

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я  
НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ О.О.БОГОМОЛЬЦЯ  
ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра хімії ліків та лікарської токсикології**

**КВАЛІФІКАЦІЙНА ВИПУСКНА РОБОТА**

на тему

**Використання хемометричних методів для виявлення фальсифікатів  
серед дієтичних добавок**

Виконав: здобувач вищої освіти 5 курсу, групи 8803  
напряму підготовки (спеціальності)  
226 «Фармація, промислова фармація»  
Освітньої програми Фармація  
Межов Станіслав Едуардович

Керівник: доктор хімічних наук, головний  
науковий співробітник Лабораторії контролю якості ДУ  
«Інститут громадського здоров'я ім О.М. Марзєєва  
НАМНУ» Україна, м. Київ  
Левін Михайло Григорович

Рецензенти:

Доктор хімічних наук, професор, завідувач  
кафедри хімічного матеріалознавства Харківського  
національного університету імені В.Н. Каразіна  
О.І.Коробов

Доцент кафедри аналітичної, фізичної та  
колоїдної хімії НМУ імені О.О. Богомольця, кандидат  
хімічних наук

Я.М. Пушкарьова

<b>Зміст</b>	
Вступ.....	<b>3</b>
1. ДІЄТИЧНІ ДОБАВКИ В СУЧАСНОМУ СВІТІ .....	<b>4</b>
2. СТАН ПИТАННЯ	
2.1. ЗАГАЛЬНІ АСПЕКТИ .....	<b>8</b>
2.2. ФАРМАКОПЕЙНІ ПІДХОДИ .....	<b>10</b>
2.3. ОСНОВИ СПЕКТРОФОТОМЕТРІЇ В УЛЬТРАФІОЛЕТОВІЙ ТА ВИДИМІЙ ОБЛАСТІ СПЕКТРУ ТА МОДЕЛЬ КАЛІБРУВАННЯ НА ОСНОВІ ПРЯМОГО МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ .....	<b>11</b>
2.4. МОДЕЛЬ КАЛІБРУВАННЯ НА ОСНОВІ ЗВОРОТНЬОГО МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ (ЗВОРОТНЕ КАЛІБРУВАННЯ) .....	<b>19</b>
3. МОЖЛИВІСТЬ СТВОРЕННЯ ВІРТУАЛЬНИХ МОДЕЛЬНИХ СУМІШЕЙ ПОБУДОВАНИХ НА ПРИНЦИПІ АДТИВНОСТІ ТА ПРЯМОЇ ПРОПОРЦІЙНОСТІ.....	<b>23</b>
4. ЕКСПЕРИМЕНТ І ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ	
4.1. ВИБІР ЕКСТРАГЕНТУ .....	<b>25</b>
4.2. МЕТОДИКА ПРИГОТУВАННЯ ЕКСТРАКТУ ДД .....	<b>25</b>
4.3. МЕТОДИКА ПРИГОТУВАННЯ РОЗЧИНУ АФІ .....	<b>26</b>
4.4. ПРИГОТУВАННЯ СПАЙКОВАНИХ РОЗЧИНІВ (ВАЛІДАЦІЙНІ РОЗЧИНИ) .....	<b>26</b>
4.5. НОВИЙ ПІДХІД ДО ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ЗВОРОТНЬОГО КАЛІБРУВАННЯ .....	<b>31</b>
5. ВИСНОВКИ .....	<b>66</b>
6. ЛІТЕРАТУРА .....	<b>67</b>

## Вступ

Актуальність теми: Однією з актуальних проблем в сучасній фармації є протидія фальсифікації дієтичних добавок (ДД). Така фальсифікація відбувається за рахунок додавання в склад ДД незадекларованих активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ) або їхніх аналогів з метою отримання незаконних комерційних переваг. Використання підроблених ДД несе в собі багато загроз здоров'ю людей внаслідок неконтрольованого використання АФІ, що може призводити до побічних дій (незадекларовані взаємодії зі складовими лікарських препаратів або вплив на супутні хвороби людини). Тому розробка хімічних аналітичних методів для контролю якості ДД є дуже актуальною задачею.

Мета дослідження: удосконалення методів хемометрики для створення простих і ефективних методів визначення фальсифікації ДД шляхом створення хемометричної моделі на основі удосконаленого методу зворотньої калібровки.

Для досягнення поставленої мети в нашій роботі вирішувались наступні задачі:

1. Проведено аналіз використання методів хемометрики для визначення фальсифікату в ДД та можливості вдосконалення методів
2. Розробити методіку та зібрати данні необхідні для її втілення
3. Побудувати хемометричну модель та перевірити можливість її застосування для вирішення поставленої в роботі проблеми.

Предмет дослідження: наявні хемометричні методи для визначення якості ДД та можливості вдосконалення методів хемометрики

Методи дослідження: методи математичної статистики, спектрофотометричні методи, метод зворотньої калібровки

Практичне значення: розробка та тестування модифікованого методу зворотньої калібровки для застосування в визначенні фальсифікатів в ДД.

Наукова новизна: вдосконалення методу зворотньої калібровки шляхом застосування віртуальних калібрувальних проб

## 1. Дієтичні добавки в сучасному світі.

Дієтичні добавки надзвичайно важливі в руслі загальної тенденції сучасної медицини, як засіб запобігання виникнення хвороб шляхом компенсації нестачі того чи іншого інгредієнта в їжі, що набагато дешевше і краще для потенційного пацієнта, ніж лікування. Механізми виникнення хвороби в результаті того, що в їжі та/або напоях не вистачає якихось важливих мінеральних складових можуть бути різні прямі і непрямі, наприклад,

### 1. Прямі:

- Нестача йоду призводить до патологій щитовидної залози (одне з найпоширеніших у всьому світі захворювання неінфекційного характеру [1].
- Нестача того чи іншого вітаміну, провітаміну, кофактору, антиоксидантів, тощо можуть призводити до різних хворобливих станів, від дуже тяжких до легких, але останні також можуть загрожувати віддаленими у часі наслідками [2]

2. Непрямі, хворобливі стани, пов'язані з нестачею того чи іншого вітаміну, мінералу, антиоксидантів, кофакторів у їжі можуть призводити до порушення гомеостазу і, як наслідок, не тільки до втрати стійкості до патогенних мікроорганізмів, але й до того, що члени нормального мікробіома людини стають патогенними [3]. Недавнім прикладом є пандемія КОВІД-19, при якій вірус більш ефективно вражав нижні дихальні шляхи людини при зниженому вмісті вітаміну D [4].

Важливість вживання їжі багатою різноманітними поживними речовинами була помічена людством з давніх часів й знайшла своє відображення в народних прислів'ях та приказках, наприклад:

- англійська приказка "An apple a day keeps the doctor away", "An ounce of prevention is worth a pound of cure"
- іспанська приказка «Una manzana al día mantiene al doctor en la lejanía»
- часник сім хвороб лікує тощо.

З розвитком індустрії виготовлення дієтичних добавок з'явилися і наукові журнали цілком присвячені ДД, наприклад:

Taylor & Francis Online

Home ▶ All Journals ▶ Journal of Dietary Supplements ▶ Journal Information

Journal of Dietary Supplements

Enter keywords, authors, DOI, ORCID etc

Publish with us  
Submit an article ▼

About this journal ▼

Explore  
Browse all articles & issues ▼

Latest issue

Subscribe  
Alerts & RSS feed ▼

+ Purchase a subscription

Ready to submit?

Start a new manuscript submission or continue a submission in progress

[Go to submission site](#)

## Journal information

Print ISSN: 1939-0211 Online ISSN: 1939-022X

6 issues per year

Численні медичні, фармацевтичні, хімічні та ін. журнали публікують статті присвячені тим чи іншим аспектам розробки, виробництва, регулювання, забезпечення та контролю якості дієтичних добавок.

Індустрія дієтичних добавок стала дуже прибутковою галуззю, в якій, природньо, виникла жорстка конкуренція. Але конкуренція без належного контролю призводить до бажання зробити свій продукт привабливішим за продукти конкурентів і максимально привабливим, можна сказати патологічно (наркотично) привабливим для потенційних покупців. У випадку ДД це призвело до спроб наділити свої продукти терапевтичними властивостями за допомогою введення до їх складу незадекларованих колишніх та актуальних активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ) або їх аналогів (так званих дизайнерських АФІ, які на відміну від звичайних АФІ, ніколи не проходили жодних доклінічних або клінічних випробувань, або проходили, але були відхилені з причин низького відношення ефективність/безпека, або просто синтетичних речовин, які на думку фальсифікаторів повинні виявляти певні терапевтичні властивості і при цьому не настільки токсичні, щоб викликати негайне викриття). Ми називатимемо такі АФІ чи їхні аналоги фальсифікантами, тобто, тими агентами, які фальсифікують ДД, а дієтичні добавки, які містять фальсифіканти – фальсифікати або фальсифіковані ДД, а людей які займаються подібними низькими справами – фальсифікаторами.

У нашій роботі ми спробуємо поєднати такі аспекти:

1. Результати роботи мають стати додатковим внеском у вирішення одного із сучасних викликів людству в галузі охорони здоров'я, а саме, фальсифікації дієтичних добавок (ДД) шляхом введення до їх складу незадекларованих фармакологічно активних речовин (активних фармацевтичних інгредієнтів або їх аналогів) Метою прихованого введення АФІ в ДД є створення у споживача враження, що ця ДД (образно кажучи набір невинних трав) викликає терапевтичний ефект і при цьому гіпотетично не має побічних дій та ризиків з якими пов'язане застосування лікарських засобів, для яких завжди є деяке співвідношення користь/ шкода. Зауважимо, що ризик використання ДД (скажімо у вигляді капсул) завжди вищий за ризик прийому відповідного лікарського препарату (також капсул з тим самим АФІ) з наступних причин:

- АФІ таємно введене в ДД зазвичай не контролюється на наявність домішок і може містити як допустимі споріднені сполуки у більш високих концентраціях ніж легальний лікарський засіб, так і неприпустимі, наприклад, генотоксичні домішки та сторонні домішки, внаслідок того, що ця АФІ швидше за все зроблена не в умовах GMP, як АФІ для лікарського препарату, а нелегально

- Біодоступність АФІ з такого ДД може бути аномальною. Тобто АФІ з легального лікарського засобу має модифіковане вивільнення, наприклад, пролонговане, або вивільнення відбувається тільки в певних сегментах кишечника при певних рН, а АФІ з ДД буде вивільнятися негайно, що може призводити

- для його розкладання в кислому середовищі шлунка з утворенням токсичних продуктів;
- до виникнення аномально високих та токсичних концентрацій через неправильні профілі вивільнення з продукту та всмоктуючи в ШКТ;
- до взаємодій різного характеру з легальними компонентами ДД;

2. Застосування методів хемометрики для створення простих та ефективних методів протидії зазначеній вище загрозі з урахуванням реалій, що мають місце в Україні на етапі її протистояння агресії Російської Федерації.

3. На базі напрацьованих в процесі виконання роботи способів і досвіду можна розвивати і більш витончені способи аналізу і досліджувати більш складні об'єкти.

## **2. Стан питання**

### **2.1 Загальні аспекти**

У вступі ми спробували показати важливість використання дієтичних добавок для профілактики виникнення хворобливих станів. Однак, і в процесі терапевтичного, а часом і хірургічного лікування хворобливих станів (хвороб) роль дієтичних добавок велика. Так, в Енциклопедії ДД [5] розглядаються кілька десятків компонентів, що входять у дієтичні добавки з точки зору їх хімії, біохімії та їх ефект для профілактики та лікування різних хворобливих станів. У [6] представлена історична перспектива розвитку законодавчого процесу у США щодо тріади - їжа, дієтичні добавки, ліки. Монографії [7,8,9] представляють ті аспекти застосування дієтичних добавок, коли їх корисність домінує над негативними аспектами і навпаки, як треба застосовувати ДД з погляду лікаря, наскільки звичайна людина може довіряти рекламним матеріалам без поради дипломованого фахівця та деякі аспекти ефективності, безпеки та якості, які пов'язані із застосуванням ДД. Книга [10] знайомить читача з тими ситуаціями, коли і за яких умов можна і потрібно проводити клінічні випробування, в яких досліджуються дієтичні добавки як самі по собі, так і в поєднанні з ліками. У книзі представлено широку інформацію про всі життєво важливі аспекти та науково обґрунтовані дослідження ДД. Монографії [11-15] присвячені використанню ДД для профілактики та лікування різних видів захворювань та станів, наприклад, для неврологічних захворювань та захворювань головного мозку [11], захворювань ШКТ [12], печінки [13] та станів, пов'язаних із літнім віком [14].

Стан правових та інших адміністративних аспектів та законодавчих перспектив дієтичних добавок в Україні станом на 2020 рік досить докладно осячено в дисертаційній роботі Олени Михайлівни Кузнєцової [15]. Цілком очевидно, що законотворчість в Україні, зокрема щодо ДД, розвивається з огляду на досвід США, ЄС, Великобританії, Японії, Швейцарії, Китаю, Індії та деяких інших розвинених країн, тому має сенс розглянути деякі аспекти цього процесу в перелічених країнах і регіонах. У статтях [16-18] перелічені органи, що



здійснюють регулювання та наділені законодавчою ініціативою в галузі ДД для таких країн та проаналізовано деякі відмінності в підходах до адміністрування тріади - їжа-ДД-ліки, причому в роботі [18] дається порівняння термінів, що застосовуються у різних регіонах до того, що ми називаємо дієтичними добавками, наприклад, *herbal medicines, functional foods, health food, natural health products, food supplements, novel foods, complementary medicines, alternative medicines, traditional medicines, traditional Chinese medicines, campo medicines* і робиться акцент на істотних відмінностях щодо віднесення тих чи інших продуктів до різних розрядів тріади. Особливо важливе для аналізованої нами теми формування ставлення громадськості до FDA USA в процесі боротьби з фальсифікаціями ДД. FDA вважає фальсифікацією ДД заміну дорогих компонентів ДД дешевшими, що розглядається як адміністративне правопорушення, та введення в склад ДД незадекларованих компонентів (АФІ або їх аналогів), яке повинно тягнути за собою кримінальне переслідування або звичайні адміністративні заходи у разі добровільного відкликання ДД фірмою виробником [19]. У десятих роках 21 століття з'явилися серйозні наукові огляди присвячені зростаючій проблемі фальсифікації ДД за допомогою АФІ та їх аналогів [20,21], які, здається, спонукали законодавців та уповноважені органи впритул зайнятися цією проблемою. Однак, на жаль, боротьба з цим злом не завжди виявляється успішною: як показано у статті 2023 року, деякі ДД із давно виявленими фальсифікантами досі перебувають на ринку США [22]. У роботі [23] представлений цікавий список незадекларованих АФІ та їх аналогів, виявлених у ДД в Республіці Корея, причому попри зусилля компетентних органів частота фальсифікацій не зменшується. Основну групу фальсифікантів становлять АФІ та його аналоги призначені для посилення еректильної функції, далі слідують АФІ та його аналоги, створені задля зниження ваги, третя група АФІ та його аналоги для збільшення м'язової маси, четверта — спрямована на релаксацію тощо. Загалом у роботі [23] представлено понад 100 таких АФІ. Перелічувати всі оригінальні статті та монографії, поява яких викликала явище фальсифікації ДД за допомогою АФІ та їх аналогів, просто неможливо, але ми

представимо лише декілька, які вийшли у 2023 році [24-27], що вказує на те, що проблема не має тенденції до зменшення.

**Проміжний висновок:** враховуючи вищесказане, можна стверджувати, що практично будь-яке АФІ або його аналог може бути використане фальсифікаторами, тому чим ширший спектр АФІ охоплює аналітична методика, що пропонується для контролю ринку ДД тим краще, причому актуальність розробки такого роду методик у майбутньому буде, швидше за все, збільшуватись.

## 2.2. Фармакопейні підходи

В оглядовій статті присвяченій фармакопейним аспектам контролю якості ДД розглядаються зокрема й ті, які дозволяють виявити наявність аномальних ДД за допомогою фармакопейних методів контролю якості, описаних у тій чи іншій провідній фармакопеї з акцентом на Американську [28]. Крім того підкреслюється, що наявність загальної статті Американської Фармакопеї SCREENING FOR UNDECLARED DRUGS AND DRUG ANALOGUES [29] дає гарну основу для розробки як цільових методик, спрямованих на пошук певних фальсифікантів, так і не цільових, спрямованих на виявлення ДД, які можна запідозрити на наявність фальсифіканта чи фальсифікантів. Запропоновані у статті методи та методики випробувань полегшують скринінг синтетичних домішок. Зазначається, що жоден окремий метод неспроможний працювати з усіма потенційними аналітами (фальсифікантами); таким чином, комбінація ортогональних підходів додають впевненості до аналітичного результату. Мас-спектрометричні методи забезпечують сильне обґрунтування аналітичних висновків. У деяких випадках, наприклад, якщо фальсифіканти є гормонами, їх вміст у ДД може бути настільки низьким, що GC-MS або LC-MS можуть бути єдиними відповідними аналітичними опціями. На момент написання даної роботи в статті USP представлені методики виявлення АФІ для підсилювачів потенції у відповідних ДД. Для виявлення фальсифікантів – підсилювачів потенції рекомендовано такі аналітичні методи:

1. ВЕРХ з фотодіодним УФ-ВИД детектуванням (HPLC with Photodiode Array Detection).
2. ВЕРХ з МС детектуванням (HPLC with Mass-Spectrometric Detection).
3. Високоєфективна тонкошарова хроматографія (ВЕТШХ) з візуальним, УФ та/або МС детектуванням (High Performance Thin-Layer Chromatography (HPTLC) with Visual, UV, and/or MS Detection).
4. Мас-спектрометрія за нормальних умов (Ambient Ionization Mass Spectrometry).
5. Спектроскопія Ядерно Магнітного Резонансу в слабкому та сильному полях (NMR Spectroscopy-Low-Field and High-Field).
6. Біологічні методи кількісного визначення (Bioassay).

Подані методи виявлення фальсифікантів можуть бути здійснені у спеціалізованих аналітичних лабораторіях. Для умов «дикого» ринку ДД в Україні, як нам вдається, більш відповідними, будуть методи, що ґрунтуються на спектрометрії в ультрафіолетовій та видимій областях спектру (УФ-ВИД спектрометрія), оскільки цим методом володіють практично всі лабораторії, як у системі Держслужби лікарських засобів та контролю за наркотиками України, так і в інших державних та приватних лабораторіях України.

**Проміжний висновок:** слід докласти зусиль для розробки простої та експресної методики виявлення фальсифікантів (АФІ та їх аналогів) у ДД на ринку України на основі спектрофотометрії в ультрафіолетовій та видимій області з перспективою розширення спектрального діапазону на фундаментальну та ближню інфрачервоні області спектру.

### **2.3. Основи спектрофотометрії в ультрафіолетовій та видимій областях спектру та модель калібрування на основі прямого методу найменших квадратів.**

Насамперед відзначимо, що з формальної точки зору, вимірювання аналітичного сигналу при будь-якій довжині хвилі випромінювання є виміром сигналу від одного сенсора і не важливо, чи знаходиться цей сенсор у видимій,

ультрафіолетовій, фундаментальній інфрачервоній (ІЧ) або ближній ІЧ. Тому за наявності доступного обладнання можна використовувати ці три області спектру як окремо, так і в різних поєднаннях, причому проби можуть бути як у вигляді розчинів (екстрактів) у разі УФ-ВИД спектrophотометрії та ІЧ в фундаментальній області, так і у вигляді нативних твердих зразків у разі ближньої ІЧ області спектру або у вигляді твердих дисперсій у вазеліновому маслі або броміді калію у разі фундаментальної ІЧ. У більш віддаленому майбутньому можливо з'явиться можливість використовувати як джерело додаткових сенсорів так звану Раманівську спектроскопію. Але поки що в експериментальній частині обмежимося лише УФ-ВИД спектrophотометрією.

Ультрафіолетова і видима області спектра тягнуться від 200 до 780 нм [30], за цією областю простягається область ближнього ІЧ 780-2500 нм [32] і далі фундаментальна ІЧ середня ІЧ область 2500 - 25000 нм [34]. Основні аналітичні аспекти вимірювань у цих галузях радіомагнітного випромінювання описані у загальних статтях USP поточного видання [30-35]. Нині Раманівська спектроскопія набула фармакопейного статусу [36, 37] та отримала адекватну інструментальну базу. Раманівська спектроскопія доповнює спектроскопію в середньому та ближньому ІЧ діапазонах тим, що в ній активні коливання атомів у молекулах, які не виявляють активності в ІЧ.

Найчастіше лінійно зв'язаною з концентрацією є абсорбція або оптична щільність, яка пов'язує інтенсивність падаючого потоку світла з інтенсивністю потоку світла ( $I_0$ ), що пройшло через зразок  $I$ . [30,31]:

$$A = -\lg \left( \frac{I}{I_0} \right) \quad (2.1)$$

Величина  $A$  зв'язана з концентрацією рівнянням Бугера-Ламберта-Бера (закон БЛБ) (чи просто законом Бера (Beer law в англійській літературі) [30,31]:

$$A = e \cdot c, \quad (2.2)$$

де:

$c$  - концентрація речовини, наприклад, вагооб'ємні відсотки, молярна концентрація або концентрація в мкг/мл тощо;

довжина оптичного шляху завжди становить 1 см і тому не представлена;

$E$  - показник поглинання, який показує яку оптичну щільність мав би об'єкт при даній довжині оптичного шляху (наприклад, 1 см) та одиничної концентрації (наприклад, 1% (10 г/літр розчину) або 1 моль на літр (у цьому випадку він зазвичай позначиться як  $\epsilon$ )).

Крім того, так як вимірювання в УФ-ВИД діапазоні проводиться, як правило, в дуже розбавлених розчинах виконується так званий. принцип адитивності оптичних щільностей:

$$A_i = \sum_{j=1}^n A_{ij}, \quad (2.3)$$

де індекс  $i$  вказує на довжину хвилі, наприклад 254 нм, а індекс  $j$  вказує на сполуки, що поглинають світло на цій довжині хвилі.

Сучасні спектрофотометри (детально описані в [30,31]) дозволяють вимірювати спектри поглинання в повному спектральному УФ-ВИД діапазоні (або будь-якої його частини) з кроком близько 1 нм (і менше) за час від кількох мілісекунд до декількох хвилин з високими точністю, правильністю, відтворюваністю та іншими атрибутами аналітичної якості.

Рівняння (2.3) показує, що в результаті використання УФ-ВИД спектрофотометрії як джерела аналітичного сигналу, можна отримувати як сигнал у вигляді скаляра - вимірювання оптичної густини при одній довжині хвилі, так і у вигляді вектора - спектра. (Зазначимо, що у випадку використання гібридного методу ВЕРХ-УФ/ВИД сигнал виходить у вигляді матриці, де як додаткова розмірність служить час/обсяг утримування, а більш складні техніки (наприклад, спектро-флуориметрія у разі поєднання з ВЕРХ дають сигнали у вигляді тривимірних тензорів або об'єктів більш високих рангів) Сигнал у вигляді вектора варіант відкриває перед нами можливість використання для виявлення наявності фальсифіканта АФІ у складі ДД потужного інструментарію, що надається відносно новою дисципліною - хемометрикою.

Відносно нещодавно хемометрика з'явилася у Фармакопеях (наприклад, Американській Фармакопеї[38], причому там вона пропонується для використання в ряді методів [32, 34, 36, 37, 39-45]), так і в великих текстах, які можна розглядати як підручники та довідкові посібники (наприклад, [46-64]), не говорячи про численні статті, присвячені найрізноманітнішим питанням теорії та практики хемометрики.

