém může být buď řešitelný jednoznačně, neřešitelný nebo může mít nekonečně mnoho řešení. Diplomová práce bude matematicky analyzovat tyto rozdílné případy, poukazovat na jejich vztah k fyzickému problému a pak se bude soustředit na situaci s více rovnic než proměnných. V tomto případě Moore-Penroseové inverzní matice mohou být využity pro řešení vzniklých lineárních soustav. Toto bude ilustrováno pomocí výsledků měření získaných v laboratoři.

# 1. Základní maticové operace

## 1.1 Základní pojmy

K vypracování této podkapitoly byly použity zdroje [1], [2], [12], [18] a [29].

### 1.1.1 Matice

*Maticí typu  $(m, n)$*  rozumíme soustavu  $m \cdot n$  čísel uspořádaných do  $m$  řádků a  $n$  sloupců:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \dots & a_{m,n} \end{bmatrix}.$$

Čísla  $a_{i,j}$  nazýváme prvky matice, kde  $i$  značí řádky a  $j$  sloupce. Jsou-li prvky matice reálná čísla, hovoříme o reálné matici a množinu reálných matic typu  $(m, n)$  označíme  $\mathbb{R}^{m \times n}$ . Jsou-li prvky matice komplexní čísla, nazýváme matici komplexní a množinu komplexních matic typu  $(m, n)$  označíme  $\mathbb{C}^{m \times n}$ . Matice označujeme velkými tučnými písmeny, např.  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{P}$  apod.

### 1.1.2 Čtvercová matice

*Čtvercovou maticí* rozumíme matici, kdy  $m = n$ , tedy matici o stejném počtu řádků jako sloupců. Jedná se o matici *řádu*  $n$ . Například čtvercová matice řádu tři může vypadat takto:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}.$$

### 1.1.3 Nulová matice

*Nulovou maticí* rozumíme matici libovolného typu, jejíž všechny prvky jsou rovny nule. Značí se  $\mathbf{0}$ . Například nulová matice třetího řádu vypadá takto:

$$\mathbf{0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

### 1.1.4 Diagonální matice

*Diagonální maticí* se nazývá čtvercová nebo obdélníková matice, jejíž prvky v hlavní diagonále (hlavní diagonálou rozumíme prvky  $a_{i,j}$ , kde  $i = j$ ) nejsou všechny nulové, ale všechny prvky, které neleží v hlavní diagonále jsou nuly. Zde uvedeme příklad diagonální

matice  $\mathbf{D}$  typu (3,4):

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}.$$

### 1.1.5 Trojúhelníková matice

Rozlišujeme matici *horní trojúhelníkovou* - jedná se o matici, která má pod hlavní diagonálou samé nuly a *dolní trojúhelníkovou* - jedná se o matici, která má nad hlavní diagonálou samé nuly. Zde uvedeme příklad horní trojúhelníkové matice typu (3,4):

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 5 & -6 \\ 0 & 0 & 2 & 8 \end{bmatrix}.$$

### 1.1.6 Transponovaná matice

Matice transponovaná  $\mathbf{A}^T$  je čtvercová nebo obdélníková matice, která vznikne z matice  $\mathbf{A}$  záměnou řádků za sloupce při zachování pořadí. Tato operace se nazývá transpozice. Platí, že pokud  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , pak  $\mathbf{A}^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$ . Zde je příklad matice  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & 0 \\ 3 & 1 & 5 & -8 \\ 7 & 0 & 4 & -4 \end{bmatrix}.$$

K matici  $\mathbf{A}$  je matice transponovaná dána

$$\mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 7 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 5 & 4 \\ 0 & -8 & -4 \end{bmatrix}.$$

### 1.1.7 Symetrická matice

*Symetrickou maticí* se nazývá čtvercová matice  $n$ -tého řádu, pro kterou platí  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ , tj. pro její prvky platí  $a_{i,j} = a_{j,i}$  pro všechna  $i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, n$ . Symetrickou maticí třetího řádu je například matice  $\mathbf{A}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 3 & 2 & 5 \\ -2 & 5 & 0 \end{bmatrix}.$$

## 1.2 Základní operace s maticemi

K vypracování této podkapitoly byly použity zdroje [2], [12] a [29].

### 1.2.1 Součet (rozdíl) matic

Jsou-li matice  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$  stejného typu  $(m, n)$ , pak jejich součet (rozdíl) je matice  $\mathbf{C}$  stejného typu  $(m, n)$ , pro kterou platí

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} \pm \mathbf{B} \Leftrightarrow c_{i,j} = a_{i,j} \pm b_{i,j} \quad \text{pro} \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

**Příklad 1.2.1.** Je-li

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 8 & 1 \\ 4 & 0 & -2 \\ 4 & 2 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 7 \\ -3 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{bmatrix},$$

potom součet matic  $\mathbf{A} + \mathbf{B}$  je výsledná matice  $\mathbf{C}$ , kdy

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 10 & 8 \\ 1 & 1 & -1 \\ 7 & 5 & 1 \end{bmatrix}.$$

### 1.2.2 Násobení matic číslem

Při násobení matic číslem každý prvek  $a_{i,j}$ , kde  $i = 1, 2, \dots, m$  a  $j = 1, 2, \dots, n$ , libovolné matice  $\mathbf{A}$  typu  $(m, n)$  vynásobíme číslem  $r$  ( $r$  je reálné nebo komplexní číslo) a získáme  $r$ - násobek matice  $\mathbf{A}$ .

**Příklad 1.2.2.** Například vynásobíme matici  $\mathbf{A}$  číslem 3, kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}.$$

Trojnásobkem matice  $\mathbf{A}$  je

$$3 \cdot \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 6 & 9 \\ 12 & 15 & 18 \\ 21 & 24 & 27 \end{bmatrix}.$$

### 1.2.3 Součin matic

Součin matic  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  lze definovat pouze v případě, kdy počet sloupců matice  $\mathbf{A}$  se rovná počtu řádků matice  $\mathbf{B}$ . Máme-li matici  $\mathbf{A}$  typu  $(m, p)$ , matice  $\mathbf{B}$  musí být typu  $(p, n)$  pro libovolné přirozené číslo  $n$ . Výsledná matice  $\mathbf{C}$  je typu  $(m, n)$ . Součin matic není kumulativní. Pokud je definován součin matic  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ , nemusí být definován součin matic  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$ . I v případě, pokud je součin matic  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$  definován, ve většině případů platí, že  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \neq \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$ . Vztah  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$  platí například v případě, kdy jedna z matic je jednotková.

**Vzorec 1.2.3.** Prvek  $c_{i,j}$  výsledné matice  $\mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  je definován jako

$$c_{i,j} = \sum_{k=1}^p a_{i,k} b_{k,j}.$$

**Příklad 1.2.4.** Jako příklad uvedeme součin matic  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix}.$$

Poté

$$\begin{aligned} c_{1,1} &= a_{1,1} \cdot b_{1,1} + a_{1,2} \cdot b_{2,1} = 1 \cdot 5 + 2 \cdot 7 = 19, \\ c_{1,2} &= a_{1,1} \cdot b_{1,2} + a_{1,2} \cdot b_{2,2} = 1 \cdot 6 + 2 \cdot 8 = 22, \\ c_{2,1} &= a_{2,1} \cdot b_{1,1} + a_{2,2} \cdot b_{2,1} = 3 \cdot 5 + 4 \cdot 7 = 43, \\ c_{2,2} &= a_{2,1} \cdot b_{1,2} + a_{2,2} \cdot b_{2,2} = 3 \cdot 6 + 4 \cdot 8 = 50. \end{aligned}$$

Výsledkem je matice  $\mathbf{C}$ , kde

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 19 & 22 \\ 43 & 50 \end{bmatrix}.$$

### 1.3 Jednotková a inverzní matice

K vypracování této podkapitoly byly použity zdroje [2], [3], [4], [12], [25] a [27].

*Jednotkovou maticí* se nazývá čtvercová matice, která má v hlavní diagonále všechny prvky rovny jedné a všechny ostatní prvky jsou rovny nule. Jednotkové matice značíme  $\mathbf{I}$ . Definující vlastností jednotkové matice řádu  $n$  je

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{I}_n = \mathbf{A} \quad \text{a} \quad \mathbf{I}_n \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B}, \quad \text{pro} \quad \mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times n} \quad \text{a} \quad \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times k}.$$

Například jednotková matice třetího řádu vypadá takto:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

*Inverzní matice* dané čtvercové matice  $\mathbf{A}$  je čtvercová matice, která při součinu s původní maticí dá matici jednotkovou stejného řádu. Inverzní matici značíme  $\mathbf{A}^{-1}$ .

Obecně platí pro inverzní matici, že

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I}.$$

Inverzní matice  $\mathbf{A}^{-1}$  je tedy řešením maticové rovnice  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{I}$  i rovnice  $\mathbf{X} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I}$ . Inverzní matice dané matice existuje pouze tehdy, pokud determinant původní matice je různý od nuly. Matici, jejíž determinant je různý od nuly, nazýváme *regulární maticí*.

**Definice 1.3.1** (Definice determinantu). *Determinant pro matici druhého řádu  $\mathbf{A}$  s prvky*

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

*je definován jako*

$$\det(\mathbf{A}) = ad - bc.$$

Pro determinant matic vyššího řádu odkážeme na <http://artemis.osu.cz/mmmat/txt/la/mde.htm>.

**Vzorec 1.3.2.** *Inverzní matice pro matici druhého řádu  $\mathbf{A}$  s prvky*

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

*je definována jako*

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}, \quad \text{pokud } \det(\mathbf{A}) \neq 0.$$

**Příklad 1.3.3.** Jako příklad použití vzorce 1.3.2 uvedeme výpočet inverzní matice k matici  $\mathbf{A}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}.$$

Determinant je podle definice determinantu 1.3.1 dán jako

$$\det(\mathbf{A}) = 8 \cdot 3 - 4 \cdot 4 = 8.$$

Inverzní matice je podle 1.3.2 dána jako

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{8 \cdot 3 - 4 \cdot 4} \cdot \begin{bmatrix} 3 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{8} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}.$$

Pro ověření správnosti výpočtu vypočítáme

$$\begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{3}{8} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Zde jsme vypočetli inverzní matici k matici, jejíž determinant je různý od nuly. Zkusíme si totéž s maticí, jejíž determinant je roven 0. Máme matici  $\mathbf{A}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 5 & 4 \end{bmatrix}.$$

Podle definice determinantu 1.3.1 je

$$\det(\mathbf{A}) = 5 \cdot 4 - 4 \cdot 5 = 20 - 20 = 0.$$

V následujícím výpočtu se do jmenovatele dostane 0, a proto výsledek nelze vypočítat. Tedy

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{0} \cdot \begin{bmatrix} 4 & -4 \\ -5 & 5 \end{bmatrix} = \emptyset.$$



**Tvrzení 1.3.4.** *Ke každé regulární matici existuje právě jedna inverzní matice.*

D ů k a z: Důkaz provedeme sporem. Předpokládejme, že k matici  $\mathbf{A}$  existují dvě inverzní matice  $\mathbf{A}_1^{-1}$  a  $\mathbf{A}_2^{-1}$ , kdy  $\mathbf{A}_1^{-1} \neq \mathbf{A}_2^{-1}$ . Pro  $\mathbf{A}_1^{-1}$  a  $\mathbf{A}_2^{-1}$  musí platit

$$\mathbf{A}_1^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I}$$

a zároveň

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}_2^{-1} = \mathbf{I}.$$

Odtud

$$\mathbf{A}_1^{-1} = \mathbf{A}_1^{-1} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{A}_1^{-1} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}_2^{-1}) = (\mathbf{A}_1^{-1} \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{A}_2^{-1} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{A}_2^{-1} = \mathbf{A}_2^{-1}.$$

Jde tedy o spor oproti původnímu předpokladu.

□

**Tvrzení 1.3.5.** *Inverzní maticí jednotkové matice je matice jednotková, tedy*

$$\mathbf{I}^{-1} = \mathbf{I},$$

D ů k a z:

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{I}.$$

□

**Příklad 1.3.6.** Jako další použití vzorce 1.3.2 uvedeme výpočet inverzní matice jednotkové matice druhého řádu, kde

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Determinant podle definice determinantu 1.3.1 je dán jako

$$\det(\mathbf{A}) = 1 \cdot 1 - 0 \cdot 0 = 1.$$

Podle vzorce pro výpočet inverzní matice 1.3.2 získáme

$$\mathbf{I}^{-1} = \frac{1}{1} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = 1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

**Tvrzení 1.3.7.** *Inverzní maticí inverzní matice  $\mathbf{A}$  je matice  $\mathbf{A}$ . Tedy*

$$(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}.$$

D ů k a z:

$$\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I}.$$

□

**Příklad 1.3.8.** Pro uvedení příkladu použijeme již dříve vypočtenou inverzní matici  $\mathbf{A}^{-1}$  matice  $\mathbf{A}$ , viz. příklad 1.3.3. Máme tedy matici  $\mathbf{A}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}.$$

Inverzní matice  $\mathbf{A}^{-1}$  je

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{3}{8} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}.$$

Podle definice determinantu 1.3.1 vypočteme determinant inverzní matice  $\mathbf{A}^{-1}$ , kde

$$\det(\mathbf{A}) = \frac{3}{8} \cdot 1 - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{8}.$$

Podle vzorce inverzní matice 1.3.2 vypočteme inverzní matici inverzní matice, tedy

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\frac{1}{8}} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{8} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix},$$

což je původní matice  $\mathbf{A}$ .

**Tvrzení 1.3.9.** Pro čtvercové regulární matice  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$  stejného řádu platí

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}.$$

D ů k a z:

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}) = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^{-1}) \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}.$$

□

**Příklad 1.3.10.** Příklad uvedeme s maticemi  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}.$$

Nejprve vypočteme levou stranu rovnice tvrzení 1.3.9. Tedy

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 20 & 32 \\ 13 & 20 \end{bmatrix}$$

a podle 1.3.1 a 1.3.2 vypočteme

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{-1} = \frac{1}{20 \cdot 20 - 32 \cdot 13} \begin{bmatrix} 20 & -32 \\ -13 & 20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{5}{4} & 2 \\ \frac{13}{16} & -\frac{5}{4} \end{bmatrix}.$$

Nyní vypočteme opět podle 1.3.1 a 1.3.2 pravou stranu rovnice tvrzení 1.3.9, kdy

$$\mathbf{B}^{-1} = \frac{1}{1 \cdot 4 - 2 \cdot 3} \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

a

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{8 \cdot 3 - 4 \cdot 4} \begin{bmatrix} 3 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{8} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}.$$

Následně vypočítáme

$$\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} -\frac{5}{4} & 2 \\ \frac{13}{16} & -\frac{5}{4} \end{bmatrix}.$$

Zjistili jsme, že  $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}$ .

**Tvrzení 1.3.11.** Pro obdélníkové matice  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$ , které lze násobit, platí, že  $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{\mathbf{T}} = \mathbf{B}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$ .

Důkaz:

Pokud násobíme  $i$ -tý řádek matice  $\mathbf{A}$  s  $j$ -tým sloupcem matice  $\mathbf{B}$ , získáme výsledný prvek matice  $\mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  na pozici  $c_{i,j}$ . Platí, že  $j$ -tý sloupec matice  $\mathbf{B}$  se rovná  $j$ -tému řádku matice  $\mathbf{B}^{\mathbf{T}}$  a  $i$ -tý řádek matice  $\mathbf{A}$   $i$ -tému sloupci matice  $\mathbf{A}^{\mathbf{T}}$ . Pokud násobíme transponované matice  $\mathbf{B}^{\mathbf{T}}$  a  $\mathbf{A}^{\mathbf{T}}$  a získáme  $\mathbf{D} = \mathbf{B}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$ , pak platí, že výsledný prvek  $d_{j,i} = c_{i,j}$ , protože prvek vzniklý součinem  $i$ -tého řádku matice  $\mathbf{A}$  a  $j$ -tého sloupce matice  $\mathbf{B}$ , je stejný jako výsledný prvek součinu  $j$ -tého řádku matice  $\mathbf{B}^{\mathbf{T}}$  a  $i$ -tého sloupce matice  $\mathbf{A}^{\mathbf{T}}$ . Jde též ale o prvek v pozici  $(j,i)$  pro transponovanou matici  $(\mathbf{AB})^{\mathbf{T}}$ .

□

**Příklad 1.3.12.** Příklad uvedeme na maticích  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8 & 4 & -1 \\ 5 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 3 \\ 1 & -2 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}.$$

Součinem matic  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$  získáme

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 57 & 15 \\ 40 & 12 \end{bmatrix}.$$

Provedeme transpozici matice  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  a dostaneme

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 57 & 40 \\ 15 & 12 \end{bmatrix}.$$

Na pravé straně rovnice provedeme transpozici matic  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$  a získáme

$$\mathbf{A}^{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 8 & 5 \\ 4 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad \mathbf{B}^{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 7 & 1 & 3 \\ 3 & -2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Součinem  $\mathbf{B}^{\mathbf{T}}$  a  $\mathbf{A}^{\mathbf{T}}$  získáme

$$\mathbf{B}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{A}^{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 57 & 40 \\ 15 & 12 \end{bmatrix}.$$

Tudíž platí, že  $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{\mathbf{T}} = \mathbf{B}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$ .

**Tvrzení 1.3.13.** Pro matici  $\mathbf{A}$ , která je čtvercová a regulární, platí

$$(\mathbf{A}^{\mathbf{T}})^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^{\mathbf{T}}.$$

D ů k a z:

Platí  $(\mathbf{A}\mathbf{B})^{\mathbf{T}} = \mathbf{B}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$  podle 1.3.11. Z toho dostaneme  $\mathbf{I}^{\mathbf{T}} = (\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A})^{\mathbf{T}} = \mathbf{A}^{\mathbf{T}}(\mathbf{A}^{-1})^{\mathbf{T}} = \mathbf{I}$ . Platí tedy  $(\mathbf{A}^{-1})^{\mathbf{T}} = (\mathbf{A}^{\mathbf{T}})^{-1}$ .

□

**Příklad 1.3.14.** Příklad uvedeme na matici  $\mathbf{A}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}.$$

K matici  $\mathbf{A}$  vytvoříme matici transponovanou, tedy

$$\mathbf{A}^{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}.$$

Pak

$$(\mathbf{A}^{\mathbf{T}})^{-1} = \frac{1}{1 \cdot 4 - 3 \cdot 2} \begin{bmatrix} 4 & -3 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & \frac{3}{2} \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Na druhé straně rovnice nejprve vypočítáme  $\mathbf{A}^{-1}$ , kdy

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{1 \cdot 4 - 2 \cdot 3} \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

K inverzní matici matice  $\mathbf{A}$  vytvoříme matici transponovanou, tedy

$$(\mathbf{A}^{-1})^{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} -2 & \frac{3}{2} \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Ověřili jsme, že platí výše uvedená rovnice, tedy že

$$(\mathbf{A}^{\mathbf{T}})^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^{\mathbf{T}}.$$

**Tvrzení 1.3.15.** Inverzní matice ke čtvercové diagonální matici, kdy prvky  $a_i$  hlavní diagonály nejsou rovny nule, je opět diagonální matice, kdy prvky diagonály jsou

$$\frac{1}{a_i}.$$

D ů k a z:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{1,1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{2,2}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{a_{n,n}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{a_{1,1}}{a_{1,1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{a_{2,2}}{a_{2,2}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{a_{n,n}}{a_{n,n}} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}.$$

□

**Příklad 1.3.16.** Jako konkrétní příklad uvedeme výpočet inverzní matice diagonální matice  $\mathbf{A}$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Podle definice determinantu 1.3.1 je

$$\det(\mathbf{A}) = ad - bc = 1 \cdot 2 - 0 \cdot 0 = 2.$$

A dále podle vzorce inverzní matice 1.3.2 je

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

## 1.4 Vektory

K vypracování této podkapitoly byly použity zdroje [2], [4] a [28].

*Vektorem* rozumíme matici o jednom řádku nebo sloupci. Matice, která má pouze jeden řádek, se nazývá *řádkový vektor*, tedy

$$v = \begin{bmatrix} v_1 & \dots & v_n \end{bmatrix}.$$

Matice, která má pouze jeden sloupec, se nazývá *sloupcový vektor* nebo pouze *vektor*, tedy

$$v = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}.$$

Podle počtu složek rozlišujeme vektory dvoudimenzionální, trojdimenzionální až  $n$ -dimenzionální.

### 1.4.1 Nulový vektor

Jedná se o vektor, jehož složky jsou rovny nule. Lze ho získat například součtem  $-v$  a  $v$ . Nulový vektor může vypadat například takto:

$$v = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

## 1.4.2 Součet vektorů

Pokud máme dva sloupcové vektory stejné délky, můžeme provést jejich součet podle

**Vzorec 1.4.1.**

$$v + w = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 + w_1 \\ v_2 + w_2 \\ \vdots \\ v_n + w_n \end{bmatrix}.$$

## 1.4.3 Délka vektorů

Délku vektoru značíme  $\|v\|$ . Délka vektorů se rovná druhé odmocnině součtu druhých mocnin složek vektorů, tedy

**Vzorec 1.4.2.**

$$\|v\| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2}.$$

**Příklad 1.4.3.** Například délka vektoru  $v = [2, 3, 4]$  je

$$\|v\| = \sqrt{2^2 + 3^2 + 4^2} = \sqrt{29}.$$

Vektor, jehož délka se rovná jedné, se nazývá *jednotkový vektor*.

**Příklad 1.4.4.** Příklad si uvedeme na čtyřdimenzionálním vektoru  $u = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ , kde

$$\|u\| = \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4}} = \sqrt{1} = 1.$$

## 1.4.4 Skalární součin

Další základní operací s vektory je *skalární součin*. Skalární součin je definován mezi dvěma vektory (řádkovým a sloupcovým v tomto pořadí) se stejným počtem prvků. Vyjadřuje vztah mezi délkou vektorů a jejich úhlem, tedy

**Vzorec 1.4.5.**

$$u \cdot v = \|u\| \cdot \|v\| \cdot \cos \alpha,$$

kde  $\alpha$  je velikost úhlů mezi těmito vektory. Výsledkem skalárního součinu je reálné číslo. Pokud máme dva vektory, pak jejich skalární součin je definován podle

**Vzorec 1.4.6.**

$$v \cdot w = v_1 \cdot w_1 + v_2 \cdot w_2 + \dots + v_n \cdot w_n = \sum_{i=1}^n v_i \cdot w_i.$$

Jestliže je alespoň jeden z vektorů nulový, pak se jejich skalární součin rovná

$$u \cdot v = 0.$$

Jestliže výsledkem součinu dvou nenulových vektorů získáme nulu, znamená to, že vektory jsou si vzájemně kolmé.