Зазначимо, що хемометрика [64, Р. 60] являє собою використання методів математики в галузі хімії (в основному аналітичної), тому позначення, що використовуються в цій науці узгоджуються з тими, що використовуються в математиці, зокрема:

- скалярні величини позначаються символами, записаними простим шрифтом;
- вектори позначаються малими літерами, записаними жирним прямим шрифтом, наприклад **x**, **y**;
- матриці позначаються великими літерами, записаними жирним прямим шрифтом, наприклад, **X**, **Y**;

З точки зору хемометрики рівняння (3) є опис вектора, тому його потрібно переписати з урахуванням вищесказаного:

$$a_i = \sum_{j=1}^n c_j E_{ij} \quad (2.4)$$

Так як ми плануємо використовувати хемометричні підходи для створення методу виявлення фальсифікантів в ДД, то нам перш за все треба чітко розуміти з якими типами об'єктів, з точки зору хемометрики нам доведеться мати справу. Об'єкти (системи), які піддаються аналізу, є багатокомпонентними (навіть надчисті монокристали не досконалі, природа не виносить абсолютної чистоти і абсолютна чистота макрооб'єктів так само недосяжна, як абсолютний нуль температури). З погляду хемометрики будь-який багатокомпонентний об'єкт відноситься до одного з трьох типів [65]:

- білого,
- сірого
- чорного.

Багатокомпонентні системи, які маркуються як білі, мають наступні характеристики [65]: доступні спектри всіх хімічних речовин, присутніх в пробі, або спектри від проб, які містять усі можливі похибки крім цільових речовин. Крім того, концентрації всіх цільових аналітів у тренувальних наборах повинні бути відомі. Метою аналізу білих систем є кількісне визначення концентрацій деяких або всіх хімічних речовин [65]. Методи такого роду аналізу відносно детально розроблені та майже завжди дають чудові результати, винятками є погано обумовлені та серйозно нелінійні системи [65]. Чорними системами називаються такі, для яких немає апіорної інформації щодо хімічного складу [65]. Незважаючи на це супер завданням є одночасне визначення спектрів (рішення) та концентрацій (кількісне визначення або квантифікація (quantification)) всіх хімічних речовин у цій суміші, після впровадження техніки самомоделюючої роздільної здатності кривих (self-modeling curve resolution (SMCR)), було розроблено декілька методів вирішення цих аналітичних систем [65]. Сірі аналітичні системи охоплюють область між двома типами, описаними вище. Базовими характеристиками цих аналітичних систем є те, що доступне лише неповне знання щодо якісного хімічного складу [65]. Метою аналізу є кількісне визначення цільових аналітів у присутності невідомих похибок. Як правило, спектри цільових аналітів доступні, але немає інформації щодо можливих похибок у пробах [65].

Почнемо, однак, з розгляду тих ситуацій, які все частіше зустрічаються на практиці в процесі розвитку нашої цивілізації і які вимагають практично повного знання якісного складу об'єкта. Це, наприклад, матеріали для напівпровідників на основі кремнію або германію, коли поява невідомої домішки на рівні 10 атомів з трильйону (правило 11 дев'яток) може спричинити бракування серії матеріалу [66]. Набагато ближчий нам приклад - це фармацевтична галузь промисловості, де якісний склад будь-якої лікарської субстанції, допоміжного лікарського інгредієнта та природно-лікарського препарату повинен бути відомий на рівні як правило не гірше 0.05-0.1%, тобто. на таких низьких рівнях не має бути неідентифікованих домішок [67, 68]. Як

наслідок, фармацевтичні об'єкти є «білими» і для них застосовується класичний метод найменших квадратів, зокрема вітчизняними авторами розвинені варіанти цього підходу, що мають високу робастність [69-77].

Розглянемо застосування моделі класичного методу найменших квадратів для аналізу білих багатокомпонентних об'єктів. Взагалі спосіб найменших квадратів можна використовувати у двох випадках: прямому і зворотному. Прямий варіант відрізняється від зворотного тим, що в прямому варіанті сигнал розглядається прямо пропорційним концентрації, як це представлено рівнянням Бугера-Ламберта-Бера (2.2), у зворотному варіанті, концентрація розглядається прямо пропорційною сигналу. Якщо аналіз проводиться при одній довжині хвилі, то очевидно, що жодної різниці в цих підходах немає, але при використанні багатохвильового діагностики різниця між цими двома підходами стає величезною [64].

Усі аналітичні методи поділяються на прямі та непрямі. Прямі методи не вимагають стандартного зразка речовини, що визначається (аналіту). Наприклад, визначення ацетилсаліцилової кислоти в таблетках за допомогою кислотно-основного титрування не вимагає стандартного зразка цього аналіту, титр розчину луку за допомогою якого виконується титрування, можна визначити, наприклад, по соляній кислоті з фіксаналу. Спектрометрія є типовим непрямим методом.

Прямі аналітичні методи містять один фундаментальний етап - вимірювання, перед яким може проводитися складна та тривала пробопідготовка.

Усі непрямі аналітичні методи вимагають двох фундаментальних етапів: калібрування та вимірювання, кожен з яких може включати пробопідготовку.

Розглянемо фазу калібрування в найбільш загальному вигляді для моделі прямого методу найменших квадратів ми знаємо число світлопоглинаючих компонентів системи, нехай їх число буде рівним  $N$ . Ми плануємо проводити вимірювання при  $J$  аналітичних довжинах хвиль, у цьому випадку нам треба приготувати  $I$  стандартних розчинів (звичайно, що для кожного стандартного



розчину повинна бути відома концентрація всіх компонентів, що входять до нього), кожен з цих стандартних розчинів потрібно проспектрофотометрувати при  $J$  аналітичних довжинах хвиль, що дасть нам матрицю  $\mathbf{X}$  розміром  $J \times I$ . Концентрації стандартних розчинів також формують матрицю  $\mathbf{Y}$  розміром  $I \times N$ .

Матриці  $\mathbf{Y}$  та  $\mathbf{X}$  пов'язані рівнянням [60]:

$$\mathbf{X} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{Y}^T + \Delta \quad (2.5)$$

де:  $\mathbf{S}$ - матриця коефіцієнтів пропорційності розміром  $J \times N$ , які в ідеальному випадку збігаються з величинами  $\mathbf{E}$  з рівняння (2.2);  $\Delta$  - матриця похибок, яка в ідеалі є нульовою і не бере участь у подальших викладках; надрядковий індекс  $t$  означає транспонування. Матриця  $\mathbf{S}$  дає зв'язок між оптичними густинами та концентраціями. Для того, щоб рівняння працювало необхідно знати концентрації всіх компонентів калібрувальних розчинах і ці компоненти повинні бути тими ж самими, що і в реальних пробах (випробуваних розчинах) на стадії вимірювання. Зауважимо, що рівняння (2.5) пов'язує тільки оптичні густини (показання сенсорів) та концентрації аналітів і його ніяк не можна пов'язати з якимись властивостями аналітичних проб, наприклад ефірним числом або показником окислюваності).

Так як  $J \geq N$ , а на сучасному етапі  $J \gg N$  то розв'язок рівняння (2.5) проводиться методом найменших квадратів (деталі якого виходять за рамки даного тексту), проте продемонструємо прості викладки:

- помножимо обидві частини рівняння (2.5) на  $\mathbf{Y}$  праворуч:

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y} \quad (2.6)$$

- помножимо обидві частини отриманого рівняння на  $(\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y})^{-1}$

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y})^{-1} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y})^{-1}$$

$$\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y})^{-1} = \mathbf{I}$$

де:  $\mathbf{I}$ - одинична матриця. Перепишемо отримане рівняння у зручному для роботи вигляді:

$$\mathbf{S} = \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{Y})^{-1} \quad (2.7)$$

Розглянемо фазу виміру. На цій фазі вимірюються оптичні густини випробуваного розчину (тобто той розчин, який отриманий в результаті відповідної пробопідготовки) при аналітичних довжинах хвиль (знімається його спектр), в результаті отримуємо вектор  $\mathbf{x}_T$  (підрядковий індекс  $T$  вказує, що цей вектор відноситься до випробуваного розчину (test solution), це вектор-стовпець.

Для випробуваного розчину має виконуватися рівняння, аналогічне до рівняння (2.5)

$$\mathbf{x}_T = \mathbf{S} \cdot \mathbf{y} + \boldsymbol{\delta}, \quad (2.8)$$

де:  $\mathbf{y}$ - вектор стовпець розміром  $N \times 1$ , що містить концентрації компонентів по яких проводилося калібрування,  $\boldsymbol{\delta}$ - вектор похибок прийнятої лінійної моделі, аналогічний матриці  $\Delta$  у рівнянні (2.5) і який далі прирівнюється до нульового вектора.

Проведемо стандартні перетворення див., наприклад, [64]:

- множимо (2.8) зліва на  $\mathbf{S}^T$

$$\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{x}_T = (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{y},$$

- потім множимо ліворуч на зворотну матрицю  $(\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S})^{-1}$

$$(\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S})^{-1} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{x}_T = (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S})^{-1} \cdot (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{y} \rightarrow (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S})^{-1} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{x}_T = \mathbf{I} \cdot \mathbf{y},$$

- та переписуючи у зручній для роботи формі, отримуємо:

$$\mathbf{y} = (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S})^{-1} \cdot \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{x}_T \quad (2.9)$$

Часто рівняння (2.9) переписують у більш компактній формі:

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}^+ \cdot \mathbf{x}_T, \quad (2.10)$$

де:  $\mathbf{S}^+ = (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S})^{-1} \cdot \mathbf{S}^T$ .

Зазначимо, що рівняння (2.10) по суті та формі нагадує рівняння (2.2).

Рівняння (2.10) має важливу проблему: якщо спектри будь-яких двох (або більше) компонентів колінеарні, тобто:

1. спектр одного компонента можна представити як спектр іншого помножений на скаляр (позитивне число) або

2. спектр одного компонента можна представити як лінійну комбінацію двох або більше інших спектрів компонентів,

то детермінант квадратної матриці  $\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S}$  дорівнюватиме 0.

Перша ситуація дуже наочна, що більш подібні спектри двох компонентів тим більша помилка виникає щодо їх концентрацій.

Вплив колінеарності на метрологічні характеристики багатохвильового спектрофотометричного аналізу багатокомпонентних сумішей розглянута в роботах [72, 74, 78].

Звернемо увагу, що використання прямого методу найменших квадратів, розглянуте вище, фактично засноване на тому припущенні, що всі компоненти системи повинні бути кількісно визначені, а це не так для більшості завдань реального світу.

Далі розглядатимемо так звану зворотню модель найменших квадратів (inverse least-squares calibration model), що дозволяє обійти деякі обмеження моделі прямого методу найменших квадратів, зокрема щодо нашого супер завдання – виявлення ДД підозрілих на наявність незадекларованого АФІ, тобто ми націлені на незадекларований компонент (компоненти), тому:

- нам не є важливими окремі компоненти ДД.
- Окремі компоненти ДД можуть бути колінеарними і чим колінеарнішою буде та частина спектру продукту, яка пов'язана з ДД, тим простіше виявляти наявність і припускати природу фальсифіканта.

#### **2.4. Модель калібрування на основі зворотнього методу найменших квадратів (зворотне калібрування)**

Сама назва «зворотне калібрування» (inverse calibration) є наслідком того, що лінійний закон зв'язуючий відгук із концентрацією записується у зворотному порядку концентрація (або деяка властивість системи!) лінійно залежить від відгуку, при цьому концентрація аналіту (або аналітів, або деякої властивості/властивостей системи) зв'язується з відгуками калібрувальних розчинів для яких концентрації цих аналітів (або властивості/властивостей)

відомі, а про якісний і кількісний склад матриць для цих калібрувальних розчинів практично нічого не відомо.

Розглянемо фазу калібрування. Далі майже всі позначення такі ж, як були використані для моделі прямого калібрування.

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}^T \times \mathbf{B} + \mathbf{\Delta},$$

(2.11)

де:

$\mathbf{X}$  - матриця розміром  $(J \times I)$  у якій зібрані інструментальні відгуки від  $I$  калібрувальних розчинів кожен з яких виміряний при  $J$  аналітичних довжинах хвиль;

$\mathbf{Y}$  - матриця концентрацій компонентів кожного з  $I$  калібрувальних розчинів її розмір  $(I \times N)$ , де  $N$  - загальна кількість компонентів. Зазначимо, поки всі позначення мають такий самий сенс, як і для прямого калібрування;

$\mathbf{B}$  - являє собою матрицю розміром  $(J \times N)$ , яка пов'язує концентрації з відгуками та її називають матрицею коефіцієнтів регресії [64];

$\mathbf{\Delta}$  - має той самий сенс, що і в рівнянні (2.5) і так само в подальших перетвореннях ми нехтуватимемо єю.

Далі розглянемо найпростішу ситуацію – нас цікавить лише один компонент системи (аналіт = фальсифікант, нехай це компонент під номером 1), тому виділимо з рівняння (2.11) частину, що відноситься тільки до нього, тому з матричної форми рівняння перетворюється на векторну форму:

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{X}^T \mathbf{b}_1 + \mathbf{\delta},$$

(2.12)

де:

$\mathbf{y}_1$  - вектор-стовпець концентрацій аналіту в калібрувальних розчинах;

$\mathbf{b}_1$  - перший стовпець матриці, що відповідає аналіту;

$\mathbf{\delta}$  - Вектор-стовпець похибок, що відносяться до аналіту (при подальших перетвореннях ми їм нехтуємо, див. вище).

$\mathbf{X}$  = Дивитись вище.

Проведемо такі перетворення:

- помножимо зліва обидві сторони (2.12) на  $\mathbf{X}$

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{y}_1 = \mathbf{X} \cdot \mathbf{X}^T \mathbf{b}_1,$$

- помножимо зліва обидві сторони (2.12) на  $(\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}^T)^{-1}$

$$(\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}^T)^{-1} \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{y}_1 = (\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}^T)^{-1} \cdot (\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}^T) \cdot \mathbf{b}_1 \rightarrow \mathbf{I} \cdot \mathbf{b}_1$$

- представимо у вигляді зручному для роботи:

$$\mathbf{b}_1 = (\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{X})^{-1} \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{y}_1 \quad (2.13)$$

Зазначимо, що якщо аналітів (або властивостей системи) більш ніж один, рівнянь типу (2.13) буде відповідна кількість. Компактна форма запису рівняння (2.13), за аналогією до (2.10) має вигляд:

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{X}^+ \cdot \mathbf{y}_1 \quad (2.14)$$

На фазі розрахунку для деякого випробуваного розчину знімається спектр  $\mathbf{x}$  і підставляється в розрахункове рівняння [64]:

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{b}_1^T \cdot \mathbf{x} \quad (2.15)$$

(Слід звернути увагу на те, що  $y_1$  - це просто число, тобто скаляр, тому він і не виділений жирним шрифтом).

Повернемося до рівняння (2.12) без урахування похибок  $\mathbf{y}_1 = \mathbf{b}_1^T \cdot \mathbf{x}$ . Концентрації аналіту в кожному з  $I$  калібрувальних розчинів (представлені вектором  $\mathbf{y}_1$ ) пов'язані з вектором коефіцієнтів регресії  $\mathbf{b}_1$ , який має розмір рівний числу аналітичних довжин хвиль (число сенсорів), що говорить про те, що система як правило буде недовизначеною, оскільки число сенсорів може бути дуже великим (десятки і сотні аналітичних довжин хвиль) і кілька фізичних калібрувальних розчинів. Додаткові проблеми створює те, що калібрувальні розчини можуть містити безліч апріорі не відомих нам сполук – компонентів системи, ефективне число також впливає на ступінь певності системи. І все це принципова проблема зворотного калібрування – для того, щоб працювати необхідно більше калібрувальних розчинів ніж аналітичних довжин хвиль [64] і додатково більше число ефективних компонентів системи.

На сьогодні літературні джерела пропонують лише декілька способів вирішення цієї проблеми [64]:

1. Збільшення числа калібрувальних розчинів.
2. Зменшення числа аналітичних довжин хвиль.
3. Використання способу основних компонентів.

Перший шлях порочний за своєю суттю, тому що вимагає фізичного приготування сотень калібрувальних сумішей, що вимагає колосальних витрат розчинників, праці, часу і загрожує виникненням аналітичних промахів через величезний обсяг рутинної роботи з підготовки такої кількості калібрувальних розчинів.

Другий загрожує втратою критично важливої інформації та погіршенням метрологічних характеристик методики [64]. Для пом'якшення цих проблем розроблено складні методи вибору аналітичних довжин хвиль, починаючи з використання так званого інформаційного коефіцієнта [72; 74] до використання складних математичних алгоритмів [79].

Третій - використання методу головних компонентів - дозволяє обійти цю проблему переводячи завдання з області великої кількості реальних компонентів – не ортогональних векторів, в область малого числа ортогональних головних компонентів. Цей підхід широко використовується в сучасній аналітичній хімії, наприклад [80, 81]. Як і будь-який інший підхід заснований на складній математиці він має свої переваги та недоліки, одним з яких є стиснення інформації, проте розгляд цих переваг та недоліків виходить за рамки даного тексту.

Ми запропонували трохи інший підхід, який дозволяє зберегти модель зворотного калібрування практично без змін та обійти зазначені обмеження, він буде розглянутий та застосований у наступних розділах.

### 3. Можливість створення віртуальних модельних сумішей побудованих на принципі адитивності та прямої пропорційності

Згадаймо рівняння (2.4), яке пов'язує оптичні густини при аналітичних довжинах хвиль для деякої суміші  $j$  відомих «чистих» компонентів, і перепишемо його так, щоб до нього входили не чисті компоненти, які у разі екстрактів з ДД можуть бути як недоступні, так і просто невідомі.

Лінійність визначається тим, що, якщо для кожного з компонента ДД виконується лінійність, тоді в ситуації коли ми беремо цей первинний екстракт (отриманий за допомогою екстрагування компонентів ДД якимось «розчинником») і розводимо його тим же «розчинником» до типових концентрацій, що використовуються для спектрофотометрування, а це величини близько 5-50 мкг/мл, тоді всі світлопоглинаючі компоненти повинні проявляти лінійність (для різних розведень) і при цьому повинен виконуватися принцип адитивності, тому рівняння (2.4) можна переписати (далі шапочка над скаляром, вектором або матрицею позначає його віртуальний характер):

$$\widehat{\mathbf{a}}_i = \sum_{k=1}^k \widehat{c}_k \cdot \widehat{E}_{ik}, \quad (3.1)$$

де:

$\widehat{\mathbf{a}}_i$ - оптична густина віртуальної суміші екстрактів з ДД при довжині хвилі  $i$ , де  $k = 1, 2 \dots, K$

$c_k$  - Концентрація екстракту з  $k$ -ого ДД в модельній суміші;

$\widehat{E}_{ik}$  - Показник поглинання екстракту з  $k$ -ого ДД.

Дамо необхідні пояснення. Нехай випробуване ДД є таблетками масою 1 г. Екстракт готується, наприклад, наступним чином:

1.00 г порошку подрібненого ДД екстрагують 100 мл розчинника. Звісно, розчинник вибирається таким чином, щоб максимально повно екстрагувати потенційний фальсифікант (тобто АФІ, якщо такий входить до складу даного ДД, більш детально вибір розчинника буде розглянутий в експериментальній частині). Звісно, що не всі компоненти ДД розчиняться, однак, умовна концентрація ДД в екстракті ( $C_{k,0}$ ) становитиме 10000 мкг/мл ( $\mu\text{g/ml}$ ) (1 г

1000000 мкг при розведенні в 100 мл виходить 10000 мкг/мл, частковим розчиненням проби і можливими обсягами розчинника при розчиненні екстрактивних речовин та іншими малими ефектами ми нехтуємо). Розчин фільтрують або центрифугують для того, щоб очистити його від механічних частинок і далі беруть 0.1 мл отриманого фільтрату або надосадової рідини і додають скажімо в 20.0 мл розчинника та отримують умовну концентрацію  $C_{k,1} = \frac{0,1 \cdot C_{k,0}}{(0,1+20)} = 49,8 \approx 50 \frac{\mu g}{ml}$ , аналогічно можна отримати будь-яку умовну концентрацію в діапазоні 5-50 мкг/мл. Звісно, умовний показник поглинання зручно вибирати для умовної концентрації 1 мкг/мл. Тобто вимірявши оптичну густину отриманого розчину (звісно проти розчинника) ми розділимо її на її концентрацію в мкг/мл. Експеримент показує, що при правильному виборі розчинника для концентрацій у такому діапазоні для екстрактів ДД достатньою мірою виконується як лінійність так і адитивність.

Використовуючи різні поєднання  $\hat{c}_k$  та віртуальних концентрацій аналіту (віртуальні концентрації зручно і правильно вибирати використовуючи випадкові числа (див. експериментальну частину) можна скласти велику кількість віртуальних калібрувальних сумішей для яких можна записати рівняння аналогічне рівнянню (2.11)

$$\hat{Y} = \hat{X}^T \times B + \Delta, \quad (3.2)$$

та отримати вектор розрахункових коефіцієнтів:

$$b_1 = \hat{X}^+ \cdot \hat{y}_1, \quad (3.3)$$

який можна використовувати для розрахунку реальних або віртуальних концентрацій аналіту в ДД:

$$y_1 = b_1^T \cdot x \quad (3.4)$$

$$\hat{y}_1 = b_1^T \cdot \hat{x} \quad (3.5)$$



## 4. ЕКСПЕРИМЕНТ І ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

**4.1. Вибір екстрагенту.** Вибір основного розчинника для масової УФ-ВИД спектрофотометрії вкрай обмежений: фактично лише вода (очищена спеціальним чином), метанол та ацетонітрил для ВЕРХ з УФ детектуванням. Але як екстрагуючий розчинник не підходить ні вода, ні ацетонітрил через малу розчинну сили води щодо неполярної органіки (практично всі АФІ) і малої розчиняючої сили чистого ацетонітрилу, молекула якого не має рухомого протона, тому практично не бере участі в утворенні водневих зв'язків. Також немале значення має його висока вартість. Тому як екстрагуючий розчинник обраний метанол для ВЕРХ з УФ-ВИД детектором (Methanol for HPLC & UV Spectroscopy, 99.8% виробництва фірм: Carlo Erba, Honeywell Research Chemicals, Merck). Практично всі АФІ, які можуть виступати в якості фальсифікантів ДД розчинні в метанолі в достатній мірі, щоб проявитися в спектрі результуючого екстракту, навпаки багато компонентів ДД біологічні полімери, що представляють, наприклад, целюлозу в метанолі не розчиняються або розчиняються дуже мало, що є корисною обставиною, так як збільшує частку оптичної густини, пов'язаної з АФІ і знижує, таким чином, межу його виявлення. Так як наші АФІ можуть бути кислотами, основами, нейтральними або амфотерними сполуками, або солями, то ми використовуємо як екстрагуючий розчинник не забуферний метанол. А ось як розчинник у якому буде проводитися вимірювання УФ обрана система вода-метанол (50:50), що містить 0.01 М хлористоводневої кислоти. Цей розчинник з одного боку забезпечує хорошу буферність та іонну силу, тобто. стандартні умови зняття УФ-ВИД спектрів, а з іншого має високу прозорість починаючи з 210 нм. Необхідність економити дорогі розчинники в умовах воєнного часу призвела до наступної методики пробопідготовки:

Всі розчини готувалися при жорсткому контролі ваги концентрацій для чого була визначена щільність використовуваного розчинника.

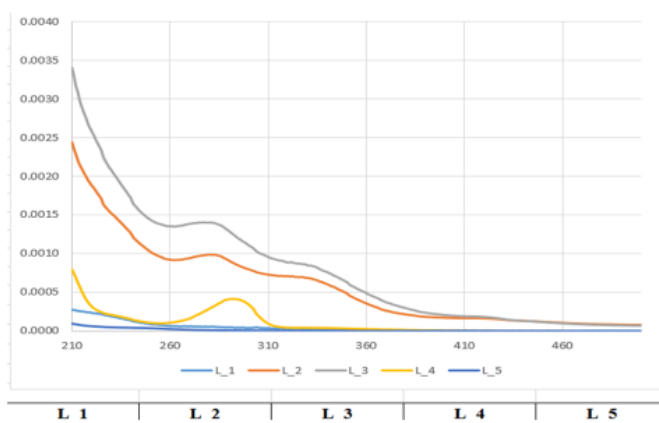
**4.2. Методика приготування екстракту ДД.** Зважену подрібнену разом з первинною оболонкою (наприклад, оболонка капсул також піддається

подрібненню, так як показано, що фальсифікатори можуть ввести фальсифіканти в оболонку ДД [82]) ДД близько 50 мг (точне зважування) відбираємо у флакон темного скла ємністю 50 мл, додаємо 10.0 мл метанолу і ставимо в шейкер на 1 годину 200 циклів за хвилину. Фільтруємо через фільтр синя стрічка (зберігаємо фільтрат = первинний розчин), відбираємо 200 мкл первинного розчину у флакон темного скла 50 мл, додаємо 10.0 мл розчинника (розчин НСІ 0.01 вода-метанол 50:50). Кислота хлористоводнева та вода відповідали вимогам Фармакопеї України поточного видання. Спектрофотометруємо в діапазоні довжин хвиль від 210 до 500 нм з оптичною шириною щілини 1 нм та швидкістю сканування 50 нм за секунду з кроком 1 нм.

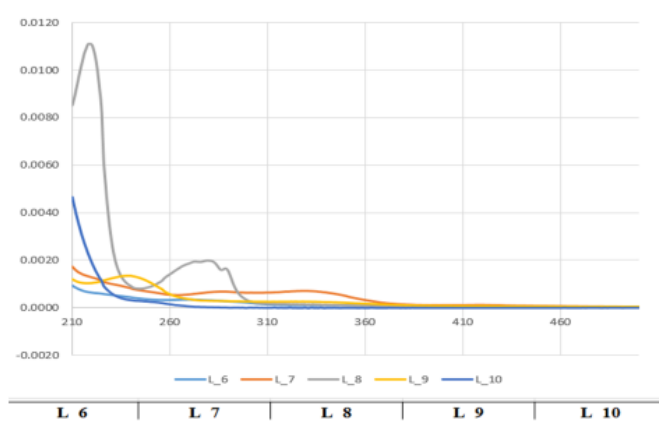
**4.3 Методика приготування розчину АФІ.** Звішене АФІ близько 50 мг (точне зважування) відбираємо у флакон темного скла ємністю 50 мл, додаємо 10.0 мл метанолу, розчиняємо (первинний розчин). 1 мл первинного розчину + 10 мл розчинника (перше розведення). 200 мкл 1-го розведення + 10 мл розчинника. Спектрофотометруємо в діапазоні довжин хвиль від 210 до 500 нм із оптичною шириною щілини 1 нм та швидкістю сканування 50 нм за секунду.

**4.4 Приготування спайкованих розчинів (валідаційні розчини).** До 1.0 мл первинного ДД, додаємо 1 мл 1-го розведення АФІ + 10 мл розчинника, перемішати і спектрофотометрувати (проте через проблеми воєнного часу цю частину експерименту довелося відкласти на майбутнє), тому використовувалися лише віртуальні валідаційні розчини.

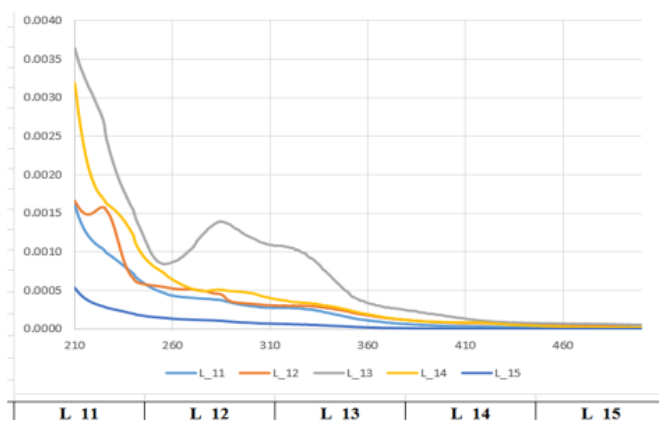
На Рисунках 4.1-4.8 представлені спектри 17 ДД у концентраціях, що відповідають 1 мкг/мл, показник оптичного поглинання, про яке було сказано в розділі 3.



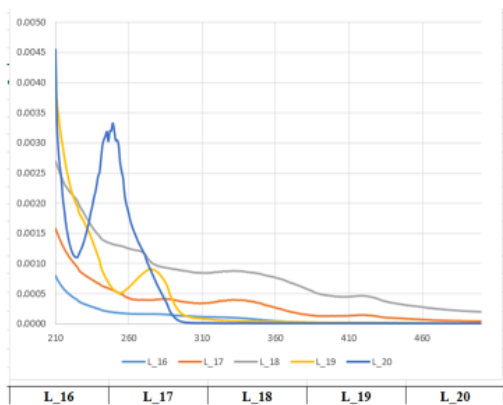
Малюнок 4.1 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L1-L5



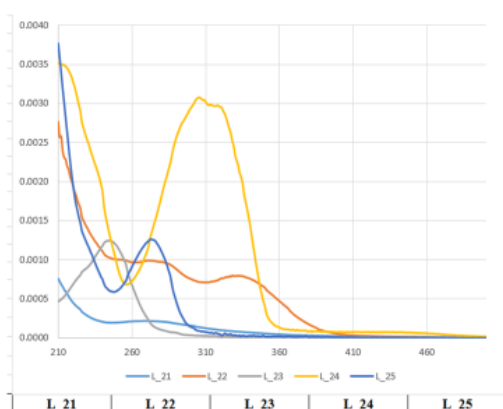
Малюнок 4.2 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L6-L10



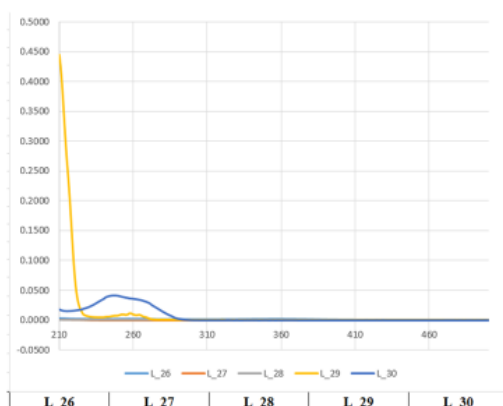
Малюнок 4.3 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L11-L15



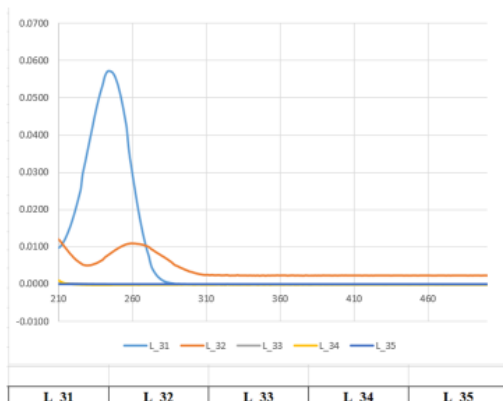
Малюнок 4.4 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L16-L20



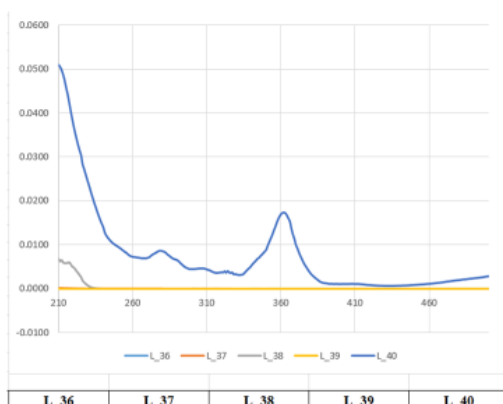
Малюнок 4.5 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L21-L25



Малюнок 4.6 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L26-L30

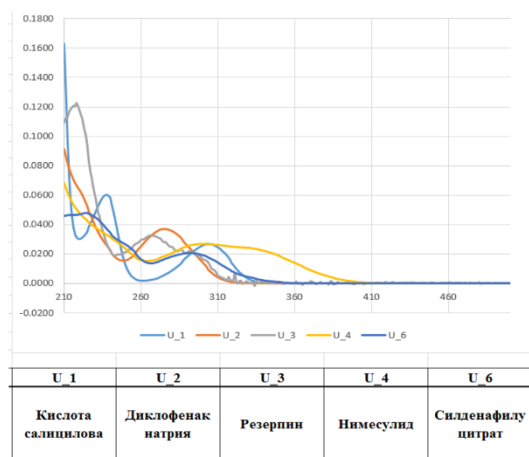


Малюнок 4.7 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L31-L35

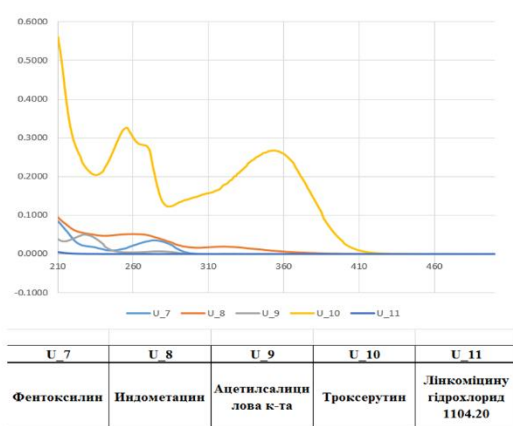


Малюнок 4.8 Спектри екстрактів дієтичних добавок (1µg/ml) L36-L40

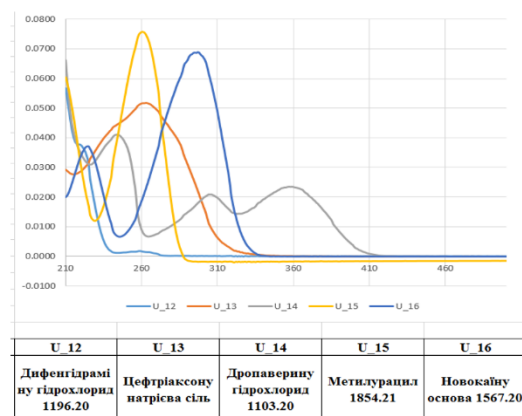
Спектри потенціальних фальсифікантів (АФІ), які ми використовували для подальших досліджень, представлені на малюнках 4.9 - 4-15.



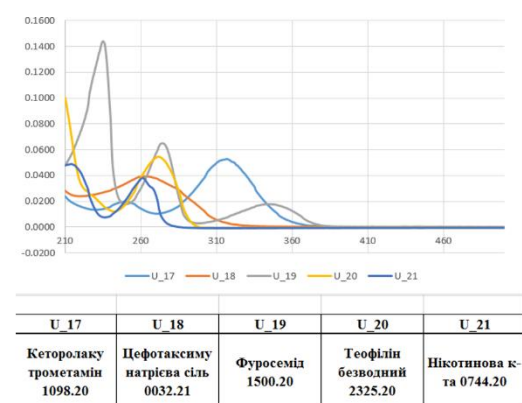
Малюнок 4.9 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.



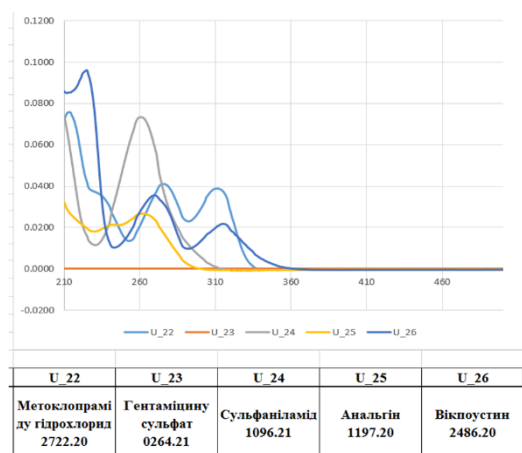
Малюнок 4.10 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.



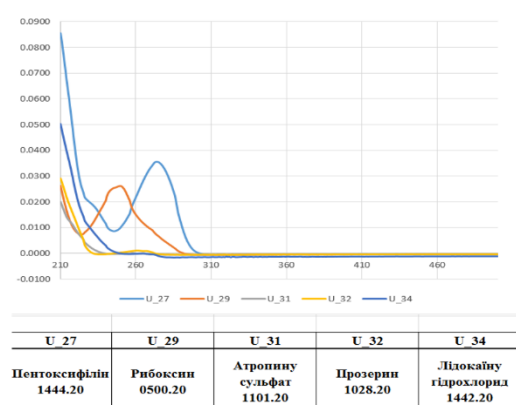
Малюнок 4.11 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.



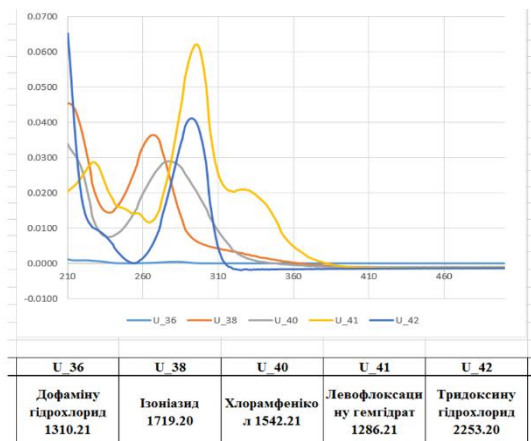
Малюнок 4.12 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.



Малюнок 4.13 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.



Малюнок 4.14 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.



Малюнок 4.15 Спектри розчинів (1µg/ml) потенційних фальсифікантів АФІ.

#### 4.5. Новий підхід до використання методу зворотнього калібрування

Як було сказано в розділі 2 є проблема методу зворотнього калібрування - необхідність використання дуже великої кількості калібрувальних проб. Це практично виключає з розгляду ближню ІЧ область, де дуже велику роль відіграють нелінійні явища [83,84]. Однак ми, як сказано в Розділі 3, у випадку УФ-ВИД спектрів можемо використовувати широкий діапазон лінійності та

адтивності для роботи з віртуальними калібрувальними та випробуваними розчинами. Як нам видається на стадії калібрування розумно використовувати віртуальні калібрувальні проби, кожна з яких складена з багатьох спектрів-векторів ДД та одного вектора-спектру АФІ з віртуальними концентраціями, отриманими за допомогою випадкових чисел, рівномірно розподілених в діапазоні 1-100 для ДД, та 2.5- 7.5 для АФІ, що дозволяє нам отримувати розрахункові рівняння (3.3) для всіх доступних АФІ при використанні наборів ДД різного розміру (наприклад, набір, що складається з 10 ДД, або набір, що складається з 15 ДД). У нашому випадку, коли ми мали всього 40 ДД, це набори в 10, 15, 20, 30, 35 і 40 ДД. Валідаційні розчини звичайно ж бажано мати фізичні, однак, з причин військового часу довелося працювати з віртуальними валідаційними розчинами, складеними так, щоб відображати реальну ситуацію фальсифікації, а саме: розчин містить лише одне ДД та одне АФІ у співвідношенні (10:1) (реальна ситуація для більшості фальсифікацій, коли на 500 мг ДД припадає 50 мг АФІ фальсифіканта) та прогнозовані концентрації в розчині 100 та 10 мкг/мл ДД та АФІ, відповідно.

Малюнки 4.16 - 4.21 представляють матриці спектрів та концентрацій, матриці концентрацій, призначених для калібрування, тобто. одержання розрахункових рівнянь.



SENSOR NONBER	$E \text{ (mcg/ml)} = A(c=1 \text{ mcg/ml})$																			
	$\lambda, \text{ nm}$	L 1	L 2	L 3	L 4	L 5	L 6	L 7	L 8	L 9	L 10	L 11	L 12	L 13	L 14	L 15	L 40			
1	210	0.00027	0.00244	0.00340	0.00079	0.00009	0.00093	0.00172	0.00852	0.00120	0.00465	0.00160	0.00166	0.00364	0.00319	0.00053	0.05094			
2	215	0.00026	0.00209	0.00290	0.00051	0.00007	0.00072	0.00141	0.01032	0.00104	0.00302	0.00128	0.00150	0.00326	0.00232	0.00040	0.04570			
3	220	0.00024	0.00188	0.00258	0.00032	0.00006	0.00064	0.00127	0.01107	0.00104	0.00190	0.00112	0.00152	0.00298	0.00187	0.00033	0.03700			
4	225	0.00022	0.00170	0.00233	0.00025	0.00005	0.00059	0.00114	0.00828	0.00111	0.00113	0.00102	0.00158	0.00266	0.00167	0.00029	0.03042			
5	230	0.00019	0.00152	0.00208	0.00021	0.00005	0.00054	0.00100	0.00284	0.00123	0.00062	0.00092	0.00133	0.00213	0.00155	0.00026	0.02389			
6	235	0.00016	0.00140	0.00189	0.00019	0.00004	0.00049	0.00092	0.00131	0.00132	0.00041	0.00082	0.00089	0.00180	0.00141	0.00023	0.01847			
7	240	0.00014	0.00126	0.00171	0.00016	0.00004	0.00044	0.00082	0.00090	0.00134	0.00033	0.00071	0.00065	0.00154	0.00121	0.00020	0.01400			
8	245	0.00011	0.00112	0.00154	0.00013	0.00004	0.00039	0.00073	0.00079	0.00124	0.00029	0.00060	0.00058	0.00122	0.00094	0.00017	0.01085			
9	250	0.00009	0.00102	0.00143	0.00011	0.00003	0.00035	0.00067	0.00087	0.00105	0.00026	0.00052	0.00056	0.00095	0.00082	0.00016	0.00958			
10	255	0.00007	0.00096	0.00138	0.00010	0.00003	0.00033	0.00060	0.00108	0.00082	0.00022	0.00047	0.00054	0.00085	0.00073	0.00015	0.00829			
11	260	0.00007	0.00092	0.00135	0.00011	0.00002	0.00033	0.00054	0.00140	0.00056	0.00015	0.00043	0.00052	0.00087	0.00064	0.00014	0.00726			
12	265	0.00006	0.00092	0.00135	0.00013	0.00002	0.00034	0.00053	0.00168	0.00042	0.00011	0.00041	0.00051	0.00093	0.00057	0.00013	0.00702			
13	270	0.00006	0.00094	0.00138	0.00016	0.00002	0.00035	0.00056	0.00186	0.00035	0.00007	0.00040	0.00051	0.00105	0.00052	0.00012	0.00706			
14	275	0.00006	0.00097	0.00140	0.00022	0.00001	0.00033	0.00061	0.00192	0.00030	0.00004	0.00039	0.00049	0.00121	0.00049	0.00012	0.00810			
15	280	0.00006	0.00099	0.00140	0.00029	0.00001	0.00032	0.00065	0.00198	0.00028	0.00003	0.00038	0.00047	0.00133	0.00050	0.00011	0.00856			
16	285	0.00005	0.00097	0.00137	0.00036	0.00001	0.00030	0.00068	0.00167	0.00027	0.00003	0.00037	0.00044	0.00139	0.00050	0.00011	0.00740			
17	290	0.00005	0.00091	0.00129	0.00041	0.00001	0.00027	0.00067	0.00151	0.00027	0.00001	0.00034	0.00035	0.00135	0.00049	0.00010	0.00649			
18	295	0.00004	0.00084	0.00119	0.00041	0.00001	0.00025	0.00064	0.00060	0.00025	0.00001	0.00031	0.00033	0.00126	0.00048	0.00009	0.00497			
19	300	0.00004	0.00080	0.00110	0.00034	0.00001	0.00022	0.00063	0.00029	0.00025	0.00001	0.00029	0.00032	0.00119	0.00046	0.00008	0.00450			
20	305	0.00004	0.00075	0.00101	0.00020	0.00001	0.00017	0.00063	0.00018	0.00024	0.00001	0.00028	0.00031	0.00113	0.00043	0.00008	0.00465			

Малюнок 4.16 Частина матриці 20\*40, що представляє питомі показники для 40 екстрактив дієтичних добавок для набору з 20 довжин хвиль в діапазоні 210 – 305 нм (сенсори через 5 нм)

SENSOR NONBER	$E \text{ (mcg/ml)} = A(c=1 \text{ mcg/ml})$																			
	$\lambda, \text{ nm}$	U 1	U 2	U 3	U 4	U 5	U 6	U 7	U 8	U 9	U 10	U 11	U 12	U 13	U 14	U 15	U 42			
1	210	0.1631	0.0915	0.1091	0.0682	0.1169	0.0460	0.0848	0.0954	0.0385	0.5610	0.0055	0.0568	0.0293	0.0661	0.0603	0.0652			
2	215	0.0473	0.0735	0.1194	0.0554	0.0806	0.0465	0.0620	0.0782	0.0330	0.4123	0.0026	0.0405	0.0277	0.0421	0.0472	0.0358			
3	220	0.0302	0.0637	0.1178	0.0478	0.0479	0.0471	0.0384	0.0635	0.0395	0.2983	0.0013	0.0375	0.0288	0.0346	0.0305	0.0167			
4	225	0.0349	0.0529	0.0947	0.0427	0.0324	0.0480	0.0240	0.0566	0.0475	0.2504	0.0007	0.0314	0.0317	0.0311	0.0171	0.0110			
5	230	0.0473	0.0396	0.0605	0.0381	0.0271	0.0452	0.0198	0.0526	0.0489	0.2162	0.0003	0.0150	0.0362	0.0326	0.0121	0.0094			
6	235	0.0582	0.0299	0.0363	0.0347	0.0221	0.0405	0.0165	0.0493	0.0401	0.2040	0.0001	0.0051	0.0399	0.0365	0.0171	0.0077			
7	240	0.0583	0.0228	0.0226	0.0316	0.0159	0.0346	0.0119	0.0473	0.0253	0.2144	0.0001	0.0016	0.0428	0.0395	0.0270	0.0053			
8	245	0.0339	0.0165	0.0200	0.0277	0.0130	0.0296	0.0091	0.0480	0.0105	0.2518	0.0000	0.0011	0.0449	0.0409	0.0427	0.0023			
9	250	0.0123	0.0157	0.0214	0.0234	0.0160	0.0265	0.0106	0.0498	0.0057	0.2968	0.0000	0.0013	0.0468	0.0374	0.0570	0.0006			
10	255	0.0039	0.0188	0.0255	0.0190	0.0226	0.0225	0.0148	0.0512	0.0042	0.3258	0.0000	0.0015	0.0494	0.0254	0.0689	0.0001			
11	260	0.0019	0.0252	0.0297	0.0157	0.0331	0.0165	0.0219	0.0518	0.0040	0.3003	0.0000	0.0016	0.0517	0.0089	0.0757	0.0015			
12	265	0.0021	0.0309	0.0323	0.0152	0.0420	0.0138	0.0282	0.0511	0.0046	0.2828	0.0000	0.0014	0.0515	0.0067	0.0719	0.0043			
13	270	0.0032	0.0352	0.0320	0.0161	0.0484	0.0143	0.0331	0.0486	0.0056	0.2737	0.0000	0.0008	0.0495	0.0076	0.0589	0.0088			
14	275	0.0055	0.0371	0.0282	0.0184	0.0495	0.0164	0.0349	0.0429	0.0067	0.1899	0.0000	0.0002	0.0458	0.0091	0.0364	0.0168			
15	280	0.0086	0.0358	0.0250	0.0205	0.0430	0.0183	0.0313	0.0368	0.0064	0.1315	0.0000	0.0001	0.0423	0.0106	0.0161	0.0252			
16	285	0.0125	0.0321	0.0228	0.0229	0.0314	0.0197	0.0238	0.0302	0.0053	0.1235	0.0000	0.0001	0.0382	0.0124	0.0030	0.0339			
17	290	0.0181	0.0259	0.0207	0.0253	0.0142	0.0206	0.0116	0.0229	0.0025	0.1330	0.0000	0.0001	0.0313	0.0148	-0.0014	0.0406			
18	295	0.0225	0.0203	0.0197	0.0264	0.0048	0.0205	0.0040	0.0186	0.0008	0.1401	0.0000	0.0001	0.0248	0.0170	-0.0018	0.0402			
19	300	0.0257	0.0144	0.0165	0.0268	0.0011	0.0193	0.0010	0.0164	0.0002	0.1463	0.0000	0.0001	0.0178	0.0195	-0.0018	0.0328			
20	305	0.0267	0.0081	0.0121	0.0265	0.0002	0.0170	0.0001	0.0163	0.0000	0.1522	0.0000	0.0001	0.0103	0.0209	-0.0018	0.0156			