**Příklad 1.4.7.** Uvedeme příklad součinu vektorů  $v = [6,2]$  a  $w = [-1,3]$ , kdy

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \end{bmatrix} = 6 \cdot (-1) + 2 \cdot 3 = -6 + 6 = 0.$$

Vysvětlení vyplývá z výše uvedeného vzorce 1.4.5. Pokud součin dvou nenulových vektorů se rovná 0, musí to platit i pro pravou stranu rovnice, a proto  $\cos \alpha = 0$ , tedy 90 stupňů. Tedy

$$u \cdot v = 0 = \| u \| \cdot \| v \| \cdot \cos \alpha = 0.$$

## 2. Řešení soustavy lineárních rovnic

### 2.1 Řešení soustavy lineárních rovnic pomocí inverzní matice

K vypracování této podkapitoly byl použit zdroj [13].

Nyní se budeme věnovat řešení soustavy  $n$  rovnic o  $n$  neznámých pomocí inverzní matice. Příklad si uvedeme na soustavě dvou rovnic o dvou neznámých, kde

$$\begin{aligned}a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 &= d_1, \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 &= d_2.\end{aligned}$$

Hodnoty  $a_{i,j}$  a  $d_i$  jsou známé a  $x_i$  jsou neznámé, jejichž hodnoty hledáme.

Uvedeme matici  $\mathbf{A}$  a vektory  $x$  a  $d$ , kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad d = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}.$$

Soustavu lze potom zapsat jako maticovou rovnici

$$\mathbf{A}x = d, \tag{2.1}$$

čili,

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}.$$

Pokud provedeme součin matic na levé straně, získáme

$$\begin{bmatrix} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix},$$

tedy původní soustavu.

Pokud předpokládáme, že k matici  $\mathbf{A}$  existuje inverzní matice  $\mathbf{A}^{-1}$ , lze jí vynásobit obě strany rovnice (2.1) a získáme

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}x = \mathbf{A}^{-1}d.$$

$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$  nám dá dohromady jednotkovou matici, tudíž získáme

$$\mathbf{I}x = \mathbf{A}^{-1}d,$$

z čehož vyplývá

$$x = \mathbf{A}^{-1}d.$$

Pokud tedy existuje k matici  $\mathbf{A}$  inverzní matice, lze zjistit neznámé hodnoty  $x_i$  tím, že vynásobíme tuto inverzní matici se sloupcovou maticí na pravé straně rovnice.



**Příklad 2.1.1.** Pomocí inverzní matice vyřešíme soustavu rovnic, kde

$$\begin{aligned}6x_1 + 3x_2 &= 9, \\ -15x_1 + 3x_2 &= 21.\end{aligned}$$

Maticově lze soustavu zapsat jako

$$\begin{bmatrix} 6 & 3 \\ -15 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 21 \end{bmatrix}.$$

K matici zjistíme matici inverzní, kde podle vzorce 1.3.2

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{6 \cdot 3 - 3 \cdot (-15)} \begin{bmatrix} 3 & -3 \\ 15 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{21} & -\frac{1}{21} \\ \frac{5}{21} & \frac{2}{21} \end{bmatrix}.$$

Podle výše uvedené rovnice  $x = \mathbf{A}^{-1}d$ ,

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{21} & -\frac{1}{21} \\ \frac{5}{21} & \frac{2}{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 \\ 21 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{21} \cdot 9 + \left(-\frac{1}{21}\right) \cdot 21 \\ \frac{5}{21} \cdot 9 + \frac{2}{21} \cdot 21 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{4}{7} \\ \frac{29}{7} \end{bmatrix}.$$

Výsledkem tedy je

$$\begin{aligned}x_1 &= -\frac{4}{7}, \\ x_2 &= \frac{29}{7}.\end{aligned}$$

Abychom ověřili správnost našeho výpočtu, spočítáme součin  $\mathbf{A}x$ , tedy

$$\begin{bmatrix} 6 & 3 \\ -15 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{4}{7} \\ \frac{29}{7} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \cdot \left(-\frac{4}{7}\right) + 3 \cdot \frac{29}{7} \\ -15 \cdot \left(-\frac{4}{7}\right) + 3 \cdot \frac{29}{7} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 21 \end{bmatrix}.$$

V dalších kapitolách řešíme soustavy rovnic s maticemi řádu dva nebo tři. Výpočet inverzních matic je proveden v Excelu.

## 2.2 Řešení soustavy rovnic s více rovnicemi než proměnnými

K vypracování této podkapitoly byly použity zdroje [4], [5], [8] a [19].

Nyní se budeme věnovat případu, kdy řešíme soustavu rovnic, kde je méně proměnných než jednotlivých rovnic. V tom případě matice  $\mathbf{A}$  bude obdélníková a vektor  $d$  bude mít stejný počet řádků jako matice  $\mathbf{A}$ . Tato soustava nemusí mít řešení a pokud ho má, nemusí být jednoznačné. Budeme hledat vektor  $x$ , pro který platí

$$\mathbf{A}x \approx d,$$

ve smyslu, který popíšeme níže.

Stejně jako v podkapitole 2.1 jsou hodnoty matice  $\mathbf{A}$  a vektoru  $d$  známé hodnoty a hodnoty vektoru  $x$  jsou hodnoty, které hledáme. Hodnoty matice  $\mathbf{A}$  a vektor  $d$  mohou být zatíženy různými chybami a tyto chyby je potřeba zohlednit při hledání vektoru  $x$ .

V našem případě předpokládáme, že chyby vykazuje pouze vektor  $d$  pravé strany rovnice. Musíme najít co nejmenší hodnotu  $h$ , o kterou se liší vektor  $d$ , aby platilo

$$\mathbf{A}x = d + h.$$

Tuto situaci nazýváme problémem nejmenších čtverců. V dalším textu předpokládáme, že  $n > m$ .

**Definice 2.2.1. (Problém nejmenších čtverců)** *Pokud je  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$  a  $d \in \mathbb{C}^n$ , chceme určit  $x \in \mathbb{C}^m$ , tak aby platilo*

$$\mathbf{A}x = d + h,$$

*přičemž délka  $h$  je minimální.*

V dalším textu budeme používat pojmy obor hodnot matice, jádro matice, direktní součet podprostorů a ortogonální doplněk, proto si je nyní definujeme.

**Definice 2.2.2. (Obor hodnot matice  $R(\mathbf{A})$ )** *Oborem hodnot matice  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$  rozumíme množinu vektorů, kterou nabývá  $\mathbf{A}x$  za předpokladu, že  $x \in \mathbb{C}^m$ .*

**Definice 2.2.3. (Jádro matice  $N(\mathbf{A})$ )** *Jádrem matice  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$  rozumíme množinu vektorů, kterou nabývá  $x \in \mathbb{C}^m$  za předpokladu, že  $\mathbf{A}x = 0$ .*

**Definice 2.2.4. (Direktní součet podprostorů)** *Direktním součtem podprostorů rozumíme součet dvou podprostorů, které nemají žádný společný bod s výjimkou  $\{0\}$ . Tento součet značíme symbolem  $\oplus$ .*

**Definice 2.2.5. (Ortogonální doplněk)** *Mějme  $D$  vektorový prostor a  $Y$  jeho podprostor. Ortogonálním doplňkem podprostoru  $Y$ , značeným  $Y^\perp$ , nazýváme soubor všech vektorů prostoru  $D$ , které jsou kolmé ke všem vektorům podprostoru  $Y$ . Platí  $D = Y \oplus Y^\perp$ . Pro více informací viz [19].*

**Tvrzení 2.2.6.** *Pokud je  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$ , pak prostor  $\mathbb{C}^m$  lze rozdělit do kolmé direktní sumy jádra matice a oboru hodnot matice transponované. Zároveň platí i naopak, že prostor  $\mathbb{C}^n$  lze rozdělit do kolmé direktní sumy jádra matice transponované a oboru hodnot matice. Platí tedy*

$$\begin{aligned} N(\mathbf{A}) \oplus R(\mathbf{A}^T) &= \mathbb{C}^m, & N(\mathbf{A}) \perp R(\mathbf{A}^T), \\ N(\mathbf{A}^T) \oplus R(\mathbf{A}) &= \mathbb{C}^n, & N(\mathbf{A}^T) \perp R(\mathbf{A}). \end{aligned}$$

D ů k a z:

Prostor  $\mathbb{C}^m$  můžeme napsat jako součet

$$\mathbb{C}^m = R(\mathbf{A}^T) \oplus R(\mathbf{A}^T)^\perp.$$

Abychom dokázali, že platí první část tvrzení, tj.  $\mathbb{C}^m = N(\mathbf{A}) \oplus R(\mathbf{A}^T)$ , stačí dokázat, že  $R(\mathbf{A}^T)^\perp = N(\mathbf{A})$ . Jestliže je  $x$  jakýkoliv vektor z prostoru  $R(\mathbf{A}^T)^\perp$ , pak platí, že skalární součin  $y \cdot x = 0$ , pokud vektor  $y \in R(\mathbf{A}^T)$ . Tudíž platí, že vynásobíme-li  $\mathbf{A}^T$  jakýmkoliv vektorem  $z \in \mathbb{C}^n$ , skalární součin  $\mathbf{A}^T z$  s vektorem  $x$  bude opět nulový. A taktéž pokud provedeme skalární součin  $\mathbf{A}x$  s libovolným číslem  $z \in \mathbb{C}^n$ , výsledek bude opět nulový. Platí tedy i, že  $\mathbf{A}x = 0$ , tudíž musí platit, že  $x \in N(\mathbf{A})$  tehdy a právě tehdy, když  $x \in R(\mathbf{A}^T)^\perp$ .

Pro druhou část tvrzení platí to samé, jen vše aplikujeme na matici transponovanou.  $\square$

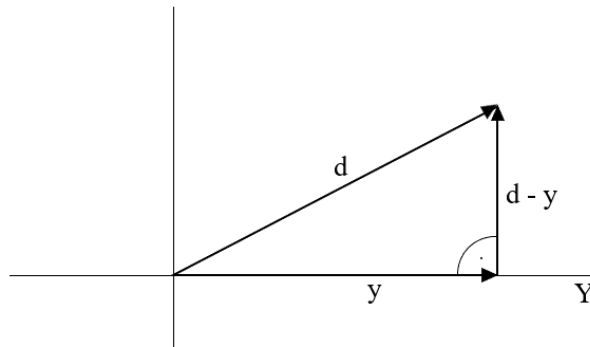
Soustavu lineárních rovnic  $\mathbf{A}x \approx d$  lze řešit přesně, pokud  $d \in R(\mathbf{A})$ .

Pokud hledáme řešení soustavy  $\mathbf{A}x = d + h$ , kde  $h$  má minimální hodnotu, pokusíme se najít nejlepší přiblížení vektoru  $d$  v prostoru  $R(\mathbf{A})$ .

**Definice 2.2.7. (Ortogonalní projekce)** Dle [8] definujeme *ortogonalní projekci následovně*: „Mějme  $D$  vektorový prostor se skalárním součinem a  $Y$  jeho podprostor. Prvek  $y \in Y$  nazýváme *ortogonalní (kolmou) projekcí* prvku  $d \in D$  na prostor  $Y$ , pokud platí  $d - y \perp Y$ .“ (Pro účely této práce jsou v definici pozměněny názvy prvků a podprostorů.) Prvek  $y$  je přitom tím prvkem z prostoru  $Y$ , pro který je vzdálenost  $\|y - d\|$  nejmenší ze všech prvků  $y$ .

Pro lepší znázornění viz. obrázek:

Obrázek 2.1: Ortogonalní projekce



Pomocí ortogonalní projekce vektoru  $d$  na  $R(\mathbf{A})$  získáme nejlepší aproximaci vektoru  $d$  v  $R(\mathbf{A})$ . Pro ortogonalní projekci vektoru  $d$  na  $R(\mathbf{A})$  zvolíme označení symbolem  $d|_{R(\mathbf{A})}$ .

Jestliže platí, že  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$  a  $d \in \mathbb{C}^n$ , je vektor  $x$  řešením problému nejmenších čtverců, pokud

$$\mathbf{A} \cdot x = d|_{R(\mathbf{A})}. \quad (2.2)$$

V tom případě vektor  $h$  v definici 2.2.1 odpovídá vektoru  $d - d|_{R(\mathbf{A})}$  a na základě tvrzení 2.2.6 platí i

$$\|d - \mathbf{A} \cdot x\| = \|d|_{N(\mathbf{A}^T)}\|.$$

Abychom našli řešení problému nejmenších čtverců, musí platit, že  $d \neq 0$ , tedy, že vektor  $d$  má nenulovou složku v  $R(\mathbf{A})$ , tzn.  $d$  není kolmé k  $R(\mathbf{A})$ . Pokud by  $d$  bylo kolmé k  $R(\mathbf{A})$ , bylo by jediné správné řešení  $x = 0$ . Výsledkem součinu  $\mathbf{A} \cdot x$  je lineární kombinace sloupců

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = x_1 \cdot a_1 + x_2 \cdot a_2 + \dots + x_m \cdot a_m.$$

Pokud jsou sloupce matice  $\mathbf{A}$  lineárně nezávislé, můžeme  $d|_{R(\mathbf{A})}$  popsat jednoznačně pomocí lineární kombinace sloupců a soustava má tedy jednoznačné řešení. Jsou-li sloupce matice  $\mathbf{A}$  lineárně závislé, můžeme  $d|_{R(\mathbf{A})}$  popsat pomocí lineární kombinace sloupců matice  $\mathbf{A}$  nekonečně mnoha způsoby.

Nyní si ukážeme, jak řešení problému nejmenších čtverců souvisí se soustavou lineárních rovnic se čtvercovou maticí.

**Tvrzení 2.2.8.** *Mějme  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$  a  $d \in \mathbb{C}^n$ . V tom případě je  $x$  řešením problému nejmenších čtverců tehdy a právě tehdy, pokud je řešením soustavy normálních rovnic*

$$\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot x = \mathbf{A}^T \cdot d. \quad (2.3)$$

Důkaz:

Pokud je  $x$  řešením problému nejmenších čtverců, pak platí  $\mathbf{A} \cdot x = d|_{R(\mathbf{A})}$ , viz (2.2). Tudíž

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot x = d|_{R(\mathbf{A})}, \quad \text{a tedy} \quad \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot x &= \mathbf{A}^T \cdot d|_{R(\mathbf{A})}, \\ \text{a zároveň} \quad \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot x &= \mathbf{A}^T \cdot (d|_{R(\mathbf{A})} + d|_{N(\mathbf{A}^T)}) = \mathbf{A}^T \cdot d. \end{aligned}$$

Poslední rovnost vyplývá na základě tvrzení 2.2.6, kdy  $d \in \mathbb{C}^n$  a  $\mathbb{C}^n$  lze rozdělit kolmou direktní sumou na  $N(\mathbf{A}^T)$  a  $R(\mathbf{A})$ .

Pokud platí  $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot x = \mathbf{A}^T \cdot d = \mathbf{A}^T \cdot d|_{R(\mathbf{A})}$ , pravou stranu položíme rovnu 0 a získáme

$$\mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{A} \cdot x - d|_{R(\mathbf{A})}) = 0, \quad \text{z čehož vyplývá, že} \quad (\mathbf{A} \cdot x - d|_{R(\mathbf{A})}) \in N(\mathbf{A}^T),$$

na základě definice 2.2.3.

Víme ale i, že  $\mathbf{A} \cdot x - d|_{R(\mathbf{A})} \in R(\mathbf{A})$ . Vektor  $\mathbf{A} \cdot x - d|_{R(\mathbf{A})}$  se nachází v průniku prostorů  $N(\mathbf{A}^T)$  a  $R(\mathbf{A})$ . V průniku obou prostorů se na základě tvrzení 2.2.6 může nacházet pouze nulový vektor, proto musí platit

$$\mathbf{A} \cdot x - d|_{R(\mathbf{A})} = 0.$$

Tudíž

$$\mathbf{A} \cdot x = d|_{R(\mathbf{A})},$$

což znamená, že  $x$  je řešením problému nejmenších čtverců.  
□

Pokud má matice  $\mathbf{A}$  plnou sloupcovou hodnotu, matice  $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$  je regulární a soustava (2.3) má jednoznačné řešení, které lze vyjádřit pomocí inverze matice normální soustavy jako

$$x = (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot d. \quad (2.4)$$

**Definice 2.2.9. (Moore-Penroseova pseudoinverze)** *Pokud matice  $\mathbf{A}$  má lineárně nezávislé sloupce, pak Moore-Penroseova pseudoinverze, označovaná jako  $\mathbf{A}^\dagger$ , je definována jako*

$$\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T.$$

**Příklad 2.2.10.** Příklad uvedeme na soustavě rovnic, kde

$$\begin{aligned} a \cdot 2 + b \cdot 3 &= 8, \\ a \cdot 4 + b &= 5, \\ a \cdot (-2) + b \cdot 7 &= -6, \\ a \cdot 1 + b \cdot (-2) &= 4. \end{aligned}$$

Tato soustava obecně nemá řešení. Pokusíme se najít takové  $a$  a  $b$ , aby

$$\begin{aligned} a \cdot 2 + b \cdot 3 &\approx 8, \\ a \cdot 4 + b &\approx 5, \\ a \cdot (-2) + b \cdot 7 &\approx -6, \\ a \cdot 1 + b \cdot (-2) &\approx 4. \end{aligned}$$

Maticově soustavu zapíšeme jako

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 1 \\ -2 & 7 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \\ -6 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Uvedeme notaci, kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 1 \\ -2 & 7 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad d = \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \\ -6 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Musíme vyřešit rovnici

$$\mathbf{A} \cdot x \approx d.$$

Podle tvrzení 2.2.8 je řešení dáno rovnicí

$$x = (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot d.$$

Nejprve vypočteme

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 \\ 3 & 1 & 7 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 1 \\ -2 & 7 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 & -6 \\ -6 & 63 \end{bmatrix}.$$

Odvodíme, že

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} = \frac{1}{25 \cdot 63 - (-6) \cdot (-6)} \cdot \begin{bmatrix} 63 & 6 \\ 6 & 25 \end{bmatrix} = \frac{1}{1539} \cdot \begin{bmatrix} 63 & 6 \\ 6 & 25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{171} & \frac{2}{513} \\ \frac{2}{513} & \frac{25}{1539} \end{bmatrix}.$$

Dále

$$\mathbf{A}^T d = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 \\ 3 & 1 & 7 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \\ -6 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 52 \\ -21 \end{bmatrix}.$$

Dále nám vyplývá, že

$$x = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T d = \begin{bmatrix} \frac{7}{171} & \frac{2}{513} \\ \frac{2}{513} & \frac{25}{1539} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 52 \\ -21 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{350}{171} \\ -\frac{71}{513} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}.$$

# 3. Ultrafialová a viditelná spektroskopie

Spektrofotometrie je metoda založená na měření intenzity záření absorbovaného vzorkem. V případě ultrafialové a viditelné (UV-VIS) spektrofotometrie působíme na látku buď ultrafialovým (při vlnových délkách 200 - 400 nm) nebo viditelným zářením (v oblasti vlnových délek 400 - 800 nm). Molekula záření absorbuje a díky tomu se zvyšuje její energetický stav. Léciva absorbující v UV oblasti obsahují ve své molekule skupiny s dvojnými nebo trojnými vazbami, tzv. chromofory. Jedná se například o ketonickou, nitrilovou nebo nitroskupinu. Pokud molekula obsahuje několik konjugovaných vazeb, absorbuje ve viditelné oblasti spektra. Tuto metodu můžeme využít ke zjištění koncentrace látky v roztoku. Pro více informací viz [14] a [16].

## 3.1 Základní vztahy

K vypracování této podkapitoly byly použity zdroje [14] a [15].

Pokud na kyvetu obsahující roztok léčiva dopadá zářivý tok  $\phi_0$ , záření, které projde tímto vzorkem, není úplné. Intenzita záření je zmenšena o odražené, rozptýlené a absorbované záření. Pokud zanedbáme odraz a rozptyl a předpokládáme, že největší část úbytku záření připadá na absorpenci, můžeme vyjádřit transmitanci.

**Definice 3.1.1. (Transmittance)** *Transmittance  $T$  vyjadřuje relativní část prošlého záření, tedy*

$$T = \frac{\phi}{\phi_0}.$$

Transmitanci je možné vyjádřit i v procentech.  $\phi_0$  vyjadřuje dopadající zářivý tok (původní zářivý tok) a  $\phi$  vyjadřuje zářivý tok, který prošel kyvetou. Pokud látka žádné záření neabsorbuje, transmittance se rovná jedné neboli 100 %.

**Definice 3.1.2. (Absorbance)** *Záporný dekadický logaritmus transmittance nazýváme absorbance, tedy*

$$A = -\log T = \log \frac{\phi_0}{\phi}.$$

Pokud látka záření neabsorbuje, je absorbance nulová. Absorbance roste s rostoucí absorpcí záření. Pokud se transmittance blíží nule, absorbance se blíží nekonečnu.

**Definice 3.1.3. (Lambert-Beerův zákon)** *Lambert-Beerův zákon nám vyjadřuje, že absorbance je přímo úměrná tloušťce absorbující vrstvy a koncentraci absorbující látky, tedy*

$$A = \varepsilon \cdot c \cdot l.$$

V Lambert-Beerově zákoně nám  $\varepsilon$  vyjadřuje molární absorpční koeficient (za daných podmínek při určité vlnové délce je to pro danou látku konstanta) [ $dm^3 \cdot mol^{-1} \cdot cm^{-1}$ ],  $c$  vyjadřuje látkovou koncentraci [ $mol \cdot dm^{-3}$ ] a  $l$  je tloušťka absorbující vrstvy [ $cm$ ]. Lambert-Beerův zákon platí pouze pro zředěné roztoky do nejvyšší koncentrace zhruba  $10^{-2} mol \cdot dm^{-3}$ .