Малюнок 4.17 Частина матриці 20\*40, що представляє питому показники для 42 розчинів АФІ для набору з 20 довжин хвиль в діапазоні 210 – 305 нм (сенсори через 5 нм)

CALIBRATION VIRTUAL SAMPLE	C (mcg/ml)																
	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_7	L_8	L_9	L_10	L_11	L_12	L_13	L_14	L_15	L_16	L_40
CVS 1	39	94	18	83	61	9	56	46	33	90	32	3	33	29	61	69	24
CVS 2	19	8	63	79	85	99	85	37	3	69	9	29	8	68	62	31	51
CVS 3	11	94	19	27	51	8	8	40	86	13	1	59	75	69	81	69	63
CVS 4	28	98	21	49	80	84	99	71	45	77	86	4	43	46	40	48	94
CVS 5	76	5	35	24	44	67	34	4	38	24	90	16	89	14	23	99	22
CVS 6	57	45	88	11	47	85	85	34	13	32	2	17	93	56	18	27	57
CVS 7	15	26	15	60	67	94	75	93	72	9	33	20	33	25	78	5	97
CVS 8	55	91	14	90	27	27	12	19	50	76	74	98	69	80	91	34	70
CVS 9	96	94	12	100	98	33	20	20	71	23	4	50	21	32	34	61	37
CVS 10	31	68	82	29	51	3	64	67	33	60	55	41	39	65	27	68	40
CVS 11	76	12	73	25	3	81	3	66	67	1	36	51	44	13	24	47	89
CVS 12	69	90	78	69	36	89	91	28	77	27	54	47	68	32	20	82	19
CVS 13	25	53	49	46	47	71	96	83	42	51	60	7	80	45	75	98	84
CVS 14	52	41	58	18	8	46	77	4	1	84	92	64	55	82	32	36	4
CVS 15	42	81	68	51	34	81	83	17	89	68	16	7	52	27	99	69	8
CVS 95	53	99	79	2	61	16	14	66	60	38	19	93	61	57	24	69	9
CVS 96	74	87	49	92	6	90	12	93	76	7	78	64	7	68	13	49	96
CVS 97	14	33	93	66	38	16	11	58	57	6	24	8	44	10	79	82	7
CVS 98	10	54	85	35	35	2	91	72	96	18	46	68	47	17	83	51	79
CVS 99	55	100	30	40	23	76	93	17	79	14	66	67	25	86	8	22	42
CVS 100	42	17	5	95	96	31	78	23	47	4	13	28	95	76	34	69	88

Малюнок 4.18 Частина матриці 100\*40 представляє концентрації (мкг/мл) ДД для набору зі 100 модельних сумішей 20 для 40 екстрактів ДД.

CALIBRATION VIRTUAL SAMPLE	C (mcg/ml)															L_42	
	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_7	L_8	L_9	L_10	L_11	L_12	L_13	L_14	L_15		L_16
CVS 1	7.2	5.7	7.2	3.9	6.6	7.4	3.1	6.0	5.9	6.8	5.4	2.6	5.0	5.0	3.8	3.6	7.2
CVS 2	5.6	7.1	5.9	6.8	3.4	4.6	5.7	3.4	4.2	6.4	4.9	4.1	4.8	3.7	4.0	3.7	5.9
CVS 3	3.2	3.4	3.7	5.6	5.6	4.0	5.6	2.7	3.3	4.2	3.2	2.9	7.4	4.9	5.3	5.9	3.7
CVS 4	2.8	4.6	5.7	3.5	4.2	3.0	5.4	4.6	3.0	7.1	6.9	2.9	6.9	2.7	3.5	3.9	5.7
CVS 5	7.1	6.6	4.5	2.7	5.1	6.3	6.6	4.3	5.3	2.8	3.2	4.5	7.5	7.1	2.8	7.3	4.3
CVS 6	4.0	5.0	5.5	6.3	6.3	4.4	6.2	4.1	3.8	3.3	3.9	7.3	7.4	6.1	7.1	7.2	5.5
CVS 7	6.4	3.1	6.2	2.9	7.1	3.7	2.5	4.0	6.6	6.7	7.4	4.2	4.8	4.9	4.9	3.3	6.2
CVS 8	5.1	3.0	4.9	2.8	2.8	4.4	4.8	6.7	3.5	3.4	7.4	7.3	4.6	5.8	6.9	4.6	4.9
CVS 9	6.7	6.8	4.7	4.4	4.3	6.9	2.5	6.6	4.6	3.8	7.4	2.8	6.3	5.2	3.7	4.5	4.7
CVS 10	2.6	6.2	5.2	4.5	3.5	7.0	2.9	4.3	6.0	7.0	6.4	6.9	3.1	6.7	7.1	6.0	5.2
CVS 11	4.5	5.0	2.7	5.8	4.6	6.8	6.5	3.9	3.8	6.1	5.5	4.8	3.1	2.6	4.0	6.8	2.7
CVS 12	2.7	6.2	7.1	3.6	4.4	5.4	2.6	7.0	3.3	5.8	7.5	6.8	7.2	2.9	6.2	4.7	7.1
CVS 13	4.3	3.3	4.4	6.9	5.4	2.9	5.5	3.4	5.2	2.9	5.5	2.9	4.2	6.7	2.9	6.6	4.4
CVS 14	3.1	4.3	6.0	5.2	6.8	5.8	6.1	3.5	3.2	4.3	5.7	5.0	3.3	6.8	6.5	2.8	6.0
CVS 15	6.2	3.3	5.9	3.0	4.2	7.0	5.1	3.1	5.2	2.8	3.8	5.2	3.9	3.7	4.4	6.1	5.9
CVS 95	4.0	4.0	4.8	7.4	5.3	5.2	4.1	6.2	6.6	7.4	6.7	4.8	5.9	3.2	6.3	4.3	3.3
CVS 96	4.9	3.5	5.8	6.2	6.0	5.9	3.6	5.8	7.2	5.4	7.0	5.0	6.3	3.1	3.2	2.9	4.4
CVS 97	3.9	2.6	4.1	7.2	6.3	7.4	5.5	5.3	2.6	2.6	7.4	3.8	4.3	3.8	4.5	6.4	2.6
CVS 98	3.8	4.4	4.1	5.0	6.9	5.6	4.5	5.4	5.4	3.3	5.8	7.2	6.5	3.7	3.3	4.8	3.4
CVS 99	5.6	3.2	6.4	6.1	5.6	4.6	6.2	3.6	5.4	5.1	5.1	5.2	4.9	6.7	4.4	4.1	5.5
CVS 100	3.8	7.4	7.3	5.1	7.1	5.5	3.3	3.1	5.3	3.9	6.0	6.8	7.2	3.9	5.2	3.9	6.7

Малюнок 4.19 Частина матриці 100\*42 представляє концентрації (мкг/мл) АФІ для набору зі 100 модельних сумішей 20 для 42 розчинів АФІ.

VALIDAT ION VIRTUAL SAMPLE	C (mcg/ml)															L_40	
	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_7	L_8	L_9	L_10	L_11	L_12	L_13	L_14	L_15		L_16
VVS 1	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 2	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 3	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 4	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 5	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 6	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 7	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 8	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 9	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0	0
VVS 11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0
VVS 12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0
VVS 13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0	0
VVS 14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0	0
VVS 15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	100	0	0
VVS 95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VVS 100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1

Малюнок 4.20 Частина матриці 100\*42 представляє концентрації (мкг/мл) АФІ для набору зі 100 модельних сумішей 20 для 42 розчинів АФІ.

NAME	Кислота саліцилова	
	U_1	
CVS_1	10.0	
CVS_2	10.0	
CVS_3	10.0	
CVS_4	10.0	
CVS_5	10.0	
CVS_6	10.0	
CVS_7	10.0	
CVS_8	10.0	
CVS_9	10.0	
CVS_10	10.0	
CVS_11	10.0	
CVS_12	10.0	
CVS_13	10.0	
CVS_14	10.0	
CVS_15	10.0	
CVS_95	10.0	
CVS_96	10.0	
CVS_97	10.0	
CVS_98	10.0	
CVS_99	10.0	
CVS_100	10.0	

Малюнок 4.21 Вектор-стовпець, що представляє концентрації першої АФІ для формування 100 калібрувальних сумішей для першого АФІ. Такі ж вектори стовпці використовуються для інших АФІ.

Усі обчислення проводяться у математичному пакеті MathCad Prime 8.0.0.0. На рисунках 4.22 – 4.28 представлені основні фрагменти створеної нами програми для проведення зворотного калібрування та валідації отриманих розрахункових рівнянь.

(A)

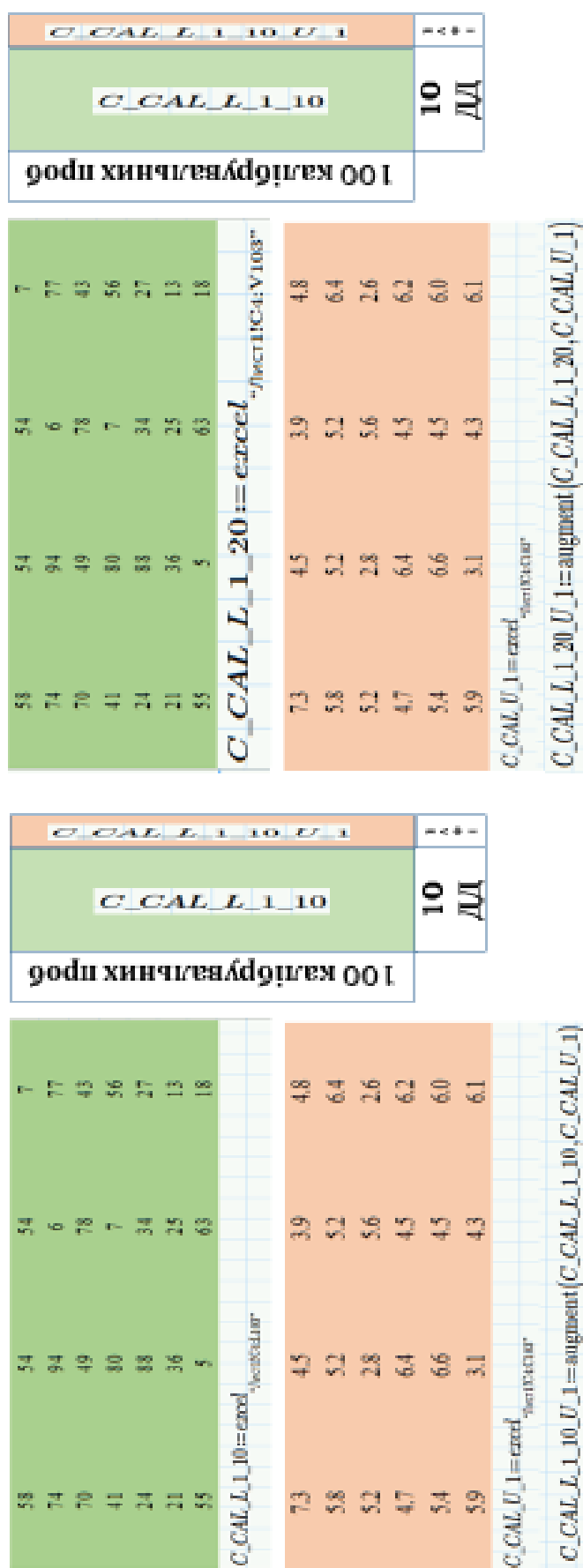
Асфальтова к-та 1099,20	Рішення ДІ-асфальту к-та 0740,21	ДІ-асфальту 1602,21	Архіву підполка 1733,20		
$E_{LS\_1\_10\_20\_SENSORS} := \text{excel\_matrix}$					
SENSOR NONE R		Басня салютна		Деклофак вагу	
i, m		R		Решив	
$E_{U\_1\_20\_SENSORS} := \text{excel\_matrix}$					

(B)

20 сенсори		20 сенсори		20 ДД	
$E_{LS\_1\_10\_20\_SENSORS}$					
$E_{U\_1\_20\_SENSORS}$					
SENSOR NONE R		Каса Дифолак вагу		Решив	
i, m		R		Решив	
$E_{LS\_1\_20\_20\_SENSORS} := \text{excel\_matrix}$					

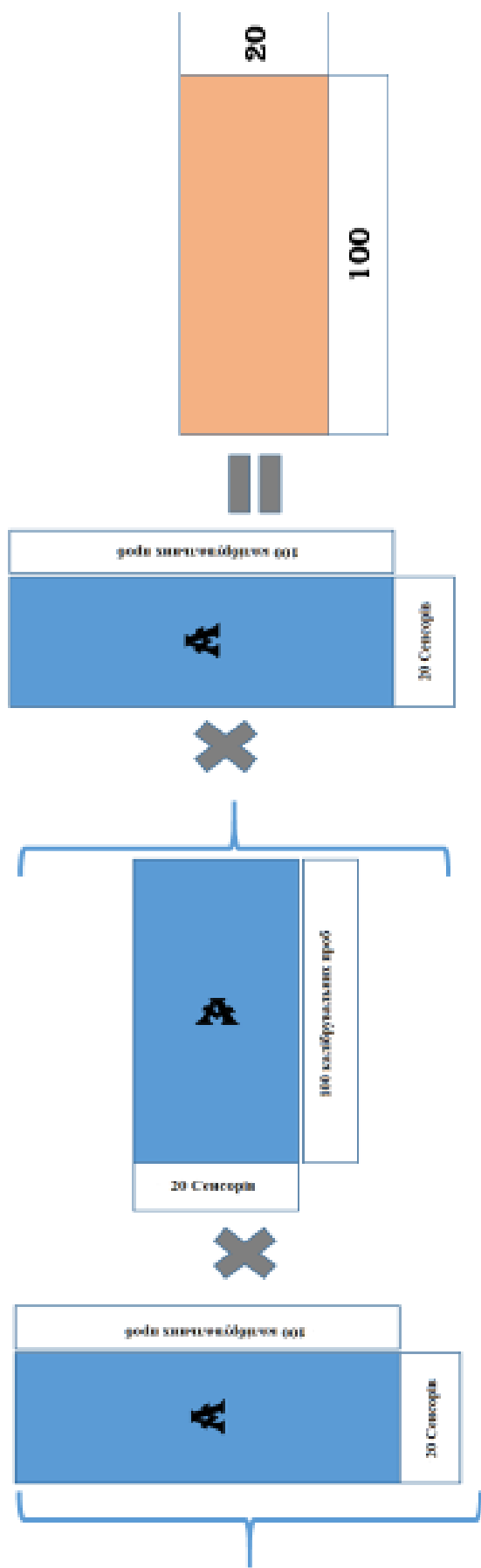
$E_{L\_1\_10\_U\_1\_20\_SENSORS} = \text{augment}(E_{LS\_1\_10\_20\_SENSORS}, E_{U\_1\_20\_SENSORS})$      $E_{L\_1\_10\_U\_1\_20\_SENSORS} = \text{augment}(E_{LS\_1\_10\_20\_SENSORS}, E_{U\_1\_20\_SENSORS})$

Малюнок 4.22 Блок операторів для формування спектральної матриці для побудови калібрувального рівняння для: (а) перших десяти ДД та першого АФІ; (б) перших двадцяти ДД та першого АФІ.



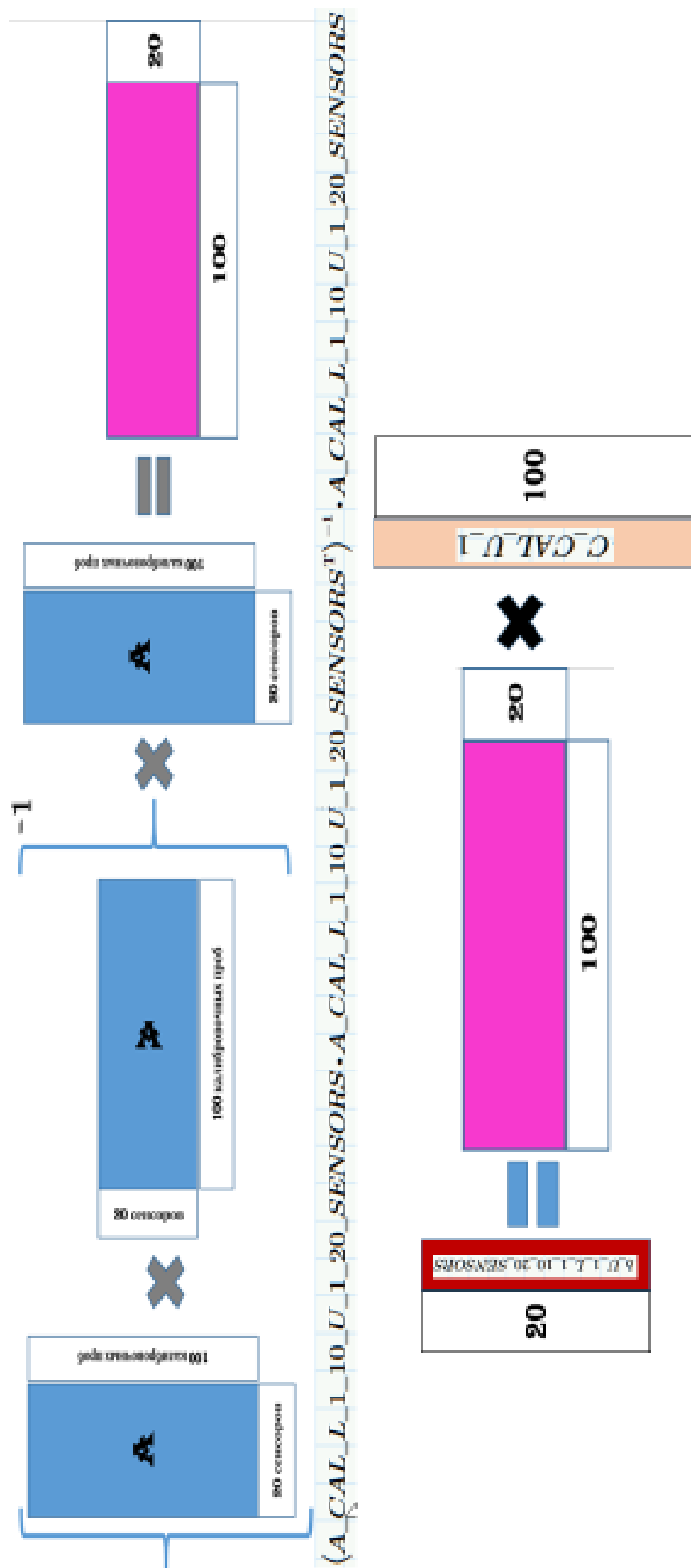
Малюнок 4.23 Блок операторів для формування концентраційної матриці для побудови калібрувального рівняння для: (а) перших 10 ДД та першого АФІ; (б) перших 20 ДД та першого АФІ.





$$b_{U_1 L_1 10_20\_SENSORS} := (A\_CAL_{L_1 10_20\_SENSORS} \cdot A\_CAL_{L_1 10_20\_SENSORS}^T)^{-1} \cdot A\_CAL_{L_1 10_20\_SENSORS} \cdot C\_CAL_{U_1}$$

Малюнок 4.24 Блок операторів для формування матриці оптичних щільностей для калібрувального рівняння (перший рядок) (на прикладі перших 10 сенсорів та першого АФІ)



Малюнок 4.25 Отримання вектора  $b_1$  для розрахункового рівняння першого АФІ (на прикладі перших 10 сенсорів і першого АФІ).

NAME	Ферніксил L_1	Нервонорм L_2	Антистрес L_3
VVS_1	100	0	0
VVS_2	0	100	0
VVS_3	0	0	100
VVS_4	0	0	0

C_VAL_L_1_10 := excel "Лист1С4:Л103"			
CVS_58	10.0		
CVS_59	10.0		
CVS_60	10.0		
CVS_61	10.0		
CVS_62	10.0		
CVS_63	10.0		

C_VAL_U_1 := excel "Лист1С4-С103"	
C_VAL_L_1_10_U_1 := augment(C_VAL_L_1_10, C_VAL_U_1)	

Малюнок 4.26 Блок операторів для формування концентраційної матриці для валідації для першого АФІ (на прикладі перших 10 сенсорів та першого АФІ).

$A\_VAL\_L_{1\_10}\ U_{1\_20}\ SENSORS := E\_L_{1\_10}\ U_{1\_20}\ SENSORS \cdot C\_VAL\_L_{1\_10}\ U_{1\_1}^T$

Малюнок 4.27 Блок операторів для формування матриці оптичних щільностей для валідації для розрахункового рівняння для першого АФІ (графічне уявлення аналогічне тому, що дано на малюнку 4.24 (на прикладі перших 10 сенсорів і першого АФІ, формально структура рівняння така сама як і для калібрувального рівняння) малюнку 4.24).



Отже, ми моделюємо такі ситуації:

Набори довжин хвиль (нм):

1. 210-305, через 5 нм (тобто 210, 215, 220, 225, 230, 235, 240, 245, 250, 255, 260, 265, 270, 275, 280, 285, 290, 295, 300, 305) всього 20 аналітичних довжин хвиль (тобто 20 сенсорів).

2. 240-335, через 5 нм (тобто 240, 245, 250, 255, 260, 265, 270, 275, 280, 285, 290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335) всього 20 аналітичних довжин хвиль (тобто 20 сенсорів).

3. 270-365, через 5 нм (тобто 270, 275, 280, 285, 290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340, 345, 350, 355, 360, 365) всього 20 аналітичних довжин хвиль (тобто 20 сенсорів).

4. 300-395, через 5 нм (тобто 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340, 345, 350, 355, 360, 365, 370, 375, 380, 385, 390, 395) всього 20 аналітичних довжин хвиль (тобто 20 сенсорів).

Набори ДД:

1. 10 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10).

2. 15 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10, L\_11, L\_12, L\_13, L\_14, L\_15).

3. 20 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10, L\_11, L\_12, L\_13, L\_14, L\_15, L\_16, L\_17, L\_18, L\_19, L\_20).

4. 25 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10, L\_11, L\_12, L\_13, L\_14, L\_15, L\_16, L\_17, L\_18, L\_19, L\_20, L\_21, L\_22, L\_23, L\_24, L\_25).

5. 30 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10, L\_11, L\_12, L\_13, L\_14, L\_15, L\_16, L\_17, L\_18, L\_19, L\_20, L\_21, L\_22, L\_23, L\_24, L\_25, L\_26, L\_27, L\_28, L\_29, L\_30).

6. 35 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10, L\_11, L\_12, L\_13, L\_14, L\_15, L\_16, L\_17, L\_18, L\_19, L\_20, L\_21, L\_22, L\_23, L\_24, L\_25, L\_26, L\_27, L\_28, L\_29, L\_30, L\_31, L\_32, L\_33, L\_34, L\_35).

7. 40 (L\_1, L\_2, L\_3, L\_4, L\_5, L\_6, L\_7, L\_8, L\_9, L\_10, L\_11, L\_12, L\_13, L\_14, L\_15, L\_16, L\_17, L\_18, L\_19, L\_20, L\_21, L\_22, L\_23, L\_24, L\_25, L\_26, L\_27, L\_28, L\_29, L\_30, L\_31, L\_32, L\_33, L\_34, L\_35, L\_36, L\_37, L\_38, L\_39, L\_40)

В результаті ми отримуємо дуже велику кількість комбінацій - 28 для кожного з досліджених АФІ, що як нам представляється надлишковим, тому перші 10 АФІ досліджені для всіх 28 комбінацій, наступні в основному за спектральним діапазоном 2 (240-335 нм), який, як нам уявляється, є найперспективнішим, деякі по одному чи двом іншим спектральним діапазонам. Далі як приклад (див. 4.29 - 4.32) представлені результати для першого АФІ (саліцилова кислота для всіх чотирьох діапазонів).

C_U_I_NOM	C_U_I_CALCULATED						
	10L	15L	20L	25L	30L	35L	40L
YS_1	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_2	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_3	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_4	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_5	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_6	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_7	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_8	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_9	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_10	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_11	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_12	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_13	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_14	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_15	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_16	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_17	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_18	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_19	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_20	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_21	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_22	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_23	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_24	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_25	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_26	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_27	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_28	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_29	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_30	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_31	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_32	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_33	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_34	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_35	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_36	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_37	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_38	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_39	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_40	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_41	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_42	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_43	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_44	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_45	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_46	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_47	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_48	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_49	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
YS_100	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0

	C_U_I_CALCULATED						
	10L	15L	20L	25L	30L	35L	40L
Істинні валідаційні проби							
MEAN	52.07	10.41	10.00	10.00	10.01	10.01	9.98
MEAN (% of NOMINAL)	520.75	104.09	99.99	100.00	100.14	99.75	99.90
CV, %	11.43	1.94	0.06	0.15	0.27	0.76	1.43
Супутні валідаційні проби							
MEAN	53.68	10.19	10.00	10.00	10.01	9.97	9.97
MEAN (% of NOMINAL)	536.81	101.89	99.99	100.10	100.14	99.74	99.66
CV, %	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.44

Малюнок 4.29 Результати розрахунку одного поєднання 1-го набору аналітичних доджин хвиль (210 – 305 nm) і семи наборів ДД (10, 15, 20, 25, 30, 35, 40) першого АФІ (саліцилова кислота).



C_U_I_NOM	C_U_I_CALCULATED						
	10L	15L	20L	25L	30L	35L	40L
V8_1	43.56	8.83	10.00	9.88	9.93	9.96	9.96
V8_2	44.71	8.84	10.00	9.84	9.93	9.93	10.02
V8_3	71.66	8.78	10.00	10.04	10.18	10.19	9.97
V8_4	48.93	8.78	10.00	9.98	9.93	9.93	9.87
V8_5	41.30	8.89	9.99	9.98	9.93	9.96	10.08
V8_6	38.51	8.84	10.00	10.04	10.04	10.08	9.89
V8_7	60.24	8.84	10.00	10.04	9.94	9.98	10.11
V8_8	58.48	7.77	10.00	9.87	9.98	9.97	9.84
V8_9	53.34	8.25	10.00	10.06	9.94	9.97	9.84
V8_10	62.25	8.85	10.00	9.98	9.97	10.03	8.75
V8_11	8.24	10.00	10.00	10.00	9.85	9.84	10.07
V8_12	44.20	8.47	10.00	9.97	9.98	9.94	9.93
V8_13	7.83	10.00	9.98	9.98	9.93	9.97	8.83
V8_14	44.20	8.41	10.00	9.98	9.93	9.99	9.93
V8_15	8.80	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00	9.96
V8_16	8.91	10.00	9.98	9.98	9.97	9.99	9.94
V8_17	8.91	10.00	9.98	9.98	9.97	9.99	8.93
V8_18	44.20	8.91	10.00	10.00	10.00	10.00	10.07
V8_19	44.20	8.91	10.00	9.98	10.00	9.98	9.88
V8_20	44.20	8.91	10.00	10.00	10.00	10.00	9.87
V8_21	44.20	8.91	10.00	10.00	9.97	10.09	10.16
V8_22	8.81	10.00	9.95	9.95	9.98	9.98	10.04
V8_23	8.81	10.00	10.00	10.00	9.91	10.11	10.08
V8_24	8.81	10.00	9.98	9.98	9.93	9.82	9.82
V8_25	8.81	10.00	9.95	9.85	9.87	9.98	10.15
V8_26	8.81	10.00	9.99	9.99	9.93	9.98	10.02
V8_27	44.20	8.81	10.00	9.98	9.98	9.98	10.15
V8_28	8.81	10.00	9.99	10.00	10.00	10.11	10.01
V8_29	8.81	10.00	9.99	9.99	9.93	9.98	9.96
V8_30	44.20	8.81	10.00	9.99	9.98	9.94	9.96
V8_31	8.81	10.00	9.98	9.98	9.94	9.92	10.13
V8_32	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	9.83
V8_33	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.19
V8_34	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	9.82
V8_35	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03
V8_36	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03
V8_37	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03
V8_38	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03
V8_39	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03
V8_40	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03
V8_41	44.20	8.81	10.00	9.98	9.94	9.96	10.03

C_U_I_CALCULATED						
10L	15L	20L	25L	30L	35L	40L
<b>Істинні валідаційні проби</b>						
MEAN	54.10	8.43	10.00	9.99	9.94	9.99
MEAN (% of NOMINAL)	541.05	84.28	100.02	99.88	99.42	99.85
CV, %	17.40	4.94	0.03	0.27	0.56	0.70
<b>Синтетичні валідаційні проби</b>						
MEAN	44.20	8.91	10.00	9.99	9.94	9.98
MEAN (% of NOMINAL)	442.02	89.07	100.02	99.87	99.40	99.84
CV, %	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Малюнок 4.30 Результати розрахунку для одного поєднання 2-го набору аналітичних довшин хвиль (240 – 335 нм) та семи наборів ДД (10, 15, 20, 25, 30, 35, 40) для першого АФІ (саліцилова кислота).

C_U_I_CALCULATED	C_U_I_CALCULATED						
	10 L	15 L	20 L	25 L	30 L	35 L	40 L
V5_1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_9	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_28	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_32	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_33	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_34	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_35	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_37	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_38	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_39	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_41	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_43	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_44	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_45	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_46	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_48	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_49	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_51	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_52	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_53	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_54	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_55	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_56	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_57	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_58	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_59	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_62	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_63	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_64	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_65	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_66	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_67	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_68	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_69	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_71	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_72	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_73	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_74	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_75	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_76	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_77	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_78	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_79	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_81	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_83	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_84	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_85	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_86	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_87	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_88	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_89	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_90	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_91	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_92	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_93	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_94	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_95	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_96	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_97	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_98	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_99	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_100	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

## C\_U\_I\_CALCULATED

	10 L	15 L	20 L	25 L	30 L	35 L	40 L
Истинный валидационный проба							
MEAN	12.73	9.47	10.00	9.94	9.96	9.94	9.95
MEAN (% of NOMINAL)	127.19	94.73	99.99	99.44	99.56	99.41	99.51
CV, %	10.83	1.28	0.02	0.28	0.47	0.65	1.07
Случайный валидационный проба							
MEAN	14.14	9.50	9.99	9.94	9.94	9.94	9.98
MEAN (% of NOMINAL)	141.55	95.86	99.95	99.41	99.54	99.38	99.79
CV, %	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.10

Малюнок 4.31 Результати розрахунку для одного поєднання третього набору аналітичних довжин хвиль (270 – 365 nm) та семи наборів ДД (10, 15, 20, 25, 30, 35, 40) для першого АФІ (саліцилова кислота).

C_UJ_NUM	C_UJ_CALCULATED						
	10 L	15 L	20 L	30 L	35 L	40 L	40 L
V5_1	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_2	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_3	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_4	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_5	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_6	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_7	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_8	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_9	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_10	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_11	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_12	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_13	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_14	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_15	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_16	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_17	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_18	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_19	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_20	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_21	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_22	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_23	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_24	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_25	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_26	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_27	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_28	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_29	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_30	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_31	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_32	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_33	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_34	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_35	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_36	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_37	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_38	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_39	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
V5_40	0.00	10.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

C_UJ_CALCULATED							
10 L	15 L	20 L	30 L	35 L	40 L	40 L	
Істинні валізаційні проби							
MEAN	8.74	-32.51	10.00	9.97	9.96	9.95	9.84
MEAN(% of NOMINAL)	87.39	-325.12	100.00	99.72	99.56	99.46	98.40
CV, %	3.93	-48.66	0.01	0.43	0.41	0.61	0.78
Супутні валізаційні проби							
MEAN	8.96	-17.33	10.00	9.97	9.95	9.94	9.84
MEAN(% of NOMINAL)	89.65	-173.26	100.00	99.70	99.54	99.44	98.36
CV, %	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Малюнок 4.32 Результати розрахунку для одного поєднання 4-го набору аналітичних довжин хвиль (300 – 395 nm) та семи наборів ДД (10, 15, 20, 25, 30, 35, 40) для першого АФІ (саліцилова кислота).



У таблиці 4.1 представлені результати калібрування та валідації у межах інтерполяції. Калібрування та валідація проводяться на тому самому наборі ДД, представлені тільки інтерполяційні валідаційні проби.

Як видно з Таблиці 4.1, найкращі результати інтерполяції виходять для формування валідаційних сумішей на перших 25 дієтичних добавок. На даний момент дослідження ми не знаємо, наскільки цей результат пов'язаний з математичними аспектами і наскільки з природою добавок. Ми сподіваємось, що подальші дослідження дозволять прояснити це питання. Тому подальші дослідження порівняння інтерполяції та екстраполяції проводяться на наборі з 25 дієтичних добавок.

Природно, що до екстраполяції слід застосовувати менш жорсткі вимоги, ніж до інтерполяції, тому, якщо у випадку інтерполяції ми вибрали межі толерантності знайденого 95 – 105% до введеного, то у разі екстраполяції з урахуванням того, що ми маємо вирішувати суто якісне завдання, обрали межі толерантності 50 — 150%. У наведених нижче таблицях представлені результати інтерполяції для валідаційних проб, складених на перших 25 дієтичних добавках та екстраполяції на наступних 15 пробах, складених на наступних 15 дієтичних добавках. Ще раз підкреслимо, що калібрувальні рівняння склалися на перших 25 калібрувальних пробах, складених на перших 25 дієтичних добавках.

Таблиця 4.2 надає результати інтерполяції та екстраполяції для доступних активних фармацевтичних інгредієнтів. Червоним кольором вказані результати, що не потрапили в межі толерантності.

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферніксил	99.89	99.93	99.95	100.01	VS_26	Корамат	104.81	98.95	101.49	96.48
VS_2	Нервоном	99.78	99.54	100.10	100.03	VS_27	DS 1941.21	103.00	99.94	99.75	100.06
VS_3	Антистрес	100.14	99.64	99.74	100.00	VS_28	DS 0214.20	100.09	99.29	99.67	100.17
VS_4	Стресовит	99.87	99.80	99.90	100.00	VS_29	Д-Фенілаланин	867.55	70.71	171.24	89.88
VS_5	Пробіоксин	100.09	99.79	99.94	100.02	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-31.44	65.66	91.93	99.20
VS_6	Церебровин	100.43	99.65	100.03	100.01	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	4.04	100.85	127.76	98.48
VS_7	Герба спокій	100.12	99.58	99.76	100.00	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	120.64	96.38	104.67	105.69
VS_8	Калмавіс	100.13	99.82	99.87	100.00	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.27	99.70	99.78	99.94
VS_9	Кропу плоди	100.19	99.99	99.95	100.00	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	106.20	99.85	100.62	99.78
VS_10	Джонмера	100.16	99.76	99.96	100.00	VS_35	Лізину гідрохлорид 1545.20	100.12	99.82	100.07	99.98
VS_11	Картера	99.88	100.16	99.81	99.99	VS_36	Гліцин 2556.20	99.42	99.72	99.79	100.24
VS_12	Фенхель	100.20	99.65	99.79	100.00	VS_37	Л-цистин 1349.21	99.55	99.86	99.92	100.09
VS_13	Виджайсар	100.19	99.79	99.64	100.00	VS_38	Гістидин 1610.20	69.09	99.54	99.48	99.86
VS_14	Авантавати	100.29	100.08	99.83	99.98	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.83	99.83	99.78	100.03
VS_15	Седафитон(таб)	100.03	99.89	99.88	100.00	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	188.16	130.41	266.57	245.46
VS_16	Седафитон(капс)	100.13	99.86	99.97	99.97						
VS_17	М'яти листя	99.83	100.00	99.85	100.00						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.10	99.63	99.85	100.00						
VS_19	Потенза	100.07	99.81	99.99	99.99						
VS_20	Танкор	100.09	99.72	99.86	100.01						
VS_21	Лонгсил	100.31	99.52	99.89	100.02						
VS_22	Вімекс	100.10	100.12	100.01	100.01						
VS_23	Клосімбекс	100.18	99.42	100.20	100.03						
VS_24	Вератол С	100.13	99.70	99.93	100.00						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.05	99.91	99.85	100.00						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферніксил	98.51	99.69	100.06	100.14	VS_26	Корамат	125.32	88.45	105.11	74.88
VS_2	Нервоном	99.95	98.90	99.77	100.24	VS_27	DS 1941.21	112.66	100.80	99.75	100.44
VS_3	Антистрес	99.95	100.10	100.04	100.06	VS_28	DS 0214.20	99.23	102.46	99.58	101.18
VS_4	Стресовит	98.97	99.53	99.82	99.93	VS_29	Д-Фенілаланин	5060.53	-271.16	201.09	3.74
VS_5	Пробіоксин	99.17	99.61	99.86	100.15	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-988.07	579.49	60.98	90.62
VS_6	Церебровин	99.76	99.68	100.04	100.06	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-372.12	7.07	92.40	85.61
VS_7	Герба спокій	97.51	100.43	100.00	99.78	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	208.15	66.77	136.70	136.57
VS_8	Калмавіс	98.82	99.69	99.89	99.94	VS_33	DL-карнітину 1602.21	95.90	100.43	99.55	99.32
VS_9	Кропу плоди	99.12	100.64	100.41	99.92	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	122.29	94.13	97.00	99.01
VS_10	Джонмера	99.81	99.11	99.89	100.01	VS_35	Лізину гідрохлорид 1545.20	100.91	98.51	99.66	99.79
VS_11	Картера	96.72	100.71	100.25	99.73	VS_36	Гліцин 2556.20	95.31	101.17	99.03	102.45
VS_12	Фенхель	100.02	100.02	99.78	99.92	VS_37	Л-цистин 1349.21	96.55	99.62	98.99	101.02
VS_13	Виджайсар	99.05	100.26	99.82	99.96	VS_38	Гістидин 1610.20	-1.15	101.98	100.67	98.91
VS_14	Авантавати	99.79	100.16	99.86	99.77	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	97.49	100.03	98.92	100.66
VS_15	Седафитон(таб)	97.81	99.93	99.80	99.99	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	848.44	-353.04	640.68	998.62
VS_16	Седафитон(капс)	98.81	99.43	99.87	99.67						
VS_17	М'яти листя	98.68	99.31	100.20	100.02						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.38	99.68	99.77	99.99						
VS_19	Потенза	100.49	99.00	100.01	99.94						
VS_20	Танкор	99.26	99.71	99.95	99.90						
VS_21	Лонгсил	100.38	100.43	99.78	100.21						
VS_22	Вімекс	99.93	99.23	100.22	100.08						
VS_23	Клосімбекс	98.73	100.05	100.20	100.07						
VS_24	Вератол С	99.71	99.57	99.89	99.99						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.56	99.38	99.93	100.06						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферніксил	99.68	100.18	99.82	100.05	VS_26	Корамат	92.00	84.18	96.56	88.18
VS_2	Нервоном	99.99	98.84	100.17	100.08	VS_27	DS 1941.21	95.36	101.06	99.85	100.12
VS_3	Антистрес	99.60	99.59	99.50	100.01	VS_28	DS 0214.20	99.80	101.32	100.02	100.56
VS_4	Стресовит	99.91	99.98	99.82	99.99	VS_29	Д-Фенілаланин	-2180.59	-620.75	69.15	134.28
VS_5	Пробіоксин	99.68	99.65	99.83	100.02	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	356.67	2.42	112.87	105.58
VS_6	Церебровин	99.49	98.97	99.80	100.00	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	242.60	63.44	122.51	103.69
VS_7	Герба спокій	99.70	100.75	99.60	100.04	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	73.64	87.74	88.34	128.00
VS_8	Калмавіс	99.82	100.08	99.86	100.16	VS_33	DL-карнітину 1602.21	100.88	100.38	99.95	100.08
VS_9	Кропу плоди	99.74	101.23	99.75	100.02	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	92.60	97.75	101.53	98.85
VS_10	Джонмера	99.65	97.39	99.82	99.94	VS_35	Лізину гідрохлорид 1545.20	99.42	99.25	100.07	100.02
VS_11	Картера	99.99	101.05	99.55	99.96	VS_36	Гліцин 2556.20	100.70	100.66	100.34	99.92
VS_12	Фенхель	99.63	100.01	99.68	99.86	VS_37	Л-цистин 1349.21	100.62	100.03	100.22	100.19
VS_13	Виджайсар	99.69	100.72	99.62	100.00	VS_38	Гістидин 1610.20	158.50	101.90	99.30	99.31
VS_14	Авантавати	99.65	101.34	99.80	100.21	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.07	99.83	100.34	99.41
VS_15	Седафитон(таб)	99.97	100.29	99.63	100.05	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-151.21	-224.84	21.73	779.01
VS_16	Седафитон(капс)	99.74	99.84	99.73	100.04						
VS_17	М'яти листя	99.51	99.98	99.42	99.78						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.67	97.94	99.74	100.06						
VS_19	Потенза	99.62	97.74	99.76	99.91						
VS_20	Танкор	99.67	99.53	99.67	100.00						
VS_21	Лонгсил	99.20	100.21	99.76	100.14						
VS_22	Вімекс	99.67	100.39	99.90	99.91						
VS_23	Клосімбекс	99.53	100.92	99.94	100.00						
VS_24	Вератол С	99.67	99.01	99.81	100.01						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.68	99.65	99.91	99.86						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	102.66	100.77	99.58	99.68	VS_26	Корамат	30.04	72.08	127.10	150.70
VS_2	Нервоном	98.22	99.49	99.61	99.80	VS_27	DS 1941.21	72.70	101.91	97.82	99.03
VS_3	Антистрес	99.83	100.31	100.23	99.77	VS_28	DS 0214.20	100.12	101.87	96.55	97.35
VS_4	Стрессовит	100.82	100.02	98.56	100.02	VS_29	Д-Фенилаланин	-11587.97	2.82	515.58	38.46
VS_5	Пробіоксин	100.85	100.10	99.39	99.66	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	2767.45	1305.92	126.25	100.14
VS_6	Церебровин	100.73	99.95	99.96	99.63	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	1075.29	28.37	241.34	126.66
VS_7	Гербі спокій	105.29	101.06	98.07	99.72	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	-148.74	26.69	104.96	13.63
VS_8	Калмавіс	101.38	100.10	98.65	99.45	VS_33	DL-карнітину 1602.21	107.60	99.89	98.72	100.18
VS_9	Кропу плоди	102.68	100.54	97.76	99.75	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	54.67	86.84	106.83	108.52
VS_10	Джонмера	99.75	99.80	101.44	100.11	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	96.27	97.60	99.83	100.23
VS_11	Картера	107.42	102.24	98.40	99.86	VS_36	Гліцин 2556.20	109.49	101.89	97.94	99.18
VS_12	Фенхель	99.52	99.09	99.44	99.92	VS_37	Л-цистин 1349.21	106.45	99.94	98.80	99.33
VS_13	Виджайсар	101.72	99.78	97.60	99.43	VS_38	Гістидин 1610.20	290.17	101.20	95.92	102.47
VS_14	Анантавати	99.28	99.90	97.83	99.65	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	104.60	100.66	98.19	101.13
VS_15	Седаритон(таб)	104.20	100.91	98.93	99.73	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-1616.43	-342.23	531.59	-2022.44
VS_16	Седаритон(капс)	102.03	100.17	99.51	99.81						
VS_17	М'яти листя	101.72	100.38	99.32	99.63						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.49	99.98	99.89	100.01						
VS_19	Потенза	96.30	99.98	100.51	100.90						
VS_20	Танікор	100.24	100.26	99.37	99.74						
VS_21	Лонгсил	98.13	99.93	99.49	99.68						
VS_22	Вімекс	98.59	100.20	99.09	99.74						
VS_23	Клоксімбекс	100.67	100.48	99.27	99.68						
VS_24	Вератол С	99.33	99.81	99.83	99.93						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.94	99.69	99.08	100.12						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.61	100.02	100.02	100.06	VS_26	Корамат	133.38	95.40	101.41	88.26
VS_2	Нервоном	100.39	99.81	99.93	100.08	VS_27	DS 1941.21	118.46	100.27	99.96	100.19
VS_3	Антистрес	100.03	100.14	100.06	100.03	VS_28	DS 0214.20	99.73	100.43	99.91	100.59
VS_4	Стрессовит	99.35	99.93	99.97	100.01	VS_29	Д-Фенилаланин	8310.73	77.63	120.43	85.93
VS_5	Пробіоксин	99.98	99.93	99.98	100.07	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-1272.24	325.55	91.55	99.69
VS_6	Церебровин	100.93	99.93	100.02	100.05	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-510.27	78.93	95.43	96.85
VS_7	Гербі спокій	99.07	100.13	100.04	100.02	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	238.78	83.83	108.63	118.60
VS_8	Калмавіс	99.57	99.91	99.99	100.06	VS_33	DL-карнітину 1602.21	93.31	99.95	99.91	99.92
VS_9	Кропу плоди	99.28	100.00	100.10	100.05	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	130.59	97.29	99.22	98.91
VS_10	Джонмера	100.67	99.94	100.00	100.01	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	101.84	99.44	99.91	99.96
VS_11	Картера	97.10	100.22	100.09	100.01	VS_36	Гліцин 2556.20	95.10	100.30	99.76	100.50
VS_12	Фенхель	100.75	99.90	99.98	99.99	VS_37	Л-цистин 1349.21	96.20	99.91	99.75	100.25
VS_13	Виджайсар	99.43	99.93	100.01	100.05	VS_38	Гістидин 1610.20	-88.65	100.20	100.22	99.50
VS_14	Анантавати	100.20	99.85	99.98	100.02	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	97.74	100.06	99.74	99.96
VS_15	Седаритон(таб)	98.39	100.10	99.97	100.03	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	1177.03	2.96	210.45	608.67
VS_16	Седаритон(капс)	99.81	99.93	99.98	99.97						
VS_17	М'яти листя	99.92	99.95	100.09	100.06						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.43	100.00	99.98	100.01						
VS_19	Потенза	101.10	99.98	100.02	99.92						
VS_20	Танікор	100.05	99.99	100.02	100.05						
VS_21	Лонгсил	102.16	100.00	99.97	100.08						
VS_22	Вімекс	100.33	99.82	100.04	100.05						
VS_23	Клоксімбекс	100.35	100.00	100.03	100.11						
VS_24	Вератол С	100.39	99.94	99.99	100.03						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.90	99.81	99.99	99.99						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	101.20	101.08	99.99	99.95	VS_26	Корамат	63.02	79.02	112.16	114.49
VS_2	Нервоном	98.96	101.55	99.29	99.90	VS_27	DS 1941.21	91.75	102.15	99.33	99.77
VS_3	Антистрес	95.91	100.51	100.18	100.00	VS_28	DS 0214.20	95.57	105.77	98.74	99.27
VS_4	Стрессовит	98.13	101.05	99.47	100.00	VS_29	Д-Фенилаланин	-4377.56	195.34	309.72	134.14
VS_5	Пробіоксин	97.49	101.32	99.68	99.93	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	323.01	1434.81	48.94	102.65
VS_6	Церебровин	98.00	101.80	99.98	99.96	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	442.86	22.01	92.66	105.66
VS_7	Гербі спокій	99.37	102.89	99.72	100.00	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	33.00	76.37	150.98	76.66
VS_8	Калмавіс	97.97	101.45	99.60	99.97	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.62	101.82	99.05	100.21
VS_9	Кропу плоди	98.61	100.96	100.13	99.99	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	84.96	90.41	96.39	101.01
VS_10	Джонмера	97.14	101.22	99.89	99.99	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	96.66	99.24	99.34	100.07
VS_11	Картера	97.92	103.15	100.17	100.05	VS_36	Гліцин 2556.20	99.36	104.06	98.24	99.12
VS_12	Фенхель	97.04	101.34	99.66	100.01	VS_37	Л-цистин 1349.21	98.61	101.14	98.53	99.64
VS_13	Виджайсар	96.75	101.47	99.66	100.00	VS_38	Гістидин 1610.20	183.04	104.57	100.60	100.58
VS_14	Анантавати	97.45	100.75	99.61	100.03	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	97.20	102.28	98.04	99.93
VS_15	Седаритон(таб)	97.76	101.41	99.81	100.00	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-190.95	-599.05	838.77	-506.57
VS_16	Седаритон(капс)	98.76	100.77	99.83	100.10						
VS_17	М'яти листя	97.29	100.75	100.40	100.01						
VS_18	Моринга-Йоруба	95.95	101.66	99.58	99.98						
VS_19	Потенза	95.68	99.73	100.06	100.05						
VS_20	Танікор	96.59	101.53	99.87	99.95						
VS_21	Лонгсил	97.44	102.20	99.75	99.90						
VS_22	Вімекс	97.25	99.90	100.06	99.97						
VS_23	Клоксімбекс	98.05	102.79	99.82	99.87						
VS_24	Вератол С	96.56	101.28	99.69	99.98						
VS_25	Корвалтаб Метео	97.97	100.99	99.68	100.00						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS #		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS #		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	96.23	100.11	99.97	100.10	VS_26	Корамар	140.44	93.81	101.84	83.64
VS_2	Нервоном	100.43	99.83	99.85	100.10	VS_27	DS 1941.21	110.50	100.45	99.88	100.29
VS_3	Антистрес	98.71	100.27	100.03	100.05	VS_28	DS 0214.20	99.03	100.64	99.81	100.83
VS_4	Стрессовит	98.85	99.98	99.91	99.99	VS_29	Д-Фенилаланин	5630.80	73.69	129.72	69.00
VS_5	Пробіоксин	98.07	100.00	99.92	100.11	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-1438.48	406.91	88.72	96.39
VS_6	Церебровин	97.25	99.98	99.97	100.09	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-371.56	71.77	94.17	90.78
VS_7	Герба спокій	95.28	100.25	100.00	99.98	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	226.27	78.04	111.42	124.10
VS_8	Калмавіс	97.53	99.96	99.93	100.04	VS_33	DL-карнітину 1602.21	95.49	100.01	99.82	99.74
VS_9	Кропу плоди	97.03	100.07	100.07	100.03	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	116.67	96.38	98.92	98.46
VS_10	Джонмера	99.00	100.01	99.94	100.02	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	101.17	99.32	99.82	99.89
VS_11	Картера	93.73	100.39	100.07	99.96	VS_36	Гліцин 2556.20	93.75	100.49	99.62	100.98
VS_12	Фенхель	99.02	99.94	99.92	100.01	VS_37	L-цистин 1349.21	95.73	99.97	99.61	100.42
VS_13	Виджайсар	97.20	99.99	99.95	100.05	VS_38	Гістидин 1610.20	54.98	100.34	100.23	99.93
VS_14	Анангавати	98.40	99.88	99.92	99.98	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	96.38	100.16	99.99	100.11
VS_15	Седафитон(таб)	96.09	100.23	99.92	100.03	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	961.74	-28.91	248.40	730.11
VS_16	Седафитон(капс)	97.03	100.00	99.93	99.91						
VS_17	М'ята листя	98.25	100.02	100.07	100.10						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.11	100.08	99.91	100.00						
VS_19	Потенза	101.76	100.06	99.98	99.88						
VS_20	Танкор	98.39	100.07	99.98	100.04						
VS_21	Лонгсил	99.21	100.08	99.91	100.12						
VS_22	Вимекс	100.29	99.85	99.99	100.07						
VS_23	Клоксимбекс	97.76	100.07	99.98	100.12						
VS_24	Вератол С	99.05	100.00	99.93	100.02						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.79	99.82	99.93	100.00						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS #		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS #		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	100.07	100.17	99.74	100.10	VS_26	Корамар	119.90	83.04	105.68	80.33
VS_2	Нервоном	97.82	99.35	99.30	100.13	VS_27	DS 1941.21	114.69	101.11	99.58	100.33
VS_3	Антистрес	100.59	101.06	99.98	100.03	VS_28	DS 0214.20	98.03	101.03	99.31	101.03
VS_4	Стрессовит	97.18	99.82	99.61	100.02	VS_29	Д-Фенилаланин	13062.07	73.21	99.57	78.04
VS_5	Пробіоксин	99.11	99.82	99.56	100.12	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-676.19	925.64	71.50	98.35
VS_6	Церебровин	99.48	99.70	99.60	100.09	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-445.01	31.87	62.27	92.02
VS_7	Герба спокій	98.97	100.31	99.91	100.06	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	183.88	29.76	135.07	135.23
VS_8	Калмавіс	97.84	99.60	99.64	100.12	VS_33	DL-карнітину 1602.21	94.17	99.64	99.47	99.83
VS_9	Кропу плоди	98.20	99.84	100.09	100.07	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	120.56	99.16	96.12	98.08
VS_10	Джонмера	99.52	100.02	99.68	100.01	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	100.02	97.85	99.12	99.92
VS_11	Картера	99.36	100.58	100.19	100.01	VS_36	Гліцин 2556.20	95.30	100.85	99.06	100.87
VS_12	Фенхель	99.07	99.56	99.70	99.98	VS_37	L-цистин 1349.21	94.88	99.73	98.67	100.39
VS_13	Виджайсар	98.59	99.54	100.12	100.07	VS_38	Гістидин 1610.20	-206.13	100.06	101.59	99.20
VS_14	Анангавати	97.88	99.38	99.78	100.06	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	97.60	100.13	98.85	99.85
VS_15	Седафитон(таб)	97.76	100.61	99.48	100.05	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	1479.48	-170.25	312.09	986.74
VS_16	Седафитон(капс)	98.76	99.95	99.40	99.93						
VS_17	М'ята листя	101.37	99.95	100.34	100.02						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.07	100.15	99.53	100.06						
VS_19	Потенза	98.92	100.43	99.64	99.92						
VS_20	Танкор	99.57	99.98	99.97	100.12						
VS_21	Лонгсил	101.53	99.94	99.50	100.15						
VS_22	Вимекс	98.13	99.45	99.75	100.06						
VS_23	Клоксимбекс	99.85	100.02	99.56	100.17						
VS_24	Вератол С	98.83	99.91	99.66	100.05						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.10	99.22	99.63	99.98						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS #		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS #		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.79	99.47	100.05	100.07	VS_26	Корамар	58.82	95.82	104.50	88.02
VS_2	Нервоном	96.55	100.19	99.84	100.13	VS_27	DS 1941.21	80.95	98.65	99.80	100.23
VS_3	Антистрес	97.67	99.07	100.09	100.01	VS_28	DS 0214.20	97.03	99.77	99.57	100.63
VS_4	Стрессовит	98.14	99.50	99.88	100.02	VS_29	Д-Фенилаланин	-6717.97	895.41	175.05	63.92
VS_5	Пробіоксин	97.80	99.62	99.93	100.10	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	1480.83	644.76	77.62	96.84
VS_6	Церебровин	97.04	99.85	100.05	100.07	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	678.24	157.04	97.92	94.21
VS_7	Герба спокій	100.02	99.28	99.99	100.01	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	-67.19	111.12	121.91	118.14
VS_8	Калмавіс	98.20	99.62	99.92	100.05	VS_33	DL-карнітину 1602.21	101.85	98.98	99.70	99.79
VS_9	Кропу плоди	99.04	97.17	100.17	100.02	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	68.84	97.44	98.46	99.47
VS_10	Джонмера	96.14	101.15	100.00	100.04	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	95.40	99.28	99.80	99.98
VS_11	Картера	101.93	99.86	100.17	99.96	VS_36	Гліцин 2556.20	102.81	99.72	99.38	100.95
VS_12	Фенхель	96.84	99.15	99.92	100.02	VS_37	L-цистин 1349.21	100.96	99.58	99.42	100.42
VS_13	Виджайсар	98.24	99.15	99.93	100.03	VS_38	Гістидин 1610.20	222.29	98.64	100.37	99.59
VS_14	Анангавати	98.46	99.67	99.88	100.00	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.05	99.74	99.31	100.20
VS_15	Седафитон(таб)	99.48	99.46	99.94	100.04	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-861.67	151.25	402.50	575.90
VS_16	Седафитон(капс)	98.30	99.52	99.96	99.93						
VS_17	М'ята листя	98.51	99.26	100.24	100.03						
VS_18	Моринга-Йоруба	96.47	100.22	99.88	100.05						
VS_19	Потенза	96.88	99.51	100.04	100.02						
VS_20	Танкор	97.33	99.75	100.02	100.04						
VS_21	Лонгсил	95.83	99.33	99.91	100.14						
VS_22	Вимекс	97.36	98.47	100.10	100.05						
VS_23	Клоксимбекс	97.27	99.93	100.06	100.11						
VS_24	Вератол С	96.57	100.06	99.94	100.05						
VS_25	Корвалтаб Метео	97.09	99.13	99.95	100.04						