Pokud absorbuje v roztoku více složek, je celková absorbance součtem absorbancí jednotlivých složek.

## 3.2 Multikomponentní analýza

K vypracování této části podkapitoly byly použity zdroje [11], [17] a [20].

Multikomponentní analýza je spektrofotometrická metoda, která se využívá v případě, kdy zkoumaný vzorek obsahuje směs více složek, jejichž absorbance vykazují podobné hodnoty při určitém rozmezí vlnových délek, viz [20]. Pomocí multikomponentní analýzy lze stanovit koncentrace složek v roztoku, aniž bychom je od sebe oddělili. Předpokladem je předchozí znalost molárních absorpčních koeficientů pro všechny vlnové délky a složky.

**Vzorec 3.2.1.** *Pokud se složky vzájemně nemohou ovlivňovat a pro každou složku platí Lambert-Beerův zákon, platí, že výsledná absorbance  $A_i$  ( $i$  značí danou vlnovou délku a může nabývat hodnot  $i = 1, \dots, m$ ) je dána součtem absorbancí jednotlivých složek  $j$  ( $j$  může nabývat hodnot  $1, \dots, p$ ), tedy*

$$A_i = \sum_{j=1}^p \varepsilon_{i,j} \cdot c_j \cdot l$$

neboli

$$A_i = \varepsilon_{i,1} \cdot c_1 \cdot l + \dots + \varepsilon_{i,p} \cdot c_p \cdot l,$$

kde

$A_i$ značí	absorbanci roztoku se směsí léčiv při $i$ -té vlnové délce,
$i$	zvolenou vlnovou délku pro měření,
$j$	zvolenou složku,
$p$	počet složek,
$m$	počet vlnových délek,
$l$	optickou délku kyvety,
$\varepsilon_{i,j}$	molární absorpční koeficienty složek $j$ při vlnových délkách $i$ ,
$c_1, \dots, c_p$	obecně vyjádřené koncentrace jednotlivých složek.

Lze stanovit koncentrace jednotlivých složek změřením absorbancí neznámého roztoku při:

1. stejném počtu vlnových délek jako je počet složek ve směsi, tj.  $m = p$  (přesně určené systémy lineárních rovnic),
2. více vlnových délkách, než je počet absorbujících složek ve směsi, tj.  $m > p$  (přeurčené systémy lineárních rovnic).



### 3.2.1 Přesně určené systémy

K vypracování této části podkapitoly byly použity zdroje [11] a [17].

Měření provádíme při stejném počtu vlnových délek, jako je počet složek (v našem případě léčiv) v soustavě. Příklad uvedeme na soustavě dvou rovnic o dvou neznámých, kde

$$A_1 = \varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2,$$

$$A_2 = \varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2.$$

V soustavě  $A_1$  a  $A_2$  značí absorbance směsí léčiv při  $i$ -té vlnové délce,  $\varepsilon_{i,j}$  značí molární absorpční koeficienty čistých léčiv, které předpokládáme, že jsou známé, a  $c_1$  a  $c_2$  jsou hledané koncentrace léčiv.

Tuto soustavu můžeme vyřešit například dosazovací metodou, Gaussovou eliminační metodou a pro urychlení řešení lze využít softwarových funkcí.

### 3.2.2 Přeurčené systémy

K vypracování této části podkapitoly byl použit zdroj [11].

Měření provádíme při větším počtu vlnových délek, než je počet složek v soustavě, tedy  $m > p$ . Přeurčené systémy lze zpracovat metodou nejmenších čtverců. V dalším textu ukážeme, že minimalizační úlohu nejmenších čtverců (viz 2.2.1) můžeme též vyřešit pomocí parciálních derivací, což vede ke stejnému výsledku jako v případě použití tvrzení 2.2.8.

Příklad uvedeme na vzorku, který obsahuje dvě léčiva a u kterého byla měření provedena při třech vlnových délkách. Sestavíme soustavu tří přibližných rovnic (dle měřeného počtu vlnových délek) o dvou neznámých, tedy

$$A_{1,exp} \approx \varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2, \quad (3.1)$$

$$A_{2,exp} \approx \varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2,$$

$$A_{3,exp} \approx \varepsilon_{3,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{3,2} \cdot c_2.$$

Při této metodě aproximujeme hodnoty  $A_{i,exp}$  (jedná se o hodnoty, které jsme skutečně naměřili) hodnotami  $A_{i,vyp}$ , které jsme vypočítali podle vzorce

$$A_{i,vyp} \approx \varepsilon_{i,1} \cdot c_1 \cdot l + \varepsilon_{i,2} \cdot c_2 \cdot l. \quad (3.2)$$

Hodnoty  $c_1$  a  $c_2$  značí hledané koncentrace léčiv,  $l$  značí optickou délku kvety. Hodnoty molárních absorpčních koeficientů  $\varepsilon_{i,j}$  vypočítáme z naměřených spekter čistých látek dle vzorce odvozeného z definice 3.1.3. Tedy

$$\varepsilon_{i,j} = \frac{A}{c \cdot l} \quad [dm^3 \cdot mol^{-1} \cdot cm^{-1}],$$

kde  $A$  značí absorpenci čistého léčiva při  $i$ -té vlnové délce,  $c$  značí koncentraci  $j$ -tého léčiva.

Pro aproximaci vyžadujeme, aby součty druhých mocnin rozdílů mezi  $A_{i,vyp}$  a  $A_{i,exp}$  byly co nejmenší, což odpovídá hledání  $c_1$  a  $c_2$  ve smyslu problému nejmenších čtverců. Tedy

$$U = \sum_{i=1}^m (A_{i,vyp} - A_{i,exp})^2 = \text{je minimální.}$$

Při našem vzorku tudíž pro optimální hodnoty  $c_1$  a  $c_2$  musí platit

$$U = (A_{1,vyp} - A_{1,exp})^2 + (A_{2,vyp} - A_{2,exp})^2 + (A_{3,vyp} - A_{3,exp})^2 = \text{je minimální.}$$

V dalším kroku dosadíme (3.2) a počítáme, že  $l = 1$ , jelikož předpokládáme, že použijeme kyvetu o optické délce 1  $cm$ . Dostaneme tedy

$$U = (\varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2 - A_{1,exp})^2 + (\varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2 - A_{2,exp})^2 + (\varepsilon_{3,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{3,2} \cdot c_2 - A_{3,exp})^2 = \text{je minimální.} \quad (3.3)$$

Aby vztah (3.3) platil a daným součtem jsme získali co nejmenší číslo, můžeme vztah (3.3) zderivovat a výsledek položit roven nule. Následně můžeme vyřešit výslednou rovnici pro  $c_j$ . Hledáme dvě neznámé, proto musíme derivování provést dvakrát (pro každou koncentraci ( $c_1$  a  $c_2$ ) zvlášť). Derivováním získáme

$$\frac{\partial U}{\partial c_1} = 2 \cdot (\varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2 - A_{1,exp}) \cdot \varepsilon_{1,1} + 2 \cdot (\varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2 - A_{2,exp}) \cdot \varepsilon_{2,1} + 2 \cdot (\varepsilon_{3,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{3,2} \cdot c_2 - A_{3,exp}) \cdot \varepsilon_{3,1} = 0$$

a

$$\frac{\partial U}{\partial c_2} = 2 \cdot (\varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2 - A_{1,exp}) \cdot \varepsilon_{1,2} + 2 \cdot (\varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2 - A_{2,exp}) \cdot \varepsilon_{2,2} + 2 \cdot (\varepsilon_{3,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{3,2} \cdot c_2 - A_{3,exp}) \cdot \varepsilon_{3,2} = 0.$$

Vydělením číslem dvě a roznásobením získáme

$$\varepsilon_{1,1}^2 \cdot c_1 + \varepsilon_{1,1} \cdot \varepsilon_{1,2} \cdot c_2 - \varepsilon_{1,1} \cdot A_{1,exp} + \varepsilon_{2,1}^2 \cdot c_1 + \varepsilon_{2,1} \cdot \varepsilon_{2,2} \cdot c_2 - \varepsilon_{2,1} \cdot A_{2,exp} + \varepsilon_{3,1}^2 \cdot c_1 + \varepsilon_{3,1} \cdot \varepsilon_{3,2} \cdot c_2 - \varepsilon_{3,1} \cdot A_{3,exp} = 0$$

a

$$\varepsilon_{1,1} \cdot \varepsilon_{1,2} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2}^2 \cdot c_2 - \varepsilon_{1,2} \cdot A_{1,exp} + \varepsilon_{2,1} \cdot \varepsilon_{2,2} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2}^2 \cdot c_2 - \varepsilon_{2,2} \cdot A_{2,exp} + \varepsilon_{3,1} \cdot \varepsilon_{3,2} \cdot c_1 + \varepsilon_{3,2}^2 \cdot c_2 - \varepsilon_{3,2} \cdot A_{3,exp} = 0.$$

Vytknutím neznámých ( $c_1$  a  $c_2$ ) a jejich seřazením získáme

$$(\varepsilon_{1,1}^2 + \varepsilon_{2,1}^2 + \varepsilon_{3,1}^2) \cdot c_1 + (\varepsilon_{1,1} \cdot \varepsilon_{1,2} + \varepsilon_{2,1} \cdot \varepsilon_{2,2} + \varepsilon_{3,1} \cdot \varepsilon_{3,2}) \cdot c_2 = \varepsilon_{1,1} \cdot A_{1,exp} + \varepsilon_{2,1} \cdot A_{2,exp} + \varepsilon_{3,1} \cdot A_{3,exp} \quad (3.4)$$

a

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_{1,1} \cdot \varepsilon_{1,2} + \varepsilon_{2,1} \cdot \varepsilon_{2,2} + \varepsilon_{3,1} \cdot \varepsilon_{3,2}) \cdot c_1 + (\varepsilon_{1,2}^2 + \varepsilon_{2,2}^2 + \varepsilon_{3,2}^2) \cdot c_2 \\ = & \varepsilon_{1,2} \cdot A_{1,exp} + \varepsilon_{2,2} \cdot A_{2,exp} + \varepsilon_{3,2} \cdot A_{3,exp}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Pokud nahradíme zápis součtů symbolikou pro sumy, získáme

$$\sum_{i=1}^m \varepsilon_{i,1} \cdot \varepsilon_{i,1} \cdot c_1 + \sum_{i=1}^m \varepsilon_{i,1} \cdot \varepsilon_{i,2} \cdot c_2 = \sum_{i=1}^m \varepsilon_{i,1} \cdot A_{i,exp}$$

a

$$\sum_{i=1}^m \varepsilon_{i,1} \cdot \varepsilon_{i,2} \cdot c_1 + \sum_{i=1}^m \varepsilon_{i,2} \cdot \varepsilon_{i,2} \cdot c_2 = \sum_{i=1}^m \varepsilon_{i,2} \cdot A_{i,exp}.$$

Jednotlivé součty sum zjednodušeně označíme postupně  $S_1$  až  $S_6$ . Získáme rovnice ve tvaru

$$S_1 \cdot c_1 + S_2 \cdot c_2 = S_3 \quad (3.6)$$

a

$$S_4 \cdot c_1 + S_5 \cdot c_2 = S_6. \quad (3.7)$$

Tuto soustavu dvou rovnic o dvou neznámých vyřešíme vhodným způsobem, například dosazovací metodou nebo Gausovou eliminační metodou s využitím programu Excel.

V dalším textu uvedeme náš důkaz o ekvivalenci tohoto postupu s řešením pomocí inverzních matic.

Soustavu (3.1) můžeme též řešit pomocí maticového zápisu  $\mathbf{M}c \approx v$ , kde

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{1,2} \\ \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{2,2} \\ \varepsilon_{3,1} & \varepsilon_{3,2} \end{bmatrix}, \quad c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad v = \begin{bmatrix} A_{1,exp} \\ A_{2,exp} \\ A_{3,exp} \end{bmatrix}.$$

Řešením je podle tvrzení 2.2.8

$$\mathbf{M}^T \mathbf{M} c = \mathbf{M}^T v. \quad (3.8)$$

Pokud roznásobíme levou stranu rovnice (3.8), získáme

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{3,1} \\ \varepsilon_{1,2} & \varepsilon_{2,2} & \varepsilon_{3,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{1,2} \\ \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{2,2} \\ \varepsilon_{3,1} & \varepsilon_{3,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

$$= \begin{bmatrix} (\varepsilon_{1,1}^2 + \varepsilon_{2,1}^2 + \varepsilon_{3,1}^2) \cdot c_1 & (\varepsilon_{1,1} \cdot \varepsilon_{1,2} + \varepsilon_{2,1} \cdot \varepsilon_{2,2} + \varepsilon_{3,1} \cdot \varepsilon_{3,2}) \cdot c_2 \\ (\varepsilon_{1,2} \cdot \varepsilon_{1,1} + \varepsilon_{2,2} \cdot \varepsilon_{2,1} + \varepsilon_{3,2} \cdot \varepsilon_{3,1}) \cdot c_1 & (\varepsilon_{1,2}^2 + \varepsilon_{2,2}^2 + \varepsilon_{3,2}^2) \cdot c_2 \end{bmatrix}.$$

Pravá strana maticového zápisu (3.9) odpovídá levé straně výše uvedených rovnic (3.4) a (3.5). Jak jsme již výše zmínili, pokud hodnoty součtu molárních absorpčních koeficientů označíme písmenem  $S_x$ , dostaneme rovnice (3.6) a (3.7). Tudíž nám vyplývá, že

$$\mathbf{M}^T \mathbf{M} = \begin{bmatrix} S_1 & S_2 \\ S_4 & S_5 \end{bmatrix}.$$

Pokud roznásobíme pravou stranu rovnice (3.8), získáme

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{3,1} \\ \varepsilon_{1,2} & \varepsilon_{2,2} & \varepsilon_{3,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{1,exp} \\ A_{2,exp} \\ A_{3,exp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} \cdot A_{1,exp} + \varepsilon_{2,1} \cdot A_{2,exp} + \varepsilon_{3,1} \cdot A_{3,exp} \\ \varepsilon_{1,2} \cdot A_{1,exp} + \varepsilon_{2,2} \cdot A_{2,exp} + \varepsilon_{3,2} \cdot A_{3,exp} \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Pravá strana maticového zápisu (3.10) odpovídá pravé straně výše uvedených rovnic (3.4) a (3.5). Tudíž nám vyplývá, že

$$\mathbf{M}^T v = \begin{bmatrix} S_3 \\ S_6 \end{bmatrix}.$$

### 3.2.3 Citlivost systému lineárních rovnic vůči nepřesnostem vstupních dat

K vypracování této části podkapitoly byly použity zdroje [5], [6] a [7].

Používáme-li přesně určené systémy, pak soustava

$$\mathbf{A}x = d$$

je zatížena nepřesnostmi. Nepřesnosti vykazuje pravá i levá strana rovnice. Nepřesnosti v levé straně rovnice vykazuje matice  $\mathbf{A}$ , která v našem případě obsahuje hodnoty molárních absorpčních koeficientů. Tyto koeficienty jsou závislé na koncentraci měřeného roztoku a absorbanci. Jistou nepřesnost vykazuje již koncentrace roztoku. Nepřesnost vykazuje taktéž absorbance díky odchylkám použitého spektrofotometru. Vektor  $d$  na pravé straně rovnice obsahuje v našem případě hodnoty absorbancí měřených směsí. Tyto hodnoty jsou opět zatíženy nepřesnostmi použitého spektrofotometru.

S ohledem na tyto nepřesnosti by bylo možné vzniklou rovnici psát ve tvaru

$$(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})y = d + \delta d,$$

kde  $\delta\mathbf{A}$  značí nepřesnosti v matici  $\mathbf{A}$  a  $\delta d$  značí nepřesnosti vektoru  $d$ . Písmenem  $y$  označujeme vypočítané hodnoty koncentrací. Zajímá nás, jak nepřesnosti v matici  $\mathbf{A}$  a vektoru  $d$  ovlivní naše vypočítané koncentrace  $y$ , zejména o kolik se liší  $y$  od řešení  $x$  ideální soustavy  $\mathbf{A}x = d$ .

Pro relativní chybu vůči  $x$  platí (viz [6], odstavec 3.3), že

$$\frac{\|y - x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(\mathbf{A})}{1 - r} \left( \frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|} + \frac{\|\delta d\|}{\|d\|} \right)$$

za předpokladu, že

$$\|\delta\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\| = r < 1.$$

Hodnota  $x$  v tomto případě značí skutečně použité koncentrace,  $\kappa$  značí číslo podmíněnosti vyjádřené jako

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|,$$

kde  $\|\mathbf{A}\|$  značí maticovou normu (tj. v určitém smyslu zobecnění vektorové normy (viz [5], podkapitola 1.7)).

Číslo podmíněnosti nám dává nějakou míru citlivosti hodnoty vypočítaných koncentrací  $y$  v závislosti na  $\|\delta\mathbf{A}\| / \|\mathbf{A}\|$  a  $\|\delta d\| / \|d\|$ . Pokud je číslo podmíněnosti malé, vykazují hodnoty  $y$  malou citlivost vůči chybám matice  $\mathbf{A}$  a vektoru  $d$ . Pokud je naopak číslo podmíněnosti velké, mohou být řešené hodnoty  $y$  velmi citlivé vůči chybám matice  $\mathbf{A}$  a vektoru  $d$ .

V případě přeурččených systémů platí analogní výsledek (viz [6], odstavec 6.6).

Máme-li soustavu dvou rovnic, která odpovídá dvěma vlnovým délkám, tedy

$$A_1 = \varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2$$

a

$$A_2 = \varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2,$$

matice  $\mathbf{A}$  bude mít tvar

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{1,2} \\ \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{2,2} \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Přidáme-li pro stejné látky měření pro další vlnovou délku, pak

$$A_1 = \varepsilon_{1,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{1,2} \cdot c_2,$$

$$A_2 = \varepsilon_{2,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{2,2} \cdot c_2,$$

a

$$A_3 = \varepsilon_{3,1} \cdot c_1 + \varepsilon_{3,2} \cdot c_2.$$

Matice  $\mathbf{A}$  bude mít v tomto případě tvar

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{1,2} \\ \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{2,2} \\ \varepsilon_{3,1} & \varepsilon_{3,2} \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

Platí, že číslo podmíněnosti matice (3.11) bude vždy menší nebo rovné než číslo podmíněnosti matice (3.12) (viz [7], důsledek 2.4.5). Z tohoto pohledu očekáváme, že se zvyšujícím se počtem vlnových délek obecně nedosáhneme přesnějších výsledků.

## 4. Experimentální část

V experimentální části jsme se zabývali konkrétním stanovením koncentrací jednotlivých léčiv ze směsí jejich roztoků pomocí multikomponentní analýzy.

Všechny výsledky jsme zaokrouhlili na dvě desetinná místa. Výjimku tvořily situace, kdy se takovéto zaokrouhlení jevílo jako nevhodné. U těchto případů jsme uvedli informaci o jiném zaokrouhlení. Všechny výsledky jsme zpracovali programem Excel, kde jsme využili veškerá data s maximální přesností bez jakéhokoliv zaokrouhlení.

### 4.1 Přístroje a léčiva

#### 4.1.1 Použité přístroje

Zde uvádíme seznam použitých přístrojů.

Analytické váhy (Sartorius)

Spektrofotometr HP8453 (Agilent technologies)

#### 4.1.2 Použitá léčiva

Zde uvádíme seznam použitých léčiv a v závorce jejich původ.

Diazepam (dar prof. Doležala; katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy)

Fenacetin (dar prof. Doležala; katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy)

Kodein (dar prof. Doležala; katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy)

Metamizol (ze sbírek katedry biofyziky a fyzikální chemie)

Pitofenon (ze sbírek katedry biofyziky a fyzikální chemie)

Triclosan (Ciba-Geigy)

#### 4.1.3 Použitá rozpouštědla

Zde uvádíme použitá rozpouštědla a v závorce jejich původ.

Methanol Chromasolv<sup>®</sup> gradient grade for HPLC (Aldrich)

Dimethylsulfoxide analytical grade (Fluka)

### 4.2 Pracovní postup

#### 4.2.1 Příprava roztoků léčiv

Připravili jsme si zásobní roztoky léčiv o koncentraci  $0,001 \text{ mol/l}$  v objemu  $50 \text{ ml}$  methanolu. V tabulce 4.1 uvádíme molární hmotnosti léčiv, teoretické a reálné navážky

s přesností na čtyři desetinná místa a výslednou koncentraci zásobního roztoku zaokrouhlenou na tři desetinná místa.

Tabulka 4.1: Molární hmotnosti léčiv, jejich teoretické a reálné navážky a výsledné koncentrace zásobních roztoků o objemu 50 ml

Léčivo	Molární hmotnost [g/mol]	Teoretická navážka [g]	Reálná navážka [g]	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]
Diazepam	284,74 [10]	0,0142	0,0143	1,004 · 10 <sup>-3</sup>
Fenacetin	179,22 [23]	0,0089	0,0091	1,016 · 10 <sup>-3</sup>
Kodein	299,36 [9]	0,0149	0,0150	1,002 · 10 <sup>-3</sup>
Metamizol	311,36 [26]	0,0156	0,0156	1,002 · 10 <sup>-3</sup>
Pitofenon	367,44 [21]	0,0184	0,0187	1,018 · 10 <sup>-3</sup>
Triclosan	289,54 [22]	0,0145	0,0146	1,008 · 10 <sup>-3</sup>

## 4.2.2 Měření spekter zásobních roztoků léčiv

Vzhledem k tomu, že náš spektrofotometr vykazuje spolehlivé hodnoty absorpčních pouze v určitém rozmezí, museli jsme zásobní roztoky dále naředit. Pro nejspolehlivější výsledky se jako nejvhodnější ředění ukázalo takové, jehož absorpční spektrum dosahuje co nejvyšších přijatelných hodnot pro náš spektrofotometr. Pro každé léčivo jsme tedy zvolili individuální poměr ředění. Jako ředidlo byl použit methanol, stejně jako pro slepý vzorek. Byly použity křemenné kyvety o optické délce 1 cm.