Таблиця 4.21 ДИФЕНГІДРАМІН

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	95.07	100.03	100.05	99.98	VS_26	Корамаг	136.43	108.07	114.47	109.74
VS_2	Нервоном	95.35	100.29	99.87	99.62	VS_27	DS 1941.21	128.12	99.69	99.03	99.74
VS_3	Антистрес	95.79	99.99	99.62	100.11	VS_28	DS 0214.20	95.90	99.58	98.11	99.69
VS_4	Стрессовит	94.56	100.19	99.42	99.89	VS_29	Д-Фенилаланин	8072.99	91.55	420.70	229.69
VS_5	Пробіоксин	96.21	100.20	99.79	99.87	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-1611.26	-318.65	43.09	112.32
VS_6	Церебровин	100.35	100.21	100.15	100.00	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-892.08	128.52	156.94	103.13
VS_7	Герба спокій	96.17	99.93	99.36	100.24	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	326.05	126.28	150.41	104.59
VS_8	Калмавіс	96.44	100.27	99.51	100.24	VS_33	DL-карнітину 1602.21	88.18	100.30	98.87	100.78
VS_9	Кропу плоди	96.42	100.22	100.08	100.11	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	158.34	104.93	99.01	97.36
VS_10	Джонмера	98.10	100.15	100.03	99.84	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	97.46	101.07	99.78	99.93
VS_11	Картера	92.72	99.65	99.92	100.46	VS_36	Гліцини 2556.20	88.76	99.59	98.41	97.29
VS_12	Фенхель	99.28	100.29	99.52	99.81	VS_37	L-цистин 1349.21	90.58	100.25	98.95	98.74
VS_13	Виджайсар	97.33	100.26	99.20	100.18	VS_38	Гістидин 1610.20	-194.52	99.90	99.62	100.33
VS_14	Анантавати	98.40	100.48	99.35	100.42	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	92.55	99.95	98.23	98.32
VS_15	Седафитон(таб)	95.00	99.94	99.76	100.00	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	1235.99	250.55	987.28	110.54
VS_16	Седафитон(капс)	97.10	100.22	99.91	100.28						
VS_17	М'ята листя	93.31	100.13	100.37	100.10						
VS_18	Моринга-Йоруба	96.72	100.11	99.36	99.90						
VS_19	Потенза	95.77	100.15	100.18	100.00						
VS_20	Танікор	96.47	100.08	99.80	100.32						
VS_21	Лонгсил	99.43	100.20	99.71	99.74						
VS_22	Вимекс	95.51	100.38	100.25	99.97						
VS_23	Клоксімбекс	96.91	100.12	100.25	100.01						
VS_24	Вератол С	97.40	100.20	99.71	99.96						
VS_25	Корвалтаб Метео	96.29	100.40	99.70	99.77						

Таблиця 4.2м ЦЕФТРИАКСОН НАТРІЮ

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	98.15	99.22	99.53	100.36	VS_26	Корамаг	131.87	104.47	103.16	119.11
VS_2	Нервоном	100.09	99.20	98.94	100.28	VS_27	DS 1941.21	108.42	99.44	99.13	100.33
VS_3	Антистрес	102.30	99.63	99.01	100.52	VS_28	DS 0214.20	100.75	101.72	98.78	99.55
VS_4	Стрессовит	99.95	99.41	98.99	100.27	VS_29	Д-Фенилаланин	7454.33	-154.72	286.00	110.23
VS_5	Пробіоксин	99.97	99.52	99.27	100.38	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-583.08	-77.40	69.52	86.05
VS_6	Церебровин	98.90	99.78	99.46	100.43	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-277.59	54.97	90.48	75.59
VS_7	Герба спокій	97.61	99.89	99.09	100.21	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	171.63	121.34	122.84	82.22
VS_8	Калмавіс	99.10	99.68	99.15	100.26	VS_33	DL-карнітину 1602.21	97.37	100.54	98.46	100.04
VS_9	Кропу плоди	99.06	100.22	99.74	100.19	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	111.07	102.68	97.33	99.95
VS_10	Джонмера	99.66	99.34	98.84	100.40	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	101.69	100.00	99.12	100.11
VS_11	Картера	99.11	99.46	99.48	100.25	VS_36	Гліцини 2556.20	97.24	100.14	98.46	100.71
VS_12	Фенхель	99.91	100.31	99.16	100.42	VS_37	L-цистин 1349.21	97.95	99.60	99.27	100.22
VS_13	Виджайсар	100.76	100.57	99.33	100.40	VS_38	Гістидин 1610.20	-16.35	101.47	99.47	100.97
VS_14	Анантавати	100.28	100.15	99.54	100.02	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.54	99.64	98.21	100.70
VS_15	Седафитон(таб)	98.66	99.16	99.75	100.40	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	855.57	-123.57	608.89	-952.16
VS_16	Седафитон(капс)	98.55	99.19	99.61	100.24						
VS_17	М'ята листя	101.22	98.93	99.51	100.38						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.55	99.65	98.88	100.38						
VS_19	Потенза	101.66	98.60	99.29	100.37						
VS_20	Танікор	100.72	99.51	99.27	100.28						
VS_21	Лонгсил	100.63	100.49	99.60	100.21						
VS_22	Вимекс	100.72	98.97	99.53	100.36						
VS_23	Клоксімбекс	99.44	99.81	98.95	99.91						
VS_24	Вератол С	100.20	99.59	98.95	100.31						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.61	99.62	99.08	100.53						

Таблиця 4.2п ДРОТАВЕРИНА ГІДРОХЛОРИД

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	98.26	99.88	99.85	99.97	VS_26	Корамаг	107.61	107.85	99.55	109.18
VS_2	Нервоном	100.50	100.31	99.55	99.91	VS_27	DS 1941.21	102.50	99.37	99.88	99.87
VS_3	Антистрес	99.46	99.72	100.29	100.01	VS_28	DS 0214.20	100.67	99.29	100.23	99.57
VS_4	Стрессовит	100.29	100.06	99.75	99.99	VS_29	Д-Фенилаланин	-893.29	159.38	76.21	126.98
VS_5	Пробіоксин	100.01	100.04	99.67	99.95	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-121.45	-336.06	65.52	100.93
VS_6	Церебровин	100.39	100.11	99.69	99.98	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	21.39	138.66	74.57	100.57
VS_7	Герба спокій	100.33	99.80	100.12	100.02	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	128.45	130.52	124.09	88.09
VS_8	Калмавіс	100.26	100.09	99.86	99.99	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.77	100.05	99.85	100.14
VS_9	Кропу плоди	100.80	99.85	100.25	100.01	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	106.27	105.26	96.37	100.13
VS_10	Джонмера	100.13	99.95	99.84	99.98	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	100.43	101.01	99.46	100.00
VS_11	Картера	98.89	99.36	99.99	100.06	VS_36	Гліцини 2556.20	99.44	99.27	99.25	99.35
VS_12	Фенхель	100.59	99.96	99.69	100.01	VS_37	L-цистин 1349.21	100.08	100.06	98.83	99.68
VS_13	Виджайсар	100.19	99.96	99.76	100.01	VS_38	Гістидин 1610.20	116.92	99.54	100.82	100.37
VS_14	Анантавати	100.72	100.35	100.05	100.02	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.89	99.68	99.28	99.84
VS_15	Седафитон(таб)	99.96	99.73	99.52	99.99	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	21.35	296.06	353.83	-264.65
VS_16	Седафитон(капс)	99.88	100.09	99.58	100.06						
VS_17	М'ята листя	99.68	99.95	99.78	100.02						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.41	100.01	99.86	99.98						
VS_19	Потенза	99.75	100.12	99.75	100.02						
VS_20	Танікор	99.86	99.94	99.66	100.01						
VS_21	Лонгсил	100.03	99.98	99.55	99.91						
VS_22	Вимекс	100.20	100.16	99.82	99.98						
VS_23	Клоксімбекс	99.82	100.01	100.32	99.91						
VS_24	Вератол С	100.19	100.07	99.89	99.98						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.31	100.22	99.75	99.99						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	100.18	99.81	99.99	100.02	VS_26	Корамаг	94.82	110.71	100.01	94.42
VS_2	Нервоном	100.00	100.34	100.07	100.04	VS_27	DS 1941.21	97.39	99.16	100.01	100.08
VS_3	Антистрес	100.08	99.79	99.97	100.00	VS_28	DS 0214.20	100.14	98.59	100.01	100.28
VS_4	Стрессвіт	100.15	99.95	100.05	100.01	VS_29	Д-Фенилаланин	-1148.34	210.52	100.01	91.49
VS_5	Пробіоксин	100.11	99.88	100.03	100.03	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	322.99	-268.30	100.01	99.83
VS_6	Церебровин	100.02	100.01	99.99	100.01	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	191.26	144.34	100.01	98.89
VS_7	Герба спокій	100.28	99.29	100.00	100.01	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	80.24	124.42	100.01	109.92
VS_8	Калмавіс	100.19	99.77	100.03	100.02	VS_33	DL-карнітину 1602.21	100.79	99.68	100.01	99.95
VS_9	Кропу плоди	100.17	99.61	99.96	100.01	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	95.67	104.36	100.01	99.58
VS_10	Джонмера	100.02	100.34	100.00	100.00	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.78	100.70	100.01	99.98
VS_11	Картера	100.57	99.11	99.95	99.99	VS_36	Гліцини 2556.20	100.86	99.12	100.01	100.26
VS_12	Фенхель	99.98	100.07	100.03	99.99	VS_37	L-цистини 1349.21	100.68	99.79	100.01	100.12
VS_13	Виджайсар	100.16	99.64	100.03	100.00	VS_38	Гістидини 1610.20	126.65	99.09	100.01	99.76
VS_14	Анантавати	100.04	99.69	100.04	100.01	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.44	99.70	100.01	99.97
VS_15	Седафитон(таб)	100.38	99.46	100.01	100.00	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-66.98	315.63	100.01	357.18
VS_16	Седафитон(капс)	100.17	99.84	100.01	99.97						
VS_17	М'яти листя	100.08	99.76	99.94	99.99						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.07	99.83	100.03	100.01						
VS_19	Потенза	99.88	100.18	99.98	99.98						
VS_20	Тавикор	100.09	99.78	100.00	100.02						
VS_21	Лонгсил	99.81	99.71	100.02	100.04						
VS_22	Вимекс	100.02	99.93	99.99	100.01						
VS_23	Клоксимбекс	100.07	99.62	100.00	100.05						
VS_24	Вератол С	100.04	100.02	100.02	100.01						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.07	99.99	100.03	99.99						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.76	100.06	100.20	100.01	VS_26	Корамаг	82.69	92.44	106.04	100.02
VS_2	Нервоном	100.69	99.83	100.12	100.01	VS_27	DS 1941.21	95.19	100.42	99.77	100.02
VS_3	Антистрес	98.73	99.94	100.02	100.02	VS_28	DS 0214.20	99.52	100.87	99.56	100.02
VS_4	Стрессвіт	100.61	99.91	99.89	100.06	VS_29	Д-Фенилаланин	-5830.74	37.60	204.18	100.02
VS_5	Пробіоксин	99.80	99.92	99.99	99.98	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	417.93	450.83	70.76	100.02
VS_6	Церебровин	100.96	99.95	100.16	99.98	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	296.55	70.91	124.33	100.02
VS_7	Герба спокій	100.66	100.33	99.75	100.01	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	86.52	82.62	125.10	100.02
VS_8	Калмавіс	100.46	99.95	99.94	100.00	VS_33	DL-карнітину 1602.21	101.39	100.01	99.75	100.02
VS_9	Кропу плоди	99.78	100.09	100.16	100.02	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	96.28	96.29	99.25	100.02
VS_10	Джонмера	99.82	99.76	100.11	100.04	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.08	99.23	100.06	100.02
VS_11	Картера	99.41	100.54	100.07	100.06	VS_36	Гліцини 2556.20	101.05	100.63	99.44	100.02
VS_12	Фенхель	100.32	99.87	99.94	100.01	VS_37	L-цистини 1349.21	101.28	99.87	99.40	100.02
VS_13	Виджайсар	99.73	100.00	99.59	100.00	VS_38	Гістидини 1610.20	207.51	100.68	99.71	100.02
VS_14	Анантавати	100.19	99.87	99.68	100.04	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.80	100.16	99.36	100.02
VS_15	Седафитон(таб)	100.60	100.08	99.78	100.03	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-452.01	-83.03	675.20	100.02
VS_16	Седафитон(капс)	100.65	99.86	99.95	100.10						
VS_17	М'яти листя	98.03	99.90	99.99	100.01						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.77	99.90	99.94	100.03						
VS_19	Потенза	98.83	99.69	100.20	100.11						
VS_20	Тавикор	99.35	100.00	99.87	99.97						
VS_21	Лонгсил	99.44	100.06	99.83	99.97						
VS_22	Вимекс	99.35	99.79	100.49	100.01						
VS_23	Клоксимбекс	99.90	100.16	100.39	99.95						
VS_24	Вератол С	99.98	99.86	100.03	100.02						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.05	99.79	100.13	100.03						

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	98.90	100.82	100.06	99.82	VS_26	Корамаг	79.51	102.09	97.95	92.70
VS_2	Нервоном	97.75	100.90	100.54	99.83	VS_27	DS 1941.21	93.50	100.48	100.43	99.76
VS_3	Антистрес	97.58	100.99	100.73	99.77	VS_28	DS 0214.20	98.24	99.01	100.72	100.13
VS_4	Стрессвіт	98.17	100.82	100.56	99.91	VS_29	Д-Фенилаланин	-3826.95	341.47	-50.24	141.35
VS_5	Пробіоксин	98.43	100.83	100.44	99.78	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	728.75	-70.25	153.56	113.44
VS_6	Церебровин	99.16	100.57	100.32	99.77	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	334.17	141.46	101.90	118.77
VS_7	Герба спокій	100.21	100.56	100.72	100.01	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	58.19	96.10	66.88	112.45
VS_8	Калмавіс	99.16	100.68	100.41	99.97	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.64	100.21	101.14	100.34
VS_9	Кропу плоди	98.70	100.14	99.72	99.99	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	92.73	101.58	103.44	99.25
VS_10	Джонмера	98.31	101.07	100.88	99.78	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	96.93	101.06	100.49	99.98
VS_11	Картера	99.73	100.17	100.19	100.04	VS_36	Гліцини 2556.20	100.28	99.76	101.07	98.67
VS_12	Фенхель	98.52	100.14	100.49	99.74	VS_37	L-цистини 1349.21	99.69	100.87	100.66	99.52
VS_13	Виджайсар	98.71	100.10	100.63	99.85	VS_38	Гістидини 1610.20	139.27	98.84	100.19	99.49
VS_14	Анантавати	98.60	100.59	100.27	100.10	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	98.97	100.39	101.32	99.09
VS_15	Седафитон(таб)	99.56	101.06	100.21	99.81	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-413.36	398.78	-689.68	692.13
VS_16	Седафитон(капс)	99.24	101.18	100.27	100.00						
VS_17	М'яти листя	97.69	101.28	100.41	99.83						
VS_18	Моринга-Йоруба	98.11	101.01	101.12	99.81						
VS_19	Потенза	96.71	101.68	100.54	99.78						
VS_20	Тавикор	98.22	100.77	100.63	99.97						
VS_21	Лонгсил	98.09	100.18	100.37	99.80						
VS_22	Вимекс	97.69	101.29	99.70	99.81						
VS_23	Клоксимбекс	99.38	100.45	100.28	100.08						
VS_24	Вератол С	98.42	100.77	100.67	99.87						
VS_25	Корвалтаб Метео	98.44	100.74	100.29	99.69						

Таблиця 4.2г ЦЕФОТАКСИМ НАТРІЮ

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	97.87	98.45	100.08	100.17	VS_26	Корамар	63.66	109.16	107.08	144.89
VS_2	Нервоном	100.28	98.57	99.33	99.90	VS_27	DS 1941.21	70.15	98.34	99.57	99.69
VS_3	Антистрес	100.99	98.80	99.41	100.41	VS_28	DS 0214.20	101.43	101.10	99.00	98.08
VS_4	Стрессовит	101.52	98.79	99.39	100.10	VS_29	Д-Фенилаланин	-13419.31	-179.02	370.78	219.79
VS_5	Пробіоксин	99.63	98.80	99.74	100.05	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	2121.55	-334.95	40.20	97.25
VS_6	Церебровин	97.17	99.15	100.05	100.16	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	1024.53	71.35	82.22	91.71
VS_7	Герба спокій	98.86	99.13	99.42	100.12	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	-80.50	140.48	149.94	47.59
VS_8	Калмавіс	100.34	99.09	99.67	100.10	VS_33	DL-карнітину 1602.21	107.34	100.03	98.61	100.53
VS_9	Кропу плоди	99.47	99.53	100.63	100.08	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	49.51	105.37	95.60	100.70
VS_10	Джомера	97.99	98.68	99.21	100.16	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	97.73	99.88	99.46	100.06
VS_11	Картера	103.04	98.36	100.20	100.27	VS_36	Гліцини 2556.20	106.96	99.20	98.41	98.13
VS_12	Фенхель	98.56	99.88	99.54	100.18	VS_37	L-цистин 1349.21	106.24	98.90	99.28	99.15
VS_13	Виджайсар	101.66	100.00	99.69	100.30	VS_38	Гістидин 1610.20	462.90	100.93	100.44	101.64
VS_14	Анантавати	100.28	99.75	99.96	100.04	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	103.46	98.82	98.01	99.82
VS_15	Седафитон(таб)	101.71	98.18	100.23	100.24	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-1690.18	-74.59	1085.73	-1885.06
VS_16	Седафитон(капс)	98.90	98.41	100.09	100.35						
VS_17	М'ята листя	99.24	98.01	100.11	100.22						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.90	98.79	99.17	100.16						
VS_19	Потенза	99.05	97.79	99.81	100.22						
VS_20	Танікор	99.99	98.70	99.72	100.05						
VS_21	Лонгсил	95.84	99.97	100.04	99.80						
VS_22	Вимекс	100.24	98.15	100.41	100.12						
VS_23	Клоксимбекс	98.21	99.27	99.47	99.49						
VS_24	Вератол С	99.30	99.05	99.36	100.09						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.20	99.05	99.72	100.24						

Таблиця 4.2с ФУРОСЕМІД

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	100.00	99.97	100.01	100.01	VS_26	Корамар	98.01	99.69	100.55	97.42
VS_2	Нервоном	99.94	100.03	99.98	100.03	VS_27	DS 1941.21	99.12	99.96	99.97	100.04
VS_3	Антистрес	99.90	100.01	100.02	100.00	VS_28	DS 0214.20	99.91	100.15	99.96	100.11
VS_4	Стрессовит	99.95	100.00	99.98	100.01	VS_29	Д-Фенилаланин	-305.37	133.49	106.45	93.42
VS_5	Пробіоксин	99.93	100.01	99.98	100.02	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	159.74	142.23	95.36	100.27
VS_6	Церебровин	99.91	100.03	99.99	100.00	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	129.11	97.02	98.97	100.72
VS_7	Герба спокій	99.99	100.05	100.01	100.00	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	93.84	99.35	104.55	103.32
VS_8	Калмавіс	99.96	99.99	99.99	100.01	VS_33	DL-карнітину 1602.21	100.14	100.01	99.97	99.98
VS_9	Кропу плоди	99.95	99.94	100.05	100.01	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	98.58	99.73	99.63	100.00
VS_10	Джомера	99.90	100.10	99.99	100.00	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.83	99.96	99.96	100.01
VS_11	Картера	100.05	100.00	100.03	99.99	VS_36	Гліцини 2556.20	100.15	100.07	99.90	100.16
VS_12	Фенхель	99.89	100.02	99.97	99.99	VS_37	L-цистин 1349.21	100.09	100.01	99.86	100.10
VS_13	Виджайсар	99.93	100.01	99.99	100.00	VS_38	Гістидин 1610.20	108.61	100.04	100.11	99.89
VS_14	Анантавати	99.92	99.96	99.98	100.00	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.00	100.04	99.89	100.04
VS_15	Седафитон(таб)	100.00	100.00	99.96	100.00	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	51.86	85.91	155.42	208.24
VS_16	Седафитон(капс)	99.96	99.98	99.97	99.99						
VS_17	М'ята листя	99.91	100.00	100.03	100.00						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.90	100.06	99.98	100.01						
VS_19	Потенза	99.85	99.98	99.99	100.00						
VS_20	Танікор	99.91	100.01	99.99	100.00						
VS_21	Лонгсил	99.85	100.03	99.96	100.03						
VS_22	Вимекс	99.90	99.88	100.03	100.01						
VS_23	Клоксимбекс	99.92	100.01	100.04	100.03						
VS_24	Вератол С	99.90	100.03	99.99	100.01						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.92	99.98	100.00	100.01						

Таблиця 7.4г ТЕОФЛІН БЕЗВОДНИЙ

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	100.17	99.98	99.98	100.02	VS_26	Корамар	109.17	95.55	101.31	92.58
VS_2	Нервоном	100.22	99.77	99.89	100.03	VS_27	DS 1941.21	106.09	100.24	99.93	100.08
VS_3	Антистрес	100.18	100.12	100.03	100.00	VS_28	DS 0214.20	100.05	100.43	99.89	100.35
VS_4	Стрессовит	99.90	99.90	99.95	100.00	VS_29	Д-Фенилаланин	2597.21	62.95	115.81	101.46
VS_5	Пробіоксин	100.20	99.90	99.94	100.01	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-294.72	320.41	90.94	102.09
VS_6	Церебровин	100.65	99.90	99.97	100.00	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-89.81	78.23	94.76	101.05
VS_7	Герба спокій	100.01	100.11	100.01	100.01	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	143.00	83.99	108.79	113.29
VS_8	Калмавіс	100.10	99.87	99.96	100.04	VS_33	DL-карнітину 1602.21	98.68	99.94	99.89	100.02
VS_9	Кропу плоди	100.03	100.00	100.07	100.03	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	110.28	97.28	99.13	99.20
VS_10	Джомера	100.43	99.89	99.96	99.97	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	100.67	99.40	99.87	99.97
VS_11	Картера	99.42	100.17	100.06	100.02	VS_36	Гліцини 2556.20	98.70	100.28	99.74	100.06
VS_12	Фенхель	100.44	99.90	99.95	99.95	VS_37	L-цистин 1349.21	98.99	99.87	99.70	100.07
VS_13	Виджайсар	100.08	99.89	99.98	100.02	VS_38	Гістидин 1610.20	36.80	100.21	100.23	99.63
VS_14	Анантавати	100.28	99.81	99.95	100.03	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.48	100.03	99.72	99.81
VS_15	Седафитон(таб)	99.76	100.06	99.93	99.99	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	428.20	-3.10	207.69	472.98
VS_16	Седафитон(капс)	100.22	99.89	99.93	99.98						
VS_17	М'ята листя	100.09	99.90	100.06	100.01						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.29	99.96	99.94	99.99						
VS_19	Потенза	100.33	99.93	99.98	99.92						
VS_20	Танікор	100.20	99.94	99.99	100.03						
VS_21	Лонгсил	100.91	100.00	99.92	100.01						
VS_22	Вимекс	100.14	99.78	100.01	100.01						
VS_23	Клоксимбекс	100.36	99.99	100.00	100.06						
VS_24	Вератол С	100.30	99.90	99.96	100.00						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.35	99.78	99.96	99.96						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.70	99.81	99.97	100.02	VS_26	Корамаг	106.18	92.80	98.19	95.16
VS_2	Нервоном	100.12	99.50	100.10	100.03	VS_27	DS 1941.21	102.28	100.43	100.05	100.08
VS_3	Антистрес	99.82	100.04	99.88	100.00	VS_28	DS 0214.20	99.83	100.45	100.10	100.25
VS_4	Стрессвіт	99.84	100.12	100.03	100.00	VS_29	Д-Фенилаланин	1201.34	-16.06	68.69	89.75
VS_5	Пробіоксин	99.78	99.91	100.02	100.02	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-162.07	197.77	111.66	98.77
VS_6	Церебровин	99.80	99.67	99.97	100.02	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	13.51	56.04	105.03	97.21
VS_7	Герба спокій	99.33	100.23	99.93	100.00	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	122.84	80.02	89.11	108.50
VS_8	Калмавіс	99.68	99.96	100.01	100.01	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.20	100.01	100.10	99.92
VS_9	Кропу плоди	99.55	100.26	99.88	100.00	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	103.71	96.98	101.01	99.59
VS_10	Джонмера	99.95	99.25	99.97	100.00	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	100.24	99.49	100.11	99.97
VS_11	Картера	99.10	100.43	99.89	99.99	VS_36	Гліцин 2556.20	98.97	100.27	100.34	100.29
VS_12	Фенхель	99.91	100.02	100.01	100.00	VS_37	L-цистин 1349.21	99.26	100.19	100.33	100.11
VS_13	Виджайсар	99.64	100.38	100.01	100.00	VS_38	Гістидин 1610.20	84.35	100.21	99.78	99.80
VS_14	Анантавати	99.85	100.19	100.03	99.99	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.89	100.09	100.34	100.00
VS_15	Седафитон(таб)	99.44	100.46	100.01	100.00	VS_40	Ціанкобаламін 1008.21	270.23	-13.59	-49.31	305.66
VS_16	Седафитон(капс)	99.69	100.04	100.00	99.96						
VS_17	М'яти листя	99.71	100.37	99.89	99.99						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.98	99.85	100.00	100.01						
VS_19	Потенза	100.24	99.62	99.96	99.98						
VS_20	Тавикор	99.82	99.93	99.98	100.02						
VS_21	Лонгсил	100.06	99.96	100.03	100.04						
VS_22	Вимекс	99.97	99.86	99.95	100.00						
VS_23	Клоксимбекс	99.81	99.80	99.93	100.03						
VS_24	Вератол С	99.95	99.70	99.99	100.01						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.85	99.87	100.01	100.00						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.98	100.04	100.05	100.00	VS_26	Корамаг	89.68	96.91	101.19	91.33
VS_2	Нервоном	100.63	99.91	99.97	100.03	VS_27	DS 1941.21	95.51	100.19	100.01	100.07
VS_3	Антистрес	99.60	100.09	100.13	99.97	VS_28	DS 0214.20	100.09	100.20	100.02	100.36
VS_4	Стрессвіт	100.15	99.97	100.03	99.98	VS_29	Д-Фенилаланин	-3406.43	93.52	112.61	89.82
VS_5	Пробіоксин	99.94	99.97	100.01	100.00	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	340.59	250.45	90.66	101.57
VS_6	Церебровин	100.12	99.96	100.06	99.96	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	258.53	88.28	92.24	101.70
VS_7	Герба спокій	99.89	100.08	100.12	99.97	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	82.58	89.26	110.44	113.01
VS_8	Калмавіс	100.23	99.96	100.03	99.99	VS_33	DL-карнітину 1602.21	101.30	99.95	99.98	99.95
VS_9	Кропу плоди	100.00	100.00	100.18	100.00	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	93.90	98.18	98.98	99.42
VS_10	Джонмера	100.12	99.98	100.05	99.96	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.68	99.64	99.92	99.96
VS_11	Картера	99.83	100.18	100.16	99.96	VS_36	Гліцин 2556.20	100.91	100.19	99.76	100.23
VS_12	Фенхель	100.02	99.93	100.00	99.93	VS_37	L-цистин 1349.21	101.04	99.96	99.68	100.14
VS_13	Виджайсар	99.80	99.95	100.04	99.97	VS_38	Гістидин 1610.20	182.89	100.08	100.36	99.57
VS_14	Анантавати	99.91	99.89	100.02	99.98	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.11	100.06	99.75	99.92
VS_15	Седафитон(таб)	100.30	100.09	99.96	99.96	VS_40	Ціанкобаламін 1008.21	-223.21	44.72	224.50	494.38
VS_16	Седафитон(капс)	100.22	99.98	99.99	99.94						
VS_17	М'яти листя	99.15	100.01	100.11	99.98						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.99	100.00	100.04	99.96						
VS_19	Потенза	99.81	100.01	100.06	99.91						
VS_20	Тавикор	99.83	100.01	100.06	99.98						
VS_21	Лонгсил	99.47	99.98	99.98	100.01						
VS_22	Вимекс	99.86	99.93	100.07	99.99						
VS_23	Клоксимбекс	99.86	100.00	100.10	100.06						
VS_24	Вератол С	100.08	99.97	100.04	99.98						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.11	99.90	100.03	99.95						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	8.52	10.75	10.49	17.05	VS_26	Корамаг	-41.21	-13.37	-18.26	-836.60
VS_2	Нервоном	8.95	7.88	9.25	14.24	VS_27	DS 1941.21	-18.16	-3.62	-2.61	18.46
VS_3	Антистрес	3.89	6.20	5.78	12.32	VS_28	DS 0214.20	-2.29	5.30	4.95	54.76
VS_4	Стрессвіт	4.66	3.67	3.55	5.47	VS_29	Д-Фенилаланин	-5148.48	1413.67	-590.65	-4375.73
VS_5	Пробіоксин	0.03	0.60	1.15	8.50	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	177.39	606.47	373.91	-447.62
VS_6	Церебровин	0.65	1.84	1.77	8.14	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	841.13	365.53	617.27	-781.43
VS_7	Герба спокій	11.53	12.89	12.22	17.66	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	-161.62	65.73	-208.62	1544.21
VS_8	Калмавіс	-5.09	-4.92	-4.95	0.61	VS_33	DL-карнітину 1602.21	4.28	-1.53	3.95	-21.41
VS_9	Кропу плоди	-2.27	-3.44	-2.94	0.53	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	-31.56	12.73	54.37	-33.99
VS_10	Джонмера	0.94	4.29	4.29	7.05	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	-2.28	1.50	5.72	-3.79
VS_11	Картера	4.26	-0.66	-2.17	1.05	VS_36	Гліцин 2556.20	4.39	-0.80	6.37	86.46
VS_12	Фенхель	4.52	4.70	4.63	7.59	VS_37	L-цистин 1349.21	2.04	-1.06	4.33	26.78
VS_13	Виджайсар	12.56	12.34	12.13	17.84	VS_38	Гістидин 1610.20	108.57	-3.63	-9.67	-20.76
VS_14	Анантавати	4.05	3.87	3.88	2.95	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	0.04	-0.24	7.69	19.67
VS_15	Седафитон(таб)	1.80	-2.03	-3.07	1.81	VS_40	Ціанкобаламін 1008.21	-513.83	407.95	-4111.84	29990.08
VS_16	Седафитон(капс)	3.61	1.49	1.11	-7.62						
VS_17	М'яти листя	3.98	2.99	1.68	5.14						
VS_18	Моринга-Йоруба	2.06	2.93	3.06	9.03						
VS_19	Потенза	10.56	11.25	11.33	9.78						
VS_20	Тавикор	3.21	2.12	2.10	8.38						
VS_21	Лонгсил	0.98	0.42	0.44	10.27						
VS_22	Вимекс	6.63	4.60	4.24	7.69						
VS_23	Клоксимбекс	4.31	6.15	6.54	13.54						
VS_24	Вератол С	3.35	4.57	4.74	8.44						
VS_25	Корвалтаб Метео	4.85	5.18	5.00	8.92						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.34	99.65	99.97	100.01	VS_26	Корамаг	105.40	118.37	98.03	92.84
VS_2	Нервоном	99.20	100.43	100.08	100.03	VS_27	DS 1941.21	99.22	98.93	100.08	100.10
VS_3	Антистрес	100.52	99.88	99.91	99.98	VS_28	DS 0214.20	100.05	97.78	100.14	100.35
VS_4	Стрессовит	99.59	100.21	100.04	99.98	VS_29	Д-Фенилаланин	3008.66	134.01	62.98	86.42
VS_5	Пробіоксин	99.76	100.00	100.03	100.02	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	218.49	-780.76	111.88	98.53
VS_6	Церебровин	99.15	100.00	99.96	100.01	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	73.96	153.85	103.02	96.36
VS_7	Герба спокій	99.43	98.91	99.96	99.99	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	94.52	143.56	88.68	112.78
VS_8	Калмавіс	99.35	99.94	100.03	100.01	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.47	99.88	100.13	99.87
VS_9	Кропу плоди	98.89	99.99	99.88	99.98	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	96.70	108.63	100.93	99.38
VS_10	Джонмера	99.73	100.06	99.98	99.98	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.82	101.69	100.10	99.94
VS_11	Картера	100.53	98.81	99.90	99.96	VS_36	Гліцин 2556.20	99.84	98.58	100.35	100.39
VS_12	Фенхель	99.44	100.49	100.04	99.97	VS_37	L-цистин 1349.21	99.51	100.17	100.34	100.15
VS_13	Виджайсар	99.80	100.34	100.04	99.99	VS_38	Гістидин 1610.20	50.62	98.76	99.80	99.69
VS_14	Анантавати	99.31	100.15	100.04	99.98	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.12	99.65	100.36	99.97
VS_15	Седафитон(таб)	99.70	99.60	100.03	99.99	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	285.26	469.01	-61.24	410.87
VS_16	Седафитон(капс)	99.31	100.05	100.01	99.93						
VS_17	М'ята листя	100.84	100.09	99.90	99.96						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.29	99.78	100.02	100.00						
VS_19	Потенза	99.96	100.16	99.95	99.96						
VS_20	Танкор	100.16	99.82	100.00	100.01						
VS_21	Лонгсил	99.93	99.76	100.04	100.04						
VS_22	Вимекс	99.48	100.19	99.96	99.99						
VS_23	Клоксимбекс	99.89	99.33	99.93	100.03						
VS_24	Вератол С	99.80	100.04	100.00	99.99						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.51	100.25	100.02	99.97						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	97.86	98.02	100.05	100.06	VS_26	Корамаг	56.23	131.04	85.09	85.46
VS_2	Нервоном	98.57	98.38	100.70	100.10	VS_27	DS 1941.21	75.81	98.09	100.88	100.23
VS_3	Антистрес	98.76	100.79	99.73	100.01	VS_28	DS 0214.20	100.05	99.66	101.68	100.74
VS_4	Стрессовит	99.08	99.11	100.60	100.00	VS_29	Д-Фенилаланин	-16216.50	-213.13	-171.30	74.58
VS_5	Пробіоксин	98.77	98.95	100.31	100.07	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	2068.36	-939.29	145.71	98.46
VS_6	Церебровин	99.18	99.29	99.94	100.04	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	887.41	37.66	92.49	95.02
VS_7	Герба спокій	98.76	98.02	100.30	100.02	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	-24.83	127.97	52.31	125.05
VS_8	Калмавіс	100.44	98.66	100.48	100.05	VS_33	DL-карнітину 1602.21	104.92	100.26	101.09	99.84
VS_9	Кропу плоди	99.62	100.06	100.13	100.03	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	67.76	108.85	102.78	98.80
VS_10	Джонмера	98.60	100.20	99.92	100.00	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	95.93	100.75	100.62	99.93
VS_11	Картера	101.52	96.73	99.90	99.98	VS_36	Гліцин 2556.20	104.82	98.29	102.13	100.74
VS_12	Фенхель	98.35	101.41	100.26	99.98	VS_37	L-цистин 1349.21	104.51	99.19	101.57	100.32
VS_13	Виджайсар	99.95	99.75	100.56	100.02	VS_38	Гістидин 1610.20	437.93	99.59	100.16	99.39
VS_14	Анантавати	99.81	99.31	100.76	100.00	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	101.28	98.91	102.16	99.97
VS_15	Седафитон(таб)	101.50	98.36	100.12	100.01	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-1823.28	179.27	-654.69	738.59
VS_16	Седафитон(капс)	99.55	98.56	100.05	99.92						
VS_17	М'ята листя	95.45	98.34	99.53	100.00						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.35	99.77	100.31	100.02						
VS_19	Потенза	97.30	99.23	99.82	99.94						
VS_20	Танкор	98.72	98.61	100.11	100.06						
VS_21	Лонгсил	95.62	100.28	100.23	100.10						
VS_22	Вимекс	98.43	98.06	100.11	100.03						
VS_23	Клоксимбекс	98.25	97.88	100.25	100.12						
VS_24	Вератол С	98.96	99.52	100.28	100.02						
VS_25	Корвалтаб Метео	98.87	99.23	100.37	99.99						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.92	100.15	100.12	99.95	VS_26	Корамаг	103.61	96.91	102.75	95.78
VS_2	Нервоном	99.93	99.99	100.06	99.95	VS_27	DS 1941.21	102.27	100.30	100.05	99.96
VS_3	Антистрес	100.00	100.14	100.19	99.93	VS_28	DS 0214.20	99.88	99.93	99.95	100.13
VS_4	Стрессовит	99.81	100.02	100.11	99.95	VS_29	Д-Фенилаланин	1235.74	67.05	92.50	107.11
VS_5	Пробіоксин	99.93	100.01	100.07	99.94	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-58.45	225.46	88.74	102.70
VS_6	Церебровин	100.08	99.95	100.06	99.93	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	21.28	95.41	96.91	102.84
VS_7	Герба спокій	99.83	100.03	100.11	99.96	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	116.65	88.30	110.67	107.90
VS_8	Калмавіс	99.87	99.98	100.09	99.98	VS_33	DL-карнітину 1602.21	99.31	99.90	100.13	100.01
VS_9	Кропу плоди	99.88	100.04	100.16	99.97	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	103.89	98.16	99.39	99.55
VS_10	Джонмера	100.05	99.91	100.20	99.92	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	100.14	99.66	100.00	99.95
VS_11	Картера	99.66	100.22	100.20	99.97	VS_36	Гліцин 2556.20	99.31	100.14	100.03	99.82
VS_12	Фенхель	100.04	99.93	100.14	99.90	VS_37	L-цистин 1349.21	99.42	99.97	99.79	99.93
VS_13	Виджайсар	99.86	99.90	100.14	99.95	VS_38	Гістидин 1610.20	72.54	99.99	100.62	99.73
VS_14	Анантавати	99.92	99.92	100.07	100.00	VS_39	Глюкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.65	100.05	99.96	99.74
VS_15	Седафитон(таб)	99.75	100.15	99.95	99.94	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	246.01	70.31	179.89	349.02
VS_16	Седафитон(капс)	99.92	100.06	99.95	99.95						
VS_17	М'ята листя	99.95	100.07	100.29	99.92						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.95	99.95	100.08	99.93						
VS_19	Потенза	100.04	100.13	100.15	99.91						
VS_20	Танкор	99.96	100.04	100.13	99.96						
VS_21	Лонгсил	100.21	99.94	99.98	99.95						
VS_22	Вимекс	99.92	100.13	100.22	99.94						
VS_23	Клоксимбекс	100.00	100.06	100.17	99.98						
VS_24	Вератол С	99.99	99.98	100.14	99.94						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.95	99.94	100.15	99.89						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферніксил	99.03	99.96	100.03	100.12	VS_26	Корамаг	141.64	93.79	101.84	84.61
VS_2	Нервоном	103.19	99.68	99.91	100.15	VS_27	DS 1941.21	111.03	100.29	99.94	100.33
VS_3	Антистрес	101.23	100.12	100.08	100.09	VS_28	DS 0214.20	101.67	100.49	99.88	100.82
VS_4	Стресовит	101.48	99.85	99.96	100.03	VS_29	Д-Фенілаланин	4918.68	75.20	128.38	68.47
VS_5	Пробіоксин	100.70	99.85	99.97	100.15	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-1382.20	397.34	89.08	96.37
VS_6	Церебровин	99.45	99.84	100.03	100.13	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-312.67	72.65	94.04	91.27
VS_7	Гербі спокій	97.65	100.10	100.05	100.02	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	215.19	78.55	111.27	121.85
VS_8	Калмавіс	99.98	99.82	99.98	100.08	VS_33	DL-карнітину 1602.21	98.72	99.86	99.88	99.79
VS_9	Кропу плоди	99.59	99.92	100.13	100.08	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	115.02	96.35	98.98	98.64
VS_10	Джонмера	101.45	99.86	100.00	100.07	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	103.87	99.20	99.88	99.95
VS_11	Картера	96.32	100.23	100.12	100.00	VS_36	Гліцин 2556.20	96.79	100.32	99.68	101.01
VS_12	Фенхель	101.35	99.79	99.98	100.06	VS_37	L-цистин 1349.21	98.74	99.82	99.67	100.46
VS_13	Виджайсар	99.48	99.86	100.01	100.09	VS_38	Гістидин 1610.20	87.13	100.17	100.28	99.42
VS_14	Анапавати	100.75	99.75	99.97	100.01	VS_39	показаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.21	100.01	99.66	100.19
VS_15	Седафитон(таб)	98.66	100.08	99.97	100.08	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	893.76	-24.84	246.46	684.12
VS_16	Седафитон(капс)	99.53	99.85	99.99	99.96						
VS_17	М'яті листя	100.96	99.87	100.12	100.16						
VS_18	Моринга-Йоруба	101.72	99.94	99.97	100.04						
VS_19	Потенза	104.41	99.93	100.03	99.93						
VS_20	Танкор	100.87	99.94	100.03	100.08						
VS_21	Лонгсил	101.54	99.93	99.96	100.16						
VS_22	Вимекс	103.11	99.70	100.04	100.12						
VS_23	Клоксімбекс	100.04	99.93	100.03	100.16						
VS_24	Вератол С	101.66	99.85	99.99	100.07						
VS_25	Корвалтаб Метео	102.35	99.68	99.98	100.05						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферніксил	97.47	99.87	99.19	99.99	VS_26	Корамаг	169.91	116.37	85.68	115.58
VS_2	Нервоном	101.21	100.66	98.51	99.89	VS_27	DS 1941.21	134.85	99.01	100.43	99.81
VS_3	Антистрес	99.30	99.81	100.10	100.07	VS_28	DS 0214.20	99.75	98.88	101.22	99.30
VS_4	Стресовит	99.24	100.21	99.51	100.03	VS_29	Д-Фенілаланин	15247.28	161.05	-191.10	152.50
VS_5	Пробіоксин	99.69	100.20	99.24	99.96	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-2659.36	-724.81	73.29	102.90
VS_6	Церебровин	100.30	100.35	98.65	100.01	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-985.73	164.43	-13.24	102.96
VS_7	Гербі спокій	97.95	99.66	99.96	100.08	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	351.45	154.76	87.42	79.50
VS_8	Калмавіс	99.18	100.24	99.68	100.03	VS_33	DL-карнітину 1602.21	91.65	100.29	99.92	100.34
VS_9	Кропу плоди	100.14	99.98	100.05	100.06	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	152.88	109.84	99.74	100.24
VS_10	Джонмера	100.48	100.13	99.00	100.01	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	103.94	101.97	98.70	100.06
VS_11	Картера	93.66	98.84	99.54	100.16	VS_36	Гліцин 2556.20	90.83	98.82	100.28	98.84
VS_12	Фенхель	101.27	100.24	99.75	100.05	VS_37	L-цистин 1349.21	93.24	100.21	99.74	99.49
VS_13	Виджайсар	99.36	100.11	100.28	100.07	VS_38	Гістидин 1610.20	-215.53	99.39	100.21	100.63
VS_14	Анапавати	101.38	100.63	100.93	100.08	VS_39	показаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	96.01	99.58	100.22	99.73
VS_15	Седафитон(таб)	96.24	99.59	99.68	100.04	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	2047.84	443.40	-522.25	-512.05
VS_16	Седафитон(капс)	98.57	100.24	99.11	100.17						
VS_17	М'яті листя	100.78	99.95	99.40	100.08						
VS_18	Моринга-Йоруба	100.52	100.18	99.40	100.01						
VS_19	Потенза	100.53	100.36	98.72	100.05						
VS_20	Танкор	99.71	100.00	99.14	100.06						
VS_21	Лонгсил	103.43	100.20	99.47	99.88						
VS_22	Вимекс	101.03	100.37	99.06	100.02						
VS_23	Клоксімбекс	100.38	100.10	99.21	99.90						
VS_24	Вератол С	100.32	100.31	99.30	100.02						
VS_25	Корвалтаб Метео	101.42	100.51	99.44	100.03						