Pro dopočet výsledných koncentrací v kyvetě jsme využili směšovací rovnici

$$V_1c_1 + V_2c_2 = V_3c_3.$$

Hodnota  $V_1$  označuje objem první složky roztoku, v našem případě léčiva. Hodnota  $V_2$  označuje objem druhé složky roztoku, v našem případě methanolu. Hodnota  $c_1$  značí koncentraci první složky roztoku, v našem případě léčiva. Hodnota  $c_2$  značí koncentraci druhé složky roztoku, v našem případě methanolu. Hodnota  $V_3$  označuje celkový objem všech složek roztoku, tedy v našem případě  $V_1 + V_2$ . Hodnota  $c_3$  značí výslednou koncentraci roztoku. V našem případě hodnoty objemů uvádíme v ml a hodnoty koncentrací v mol/dm<sup>3</sup>.

Příklad uvedeme na fenacetinu. Do kyvety jsme použili 0,45 ml zásobního roztoku fenacetinu (viz. tabulka 4.2) o koncentraci 1,016 · 10<sup>-3</sup> mol/dm<sup>3</sup> (viz. tabulka 4.1) a doplnili jsme methanolem na celkový objem 3 ml.

$$0,45 \cdot 10^{-3} \cdot 1,016 \cdot 10^{-3} + 2,55 \cdot 10^{-3} \cdot 0 = 3 \cdot 10^{-3} c_3$$

$$4,57 \cdot 10^{-7} = 3 \cdot 10^{-3} c_3$$

$$c_3 = 1,52 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$$

Stejným postupem jsme dopočítali výsledné koncentrace v kyvetě pro ostatní léčiva.

V následující tabulce uvádíme použitý objem zásobního roztoku, methanolu a výslednou koncentraci roztoků léčiv, jejichž absorpční spektra jsme změřili. Použitý objem zásobního roztoku a methanolu jsme zaokrouhlili na tři desetinná místa.

Tabulka 4.2: Výsledné koncentrace roztoků léčiv v kyvetě o objemu 3 ml použité pro měření jejich absorpčních spekter

Léčivo	Objem zásobního roztoku [ml]	Objem methanolu [ml]	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]
Diazepam	0,215	2,785	7,20 · 10 <sup>-5</sup>
Fenacetin	0,450	2,550	1,52 · 10 <sup>-4</sup>
Kodein	0,500	2,500	1,67 · 10 <sup>-4</sup>
Metamizol	0,430	2,570	1,44 · 10 <sup>-4</sup>
Pitofenon	0,320	2,680	1,09 · 10 <sup>-4</sup>
Triclosan	0,200	2,800	6,72 · 10 <sup>-5</sup>

### 4.2.3 Výpočet molárních absorpčních koeficientů

Pro využití přesně určených nebo přeuračených systémů potřebujeme znát molární absorpční koeficienty použitých léčiv. Zvolili jsme šest vlnových délek, konkrétně 205, 221, 236, 248, 262 a 279 nm, které jsme v různých kombinacích použili pro všechny výpočty pomocí přesně určených nebo přeuračených systémů. Vlnové délky jsme vybrali tak, aby mezi nimi byl rovnoměrný rozestup. Z absorpčních spekter jednotlivých léčiv jsme zjistili absorbance při jistých vlnových délkách. Ze vztahu v definici 3.1.3 z předchozí kapitoly jsme vyjádřili  $\varepsilon$ , tedy

$$\varepsilon = \frac{A}{c \cdot l},$$

kde  $c$  známe (viz. tabulka 4.2) a  $l = 1$ , protože jsme použili kyvetu o optické délce 1 cm. V tabulkách 4.3 až 4.8 uvádíme přehled takto vypočtených molárních absorpčních koeficientů pro použité vlnové délky.

Tabulka 4.3: Molární absorpční koeficienty pro diazepam

Vlnová délka [nm]	Absorbance	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]	Molární absorpční koeficient [dm <sup>3</sup> · mol <sup>-1</sup> · cm <sup>-1</sup> ]
205	2,49	7,20 · 10 <sup>-5</sup>	3,46 · 10 <sup>4</sup>
221	2,37	7,20 · 10 <sup>-5</sup>	3,29 · 10 <sup>4</sup>
236	2,39	7,20 · 10 <sup>-5</sup>	3,33 · 10 <sup>4</sup>
248	1,47	7,20 · 10 <sup>-5</sup>	2,04 · 10 <sup>4</sup>
262	9,62 · 10 <sup>-1</sup>	7,20 · 10 <sup>-5</sup>	1,34 · 10 <sup>4</sup>
279	3,08 · 10 <sup>-1</sup>	7,20 · 10 <sup>-5</sup>	4,28 · 10 <sup>3</sup>



Tabulka 4.4: Molární absorpční koeficienty pro fenacetin

Vlnová délka [nm]	Absorbance	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]	Molární absorpční koeficient [dm <sup>3</sup> · mol <sup>-1</sup> · cm <sup>-1</sup> ]
205	2,37	1,52 · 10 <sup>-4</sup>	1,55 · 10 <sup>4</sup>
221	5,71 · 10 <sup>-1</sup>	1,52 · 10 <sup>-4</sup>	3,75 · 10 <sup>3</sup>
236	1,69	1,52 · 10 <sup>-4</sup>	1,11 · 10 <sup>4</sup>
248	2,49	1,52 · 10 <sup>-4</sup>	1,64 · 10 <sup>4</sup>
262	1,64	1,52 · 10 <sup>-4</sup>	1,08 · 10 <sup>4</sup>
279	3,64 · 10 <sup>-1</sup>	1,52 · 10 <sup>-4</sup>	2,39 · 10 <sup>3</sup>

Tabulka 4.5: Molární absorpční koeficienty pro kodein

Vlnová délka [nm]	Absorbance	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]	Molární absorpční koeficient [dm <sup>3</sup> · mol <sup>-1</sup> · cm <sup>-1</sup> ]
205	2,25	1,67 · 10 <sup>-4</sup>	1,34 · 10 <sup>4</sup>
221	2,06	1,67 · 10 <sup>-4</sup>	1,24 · 10 <sup>4</sup>
236	6,53 · 10 <sup>-1</sup>	1,67 · 10 <sup>-4</sup>	3,91 · 10 <sup>3</sup>
248	4,98 · 10 <sup>-1</sup>	1,67 · 10 <sup>-4</sup>	2,98 · 10 <sup>3</sup>
262	5,17 · 10 <sup>-2</sup>	1,67 · 10 <sup>-4</sup>	3,09 · 10 <sup>2</sup>
279	1,57 · 10 <sup>-1</sup>	1,67 · 10 <sup>-4</sup>	9,42 · 10 <sup>2</sup>

Tabulka 4.6: Molární absorpční koeficienty pro metamizol

Vlnová délka [nm]	Absorbance	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]	Molární absorpční koeficient [dm <sup>3</sup> · mol <sup>-1</sup> · cm <sup>-1</sup> ]
205	2,43	1,44 · 10 <sup>-4</sup>	1,69 · 10 <sup>4</sup>
221	1,23	1,44 · 10 <sup>-4</sup>	8,59 · 10 <sup>3</sup>
236	1,38	1,44 · 10 <sup>-4</sup>	9,59 · 10 <sup>3</sup>
248	1,27	1,44 · 10 <sup>-4</sup>	8,84 · 10 <sup>3</sup>
262	1,18	1,44 · 10 <sup>-4</sup>	8,22 · 10 <sup>3</sup>
279	1,06	1,44 · 10 <sup>-4</sup>	7,35 · 10 <sup>3</sup>

Tabulka 4.7: Molární absorpční koeficienty pro pitofenon

Vlnová délka [nm]	Absorbance	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]	Molární absorpční koeficient [dm <sup>3</sup> · mol <sup>-1</sup> · cm <sup>-1</sup> ]
205	2,30	1,09 · 10 <sup>-4</sup>	2,12 · 10 <sup>4</sup>
221	1,82	1,09 · 10 <sup>-4</sup>	1,67 · 10 <sup>4</sup>
236	8,85 · 10 <sup>-1</sup>	1,09 · 10 <sup>-4</sup>	8,15 · 10 <sup>3</sup>
248	6,97 · 10 <sup>-1</sup>	1,09 · 10 <sup>-4</sup>	6,42 · 10 <sup>3</sup>
262	1,17	1,09 · 10 <sup>-4</sup>	1,08 · 10 <sup>4</sup>
279	1,60	1,09 · 10 <sup>-4</sup>	1,47 · 10 <sup>4</sup>

Tabulka 4.8: Molární absorpční koeficienty pro triclosan

Vlnová délka [nm]	Absorbance	Koncentrace [mol/dm <sup>3</sup> ]	Molární absorpční koeficient [dm <sup>3</sup> · mol <sup>-1</sup> · cm <sup>-1</sup> ]
205	2,26	6,72 · 10 <sup>-5</sup>	3,36 · 10 <sup>4</sup>
221	1,22	6,72 · 10 <sup>-5</sup>	1,81 · 10 <sup>4</sup>
236	8,72 · 10 <sup>-1</sup>	6,72 · 10 <sup>-5</sup>	1,30 · 10 <sup>4</sup>
248	2,86 · 10 <sup>-1</sup>	6,72 · 10 <sup>-5</sup>	4,25 · 10 <sup>3</sup>
262	7,88 · 10 <sup>-2</sup>	6,72 · 10 <sup>-5</sup>	1,17 · 10 <sup>3</sup>
279	3,02 · 10 <sup>-1</sup>	6,72 · 10 <sup>-3</sup>	4,49 · 10 <sup>3</sup>

#### 4.2.4 Příprava vícesložkových roztoků léčiv

Připravili jsme dvousložkové a třísložkové směsi roztoků léčiv v různém poměru. Vzhledem k tomu, že nelze z důvodu rozdílných koncentrací zásobních roztoků přesně poměr dodržet, budeme o tomto poměru dále mluvit jako o plánovaném poměru. Přehled složení jednotlivých směsí uvádíme v tabulkách 4.9 a 4.10.

Tabulka 4.9: Zvolené kombinace dvousložkových směsí a jejich plánované poměry

Kombinace léčiv	Plánovaný poměr		
Fenacetin : triclosan	1:1	1:2	3:2
Kodein : pitofenon	1:1	1:2	3:1
Diazepam : triclosan	1:1	1:2	3:1

Tabulka 4.10: Zvolené kombinace tříložkových směsí a jejich plánované poměry

Kombinace léčiv	Plánovaný poměr			
Fenacetin : metamizol : kodein	1:1:1	1:2:1	2:2:1	1:1:3
Diazepam : triclosan : pitofenon	1:1:1	2:1:2	1:1:2	2:1:1

#### 4.2.5 Dopočet výsledných koncentrací v kyvetě pro směsi léčiv

Ze zásobního roztoku jsme odebrali jistou část roztoku do kyvety, kde došlo k dalšímu naředění. Bylo proto nutné dopočítat výslednou koncentraci léčiv v kyvetě. Při výpočtech koncentrací jsme uplatnili stejný postup jako v odstavci 4.2.2.

Zde uvádíme tabulky 4.11 až 4.15 vyjadřující, jaké koncentrace léčiv byly použity ve směsích, jejichž absorpční spektra byla měřena, a jejich reálný poměr. Reálným poměrem budeme nazývat poměr skutečně použitých koncentrací léčiv v kyvetě.

#### Dvousložkové směsi

Tabulka 4.11: Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs fenacetin - triclosan

	Plánovaný poměr	Použitá koncentrace		Reálný poměr
		F	T	
1:1	1,00	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$5,04 \cdot 10^{-5}$	1,01
1:2	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$2,71 \cdot 10^{-5}$	$5,38 \cdot 10^{-5}$	$5,03 \cdot 10^{-1}$
3:2	1,50	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$3,36 \cdot 10^{-5}$	1,51

Tabulka 4.12: Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs kodein - pitofenon

	Plánovaný poměr	Použitá koncentrace		Reálný poměr
		K	P	
1:1	1,00	$6,68 \cdot 10^{-5}$	$6,79 \cdot 10^{-5}$	$9,85 \cdot 10^{-1}$
1:2	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$4,34 \cdot 10^{-5}$	$8,82 \cdot 10^{-5}$	$4,92 \cdot 10^{-1}$
3:1	3,00	$1,00 \cdot 10^{-4}$	$3,39 \cdot 10^{-5}$	2,95

Tabulka 4.13: Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs diazepam - triclosan

Plánovaný poměr		Použitá koncentrace		Reálný poměr
		D	T	
1:1	1,00	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$3,36 \cdot 10^{-5}$	$9,96 \cdot 10^{-1}$
1:2	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$2,01 \cdot 10^{-5}$	$4,03 \cdot 10^{-5}$	$4,98 \cdot 10^{-1}$
3:1	3,00	$5,02 \cdot 10^{-5}$	$1,68 \cdot 10^{-5}$	2,99

### Třísložkové směsi

Tabulka 4.14: Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs fenacetin - metamizol - kodein

	Plánovaný poměr		Použitá koncentrace			Reálný poměr	
	F:M	F:K	F	M	K	F:M	F:K
1:1:1	1,00	1,00	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$5,01 \cdot 10^{-5}$	$5,01 \cdot 10^{-5}$	1,01	1,01
1:2:1	$5,00 \cdot 10^{-1}$	1,00	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$6,68 \cdot 10^{-5}$	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$5,07 \cdot 10^{-1}$	1,01
2:2:1	1,00	2,00	$5,42 \cdot 10^{-5}$	$5,34 \cdot 10^{-5}$	$2,67 \cdot 10^{-5}$	1,01	2,03
1:1:3	1,00	$3,33 \cdot 10^{-1}$	$2,71 \cdot 10^{-5}$	$2,67 \cdot 10^{-5}$	$8,02 \cdot 10^{-5}$	1,01	$3,38 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 4.15: Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs diazepam - triclosan - pitofenon

	Plánovaný poměr		Použitá koncentrace			Reálný poměr	
	D:T	D:P	D	T	P	D:T	D:P
1:1:1	1,00	1,00	$2,34 \cdot 10^{-5}$	$2,35 \cdot 10^{-5}$	$2,38 \cdot 10^{-5}$	$9,96 \cdot 10^{-1}$	$9,87 \cdot 10^{-1}$
2:1:2	2,00	1,00	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$1,68 \cdot 10^{-5}$	$3,39 \cdot 10^{-5}$	1,99	$9,87 \cdot 10^{-1}$
1:1:2	1,00	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$2,01 \cdot 10^{-5}$	$2,02 \cdot 10^{-5}$	$4,07 \cdot 10^{-5}$	$9,96 \cdot 10^{-1}$	$4,93 \cdot 10^{-1}$
2:1:1	2,00	2,00	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$1,68 \cdot 10^{-5}$	$1,70 \cdot 10^{-5}$	1,99	1,97

### 4.2.6 Odečtené hodnoty absorbancí vícesložkových roztoků při stanovených vlnových délkách

Zde uvádíme tabulky 4.16 až 4.20 vyjadřující hodnoty absorbancí při zvolených vlnových délkách u směsí léčiv.

## Dvousložkové směsi

Tabulka 4.16: Naměřené hodnoty absorbancí směsi fenacetin - triclosan

Vlnová délka [ <i>nm</i> ]	Absorbance pro plánovaný poměr		
	1:1	1:2	3:2
205	2,42	2,39	2,31
221	1,10	1,31	$9,47 \cdot 10^{-1}$
236	1,17	1,17	1,10
248	$9,83 \cdot 10^{-1}$	$7,63 \cdot 10^{-1}$	1,04
262	$5,40 \cdot 10^{-1}$	$4,12 \cdot 10^{-1}$	$6,05 \cdot 10^{-1}$
279	$3,20 \cdot 10^{-1}$	$3,91 \cdot 10^{-1}$	$3,03 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 4.17: Naměřené hodnoty absorbancí směsi kodein - pitofenon

Vlnová délka [ <i>nm</i> ]	Absorbance pro plánovaný poměr		
	1:1	1:2	3:1
205	2,36	2,28	2,14
221	1,98	1,87	1,76
236	$8,07 \cdot 10^{-1}$	$8,13 \cdot 10^{-1}$	$6,16 \cdot 10^{-1}$
248	$6,32 \cdot 10^{-1}$	$6,39 \cdot 10^{-1}$	$4,72 \cdot 10^{-1}$
262	$7,62 \cdot 10^{-1}$	$9,10 \cdot 10^{-1}$	$3,54 \cdot 10^{-1}$
279	1,07	1,27	$5,52 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 4.18: Naměřené hodnoty absorbancí směsi diazepam - triclosan

Vlnová délka [ <i>nm</i> ]	Absorbance pro plánovaný poměr		
	1:1	1:2	3:1
205	2,51	2,34	2,40
221	1,80	1,52	1,88
236	1,61	1,28	1,79
248	$8,53 \cdot 10^{-1}$	$6,00 \cdot 10^{-1}$	1,02
262	$5,07 \cdot 10^{-1}$	$3,17 \cdot 10^{-1}$	$6,33 \cdot 10^{-1}$
279	$3,26 \cdot 10^{-1}$	$2,86 \cdot 10^{-1}$	$2,68 \cdot 10^{-1}$

## Třísložkové směsi

Tabulka 4.19: Naměřené hodnoty absorbancí směsi fenacetin - metamizol - kodein

Vlnová délka [nm]	Absorbance pro plánovaný poměr			
	1:1:1	1:2:1	2:2:1	1:1:3
205	2,31	2,30	2,37	2,24
221	1,26	1,25	1,15	1,56
236	1,19	1,22	1,32	$9,86 \cdot 10^{-1}$
248	1,39	1,32	1,56	1,04
262	$9,24 \cdot 10^{-1}$	$9,80 \cdot 10^{-1}$	1,11	$6,21 \cdot 10^{-1}$
279	$5,09 \cdot 10^{-1}$	$6,59 \cdot 10^{-1}$	$6,17 \cdot 10^{-1}$	$4,10 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 4.20: Naměřené hodnoty absorbancí směsi diazepam - triclosan - pitofenon

Vlnová délka [nm]	Absorbance pro plánovaný poměr			
	1:1:1	2:1:2	1:1:2	2:1:1
205	2,45	2,56	2,50	2,37
221	1,92	2,08	1,82	1,87
236	1,57	1,71	1,37	1,62
248	$9,13 \cdot 10^{-1}$	$9,92 \cdot 10^{-1}$	$7,79 \cdot 10^{-1}$	$9,28 \cdot 10^{-1}$
262	$7,08 \cdot 10^{-1}$	$8,06 \cdot 10^{-1}$	$7,02 \cdot 10^{-1}$	$6,64 \cdot 10^{-1}$
279	$6,97 \cdot 10^{-1}$	$7,50 \cdot 10^{-1}$	$8,03 \cdot 10^{-1}$	$5,10 \cdot 10^{-1}$

### 4.2.7 Výpočet relativní chyby poměru

K vypracování této části podkapitoly byl použit zdroj [24].

U každého vypočítaného poměru jsme vypočítali relativní chybu poměru podle vztahu

$$X = \frac{|RP - VP|}{RP},$$

kde RP značí reálně použitý poměr a VP značí poměr vypočítaný měřením.

Relativní chyba je bezrozměrná veličina a lze ji vyjádřit i v procentech.

## 5. Přehled výsledků

Zde uvádíme nejprve ukázkový výpočet přeurčeného systému pro dvousložkovou soustavu a následně výsledky pro jednotlivé kombinace léčiv. Hodnoty koncentrací jsou uvedeny v  $[mol/dm^3]$ .

### 5.1 Ukázkový výpočet dvousložkové směsi fenacetin - triclosan pro plánovaný poměr 1:1

Dle soustavy rovnic (3.1) jsme odvodili soustavu následujících rovnic. Levá strana rovnic vychází na základě hodnot uvedených v tabulce 4.16 a pravá strana rovnic vychází z hodnot uvedených v tabulkách 4.4 a 4.8.

$$\begin{aligned}2,42 &= 1,55 \cdot 10^4 c_1 + 3,36 \cdot 10^4 c_2 & (5.1) \\1,10 &= 3,75 \cdot 10^3 c_1 + 1,81 \cdot 10^4 c_2 \\1,17 &= 1,11 \cdot 10^4 c_1 + 1,30 \cdot 10^4 c_2 \\9,83 \cdot 10^{-1} &= 1,64 \cdot 10^4 c_1 + 4,25 \cdot 10^3 c_2 \\5,40 \cdot 10^{-1} &= 1,08 \cdot 10^4 c_1 + 1,17 \cdot 10^3 c_2 \\3,20 \cdot 10^{-1} &= 2,39 \cdot 10^3 c_1 + 4,49 \cdot 10^3 c_2\end{aligned}$$

Soustavu rovnic (5.1) jsme převedli do maticového zápisu, kdy

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{1,1} & \varepsilon_{1,2} \\ \varepsilon_{2,1} & \varepsilon_{2,2} \\ \varepsilon_{3,1} & \varepsilon_{3,2} \\ \varepsilon_{4,1} & \varepsilon_{4,2} \\ \varepsilon_{5,1} & \varepsilon_{5,2} \\ \varepsilon_{6,1} & \varepsilon_{6,2} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad d = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \end{bmatrix}.$$

Dle rovnice (2.4) můžeme vypočítat výsledné koncentrace. Nejprve jsme vypočítali

$$\mathbf{A}^T d = \begin{bmatrix} 1,55 \cdot 10^4 & 3,75 \cdot 10^3 & 1,11 \cdot 10^4 & 1,64 \cdot 10^4 & 1,08 \cdot 10^4 & 2,39 \cdot 10^3 \\ 3,36 \cdot 10^4 & 1,81 \cdot 10^4 & 1,30 \cdot 10^4 & 4,25 \cdot 10^3 & 1,17 \cdot 10^3 & 4,49 \cdot 10^3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2,42 \\ 1,10 \\ 1,17 \\ 9,83 \cdot 10^{-1} \\ 5,40 \cdot 10^{-1} \\ 3,20 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7,73 \cdot 10^4 \\ 1,22 \cdot 10^5 \end{bmatrix}.$$

Dále

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1,55 \cdot 10^4 & 3,75 \cdot 10^3 & 1,11 \cdot 10^4 & 1,64 \cdot 10^4 & 1,08 \cdot 10^4 & 2,39 \cdot 10^3 \\ 3,36 \cdot 10^4 & 1,81 \cdot 10^4 & 1,30 \cdot 10^4 & 4,25 \cdot 10^3 & 1,17 \cdot 10^3 & 4,49 \cdot 10^3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1,55 \cdot 10^4 & 3,36 \cdot 10^4 \\ 3,75 \cdot 10^3 & 1,81 \cdot 10^4 \\ 1,11 \cdot 10^4 & 1,30 \cdot 10^4 \\ 1,64 \cdot 10^4 & 4,25 \cdot 10^3 \\ 1,08 \cdot 10^4 & 1,17 \cdot 10^3 \\ 2,39 \cdot 10^3 & 4,49 \cdot 10^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7,70 \cdot 10^8 & 8,28 \cdot 10^8 \\ 8,28 \cdot 10^8 & 1,67 \cdot 10^9 \end{bmatrix}.$$

Poté

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} = \begin{bmatrix} 2,79 \cdot 10^{-9} & -1,39 \cdot 10^{-9} \\ -1,39 \cdot 10^{-9} & 1,29 \cdot 10^{-9} \end{bmatrix}.$$

Pokud  $x = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T d$ ,

$$x = \begin{bmatrix} 2,79 \cdot 10^{-9} & -1,39 \cdot 10^{-9} \\ -1,39 \cdot 10^{-9} & 1,29 \cdot 10^{-9} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7,73 \cdot 10^4 \\ 1,22 \cdot 10^5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4,60 \cdot 10^{-5} \\ 5,07 \cdot 10^{-5} \end{bmatrix}.$$

Stejný postup jsme využili u ostatních příkladů.



## 5.2 Výsledky dvousložkových směsí

### 5.2.1 Směs fenacetin - triclosan

Reálně použité koncentrace a jejich reálné poměry uvádíme v tabulce 4.11. Hodnoty molárních absorpčních koeficientů vycházejí z tabulek 4.4 a 4.8. Hodnoty naměřených absorbancí jednotlivých směsí uvádíme v tabulce 4.16.

Tabulka 5.1: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - triclosan a plánovaný poměr 1:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný	Relativní chyba
	F	T	poměr	poměru
205, 248	$4,70 \cdot 10^{-5}$	$5,01 \cdot 10^{-5}$	$9,38 \cdot 10^{-1}$	$6,85 \cdot 10^{-2}$
221, 262	$4,45 \cdot 10^{-5}$	$5,14 \cdot 10^{-5}$	$8,65 \cdot 10^{-1}$	$1,41 \cdot 10^{-1}$
236, 279	$5,77 \cdot 10^{-5}$	$4,04 \cdot 10^{-5}$	1,43	$4,18 \cdot 10^{-1}$
205, 262	$4,45 \cdot 10^{-5}$	$5,13 \cdot 10^{-5}$	$8,68 \cdot 10^{-1}$	$1,38 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$4,68 \cdot 10^{-5}$	$5,09 \cdot 10^{-5}$	$9,18 \cdot 10^{-1}$	$8,81 \cdot 10^{-2}$
221, 279	$3,24 \cdot 10^{-5}$	$5,39 \cdot 10^{-5}$	$6,00 \cdot 10^{-1}$	$4,04 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$4,47 \cdot 10^{-5}$	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$8,73 \cdot 10^{-1}$	$1,33 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$4,67 \cdot 10^{-5}$	$5,07 \cdot 10^{-5}$	$9,22 \cdot 10^{-1}$	$8,49 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$8,99 \cdot 10^{-1}$	$1,07 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$4,70 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$9,39 \cdot 10^{-1}$	$6,74 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$4,66 \cdot 10^{-5}$	$5,07 \cdot 10^{-5}$	$9,18 \cdot 10^{-1}$	$8,83 \cdot 10^{-2}$
236, 248, 279	$4,74 \cdot 10^{-5}$	$4,89 \cdot 10^{-5}$	$9,70 \cdot 10^{-1}$	$3,71 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$4,69 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$9,37 \cdot 10^{-1}$	$6,93 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$4,46 \cdot 10^{-5}$	$5,13 \cdot 10^{-5}$	$8,69 \cdot 10^{-1}$	$1,37 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$5,10 \cdot 10^{-5}$	$9,03 \cdot 10^{-1}$	$1,03 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$4,43 \cdot 10^{-5}$	$5,13 \cdot 10^{-5}$	$8,64 \cdot 10^{-1}$	$1,42 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$4,66 \cdot 10^{-5}$	$5,04 \cdot 10^{-5}$	$9,24 \cdot 10^{-1}$	$8,21 \cdot 10^{-2}$
236, 248, 262, 279	$4,63 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$9,26 \cdot 10^{-1}$	$8,07 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$4,59 \cdot 10^{-5}$	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$9,04 \cdot 10^{-1}$	$1,03 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$4,61 \cdot 10^{-1}$	$5,05 \cdot 10^{-5}$	$9,14 \cdot 10^{-1}$	$9,21 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$5,07 \cdot 10^{-5}$	$9,08 \cdot 10^{-1}$	$9,85 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 262, 279	$4,46 \cdot 10^{-5}$	$5,13 \cdot 10^{-1}$	$8,70 \cdot 10^{-1}$	$1,36 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$4,66 \cdot 10^{-5}$	$5,04 \cdot 10^{-5}$	$9,25 \cdot 10^{-1}$	$8,16 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$5,07 \cdot 10^{-5}$	$9,07 \cdot 10^{-1}$	$9,96 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$5,07 \cdot 10^{-5}$	$9,07 \cdot 10^{-1}$	$9,90 \cdot 10^{-2}$

Tabulka 5.2: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - triclosan a plánovaný poměr 1:2

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný poměr	Relativní chyba poměru
	F	T		
205, 248	$3,19 \cdot 10^{-5}$	$5,64 \cdot 10^{-5}$	$5,67 \cdot 10^{-1}$	$1,25 \cdot 10^{-1}$
221, 262	$3,10 \cdot 10^{-5}$	$6,61 \cdot 10^{-5}$	$4,69 \cdot 10^{-1}$	$6,84 \cdot 10^{-2}$
236, 279	$8,89 \cdot 10^{-6}$	$8,23 \cdot 10^{-5}$	$1,08 \cdot 10^{-1}$	$7,85 \cdot 10^{-1}$
205, 262	$3,21 \cdot 10^{-5}$	$5,63 \cdot 10^{-5}$	$5,69 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$2,93 \cdot 10^{-5}$	$6,64 \cdot 10^{-5}$	$4,42 \cdot 10^{-1}$	$1,23 \cdot 10^{-1}$
221, 279	$4,46 \cdot 10^{-5}$	$6,33 \cdot 10^{-5}$	$7,04 \cdot 10^{-1}$	$3,99 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$3,48 \cdot 10^{-5}$	$5,57 \cdot 10^{-5}$	$6,24 \cdot 10^{-1}$	$2,39 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$2,94 \cdot 10^{-5}$	$6,67 \cdot 10^{-5}$	$4,41 \cdot 10^{-1}$	$1,24 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$2,99 \cdot 10^{-5}$	$6,63 \cdot 10^{-5}$	$4,51 \cdot 10^{-1}$	$1,04 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$3,20 \cdot 10^{-5}$	$5,66 \cdot 10^{-5}$	$5,65 \cdot 10^{-1}$	$1,22 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$2,90 \cdot 10^{-5}$	$6,61 \cdot 10^{-5}$	$4,39 \cdot 10^{-1}$	$1,29 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$2,94 \cdot 10^{-5}$	$6,55 \cdot 10^{-5}$	$4,49 \cdot 10^{-1}$	$1,08 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$3,33 \cdot 10^{-5}$	$5,66 \cdot 10^{-5}$	$5,88 \cdot 10^{-1}$	$1,68 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$2,98 \cdot 10^{-5}$	$6,59 \cdot 10^{-5}$	$4,52 \cdot 10^{-1}$	$1,01 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$2,99 \cdot 10^{-5}$	$6,65 \cdot 10^{-5}$	$4,50 \cdot 10^{-1}$	$1,07 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$2,70 \cdot 10^{-5}$	$6,07 \cdot 10^{-5}$	$4,46 \cdot 10^{-1}$	$1,15 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$3,00 \cdot 10^{-5}$	$5,99 \cdot 10^{-5}$	$5,01 \cdot 10^{-1}$	$5,41 \cdot 10^{-3}$
236, 248, 262, 279	$3,01 \cdot 10^{-5}$	$6,48 \cdot 10^{-5}$	$4,65 \cdot 10^{-1}$	$7,69 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$2,96 \cdot 10^{-5}$	$6,60 \cdot 10^{-5}$	$4,49 \cdot 10^{-1}$	$1,09 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,29 \cdot 10^{-5}$	$5,68 \cdot 10^{-5}$	$5,78 \cdot 10^{-1}$	$1,49 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$2,97 \cdot 10^{-5}$	$5,97 \cdot 10^{-5}$	$4,98 \cdot 10^{-1}$	$1,06 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 262, 279	$2,97 \cdot 10^{-5}$	$6,01 \cdot 10^{-5}$	$4,94 \cdot 10^{-1}$	$1,98 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,00 \cdot 10^{-5}$	$6,00 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$6,11 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,05 \cdot 10^{-5}$	$5,96 \cdot 10^{-5}$	$5,12 \cdot 10^{-1}$	$1,61 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,05 \cdot 10^{-5}$	$5,97 \cdot 10^{-5}$	$5,11 \cdot 10^{-1}$	$1,47 \cdot 10^{-2}$

Tabulka 5.3: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - triclosan a plánovaný poměr 3:2

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný poměr	Relativní chyba poměru
	F	T		
205, 248	$5,22 \cdot 10^{-5}$	$4,47 \cdot 10^{-5}$	1,17	$2,28 \cdot 10^{-1}$
221, 262	$5,15 \cdot 10^{-5}$	$4,16 \cdot 10^{-5}$	1,24	$1,81 \cdot 10^{-1}$
236, 279	$5,37 \cdot 10^{-5}$	$3,90 \cdot 10^{-5}$	1,38	$8,74 \cdot 10^{-2}$
205, 262	$5,11 \cdot 10^{-5}$	$4,52 \cdot 10^{-5}$	1,13	$2,51 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$5,30 \cdot 10^{-5}$	$4,13 \cdot 10^{-5}$	1,28	$1,50 \cdot 10^{-1}$
221, 279	$4,69 \cdot 10^{-5}$	$4,26 \cdot 10^{-5}$	1,10	$2,70 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$4,93 \cdot 10^{-5}$	$4,56 \cdot 10^{-5}$	1,08	$2,83 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$5,30 \cdot 10^{-5}$	$4,12 \cdot 10^{-5}$	1,29	$1,48 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$5,25 \cdot 10^{-5}$	$4,15 \cdot 10^{-5}$	1,27	$1,61 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$5,22 \cdot 10^{-5}$	$4,46 \cdot 10^{-5}$	1,17	$2,26 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$5,27 \cdot 10^{-5}$	$4,09 \cdot 10^{-5}$	1,29	$1,48 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$5,36 \cdot 10^{-5}$	$3,90 \cdot 10^{-5}$	1,37	$9,02 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$4,46 \cdot 10^{-5}$	1,15	$2,41 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$4,15 \cdot 10^{-5}$	1,23	$1,83 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$5,25 \cdot 10^{-5}$	$4,14 \cdot 10^{-5}$	1,27	$1,59 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$5,30 \cdot 10^{-5}$	$4,36 \cdot 10^{-5}$	1,22	$1,96 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$5,23 \cdot 10^{-5}$	$4,36 \cdot 10^{-5}$	1,20	$2,06 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$5,29 \cdot 10^{-5}$	$3,98 \cdot 10^{-5}$	1,33	$1,21 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248, 262, 279	$5,23 \cdot 10^{-5}$	$4,10 \cdot 10^{-5}$	1,28	$1,55 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$4,46 \cdot 10^{-5}$	1,51	$2,41 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$5,26 \cdot 10^{-5}$	$4,37 \cdot 10^{-5}$	1,20	$2,04 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$4,40 \cdot 10^{-5}$	1,16	$2,29 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$5,22 \cdot 10^{-5}$	$4,35 \cdot 10^{-5}$	1,20	$2,05 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$5,20 \cdot 10^{-5}$	$4,37 \cdot 10^{-5}$	1,19	$2,13 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$5,20 \cdot 10^{-5}$	$4,37 \cdot 10^{-5}$	1,19	$2,12 \cdot 10^{-1}$

## 5.2.2 Směs kodein - pitofenon

Reálně použité koncentrace a jejich reálné poměry uvádíme v tabulce 4.12. Hodnoty molárních absorpčních koeficientů vycházejí z tabulek 4.5 a 4.7. Hodnoty naměřených absorbancí jednotlivých směsí uvádíme v tabulce 4.17.

Tabulka 5.4: Výsledné hodnoty pro směs kodein - pitofenon a plánovaný poměr 1:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný	Relativní chyba
	K	P	poměr	poměru
221, 262	$6,71 \cdot 10^{-5}$	$6,86 \cdot 10^{-5}$	$9,79 \cdot 10^{-1}$	$6,06 \cdot 10^{-3}$
236, 279	$6,28 \cdot 10^{-5}$	$6,89 \cdot 10^{-5}$	$9,11 \cdot 10^{-1}$	$7,51 \cdot 10^{-2}$
205, 262	$6,79 \cdot 10^{-5}$	$6,86 \cdot 10^{-5}$	$9,90 \cdot 10^{-1}$	$5,61 \cdot 10^{-3}$
221, 248	$7,21 \cdot 10^{-5}$	$6,49 \cdot 10^{-5}$	1,11	$1,29 \cdot 10^{-1}$
221, 279	$6,70 \cdot 10^{-5}$	$6,87 \cdot 10^{-5}$	$9,76 \cdot 10^{-1}$	$8,95 \cdot 10^{-3}$
236, 262	$6,33 \cdot 10^{-5}$	$6,87 \cdot 10^{-5}$	$9,21 \cdot 10^{-1}$	$6,42 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 262	$6,80 \cdot 10^{-5}$	$6,83 \cdot 10^{-5}$	$9,96 \cdot 10^{-1}$	$1,12 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 279	$6,70 \cdot 10^{-5}$	$6,86 \cdot 10^{-5}$	$9,77 \cdot 10^{-1}$	$7,81 \cdot 10^{-3}$
221, 248, 262	$6,72 \cdot 10^{-5}$	$6,84 \cdot 10^{-5}$	$9,82 \cdot 10^{-1}$	$2,42 \cdot 10^{-3}$
205, 248, 279	$6,78 \cdot 10^{-5}$	$6,85 \cdot 10^{-5}$	$9,89 \cdot 10^{-1}$	$4,53 \cdot 10^{-3}$
221, 236, 248	$7,31 \cdot 10^{-5}$	$6,42 \cdot 10^{-5}$	1,14	$1,57 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$6,30 \cdot 10^{-5}$	$6,89 \cdot 10^{-5}$	$9,15 \cdot 10^{-1}$	$7,10 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$6,77 \cdot 10^{-5}$	$6,84 \cdot 10^{-5}$	$9,90 \cdot 10^{-1}$	$5,44 \cdot 10^{-3}$
221, 236, 262, 279	$6,69 \cdot 10^{-5}$	$6,85 \cdot 10^{-5}$	$9,76 \cdot 10^{-1}$	$8,71 \cdot 10^{-3}$
221, 248, 262, 279	$6,70 \cdot 10^{-5}$	$6,86 \cdot 10^{-5}$	$9,77 \cdot 10^{-1}$	$8,07 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 262, 279	$6,74 \cdot 10^{-5}$	$6,87 \cdot 10^{-5}$	$9,82 \cdot 10^{-1}$	$3,00 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248	$7,19 \cdot 10^{-5}$	$6,55 \cdot 10^{-5}$	1,10	$1,14 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$6,33 \cdot 10^{-5}$	$6,88 \cdot 10^{-5}$	$9,19 \cdot 10^{-1}$	$6,64 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$6,68 \cdot 10^{-5}$	$6,85 \cdot 10^{-5}$	$9,76 \cdot 10^{-1}$	$8,87 \cdot 10^{-3}$
205, 236, 248, 262, 279	$6,76 \cdot 10^{-5}$	$6,84 \cdot 10^{-5}$	$9,87 \cdot 10^{-1}$	$2,69 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 248, 262, 279	$6,74 \cdot 10^{-5}$	$6,86 \cdot 10^{-5}$	$9,83 \cdot 10^{-1}$	$1,93 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 262, 279	$6,74 \cdot 10^{-5}$	$6,85 \cdot 10^{-5}$	$9,83 \cdot 10^{-1}$	$1,35 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248, 279	$6,75 \cdot 10^{-5}$	$6,84 \cdot 10^{-5}$	$9,86 \cdot 10^{-1}$	$1,48 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248, 262	$6,78 \cdot 10^{-5}$	$6,82 \cdot 10^{-5}$	$9,93 \cdot 10^{-1}$	$8,67 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$6,74 \cdot 10^{-5}$	$6,85 \cdot 10^{-5}$	$9,84 \cdot 10^{-1}$	$3,95 \cdot 10^{-4}$

Tabulka 5.5: Výsledné hodnoty pro směs kodein - pitofenon a plánovaný poměr 1:2

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný	Relativní chyba
	K	P	poměr	poměru
221, 262	$3,89 \cdot 10^{-5}$	$8,30 \cdot 10^{-5}$	$4,69 \cdot 10^{-1}$	$4,81 \cdot 10^{-2}$
236, 279	$3,28 \cdot 10^{-5}$	$8,40 \cdot 10^{-5}$	$3,90 \cdot 10^{-1}$	$2,08 \cdot 10^{-1}$
205, 262	$3,90 \cdot 10^{-5}$	$8,30 \cdot 10^{-5}$	$4,70 \cdot 10^{-1}$	$4,56 \cdot 10^{-2}$
221, 248	$4,45 \cdot 10^{-5}$	$7,89 \cdot 10^{-5}$	$5,64 \cdot 10^{-1}$	$1,46 \cdot 10^{-1}$
221, 279	$3,79 \cdot 10^{-5}$	$8,37 \cdot 10^{-5}$	$4,53 \cdot 10^{-1}$	$8,01 \cdot 10^{-2}$
236, 262	$3,47 \cdot 10^{-5}$	$8,31 \cdot 10^{-5}$	$4,18 \cdot 10^{-1}$	$1,52 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$3,91 \cdot 10^{-5}$	$8,27 \cdot 10^{-5}$	$4,72 \cdot 10^{-1}$	$4,02 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 279	$3,79 \cdot 10^{-5}$	$8,36 \cdot 10^{-5}$	$4,53 \cdot 10^{-1}$	$7,93 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262	$3,90 \cdot 10^{-5}$	$8,28 \cdot 10^{-5}$	$4,71 \cdot 10^{-1}$	$4,37 \cdot 10^{-2}$
205, 248, 279	$3,78 \cdot 10^{-5}$	$8,36 \cdot 10^{-5}$	$4,52 \cdot 10^{-1}$	$8,14 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$4,55 \cdot 10^{-5}$	$7,81 \cdot 10^{-5}$	$5,82 \cdot 10^{-1}$	$1,83 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$3,30 \cdot 10^{-5}$	$8,40 \cdot 10^{-5}$	$3,93 \cdot 10^{-1}$	$2,02 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$3,77 \cdot 10^{-5}$	$8,35 \cdot 10^{-5}$	$4,52 \cdot 10^{-1}$	$8,17 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$3,81 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-5}$	$4,57 \cdot 10^{-1}$	$7,11 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262, 279	$3,82 \cdot 10^{-5}$	$8,34 \cdot 10^{-5}$	$4,58 \cdot 10^{-1}$	$6,92 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 262, 279	$3,83 \cdot 10^{-5}$	$8,34 \cdot 10^{-5}$	$4,59 \cdot 10^{-1}$	$6,80 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248	$4,47 \cdot 10^{-5}$	$7,91 \cdot 10^{-5}$	$5,65 \cdot 10^{-1}$	$1,47 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$8,37 \cdot 10^{-5}$	$4,05 \cdot 10^{-1}$	$1,78 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248, 262, 279	$3,80 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-5}$	$4,57 \cdot 10^{-1}$	$7,22 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,80 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-5}$	$4,57 \cdot 10^{-1}$	$7,23 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$3,83 \cdot 10^{-5}$	$8,34 \cdot 10^{-5}$	$4,59 \cdot 10^{-1}$	$6,70 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 262, 279	$3,83 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-5}$	$4,59 \cdot 10^{-1}$	$6,67 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,81 \cdot 10^{-5}$	$8,34 \cdot 10^{-5}$	$4,56 \cdot 10^{-1}$	$7,31 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,93 \cdot 10^{-5}$	$8,26 \cdot 10^{-5}$	$4,76 \cdot 10^{-1}$	$3,22 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,83 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-5}$	$4,60 \cdot 10^{-1}$	$6,58 \cdot 10^{-2}$

Tabulka 5.6: Výsledné hodnoty pro směs kodein - pitofenon a plánovaný poměr 3:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný	Relativní chyba
	K	P	poměr	poměru
221, 262	$1,02 \cdot 10^{-4}$	$2,98 \cdot 10^{-5}$	3,43	$1,63 \cdot 10^{-1}$
236, 279	$9,15 \cdot 10^{-5}$	$3,17 \cdot 10^{-5}$	2,89	$2,23 \cdot 10^{-2}$
205, 262	$1,13 \cdot 10^{-4}$	$2,95 \cdot 10^{-5}$	3,83	$2,95 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$1,16 \cdot 10^{-4}$	$1,96 \cdot 10^{-5}$	5,91	1,00
221, 279	$1,00 \cdot 10^{-4}$	$3,11 \cdot 10^{-5}$	3,23	$9,41 \cdot 10^{-2}$
236, 262	$9,50 \cdot 10^{-5}$	$3,00 \cdot 10^{-5}$	3,17	$7,22 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 262	$1,13 \cdot 10^{-4}$	$2,84 \cdot 10^{-5}$	3,98	$3,48 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$1,00 \cdot 10^{-4}$	$3,08 \cdot 10^{-5}$	3,26	$1,04 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$1,02 \cdot 10^{-4}$	$2,93 \cdot 10^{-5}$	3,50	$1,84 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$1,11 \cdot 10^{-4}$	$2,99 \cdot 10^{-5}$	3,71	$2,58 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$1,15 \cdot 10^{-4}$	$2,01 \cdot 10^{-5}$	5,75	$9,45 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$9,09 \cdot 10^{-5}$	$3,17 \cdot 10^{-5}$	2,87	$2,95 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$1,11 \cdot 10^{-4}$	$2,94 \cdot 10^{-5}$	3,77	$2,77 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$1,01 \cdot 10^{-4}$	$3,04 \cdot 10^{-5}$	3,32	$1,24 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$1,01 \cdot 10^{-4}$	$3,04 \cdot 10^{-5}$	3,32	$1,23 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$3,09 \cdot 10^{-5}$	3,43	$1,60 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$1,07 \cdot 10^{-4}$	$2,98 \cdot 10^{-5}$	3,58	$2,13 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$9,25 \cdot 10^{-5}$	$3,10 \cdot 10^{-5}$	2,98	$9,30 \cdot 10^{-3}$
221, 236, 248, 262, 279	$1,01 \cdot 10^{-4}$	$3,02 \cdot 10^{-5}$	3,33	$1,27 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$1,11 \cdot 10^{-4}$	$2,95 \cdot 10^{-5}$	3,76	$2,74 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$3,07 \cdot 10^{-5}$	3,46	$1,71 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$3,06 \cdot 10^{-5}$	3,47	$1,74 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$1,05 \cdot 10^{-4}$	$3,07 \cdot 10^{-5}$	3,43	$1,62 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$1,07 \cdot 10^{-4}$	$2,97 \cdot 10^{-5}$	3,61	$2,22 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$3,03 \cdot 10^{-5}$	3,50	$1,84 \cdot 10^{-1}$

### 5.2.3 Směs diazepam - triclosan

Reálně použité koncentrace a jejich reálné poměry uvádíme v tabulce 4.13. Hodnoty molárních absorpčních koeficientů vycházejí z tabulek 4.3 a 4.8. Hodnoty naměřených absorbancí jednotlivých směsí uvádíme v tabulce 4.18.

Tabulka 5.7: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan a plánovaný poměr 1:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný poměr	Relativní chyba poměru
	D	T		
205, 248	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$4,02 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-1}$	$1,64 \cdot 10^{-1}$
221, 262	$3,47 \cdot 10^{-5}$	$3,62 \cdot 10^{-5}$	$9,58 \cdot 10^{-1}$	$3,78 \cdot 10^{-2}$
236, 279	$3,19 \cdot 10^{-5}$	$4,23 \cdot 10^{-5}$	$7,54 \cdot 10^{-1}$	$2,43 \cdot 10^{-1}$
205, 262	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$3,91 \cdot 10^{-5}$	$8,82 \cdot 10^{-1}$	$1,15 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$3,40 \cdot 10^{-5}$	$3,76 \cdot 10^{-5}$	$9,05 \cdot 10^{-1}$	$9,16 \cdot 10^{-2}$
221, 279	$3,08 \cdot 10^{-5}$	$4,33 \cdot 10^{-5}$	$7,11 \cdot 10^{-1}$	$2,86 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$3,29 \cdot 10^{-5}$	$4,06 \cdot 10^{-5}$	$8,11 \cdot 10^{-1}$	$1,86 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$3,37 \cdot 10^{-5}$	$3,83 \cdot 10^{-5}$	$8,79 \cdot 10^{-1}$	$1,17 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$3,43 \cdot 10^{-5}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	$9,29 \cdot 10^{-1}$	$6,69 \cdot 10^{-2}$
205, 248, 279	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$4,02 \cdot 10^{-5}$	$8,32 \cdot 10^{-1}$	$1,64 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$3,78 \cdot 10^{-5}$	$8,93 \cdot 10^{-1}$	$1,04 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$3,89 \cdot 10^{-5}$	$8,58 \cdot 10^{-1}$	$1,39 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$3,27 \cdot 10^{-5}$	$4,08 \cdot 10^{-5}$	$8,02 \cdot 10^{-1}$	$1,95 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$3,77 \cdot 10^{-5}$	$8,98 \cdot 10^{-1}$	$9,84 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262, 279	$3,41 \cdot 10^{-5}$	$3,75 \cdot 10^{-5}$	$9,10 \cdot 10^{-1}$	$8,68 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 262, 279	$3,29 \cdot 10^{-5}$	$4,05 \cdot 10^{-5}$	$8,11 \cdot 10^{-1}$	$1,85 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$3,25 \cdot 10^{-5}$	$4,09 \cdot 10^{-5}$	$7,95 \cdot 10^{-1}$	$2,01 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$3,40 \cdot 10^{-5}$	$3,74 \cdot 10^{-5}$	$9,09 \cdot 10^{-1}$	$8,69 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$3,76 \cdot 10^{-5}$	$9,02 \cdot 10^{-1}$	$9,44 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,31 \cdot 10^{-5}$	$4,04 \cdot 10^{-5}$	$8,19 \cdot 10^{-1}$	$1,77 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$3,32 \cdot 10^{-5}$	$4,02 \cdot 10^{-5}$	$8,25 \cdot 10^{-1}$	$1,71 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$3,26 \cdot 10^{-5}$	$4,08 \cdot 10^{-5}$	$8,00 \cdot 10^{-1}$	$1,97 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,25 \cdot 10^{-5}$	$4,09 \cdot 10^{-5}$	$7,95 \cdot 10^{-1}$	$2,02 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,29 \cdot 10^{-5}$	$4,04 \cdot 10^{-5}$	$8,13 \cdot 10^{-1}$	$1,83 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,29 \cdot 10^{-5}$	$4,05 \cdot 10^{-5}$	$8,13 \cdot 10^{-1}$	$1,84 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 5.8: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan a plánovaný poměr 1:2

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný poměr	Relativní chyba poměru
	D	T		
205, 248	$1,90 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$3,79 \cdot 10^{-1}$	$2,39 \cdot 10^{-1}$
221, 262	$1,94 \cdot 10^{-5}$	$4,85 \cdot 10^{-5}$	$4,00 \cdot 10^{-1}$	$1,96 \cdot 10^{-1}$
236, 279	$2,17 \cdot 10^{-5}$	$4,30 \cdot 10^{-5}$	$5,05 \cdot 10^{-1}$	$1,50 \cdot 10^{-2}$
205, 262	$1,93 \cdot 10^{-5}$	$4,97 \cdot 10^{-5}$	$3,89 \cdot 10^{-1}$	$2,19 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$1,92 \cdot 10^{-5}$	$4,89 \cdot 10^{-5}$	$3,92 \cdot 10^{-1}$	$2,12 \cdot 10^{-1}$
221, 279	$2,33 \cdot 10^{-5}$	$4,14 \cdot 10^{-5}$	$5,64 \cdot 10^{-1}$	$1,32 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$1,91 \cdot 10^{-5}$	$4,99 \cdot 10^{-5}$	$3,82 \cdot 10^{-1}$	$2,33 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$1,96 \cdot 10^{-5}$	$4,80 \cdot 10^{-5}$	$4,09 \cdot 10^{-1}$	$1,79 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$1,93 \cdot 10^{-5}$	$4,88 \cdot 10^{-5}$	$3,96 \cdot 10^{-1}$	$2,05 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$1,90 \cdot 10^{-5}$	$4,99 \cdot 10^{-5}$	$3,81 \cdot 10^{-1}$	$2,35 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$1,94 \cdot 10^{-5}$	$4,87 \cdot 10^{-5}$	$3,97 \cdot 10^{-1}$	$2,02 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$2,00 \cdot 10^{-5}$	$4,69 \cdot 10^{-5}$	$4,27 \cdot 10^{-1}$	$1,42 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$1,90 \cdot 10^{-5}$	$4,99 \cdot 10^{-5}$	$3,81 \cdot 10^{-1}$	$2,35 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$1,99 \cdot 10^{-5}$	$4,75 \cdot 10^{-5}$	$4,19 \cdot 10^{-1}$	$1,58 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$1,95 \cdot 10^{-5}$	$4,81 \cdot 10^{-5}$	$4,06 \cdot 10^{-1}$	$1,84 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$1,88 \cdot 10^{-5}$	$5,01 \cdot 10^{-5}$	$3,75 \cdot 10^{-1}$	$2,47 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$1,88 \cdot 10^{-5}$	$5,01 \cdot 10^{-5}$	$3,75 \cdot 10^{-1}$	$2,46 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$1,98 \cdot 10^{-5}$	$4,75 \cdot 10^{-5}$	$4,16 \cdot 10^{-1}$	$1,64 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248, 262, 279	$1,96 \cdot 10^{-5}$	$4,80 \cdot 10^{-5}$	$4,09 \cdot 10^{-1}$	$1,79 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$1,91 \cdot 10^{-5}$	$4,98 \cdot 10^{-5}$	$3,83 \cdot 10^{-1}$	$2,32 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$1,89 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$3,78 \cdot 10^{-1}$	$2,41 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$1,89 \cdot 10^{-5}$	$4,99 \cdot 10^{-5}$	$3,79 \cdot 10^{-1}$	$2,38 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$1,89 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$3,77 \cdot 10^{-1}$	$2,42 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$1,89 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$3,78 \cdot 10^{-1}$	$2,41 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$1,90 \cdot 10^{-5}$	$4,99 \cdot 10^{-5}$	$3,80 \cdot 10^{-1}$	$2,37 \cdot 10^{-1}$



Tabulka 5.9: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan a plánovaný poměr 3:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace		Vypočítaný	Relativní chyba
	D	T	poměr	poměru
205, 248	$4,47 \cdot 10^{-5}$	$2,52 \cdot 10^{-5}$	1,77	$4,07 \cdot 10^{-1}$
221, 262	$4,55 \cdot 10^{-5}$	$2,14 \cdot 10^{-5}$	2,12	$2,89 \cdot 10^{-1}$
236, 279	$4,88 \cdot 10^{-5}$	$1,32 \cdot 10^{-5}$	3,70	$2,40 \cdot 10^{-1}$
205, 262	$4,52 \cdot 10^{-5}$	$2,48 \cdot 10^{-5}$	1,82	$3,90 \cdot 10^{-1}$
221, 248	$4,56 \cdot 10^{-5}$	$2,12 \cdot 10^{-5}$	2,15	$2,81 \cdot 10^{-1}$
221, 279	$5,13 \cdot 10^{-5}$	$1,08 \cdot 10^{-5}$	4,75	$5,89 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 262	$4,41 \cdot 10^{-5}$	$2,58 \cdot 10^{-5}$	1,71	$4,27 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 279	$4,61 \cdot 10^{-5}$	$1,99 \cdot 10^{-5}$	2,32	$2,23 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$4,55 \cdot 10^{-5}$	$2,13 \cdot 10^{-5}$	2,14	$2,85 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$4,48 \cdot 10^{-5}$	$2,50 \cdot 10^{-5}$	1,79	$4,00 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$4,57 \cdot 10^{-5}$	$2,11 \cdot 10^{-5}$	2,16	$2,76 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$4,67 \cdot 10^{-5}$	$1,80 \cdot 10^{-5}$	2,60	$1,31 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$4,42 \cdot 10^{-5}$	$2,56 \cdot 10^{-5}$	1,73	$4,21 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$4,62 \cdot 10^{-5}$	$1,99 \cdot 10^{-5}$	2,32	$2,24 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$4,59 \cdot 10^{-5}$	$2,04 \cdot 10^{-5}$	2,25	$2,47 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$4,35 \cdot 10^{-5}$	$2,61 \cdot 10^{-5}$	1,66	$4,44 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$4,37 \cdot 10^{-5}$	$2,60 \cdot 10^{-5}$	1,68	$4,38 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$4,62 \cdot 10^{-5}$	$1,93 \cdot 10^{-5}$	2,39	$1,99 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248, 262, 279	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	2,26	$2,43 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$4,44 \cdot 10^{-5}$	$2,53 \cdot 10^{-5}$	1,75	$4,13 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$4,41 \cdot 10^{-5}$	$2,54 \cdot 10^{-5}$	1,74	$4,19 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$4,37 \cdot 10^{-5}$	$2,58 \cdot 10^{-5}$	1,69	$4,33 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$4,38 \cdot 10^{-5}$	$2,58 \cdot 10^{-5}$	1,70	$4,31 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$4,40 \cdot 10^{-5}$	$2,56 \cdot 10^{-5}$	1,72	$4,26 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$4,41 \cdot 10^{-5}$	$2,54 \cdot 10^{-5}$	1,73	$4,20 \cdot 10^{-1}$

## 5.3 Výsledky tříložkových soustav

V tabulkách používáme zkratky VP - vypočítaný poměr a RCHP - relativní chyba poměru.

### 5.3.1 Směs fenacetin - metamizol - kodein

Reálně použité koncentrace a jejich reálné poměry uvádíme v tabulce 4.14. Hodnoty molárních absorpčních koeficientů vycházejí z tabulek 4.4, 4.5 a 4.6. Hodnoty naměřených absorbancí jednotlivých směsí uvádíme v tabulce 4.19.

Tabulka 5.10: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 1:1:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			F : M		F : K	
	F	M	K	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$4,97 \cdot 10^{-5}$	$4,60 \cdot 10^{-5}$	$5,52 \cdot 10^{-5}$	1,08	$6,48 \cdot 10^{-2}$	$9,00 \cdot 10^{-1}$	$1,12 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$5,07 \cdot 10^{-5}$	$4,38 \cdot 10^{-5}$	$5,64 \cdot 10^{-5}$	1,16	$1,41 \cdot 10^{-1}$	$8,97 \cdot 10^{-1}$	$1,14 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$4,95 \cdot 10^{-5}$	$4,59 \cdot 10^{-5}$	$5,66 \cdot 10^{-5}$	1,08	$6,33 \cdot 10^{-2}$	$8,74 \cdot 10^{-1}$	$1,38 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$5,34 \cdot 10^{-5}$	$3,74 \cdot 10^{-5}$	$6,00 \cdot 10^{-5}$	1,43	$4,10 \cdot 10^{-1}$	$8,90 \cdot 10^{-1}$	$1,21 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$5,16 \cdot 10^{-5}$	$4,72 \cdot 10^{-5}$	$4,14 \cdot 10^{-5}$	1,09	$7,82 \cdot 10^{-2}$	1,24	$2,28 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 279	$4,69 \cdot 10^{-5}$	$4,69 \cdot 10^{-5}$	$5,54 \cdot 10^{-5}$	$9,99 \cdot 10^{-1}$	$1,42 \cdot 10^{-2}$	$8,46 \cdot 10^{-1}$	$1,66 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$4,93 \cdot 10^{-5}$	$4,49 \cdot 10^{-5}$	$5,79 \cdot 10^{-5}$	1,10	$8,14 \cdot 10^{-2}$	$8,51 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$4,78 \cdot 10^{-5}$	$4,68 \cdot 10^{-5}$	$5,51 \cdot 10^{-5}$	1,02	$7,85 \cdot 10^{-3}$	$8,68 \cdot 10^{-1}$	$1,44 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$4,97 \cdot 10^{-5}$	$4,57 \cdot 10^{-5}$	$5,55 \cdot 10^{-5}$	1,09	$7,31 \cdot 10^{-2}$	$8,95 \cdot 10^{-1}$	$1,17 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$4,99 \cdot 10^{-5}$	$4,57 \cdot 10^{-5}$	$5,59 \cdot 10^{-5}$	1,09	$7,79 \cdot 10^{-2}$	$8,92 \cdot 10^{-1}$	$1,19 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$5,13 \cdot 10^{-5}$	$4,20 \cdot 10^{-5}$	$5,83 \cdot 10^{-5}$	1,22	$2,05 \cdot 10^{-1}$	$8,81 \cdot 10^{-1}$	$1,31 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$5,02 \cdot 10^{-5}$	$4,54 \cdot 10^{-5}$	$5,17 \cdot 10^{-5}$	1,11	$9,04 \cdot 10^{-2}$	$9,70 \cdot 10^{-1}$	$4,28 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$4,95 \cdot 10^{-5}$	$4,52 \cdot 10^{-5}$	$5,56 \cdot 10^{-5}$	1,10	$8,16 \cdot 10^{-2}$	$8,91 \cdot 10^{-1}$	$1,21 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$4,93 \cdot 10^{-5}$	$4,52 \cdot 10^{-5}$	$5,75 \cdot 10^{-5}$	1,09	$7,67 \cdot 10^{-2}$	$8,58 \cdot 10^{-1}$	$1,54 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$4,97 \cdot 10^{-5}$	$4,59 \cdot 10^{-5}$	$5,59 \cdot 10^{-1}$	1,08	$6,92 \cdot 10^{-2}$	$8,89 \cdot 10^{-1}$	$1,23 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$4,88 \cdot 10^{-5}$	$4,61 \cdot 10^{-5}$	$5,62 \cdot 10^{-5}$	1,06	$4,63 \cdot 10^{-2}$	$8,69 \cdot 10^{-1}$	$1,42 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$4,96 \cdot 10^{-5}$	$4,55 \cdot 10^{-5}$	$5,62 \cdot 10^{-5}$	1,09	$7,59 \cdot 10^{-2}$	$8,82 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$5,08 \cdot 10^{-5}$	$4,32 \cdot 10^{-5}$	$5,75 \cdot 10^{-5}$	1,18	$1,61 \cdot 10^{-1}$	$8,84 \cdot 10^{-1}$	$1,28 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$4,96 \cdot 10^{-5}$	$4,54 \cdot 10^{-5}$	$5,63 \cdot 10^{-5}$	1,09	$7,80 \cdot 10^{-2}$	$8,81 \cdot 10^{-1}$	$1,31 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 5.11: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 1:2:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			F : M		F : K	
	F	M	K	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$7,35 \cdot 10^{-5}$	$3,95 \cdot 10^{-5}$	$4,61 \cdot 10^{-1}$	$9,02 \cdot 10^{-2}$	$8,58 \cdot 10^{-1}$	$1,53 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$3,42 \cdot 10^{-5}$	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$3,99 \cdot 10^{-5}$	$4,69 \cdot 10^{-1}$	$7,36 \cdot 10^{-2}$	$8,57 \cdot 10^{-1}$	$1,54 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$7,35 \cdot 10^{-5}$	$3,94 \cdot 10^{-5}$	$4,61 \cdot 10^{-1}$	$9,00 \cdot 10^{-2}$	$8,61 \cdot 10^{-1}$	$1,51 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$3,68 \cdot 10^{-5}$	$6,69 \cdot 10^{-5}$	$4,32 \cdot 10^{-5}$	$5,50 \cdot 10^{-1}$	$8,63 \cdot 10^{-2}$	$8,51 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$3,54 \cdot 10^{-5}$	$7,44 \cdot 10^{-5}$	$2,89 \cdot 10^{-5}$	$4,75 \cdot 10^{-1}$	$6,25 \cdot 10^{-2}$	1,22	$2,08 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 279	$3,17 \cdot 10^{-5}$	$7,42 \cdot 10^{-5}$	$3,97 \cdot 10^{-5}$	$4,28 \cdot 10^{-1}$	$1,56 \cdot 10^{-1}$	$8,00 \cdot 10^{-1}$	$2,11 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$7,29 \cdot 10^{-5}$	$4,03 \cdot 10^{-5}$	$4,63 \cdot 10^{-1}$	$8,56 \cdot 10^{-2}$	$8,39 \cdot 10^{-1}$	$1,72 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$3,26 \cdot 10^{-5}$	$7,41 \cdot 10^{-5}$	$3,93 \cdot 10^{-5}$	$4,41 \cdot 10^{-1}$	$1,31 \cdot 10^{-1}$	$8,30 \cdot 10^{-1}$	$1,81 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$7,34 \cdot 10^{-5}$	$3,96 \cdot 10^{-5}$	$4,62 \cdot 10^{-1}$	$8,90 \cdot 10^{-2}$	$8,56 \cdot 10^{-1}$	$1,55 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$3,37 \cdot 10^{-5}$	$7,36 \cdot 10^{-5}$	$3,96 \cdot 10^{-5}$	$4,58 \cdot 10^{-1}$	$9,61 \cdot 10^{-2}$	$8,52 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$3,59 \cdot 10^{-5}$	$6,89 \cdot 10^{-5}$	$4,25 \cdot 10^{-5}$	$5,21 \cdot 10^{-1}$	$2,76 \cdot 10^{-2}$	$8,45 \cdot 10^{-1}$	$1,66 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$3,44 \cdot 10^{-5}$	$7,32 \cdot 10^{-5}$	$3,57 \cdot 10^{-5}$	$4,70 \cdot 10^{-1}$	$7,24 \cdot 10^{-2}$	$9,63 \cdot 10^{-1}$	$4,93 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$7,30 \cdot 10^{-5}$	$3,97 \cdot 10^{-5}$	$4,63 \cdot 10^{-1}$	$8,66 \cdot 10^{-2}$	$8,52 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$7,31 \cdot 10^{-5}$	$3,99 \cdot 10^{-5}$	$4,63 \cdot 10^{-1}$	$8,72 \cdot 10^{-2}$	$8,47 \cdot 10^{-1}$	$1,65 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$7,34 \cdot 10^{-5}$	$3,96 \cdot 10^{-1}$	$4,62 \cdot 10^{-1}$	$8,90 \cdot 10^{-2}$	$8,56 \cdot 10^{-1}$	$1,55 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$3,30 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-5}$	$3,97 \cdot 10^{-5}$	$4,47 \cdot 10^{-1}$	$1,17 \cdot 10^{-1}$	$8,31 \cdot 10^{-1}$	$1,80 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$7,29 \cdot 10^{-5}$	$4,00 \cdot 10^{-5}$	$4,63 \cdot 10^{-1}$	$8,53 \cdot 10^{-2}$	$8,45 \cdot 10^{-1}$	$1,66 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,48 \cdot 10^{-5}$	$7,13 \cdot 10^{-5}$	$4,08 \cdot 10^{-5}$	$4,88 \cdot 10^{-1}$	$3,74 \cdot 10^{-2}$	$8,53 \cdot 10^{-1}$	$1,59 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,38 \cdot 10^{-5}$	$7,31 \cdot 10^{-5}$	$3,99 \cdot 10^{-5}$	$4,63 \cdot 10^{-1}$	$8,70 \cdot 10^{-2}$	$8,48 \cdot 10^{-1}$	$1,63 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 5.12: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 2:2:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			F : M		F : K	
	F	M	K	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$5,61 \cdot 10^{-5}$	$6,14 \cdot 10^{-5}$	$3,33 \cdot 10^{-5}$	$9,13 \cdot 10^{-1}$	$9,90 \cdot 10^{-2}$	1,68	$1,69 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$5,80 \cdot 10^{-5}$	$5,69 \cdot 10^{-5}$	$3,58 \cdot 10^{-5}$	1,02	$5,90 \cdot 10^{-3}$	1,62	$2,01 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$5,59 \cdot 10^{-5}$	$6,13 \cdot 10^{-5}$	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$9,12 \cdot 10^{-1}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$	1,62	$2,01 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248	$6,02 \cdot 10^{-5}$	$5,19 \cdot 10^{-5}$	$3,87 \cdot 10^{-5}$	1,16	$1,45 \cdot 10^{-1}$	1,56	$2,31 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$5,82 \cdot 10^{-5}$	$6,27 \cdot 10^{-5}$	$1,81 \cdot 10^{-5}$	$9,28 \cdot 10^{-1}$	$8,45 \cdot 10^{-2}$	3,21	$5,83 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 279	$5,30 \cdot 10^{-5}$	$6,24 \cdot 10^{-5}$	$3,36 \cdot 10^{-5}$	$8,49 \cdot 10^{-1}$	$1,62 \cdot 10^{-1}$	1,58	$2,21 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$5,57 \cdot 10^{-5}$	$6,03 \cdot 10^{-5}$	$3,59 \cdot 10^{-5}$	$9,24 \cdot 10^{-1}$	$8,85 \cdot 10^{-2}$	1,55	$2,34 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 262, 279	$5,36 \cdot 10^{-5}$	$6,23 \cdot 10^{-5}$	$3,33 \cdot 10^{-5}$	$8,60 \cdot 10^{-1}$	$1,51 \cdot 10^{-1}$	1,61	$2,07 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$5,60 \cdot 10^{-5}$	$6,07 \cdot 10^{-5}$	$3,40 \cdot 10^{-5}$	$9,24 \cdot 10^{-1}$	$8,86 \cdot 10^{-2}$	1,65	$1,86 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$5,57 \cdot 10^{-5}$	$6,12 \cdot 10^{-5}$	$3,43 \cdot 10^{-5}$	$9,10 \cdot 10^{-1}$	$1,02 \cdot 10^{-1}$	1,62	$1,99 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$5,81 \cdot 10^{-5}$	$5,65 \cdot 10^{-5}$	$3,69 \cdot 10^{-5}$	1,03	$1,55 \cdot 10^{-2}$	1,57	$2,23 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$5,63 \cdot 10^{-5}$	$6,03 \cdot 10^{-5}$	$3,15 \cdot 10^{-5}$	$9,34 \cdot 10^{-1}$	$7,89 \cdot 10^{-2}$	1,79	$1,19 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 248, 262, 279	$5,59 \cdot 10^{-5}$	$6,02 \cdot 10^{-5}$	$3,41 \cdot 10^{-5}$	$9,29 \cdot 10^{-1}$	$8,35 \cdot 10^{-2}$	1,64	$1,90 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$5,57 \cdot 10^{-5}$	$6,02 \cdot 10^{-5}$	$3,60 \cdot 10^{-5}$	$9,25 \cdot 10^{-1}$	$8,73 \cdot 10^{-2}$	1,55	$2,38 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 248, 262, 279	$5,61 \cdot 10^{-5}$	$6,09 \cdot 10^{-5}$	$3,43 \cdot 10^{-1}$	$9,21 \cdot 10^{-1}$	$9,10 \cdot 10^{-2}$	1,63	$1,95 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$5,47 \cdot 10^{-5}$	$6,15 \cdot 10^{-5}$	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$8,90 \cdot 10^{-1}$	$1,22 \cdot 10^{-1}$	1,59	$2,18 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$5,60 \cdot 10^{-5}$	$6,07 \cdot 10^{-5}$	$3,44 \cdot 10^{-5}$	$9,21 \cdot 10^{-1}$	$9,09 \cdot 10^{-2}$	1,63	$1,96 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262	$5,80 \cdot 10^{-5}$	$5,69 \cdot 10^{-5}$	$3,67 \cdot 10^{-5}$	1,02	$6,10 \cdot 10^{-3}$	1,58	$2,20 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$5,60 \cdot 10^{-5}$	$6,04 \cdot 10^{-5}$	$3,47 \cdot 10^{-5}$	$9,27 \cdot 10^{-1}$	$8,57 \cdot 10^{-2}$	1,61	$2,05 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 5.13: Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 1:1:3

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			F : M		F : K	
	F	M	K	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$2,79 \cdot 10^{-5}$	$3,48 \cdot 10^{-5}$	$9,35 \cdot 10^{-5}$	$8,03 \cdot 10^{-1}$	$2,08 \cdot 10^{-1}$	$2,99 \cdot 10^{-1}$	$1,16 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262	$2,73 \cdot 10^{-5}$	$3,63 \cdot 10^{-5}$	$9,27 \cdot 10^{-5}$	$7,52 \cdot 10^{-1}$	$2,58 \cdot 10^{-1}$	$2,94 \cdot 10^{-1}$	$1,29 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$2,84 \cdot 10^{-5}$	$3,51 \cdot 10^{-5}$	$8,99 \cdot 10^{-5}$	$8,10 \cdot 10^{-1}$	$2,01 \cdot 10^{-1}$	$3,16 \cdot 10^{-1}$	$6,47 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$3,19 \cdot 10^{-5}$	$2,57 \cdot 10^{-5}$	$9,86 \cdot 10^{-5}$	1,24	$2,22 \cdot 10^{-1}$	$3,23 \cdot 10^{-1}$	$4,28 \cdot 10^{-2}$
236, 248, 279	$2,99 \cdot 10^{-5}$	$3,60 \cdot 10^{-5}$	$7,91 \cdot 10^{-5}$	$8,31 \cdot 10^{-1}$	$1,80 \cdot 10^{-1}$	$3,78 \cdot 10^{-1}$	$1,19 \cdot 10^{-1}$
221, 236, 279	$2,50 \cdot 10^{-5}$	$3,57 \cdot 10^{-5}$	$9,38 \cdot 10^{-5}$	$7,00 \cdot 10^{-1}$	$3,10 \cdot 10^{-1}$	$2,66 \cdot 10^{-1}$	$2,11 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$2,83 \cdot 10^{-5}$	$3,44 \cdot 10^{-5}$	$9,08 \cdot 10^{-5}$	$8,22 \cdot 10^{-1}$	$1,89 \cdot 10^{-1}$	$3,11 \cdot 10^{-1}$	$7,88 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$2,67 \cdot 10^{-5}$	$3,54 \cdot 10^{-5}$	$9,31 \cdot 10^{-5}$	$7,53 \cdot 10^{-1}$	$2,57 \cdot 10^{-1}$	$2,87 \cdot 10^{-1}$	$1,51 \cdot 10^{-1}$
221, 248, 262, 279	$2,79 \cdot 10^{-5}$	$3,50 \cdot 10^{-5}$	$9,33 \cdot 10^{-5}$	$7,98 \cdot 10^{-1}$	$2,13 \cdot 10^{-1}$	$2,99 \cdot 10^{-1}$	$1,13 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 262, 279	$2,65 \cdot 10^{-5}$	$3,57 \cdot 10^{-5}$	$9,22 \cdot 10^{-5}$	$7,41 \cdot 10^{-1}$	$2,69 \cdot 10^{-1}$	$2,87 \cdot 10^{-1}$	$1,51 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248	$3,26 \cdot 10^{-5}$	$2,42 \cdot 10^{-5}$	$9,92 \cdot 10^{-5}$	1,35	$3,30 \cdot 10^{-1}$	$3,29 \cdot 10^{-1}$	$2,73 \cdot 10^{-2}$
236, 248, 262, 279	$2,90 \cdot 10^{-5}$	$3,48 \cdot 10^{-5}$	$8,59 \cdot 10^{-5}$	$8,33 \cdot 10^{-1}$	$1,78 \cdot 10^{-1}$	$3,37 \cdot 10^{-1}$	$1,17 \cdot 10^{-3}$
221, 236, 248, 262, 279	$2,78 \cdot 10^{-5}$	$3,44 \cdot 10^{-5}$	$9,34 \cdot 10^{-5}$	$8,07 \cdot 10^{-1}$	$2,04 \cdot 10^{-1}$	$2,98 \cdot 10^{-1}$	$1,19 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 262, 279	$2,83 \cdot 10^{-5}$	$3,46 \cdot 10^{-5}$	$9,04 \cdot 10^{-5}$	$8,17 \cdot 10^{-1}$	$1,94 \cdot 10^{-1}$	$3,13 \cdot 10^{-1}$	$7,31 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$2,79 \cdot 10^{-5}$	$3,46 \cdot 10^{-5}$	$9,24 \cdot 10^{-1}$	$8,05 \cdot 10^{-1}$	$2,05 \cdot 10^{-1}$	$3,01 \cdot 10^{-1}$	$1,08 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 262, 279	$2,60 \cdot 10^{-5}$	$3,59 \cdot 10^{-5}$	$9,24 \cdot 10^{-5}$	$7,24 \cdot 10^{-1}$	$2,86 \cdot 10^{-1}$	$2,81 \cdot 10^{-1}$	$1,67 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 279	$2,78 \cdot 10^{-5}$	$3,36 \cdot 10^{-5}$	$9,34 \cdot 10^{-5}$	$8,27 \cdot 10^{-1}$	$1,84 \cdot 10^{-1}$	$2,97 \cdot 10^{-1}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 28, 262	$2,93 \cdot 10^{-5}$	$3,15 \cdot 10^{-5}$	$9,42 \cdot 10^{-5}$	$9,32 \cdot 10^{-1}$	$8,06 \cdot 10^{-2}$	$3,12 \cdot 10^{-1}$	$7,76 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$2,78 \cdot 10^{-5}$	$3,43 \cdot 10^{-5}$	$9,27 \cdot 10^{-5}$	$8,11 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$	$3,00 \cdot 10^{-1}$	$1,13 \cdot 10^{-1}$

### 5.3.2 Směs diazepam - triclosan - pitofenon

Reálně použité koncentrace a jejich reálné poměry uvádíme v tabulce 4.15. Hodnoty molárních absorpčních koeficientů vycházejí z tabulek 4.3, 4.7 a 4.8. Hodnoty naměřených absorbancí jednotlivých směsí uvádíme v tabulce 4.20.

Tabulka 5.14: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 1:1:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			D : T		D : P	
	D	T	P	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$3,02 \cdot 10^{-5}$	$2,14 \cdot 10^{-5}$	$3,21 \cdot 10^{-5}$	1,41	$4,14 \cdot 10^{-1}$	$9,39 \cdot 10^{-1}$	$4,84 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262	$3,19 \cdot 10^{-5}$	$2,65 \cdot 10^{-5}$	$2,31 \cdot 10^{-5}$	1,20	$2,09 \cdot 10^{-1}$	1,38	$3,98 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$3,01 \cdot 10^{-5}$	$2,17 \cdot 10^{-5}$	$3,21 \cdot 10^{-5}$	1,39	$3,97 \cdot 10^{-1}$	$9,40 \cdot 10^{-1}$	$4,74 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$3,11 \cdot 10^{-5}$	$2,41 \cdot 10^{-5}$	$2,75 \cdot 10^{-5}$	1,29	$2,97 \cdot 10^{-1}$	1,13	$1,46 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$2,97 \cdot 10^{-5}$	$2,54 \cdot 10^{-5}$	$3,10 \cdot 10^{-5}$	1,17	$1,72 \cdot 10^{-1}$	$9,56 \cdot 10^{-1}$	$3,15 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 279	$3,34 \cdot 10^{-5}$	$1,45 \cdot 10^{-5}$	$3,33 \cdot 10^{-5}$	2,31	1,32	1,00	$1,57 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$3,09 \cdot 10^{-5}$	$2,11 \cdot 10^{-5}$	$3,18 \cdot 10^{-5}$	1,46	$4,66 \cdot 10^{-1}$	$9,73 \cdot 10^{-1}$	$1,42 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$2,79 \cdot 10^{-5}$	$2,96 \cdot 10^{-5}$	$2,90 \cdot 10^{-5}$	$9,43 \cdot 10^{-1}$	$5,36 \cdot 10^{-2}$	$9,63 \cdot 10^{-1}$	$2,40 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262, 279	$2,84 \cdot 10^{-5}$	$2,74 \cdot 10^{-5}$	$2,97 \cdot 10^{-5}$	1,04	$4,02 \cdot 10^{-2}$	$9,55 \cdot 10^{-1}$	$3,23 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 262, 279	$2,81 \cdot 10^{-5}$	$2,50 \cdot 10^{-5}$	$3,07 \cdot 10^{-5}$	1,13	$1,30 \cdot 10^{-1}$	$9,17 \cdot 10^{-1}$	$7,10 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248	$3,13 \cdot 10^{-5}$	$2,31 \cdot 10^{-5}$	$2,79 \cdot 10^{-5}$	1,36	$3,61 \cdot 10^{-1}$	1,12	$1,38 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$2,78 \cdot 10^{-5}$	$3,21 \cdot 10^{-5}$	$2,91 \cdot 10^{-5}$	$8,67 \cdot 10^{-1}$	$1,29 \cdot 10^{-1}$	$9,55 \cdot 10^{-1}$	$3,26 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$2,89 \cdot 10^{-5}$	$2,75 \cdot 10^{-5}$	$2,90 \cdot 10^{-5}$	1,05	$5,56 \cdot 10^{-2}$	$9,97 \cdot 10^{-1}$	$1,07 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,02 \cdot 10^{-5}$	$2,37 \cdot 10^{-5}$	$2,93 \cdot 10^{-5}$	1,28	$2,83 \cdot 10^{-1}$	1,03	$4,66 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$2,94 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$3,01 \cdot 10^{-5}$	1,22	$2,30 \cdot 10^{-1}$	$9,75 \cdot 10^{-1}$	$1,24 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 262, 279	$3,01 \cdot 10^{-5}$	$2,38 \cdot 10^{-5}$	$2,93 \cdot 10^{-5}$	1,26	$2,68 \cdot 10^{-1}$	1,03	$4,06 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,08 \cdot 10^{-5}$	$2,13 \cdot 10^{-5}$	$3,15 \cdot 10^{-5}$	1,44	$4,47 \cdot 10^{-1}$	$9,75 \cdot 10^{-1}$	$1,18 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,17 \cdot 10^{-5}$	$2,50 \cdot 10^{-5}$	$2,44 \cdot 10^{-5}$	1,27	$2,71 \cdot 10^{-1}$	1,30	$3,14 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,03 \cdot 10^{-5}$	$2,36 \cdot 10^{-5}$	$2,93 \cdot 10^{-5}$	1,28	$2,87 \cdot 10^{-1}$	1,03	$4,68 \cdot 10^{-2}$

Tabulka 5.15: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 2:1:2

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			D : T		D : P	
	D	T	P	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$3,30 \cdot 10^{-5}$	$2,29 \cdot 10^{-5}$	$3,44 \cdot 10^{-5}$	1,45	$2,74 \cdot 10^{-1}$	$9,60 \cdot 10^{-1}$	$2,74 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262	$3,40 \cdot 10^{-5}$	$2,55 \cdot 10^{-5}$	$2,98 \cdot 10^{-5}$	1,33	$3,32 \cdot 10^{-1}$	1,14	$1,56 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$1,94 \cdot 10^{-5}$	$3,53 \cdot 10^{-5}$	1,72	$1,36 \cdot 10^{-1}$	$9,47 \cdot 10^{-1}$	$4,07 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$3,42 \cdot 10^{-5}$	$2,63 \cdot 10^{-5}$	$2,83 \cdot 10^{-5}$	1,30	$3,47 \cdot 10^{-1}$	1,21	$2,25 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$3,24 \cdot 10^{-5}$	$2,81 \cdot 10^{-5}$	$3,30 \cdot 10^{-5}$	1,15	$4,22 \cdot 10^{-1}$	$9,81 \cdot 10^{-1}$	$5,52 \cdot 10^{-3}$
221, 236, 279	$3,73 \cdot 10^{-5}$	$1,37 \cdot 10^{-5}$	$3,60 \cdot 10^{-5}$	2,71	$3,62 \cdot 10^{-1}$	1,04	$4,97 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$3,52 \cdot 10^{-5}$	$1,83 \cdot 10^{-5}$	$3,46 \cdot 10^{-5}$	1,93	$3,31 \cdot 10^{-2}$	1,02	$2,97 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$3,26 \cdot 10^{-5}$	$2,65 \cdot 10^{-5}$	$3,23 \cdot 10^{-5}$	1,23	$3,83 \cdot 10^{-1}$	1,01	$2,34 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262, 279	$3,21 \cdot 10^{-5}$	$2,60 \cdot 10^{-5}$	$3,32 \cdot 10^{-5}$	1,24	$3,79 \cdot 10^{-1}$	$9,68 \cdot 10^{-1}$	$1,91 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 262, 279	$3,36 \cdot 10^{-5}$	$2,07 \cdot 10^{-5}$	$3,38 \cdot 10^{-5}$	1,62	$1,86 \cdot 10^{-1}$	$9,93 \cdot 10^{-1}$	$6,31 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248	$3,58 \cdot 10^{-5}$	$1,99 \cdot 10^{-5}$	$3,11 \cdot 10^{-5}$	1,80	$9,56 \cdot 10^{-2}$	1,15	$1,66 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$3,18 \cdot 10^{-5}$	$3,02 \cdot 10^{-5}$	$3,24 \cdot 10^{-5}$	1,05	$4,72 \cdot 10^{-1}$	$9,82 \cdot 10^{-1}$	$5,35 \cdot 10^{-3}$
221, 236, 248, 262, 279	$3,28 \cdot 10^{-5}$	$2,61 \cdot 10^{-5}$	$3,23 \cdot 10^{-5}$	1,26	$3,69 \cdot 10^{-1}$	1,02	$3,00 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,46 \cdot 10^{-5}$	$2,04 \cdot 10^{-5}$	$3,26 \cdot 10^{-5}$	1,70	$1,46 \cdot 10^{-1}$	1,06	$7,81 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$3,36 \cdot 10^{-5}$	$2,07 \cdot 10^{-5}$	$3,38 \cdot 10^{-5}$	1,63	$1,84 \cdot 10^{-1}$	$9,95 \cdot 10^{-1}$	$7,95 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 262, 279	$3,52 \cdot 10^{-5}$	$1,98 \cdot 10^{-5}$	$3,27 \cdot 10^{-5}$	1,78	$1,06 \cdot 10^{-1}$	1,08	$9,09 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,53 \cdot 10^{-5}$	$1,81 \cdot 10^{-5}$	$3,48 \cdot 10^{-5}$	1,94	$2,37 \cdot 10^{-2}$	1,01	$2,81 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,61 \cdot 10^{-5}$	$2,15 \cdot 10^{-5}$	$2,82 \cdot 10^{-5}$	1,68	$1,58 \cdot 10^{-1}$	1,28	$3,00 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,48 \cdot 10^{-5}$	$2,02 \cdot 10^{-5}$	$3,27 \cdot 10^{-5}$	1,72	$1,36 \cdot 10^{-1}$	1,06	$7,86 \cdot 10^{-2}$

Tabulka 5.16: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 1:1:2

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			D : T		D : P	
	D	T	P	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$1,98 \cdot 10^{-5}$	$2,68 \cdot 10^{-5}$	$4,07 \cdot 10^{-5}$	$7,38 \cdot 10^{-1}$	$2,59 \cdot 10^{-1}$	$4,86 \cdot 10^{-1}$	$1,43 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262	$2,07 \cdot 10^{-5}$	$2,94 \cdot 10^{-5}$	$3,62 \cdot 10^{-5}$	$7,04 \cdot 10^{-1}$	$2,94 \cdot 10^{-1}$	$5,72 \cdot 10^{-1}$	$1,59 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$1,95 \cdot 10^{-5}$	$2,90 \cdot 10^{-5}$	$4,01 \cdot 10^{-5}$	$6,72 \cdot 10^{-1}$	$3,25 \cdot 10^{-1}$	$4,87 \cdot 10^{-1}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$2,08 \cdot 10^{-5}$	$2,97 \cdot 10^{-5}$	$3,56 \cdot 10^{-5}$	$7,00 \cdot 10^{-1}$	$2,97 \cdot 10^{-1}$	$5,83 \cdot 10^{-1}$	$1,82 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$1,93 \cdot 10^{-5}$	$3,12 \cdot 10^{-5}$	$3,95 \cdot 10^{-5}$	$6,17 \cdot 10^{-1}$	$3,80 \cdot 10^{-1}$	$4,87 \cdot 10^{-1}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 279	$2,33 \cdot 10^{-5}$	$1,93 \cdot 10^{-5}$	$4,20 \cdot 10^{-5}$	1,21	$2,15 \cdot 10^{-1}$	$5,55 \cdot 10^{-1}$	$1,25 \cdot 10^{-1}$
205, 236, 248, 279	$1,99 \cdot 10^{-5}$	$2,88 \cdot 10^{-5}$	$3,99 \cdot 10^{-5}$	$6,94 \cdot 10^{-1}$	$3,04 \cdot 10^{-1}$	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$1,92 \cdot 10^{-5}$	$3,05 \cdot 10^{-5}$	$3,87 \cdot 10^{-5}$	$6,29 \cdot 10^{-1}$	$3,69 \cdot 10^{-1}$	$4,96 \cdot 10^{-1}$	$4,55 \cdot 10^{-3}$
221, 248, 262, 279	$1,89 \cdot 10^{-5}$	$2,98 \cdot 10^{-5}$	$3,95 \cdot 10^{-5}$	$6,33 \cdot 10^{-1}$	$3,64 \cdot 10^{-1}$	$4,78 \cdot 10^{-1}$	$3,03 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 262, 279	$1,78 \cdot 10^{-5}$	$3,10 \cdot 10^{-5}$	$3,99 \cdot 10^{-5}$	$5,75 \cdot 10^{-1}$	$4,23 \cdot 10^{-1}$	$4,47 \cdot 10^{-1}$	$9,47 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248	$2,04 \cdot 10^{-5}$	$3,14 \cdot 10^{-5}$	$3,49 \cdot 10^{-5}$	$6,49 \cdot 10^{-1}$	$3,48 \cdot 10^{-1}$	$5,84 \cdot 10^{-1}$	$1,83 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$1,86 \cdot 10^{-5}$	$3,35 \cdot 10^{-5}$	$3,88 \cdot 10^{-5}$	$5,54 \cdot 10^{-1}$	$4,44 \cdot 10^{-1}$	$4,79 \cdot 10^{-1}$	$2,99 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$1,95 \cdot 10^{-5}$	$3,00 \cdot 10^{-5}$	$3,88 \cdot 10^{-5}$	$6,51 \cdot 10^{-1}$	$3,47 \cdot 10^{-1}$	$5,03 \cdot 10^{-1}$	$1,94 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 262, 279	$1,97 \cdot 10^{-5}$	$2,98 \cdot 10^{-5}$	$3,89 \cdot 10^{-5}$	$6,61 \cdot 10^{-1}$	$3,37 \cdot 10^{-1}$	$5,06 \cdot 10^{-1}$	$2,50 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$1,88 \cdot 10^{-5}$	$3,02 \cdot 10^{-5}$	$3,94 \cdot 10^{-5}$	$6,22 \cdot 10^{-1}$	$3,75 \cdot 10^{-1}$	$4,76 \cdot 10^{-1}$	$3,46 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 262, 279	$1,94 \cdot 10^{-5}$	$3,00 \cdot 10^{-5}$	$3,88 \cdot 10^{-5}$	$6,45 \cdot 10^{-1}$	$3,52 \cdot 10^{-1}$	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 279	$1,97 \cdot 10^{-5}$	$2,92 \cdot 10^{-5}$	$3,95 \cdot 10^{-5}$	$6,74 \cdot 10^{-1}$	$3,23 \cdot 10^{-1}$	$4,98 \cdot 10^{-1}$	$9,97 \cdot 10^{-3}$
205, 221, 236, 248, 262	$2,02 \cdot 10^{-5}$	$3,06 \cdot 10^{-5}$	$3,63 \cdot 10^{-5}$	$6,61 \cdot 10^{-1}$	$3,37 \cdot 10^{-1}$	$5,57 \cdot 10^{-1}$	$1,30 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$1,95 \cdot 10^{-5}$	$2,99 \cdot 10^{-5}$	$3,88 \cdot 10^{-5}$	$6,53 \cdot 10^{-1}$	$3,45 \cdot 10^{-1}$	$5,03 \cdot 10^{-1}$	$2,03 \cdot 10^{-2}$



Tabulka 5.17: Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 2:1:1

Zvolená kombinace vlnových délek	Vypočítaná koncentrace			D : T		D : P	
	D	T	P	VP	RCHP	VP	RCHP
221, 248, 279	$3,52 \cdot 10^{-5}$	$2,32 \cdot 10^{-5}$	$1,74 \cdot 10^{-5}$	1,52	$2,38 \cdot 10^{-1}$	2,02	$2,28 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262	$3,57 \cdot 10^{-5}$	$2,48 \cdot 10^{-5}$	$1,46 \cdot 10^{-5}$	1,44	$2,76 \cdot 10^{-1}$	2,45	$2,41 \cdot 10^{-1}$
205, 248, 279	$3,51 \cdot 10^{-5}$	$2,34 \cdot 10^{-5}$	$1,74 \cdot 10^{-5}$	1,50	$2,45 \cdot 10^{-1}$	2,02	$2,54 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248	$3,55 \cdot 10^{-5}$	$2,43 \cdot 10^{-5}$	$1,55 \cdot 10^{-5}$	1,47	$2,64 \cdot 10^{-1}$	2,29	$1,61 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 279	$3,50 \cdot 10^{-5}$	$2,48 \cdot 10^{-5}$	$1,70 \cdot 10^{-5}$	1,41	$2,93 \cdot 10^{-1}$	2,06	$4,35 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 279	$3,65 \cdot 10^{-5}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$1,79 \cdot 10^{-5}$	1,80	$9,86 \cdot 10^{-2}$	2,04	$3,24 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 279	$3,54 \cdot 10^{-5}$	$2,32 \cdot 10^{-5}$	$1,72 \cdot 10^{-5}$	1,53	$2,33 \cdot 10^{-1}$	2,05	$4,08 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 262, 279	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$2,57 \cdot 10^{-5}$	$1,64 \cdot 10^{-5}$	1,34	$3,25 \cdot 10^{-1}$	2,11	$6,95 \cdot 10^{-2}$
221, 248, 262, 279	$3,46 \cdot 10^{-5}$	$2,51 \cdot 10^{-5}$	$1,67 \cdot 10^{-5}$	1,38	$3,07 \cdot 10^{-1}$	2,08	$5,24 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 262, 279	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$2,44 \cdot 10^{-5}$	$1,70 \cdot 10^{-5}$	1,41	$2,92 \cdot 10^{-1}$	2,03	$2,94 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248	$3,56 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$1,56 \cdot 10^{-5}$	1,48	$2,56 \cdot 10^{-1}$	2,28	$1,55 \cdot 10^{-1}$
236, 248, 262, 279	$3,44 \cdot 10^{-5}$	$2,67 \cdot 10^{-5}$	$1,64 \cdot 10^{-5}$	1,29	$3,54 \cdot 10^{-1}$	2,10	$6,23 \cdot 10^{-2}$
221, 236, 248, 262, 279	$3,48 \cdot 10^{-5}$	$2,51 \cdot 10^{-5}$	$1,64 \cdot 10^{-5}$	1,39	$3,04 \cdot 10^{-1}$	2,13	$7,74 \cdot 10^{-2}$
205, 236, 248, 262, 279	$3,52 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$1,65 \cdot 10^{-5}$	1,47	$2,63 \cdot 10^{-1}$	2,14	$8,39 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 248, 262, 279	$3,49 \cdot 10^{-5}$	$2,41 \cdot 10^{-5}$	$1,68 \cdot 10^{-5}$	1,45	$2,74 \cdot 10^{-1}$	2,08	$5,33 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 262, 279	$3,52 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$1,65 \cdot 10^{-5}$	1,46	$2,65 \cdot 10^{-1}$	2,14	$8,24 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 279	$3,54 \cdot 10^{-5}$	$2,33 \cdot 10^{-5}$	$1,71 \cdot 10^{-5}$	1,52	$2,37 \cdot 10^{-1}$	2,06	$4,50 \cdot 10^{-2}$
205, 221, 236, 248, 262	$3,57 \cdot 10^{-5}$	$2,44 \cdot 10^{-5}$	$1,49 \cdot 10^{-5}$	1,46	$2,67 \cdot 10^{-1}$	2,40	$2,17 \cdot 10^{-1}$
205, 221, 236, 248, 262, 279	$3,52 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$1,65 \cdot 10^{-5}$	1,47	$2,63 \cdot 10^{-1}$	2,14	$8,39 \cdot 10^{-2}$

# Závěr

Připravili jsme si zásobní roztoky léčiv o stanovené koncentraci. Následně jsme připravili dvousložkové a tříložkové směsi roztoků léčiv o různých poměrech. Pomocí UV-VIS spektrofotometru jsme změřili absorpční spektra jak čistých léčiv, tak směsí léčiv.

Pomocí systému lineárních rovnic se čtvercovou maticí a systému nejmenších čtverců jsme zjišťovali koncentrace léčiv v jednotlivých směsích. Tyto systémy lze spolehlivě řešit pomocí maticového zápisu využívající příslušné matice a jejich transponované matice.

Zvolili jsme si šest vlnových délek, které jsme uplatnili pro všechny výpočty. Pro každou směs jsme provedli výpočty při různém počtu vlnových délek. U dvousložkových směsí jsme provedli šest výpočtů při využití dvou, tří, čtyř a pěti vlnových délek a jeden výpočet při užití šesti vlnových délek. U tříložkových směsí jsme provedli šest výpočtů při využití tří, čtyř a pěti vlnových délek a jeden výpočet při užití šesti vlnových délek.

U každého měření jsme pro vyhodnocení přesnosti výsledků vypočetli relativní chybu poměru koncentrací. V případě tříložkových směsí se jednalo o poměry mezi první a druhou složkou směsi a první a třetí složkou směsi. Na základě provedených výpočtů jsme dospěli k závěru, že neexistuje přímá souvislost mezi přesností výsledků a volbou využití přesně určených nebo přeuračených systémů. Relativní chyba poměru se nejčastěji pohybovala v řádu  $10^{-1}$  až  $10^{-2}$ . Nejmenší relativní chyby poměru bylo dosaženo v řádu  $10^{-4}$ . Ve výjimečných případech hodnota relativní chyby poměru přesahovala 1,00. V některých případech se jevílo přesnější dosažení výsledků při použití pěti či šesti vlnových délek, například u směsi fenacetin - triclosan a plánovaném poměru 1:2 nebo u směsi kodein - pitofenon a plánovaných poměrech 1:1 a 1:2. Ani u soustav se stejným počtem rovnic jako neznámých nebyly relativní chyby malé, což ukazuje na potenciálně velká čísla podmíněnosti příslušných matic. Nelze proto očekávat malé relativní chyby ani u problému nejmenších čtverců.

Mezi důvody nepřesnosti měření patřily nepřesnosti při přípravě zásobních roztoků a odchylky měření použitého spektrofotometru. Díky nepřesnosti při přípravě roztoků a odchýlení spektrofotometru vznikly chyby na levé straně soustavy rovnic při výpočtu molárních absorpčních koeficientů. Stejně tak na pravé straně soustavy byly odchylkami spektrofotometru zatíženy hodnoty absorbancí směsí roztoků léčiv.

Správnost stanovení koncentrací jednotlivých léčiv pomocí multikomponentní analýzy byla ovlivněna výběrem léčiv do směsí, jejich schopností absorbovat a výběrem vlnových délek. Do směsí jsme zvolili taková léčiva, která vykazovala podobné hodnoty absorbancí při podobných koncentracích. Jako nejvhodnější hodnoty absorbancí se ukázaly hodnoty co nejvyšší přijatelné pro náš spektrofotometr. Ostatní kombinace léčiv se ukázaly jako nevhodné. V publikaci [11] je uvedeno, že jako nejvhodnější výběr vlnových délek se jeví absorpční maxima jednotlivých složek. V našem případě se tato volba ukázala jako nevhodná a vlnové délky jsme zvolili s rovnoměrnými rozestupy. Při malém počtu vlnových délek byla přesnost výsledku závislá na konkrétní kombinaci vlnových délek.

Na základě výsledků získaných v této práci jsme došli k závěru, že pomocí multikomponentní analýzy můžeme obecně dosáhnout přesnosti měření s relativní chybou v řádu  $10^{-1}$  až  $10^{-2}$ . Přesnost výsledků měření je nezávislá na použitém počtu vlnových délek. Podmínkou pro uplatnění multikomponentní analýzy je znalost molárních absorpčních koeficientů stanovovaných látek. V našem případě jsme tyto hodnoty zís-

kali měření. Je možné, že bychom dosáhli přesnějších výsledků, pokud by se nám podařilo dohledat tabulkové hodnoty molárních absorpčních koeficientů. Obecně se využití multikomponentní analýzy jeví jako problematické z důvodu, že nebylo možné kombinovat vzájemně všechna léčiva, ale jen ta léčiva, která absorbovala podobně.

# Literatura

- [1] Aristoteles: *Jednotková a trojúhelníková matice* [online]. [cit. 2019 – 04 – 12]. Dostupné z: <http://www.aristoteles.cz/matematika/matice/jednotkova-a-trojuhelnikova-matice.php>
- [2] ČERNÁ, BOHUMILA. *Matematika - lineární algebra*. Čtvrté vydání, nezměněné. Brno: Mendelova zemědělská a lesnická univerzita, 2007, c1999, s. 8-11, 22-25, 64. ISBN 978-80-7375-080-0.
- [3] DENTON, TOM A WALDRON, ANDREW. *Linear algebra in twenty five lectures* [online]. 2012, s. 80 [cit. 2020 – 15 – 10]. Dostupné z: <https://www.math.ucdavis.edu/linear/linear.pdf>
- [4] DUINTJER TEBBENS, ERIK JURJEN. *Přednáška pro studující předmět Matematika na Farmaceutické fakultě Univerzity Karlovy* [online]. [cit. 2019 – 07 – 09]. Dostupné z: <https://intranet.faf.cuni.cz/Studijni-materialy/KBFCH/?path=matematika>
- [5] DUINTJER TEBBENS, ERIK JURJEN; HNĚTYNKOVÁ, IVETA; PLEŠINGER, MARTIN; STRAKOŠ, ZDENĚK A TICHÝ, PETR. *Analýza metod pro maticové výpočty: základní metody*. Praha: Matfyzpress, 2012, s. 14-19, 98-99, 151-154. ISBN 978-80-7378-201-6.
- [6] ELDÉN, LARS. *Matrix methods in data mining and pattern recognition*. Philadelphia: Society for industrial and applied mathematics, 2007, s. 26-27, 69. ISBN 978-0-898716-26-9.
- [7] GOLUB, GENE HOWARD A VAN LOAN, CHARLES FRANCIS. *Matrix computations*. 4th ed. Baltimore: The Johns Hopkins University Press, 2013, s. 78. ISBN 1-4214-0859-7.
- [8] HRNČÍŘ, JAKUB. *Cvičení 3 - zadání a řešení úloh*. Základy numerické matematiky - NMNM201 [online]. 2018, s. 1 [cit. 2019 – 03 – 12]. Dostupné z: [https://www2.karlin.mff.cuni.cz/hrncir/cviceni03\\_reseni.pdf](https://www2.karlin.mff.cuni.cz/hrncir/cviceni03_reseni.pdf)
- [9] ChemSpider: *Codeine* [online]. [cit. 2020 – 10 – 10]. Dostupné z: <http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.4447447.html>
- [10] ChemSpider: *Diazepam* [online]. [cit. 2020 – 10 – 10]. Dostupné z: <http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.2908.html>
- [11] JANČÁŘ, LUDĚK A JANČÁŘOVÁ, IRENA. *Aplikace multikomponentní analýzy na stanovení obsahu potravinářských barviv v tříložkových systémech*. XXXII International Colloquium. Brno: 2014, s. 1-5.
- [12] JEŽEK, FRANTIŠEK A MÍKOVÁ, MARTA. *Maticová algebra a analytická geometrie*. Druhé, přepracované vydání. Plzeň: Západočeská univerzita, 2003, s. 21-28, 37-39. ISBN 80-7082-996-6.
- [13] KLEMERA, PETR. *Aplikovaná matematika - vybrané kapitoly pro studující farmacie*. Třetí vydání. Praha: Karolinum, 2018, s 69-70. ISBN 978-80-246-3863-8.
- [14] KLIMEŠ, JIŘÍ; SOCHOR, JAROSLAV; MOKRÝ, MILAN; KASTNER, PETR A PILÁŘOVÁ, PAVLA. *Kontrola léčiv I*. Druhé vydání. Praha: Karolinum, 2008, s 12-13. ISBN 978-80-246-1313-1.

- [15] KLOUDA, PAVEL. *Moderní analytické metody*. Třetí, upravené vydání. Ostrava: Pavel Klouda - nakladatelství Pavko, 2016, s. 102-103. ISBN 978-80-86369-22-8.
- [16] KOVÁČ, ŠTEFAN A LEŠKO, JÁN. *Spektrálne metódy v organickej chémii*. První vydání. Bratislava: ALFA, 1980, s. 183.
- [17] KOVÁŘOVÁ, LUCIE. *Multikomponentní analýza*. Hradec Králové, 2016. Diplomová práce. Univerzita Karlova v Praze. Farmaceutická fakulta.
- [18] KRAJNÍK, EDUARD. *Maticový počet*. Druhé vydání. Praha: Vydavatelství ČVUT, 2004, c1997, s. 7-8. ISBN 80-01-03084-9.
- [19] MOŠNA, FRANTIŠEK. *Řešené příklady z Matematiky III* [online]. 2007, s. 3 [cit. 2021 – 02 – 11]. . Dostupné z: <https://www2.karlin.mff.cuni.cz/kun-cova/kalkulus1/krivkoveplosne.pdf>
- [20] MUSELÍK, JAN. *Aplikace blízké infračervené spektroskopie ve farmaceutické analýze*. Chemické listy [online]. 2012, 106, s. 13 [cit. 2020 – 02 – 09]. Dostupné z: [http://www.w.chemicke-listy.cz/docs/full/2012\\_01\\_10-15.pdf](http://www.w.chemicke-listy.cz/docs/full/2012_01_10-15.pdf)
- [21] NCATS Inxight: Drugs: *Pitofenone* [online]. [cit. 2020 – 10 – 10]. Dostupné z: <https://drugs.ncats.io/drug/M09N8K7YJY>
- [22] NCATS Inxight: Drugs: *Triclosan* [online]. [cit. 2020 – 10 – 10]. Dostupné z: <https://drugs.ncats.io/drug/4NM5039Y5X>
- [23] NIST WebBook Chemie: *Phenacetin* [online]. [cit. 2020 – 10 – 10]. Dostupné z: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=62-44-2>
- [24] NOVÁK, JIŘÍ. *Základy teorie chyb a zpracování fyzikálních měření*. Fyzikální webové stránky Fakulty stavební ČVUT v Praze [online]. Nestránkováno [cit. 2021 – 04 – 15]. . Dostupné z: <http://webfyzika.fsv.cvut.cz/PDF/teoriechyb.pdf>
- [25] Proof Wiki: *Inverse of diagonal matrix* [online]. [cit. 2020 – 02 – 03]. Dostupné z: [https://proofwiki.org/wiki/Inverse\\_of\\_Diagonal\\_Matrix](https://proofwiki.org/wiki/Inverse_of_Diagonal_Matrix)
- [26] PubChem: *Metamizole* [online]. [cit. 2020 – 10 – 10]. Dostupné z: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Metamizole>
- [27] ROJKOVÁ, KRISTÝNA. *Řešení řídkých soustav lineárních algebraických rovnic*. Hradec Králové, 2016. Bakalářská práce. Univerzita Karlova v Praze. Farmaceutická fakulta.
- [28] STRANG, GILBERT. *Introduction to linear algebra*. 3rd ed. Wellesley: Wellesley - Cambridge Press, c2003, s. 1-2, 10-15. ISBN 0-9614088-9-8.
- [29] Wikipedie: *Matice* [online]. [cit. 2019 – 04 – 29]. Dostupné z: <https://cs.wikipedia.org/wiki/Matice>

# Seznam obrázků

2.1 Ortogonální projekce . . . . .	27
------------------------------------	----

# Seznam tabulek

4.1	Molární hmotnosti léčiv, jejich teoretické a reálné navážky a výsledné koncentrace zásobních roztoků o objemu 50 ml . . . . .	39
4.2	Výsledné koncentrace roztoků léčiv v kyvetě o objemu 3 ml použité pro měření jejich absorpčních spekter . . . . .	40
4.3	Molární absorpční koeficienty pro diazepam . . . . .	40
4.4	Molární absorpční koeficienty pro fenacetin . . . . .	41
4.5	Molární absorpční koeficienty pro kodein . . . . .	41
4.6	Molární absorpční koeficienty pro metamizol . . . . .	41
4.7	Molární absorpční koeficienty pro pitofenon . . . . .	42
4.8	Molární absorpční koeficienty pro triclosan . . . . .	42
4.9	Zvolené kombinace dvousložkových směsí a jejich plánované poměry . .	42
4.10	Zvolené kombinace třísložkových směsí a jejich plánované poměry . . .	43
4.11	Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs fenacetin - triclosan . . . . .	43
4.12	Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs kodein - pitofenon . . . . .	43
4.13	Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs diazepam - triclosan . . . . .	44
4.14	Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs fenacetin - metamizol - kodein . . . . .	44
4.15	Použité koncentrace [ $mol/dm^3$ ] pro měření absorpčních spekter - směs diazepam - triclosan - pitofenon . . . . .	44
4.16	Naměřené hodnoty absorbancí směsi fenacetin - triclosan . . . . .	45
4.17	Naměřené hodnoty absorbancí směsi kodein - pitofenon . . . . .	45
4.18	Naměřené hodnoty absorbancí směsi diazepam - triclosan . . . . .	45
4.19	Naměřené hodnoty absorbancí směsi fenacetin - metamizol - kodein . .	46
4.20	Naměřené hodnoty absorbancí směsi diazepam - triclosan - pitofenon .	46
5.1	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - triclosan a plánovaný poměr 1:1	49
5.2	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - triclosan a plánovaný poměr 1:2	50
5.3	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - triclosan a plánovaný poměr 3:2	51
5.4	Výsledné hodnoty pro směs kodein - pitofenon a plánovaný poměr 1:1 .	52
5.5	Výsledné hodnoty pro směs kodein - pitofenon a plánovaný poměr 1:2 .	53
5.6	Výsledné hodnoty pro směs kodein - pitofenon a plánovaný poměr 3:1 .	54
5.7	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan a plánovaný poměr 1:1	55
5.8	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan a plánovaný poměr 1:2	56
5.9	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan a plánovaný poměr 3:1	57
5.10	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 1:1:1 . . . . .	58
5.11	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 1:2:1 . . . . .	59
5.12	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 2:2:1 . . . . .	60

5.13	Výsledné hodnoty pro směs fenacetin - metamizol - kodein a plánovaný poměr 1:1:3 . . . . .	61
5.14	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 1:1:1 . . . . .	62
5.15	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 2:1:2 . . . . .	63
5.16	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 1:1:2 . . . . .	64
5.17	Výsledné hodnoty pro směs diazepam - triclosan - pitofenon a plánovaný poměr 2:1:1 . . . . .	65