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферніксил	61.00	99.00	99.40	100.15	VS_26	Корамаг	-10.66	144.48	156.16	18.00
VS_2	Нервоном	86.76	100.23	98.73	100.17	VS_27	DS 1941.21	-7.63	96.10	93.99	103.57
VS_3	Антистрес	78.75	97.84	96.56	101.35	VS_28	DS 0214.20	84.15	91.52	89.71	105.13
VS_4	Стресовит	80.68	99.37	95.59	99.15	VS_29	Д-Фенілаланин	-37459.30	385.11	1634.04	-566.42
VS_5	Пробіоксин	74.64	99.32	97.97	101.21	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	3856.20	-2500.18	-17.18	-76.42
VS_6	Церебровин	70.01	98.91	99.74	101.37	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	2218.22	348.60	437.11	-206.96
VS_7	Гербі спокій	68.27	96.45	95.71	99.07	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	-240.68	239.23	269.73	211.11
VS_8	Калмавіс	75.65	99.53	96.88	99.35	VS_33	DL-карнітину 1602.21	97.02	98.43	93.32	92.58
VS_9	Кропу плоди	73.56	98.88	97.96	98.97	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	-47.88	126.83	103.34	91.05
VS_10	Джонмера	80.21	99.34	98.41	100.42	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	75.66	104.56	98.64	97.55
VS_11	Картера	75.20	96.38	97.71	97.20	VS_36	Гліцин 2556.20	89.22	94.32	91.90	120.12
VS_12	Фенхель	77.92	98.82	95.90	101.07	VS_37	L-цистин 1349.21	92.38	99.68	95.88	106.39
VS_13	Виджайсар	75.43	99.02	94.94	99.97	VS_38	Гістидин 1610.20	1292.86	94.30	92.81	99.96
VS_14	Анапавати	73.87	100.95	94.81	98.51	VS_39	показаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	81.68	97.60	91.55	107.74
VS_15	Седафитон(таб)	78.70	98.14	98.34	100.40	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-3814.70	1439.09	3456.38	-151.24
VS_16	Седафитон(капс)	72.29	99.91	99.18	97.74						
VS_17	М'яті листя	72.71	99.86	99.83	100.11						
VS_18	Моринга-Йоруба	79.38	98.30	95.89	100.48						
VS_19	Потенза	83.59	100.26	98.88	100.80						
VS_20	Танкор	79.10	98.74	98.57	99.85						
VS_21	Лонгсил	65.23	97.65	98.00	102.07						
VS_22	Вимекс	74.39	101.25	99.18	99.76						
VS_23	Клоксімбекс	69.62	97.70	99.32	99.40						
VS_24	Вератол С	78.11	99.20	96.90	100.06						
VS_25	Корвалтаб Метео	73.54	100.47	97.35	101.67						

Таблиця 4.2ад ПРОЗЕРИН

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	96.30	96.72	99.33	100.55	VS_26	Корамат	51.64	93.08	60.40	9.41
VS_2	Нервоном	101.11	94.57	101.73	100.75	VS_27	DS 1941.21	63.64	96.83	100.43	102.20
VS_3	Антистрес	95.26	96.22	97.24	100.61	VS_28	DS 0214.20	98.34	92.56	102.04	105.12
VS_4	Стрессвіт	99.75	98.70	99.86	100.03	VS_29	Д-Фенилаланин	-21093.08	121.84	-304.34	-173.54
VS_5	Пробіоксин	96.63	97.57	99.90	100.83	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	1515.13	-1957.75	299.39	48.22
VS_6	Церебровин	94.74	95.58	99.47	100.74	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	1211.27	4.91	196.66	1.07
VS_7	Герба спокій	94.92	96.62	98.86	100.12	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	-68.90	82.11	-59.43	255.62
VS_8	Калмавіс	98.53	98.21	100.06	100.24	VS_33	DL-карнітину 1602.21	106.79	97.22	100.90	97.73
VS_9	Кропу плоди	96.49	100.70	98.46	100.07	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	42.70	109.28	114.67	90.85
VS_10	Джомера	96.78	95.21	98.62	100.37	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	95.92	100.94	101.49	99.25
VS_11	Картера	96.23	98.59	97.85	99.59	VS_36	Гліцин 2556.20	103.82	94.27	104.15	108.16
VS_12	Фенхель	96.60	95.89	98.90	100.47	VS_37	Л-цистин 1349.21	104.51	100.08	104.38	102.93
VS_13	Виджайсар	96.97	100.65	99.29	100.27	VS_38	Гістидин 1610.20	683.48	92.65	94.95	96.87
VS_14	Анагавати	97.45	102.68	99.99	99.72	VS_39	нокозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	99.11	97.07	104.49	101.56
VS_15	Седафитон(таб)	98.29	100.08	99.64	100.32	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-2034.40	941.38	-1799.46	3309.96
VS_16	Седафитон(капс)	96.90	99.11	99.83	99.27						
VS_17	М'яги листя	93.70	102.29	96.86	100.13						
VS_18	Моринга-Йоруба	97.45	96.21	99.51	100.48						
VS_19	Потенза	98.25	98.06	98.58	99.87						
VS_20	Танікор	96.39	96.81	99.37	100.58						
VS_21	Лонгсил	92.53	95.09	100.09	101.02						
VS_22	Вимекс	98.31	98.44	98.76	100.29						
VS_23	Клоксимбекс	95.08	92.11	99.15	100.75						
VS_24	Вератол С	97.46	95.93	99.30	100.39						
VS_25	Корвалтаб Метео	97.31	98.24	99.67	100.52						

Таблиця 4.2ае ДЛОКАІНУ ГІДРОХЛОРИД

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	104.04	101.07	99.51	99.82	VS_26	Корамат	62.70	81.65	79.14	64.35
VS_2	Нервоном	104.76	100.38	100.59	99.97	VS_27	DS 1941.21	69.73	101.84	100.56	100.32
VS_3	Антистрес	104.18	100.86	99.21	99.67	VS_28	DS 0214.20	104.04	100.83	101.21	101.49
VS_4	Стрессвіт	104.68	100.56	100.24	99.71	VS_29	Д-Фенилаланин	-6480.66	146.69	-445.60	-10.75
VS_5	Пробіоксин	103.25	100.59	99.95	99.89	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	1791.58	998.82	265.27	86.99
VS_6	Церебровин	98.72	100.42	99.09	99.85	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	1051.54	57.36	125.73	77.56
VS_7	Герба спокій	101.55	100.81	99.32	99.65	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	-133.52	37.49	-28.99	152.01
VS_8	Калмавіс	101.93	100.44	100.09	99.74	VS_33	DL-карнітину 1602.21	111.85	100.02	101.47	98.86
VS_9	Кропу плоди	102.52	100.53	98.10	99.67	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	36.19	89.67	110.69	97.98
VS_10	Джомера	103.13	100.57	99.84	99.74	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	102.84	98.62	100.72	99.53
VS_11	Картера	106.68	102.01	98.68	99.45	VS_36	Гліцин 2556.20	110.59	101.63	103.96	102.54
VS_12	Фенхель	101.11	99.96	100.25	99.75	VS_37	Л-цистин 1349.21	108.94	100.48	103.20	100.86
VS_13	Виджайсар	101.56	100.18	100.47	99.70	VS_38	Гістидин 1610.20	413.64	100.57	98.00	98.49
VS_14	Анагавати	100.43	99.98	99.88	99.65	VS_39	нокозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	106.86	101.07	104.15	100.28
VS_15	Седафитон(таб)	104.03	101.32	99.63	99.72	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-810.73	-128.22	-2003.06	1444.18
VS_16	Седафитон(капс)	101.96	100.71	99.43	99.39						
VS_17	М'яги листя	106.73	100.97	98.72	99.58						
VS_18	Моринга-Йоруба	103.54	100.54	100.02	99.76						
VS_19	Потенза	104.79	100.93	98.88	99.64						
VS_20	Танікор	103.40	100.80	100.02	99.73						
VS_21	Лонгсил	99.99	100.15	99.94	100.09						
VS_22	Вимекс	103.25	100.58	99.14	99.72						
VS_23	Клоксимбекс	101.15	100.53	98.78	99.93						
VS_24	Вератол С	103.14	100.51	99.84	99.72						
VS_25	Корвалтаб Метео	102.66	100.11	100.09	99.74						

Таблиця 4.2аф ДОПАМІН ГІДРОХЛОРИД

INTERPOLATION					EXTRAPOLATION						
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	39.10	41.94	98.40	97.64	VS_26	Корамат	260.50	257.10	181.56	201.58
VS_2	Нервоном	31.63	42.01	94.32	95.67	VS_27	DS 1941.21	136.85	31.22	93.31	100.01
VS_3	Антистрес	41.74	45.82	98.99	99.26	VS_28	DS 0214.20	30.10	26.41	89.31	95.54
VS_4	Стрессвіт	33.34	46.49	94.97	95.42	VS_29	Д-Фенилаланин	69490.54	58.41	1626.31	-1002.29
VS_5	Пробіоксин	33.81	44.24	96.11	98.98	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-8016.47	-12879.63	-278.62	-251.31
VS_6	Церебровин	33.93	41.32	98.58	100.78	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-3467.99	960.28	61.43	-445.84
VS_7	Герба спокій	32.24	39.64	97.50	95.76	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	598.69	634.82	482.34	-239.99
VS_8	Калмавіс	33.28	51.83	95.89	96.14	VS_33	DL-карнітину 1602.21	5.32	46.27	91.29	85.23
VS_9	Кропу плоди	32.71	43.50	100.12	95.08	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	180.22	173.62	70.48	102.29
VS_10	Джомера	37.03	42.36	97.22	99.28	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	44.18	68.69	93.60	93.95
VS_11	Картера	25.99	27.75	100.34	95.36	VS_36	Гліцин 2556.20	6.42	22.50	84.63	122.48
VS_12	Фенхель	41.27	49.49	95.98	101.34	VS_37	Л-цистин 1349.21	7.89	48.16	86.48	101.80
VS_13	Виджайсар	30.73	49.72	95.90	98.44	VS_38	Гістидин 1610.20	-1468.33	26.15	102.15	108.89
VS_14	Анагавати	32.22	60.66	94.69	94.44	VS_39	нокозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	23.35	34.64	83.85	114.20
VS_15	Седафитон(таб)	24.13	42.23	96.63	98.46	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	8069.97	5141.94	5690.89	-11276.74
VS_16	Седафитон(капс)	31.37	48.31	97.22	95.25						
VS_17	М'яги листя	47.33	47.22	101.58	101.43						
VS_18	Моринга-Йоруба	39.38	48.27	95.55	97.57						
VS_19	Потенза	49.32	50.38	98.71	99.71						
VS_20	Танікор	36.10	41.62	97.89	96.79						
VS_21	Лонгсил	46.61	43.14	96.06	99.20						
VS_22	Вимекс	41.73	52.92	98.39	98.09						
VS_23	Клоксимбекс	40.48	44.66	97.92	95.29						
VS_24	Вератол С	37.75	48.15	96.30	97.53						
VS_25	Корвалтаб Метео	35.09	49.51	95.90	99.60						

Таблиця 4.2аg ІЗОНІАЗИД

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	99.59	99.61	100.08	100.10	VS_26	Корамаг	80.27	83.82	94.90	89.00
VS_2	Нервоном	99.47	99.03	100.34	100.13	VS_27	DS 1941.21	89.83	100.59	100.37	100.21
VS_3	Антистрес	99.27	100.42	100.00	100.05	VS_28	DS 0214.20	99.55	101.43	100.68	100.60
VS_4	Стресовит	99.66	99.41	100.28	100.06	VS_29	Д-Фенілаланін	-4952.78	-14.68	-6.31	83.54
VS_5	Пробіоксин	99.39	99.31	100.17	100.10	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	818.95	987.33	117.96	99.96
VS_6	Церебровін	99.20	99.42	100.03	100.07	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	419.98	6.80	100.64	98.24
VS_7	Герба спокій	99.75	100.12	100.16	100.07	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	35.31	33.78	82.44	119.30
VS_8	Калмавіс	99.71	99.07	100.25	100.09	VS_33	DL-карвітину 1602.21	101.93	99.43	100.51	99.97
VS_9	Кропу плоди	99.65	99.68	100.06	100.08	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	84.10	88.77	101.23	99.21
VS_10	Джонмера	99.24	99.52	100.11	100.05	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	98.42	97.32	100.31	100.02
VS_11	Картера	100.64	100.16	100.00	100.04	VS_36	Гліцині 2556.20	101.89	100.85	100.86	100.54
VS_12	Фенхель	99.16	99.53	100.16	100.02	VS_37	L-цистин 1349.21	101.47	99.15	100.58	100.29
VS_13	Виджайсар	99.57	99.17	100.21	100.06	VS_38	Гістидин 1610.20	213.18	100.54	100.05	99.57
VS_14	Авантавати	99.31	98.77	100.27	100.06	VS_39	нікозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.40	99.89	100.89	99.99
VS_15	Седафитон(таб)	100.26	99.86	100.04	100.06	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-507.00	-305.56	-175.14	609.93
VS_16	Седафитон(капс)	99.64	99.20	100.04	100.00						
VS_17	М'ята листя	98.99	99.29	99.85	100.04						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.35	99.62	100.21	100.07						
VS_19	Потенза	98.86	99.60	100.00	100.01						
VS_20	Танкор	99.30	99.45	100.09	100.10						
VS_21	Лонгсил	98.32	99.78	100.10	100.12						
VS_22	Вимекс	99.16	98.64	100.12	100.08						
VS_23	Клоксимбекс	99.08	99.58	100.21	100.16						
VS_24	Вератол С	99.25	99.39	100.20	100.07						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.42	98.78	100.22	100.04						

Таблиця 4.2аh ХЛОРАМФЕНКОЛ

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	97.51	100.14	100.49	100.07	VS_26	Корамаг	95.20	88.03	104.37	131.54
VS_2	Нервоном	101.39	99.47	100.04	99.96	VS_27	DS 1941.21	91.49	101.44	100.18	99.70
VS_3	Антистрес	98.79	100.81	100.44	100.22	VS_28	DS 0214.20	99.87	104.38	100.26	98.56
VS_4	Стресовит	100.34	100.17	100.11	100.12	VS_29	Д-Фенілаланін	-7158.01	-333.15	243.97	158.08
VS_5	Пробіоксин	98.74	100.29	100.17	100.02	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	108.90	575.93	38.57	102.49
VS_6	Церебровін	98.15	100.46	100.51	100.06	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	329.81	-29.48	71.28	108.94
VS_7	Герба спокій	96.84	101.62	100.60	100.07	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	94.68	68.54	158.30	49.08
VS_8	Калмавіс	99.36	100.41	100.29	100.02	VS_33	DL-карвітину 1602.21	101.55	101.52	99.71	100.48
VS_9	Кропу плоди	98.69	101.43	101.29	100.08	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	88.07	95.02	94.52	102.24
VS_10	Джонмера	99.18	99.48	100.04	100.15	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.54	99.23	99.84	100.23
VS_11	Картера	96.90	101.20	100.89	100.18	VS_36	Гліцині 2556.20	99.75	102.13	98.68	98.66
VS_12	Фенхель	99.17	100.85	99.98	100.19	VS_37	L-цистин 1349.21	101.01	100.34	98.63	99.50
VS_13	Виджайсар	98.86	101.34	100.10	100.12	VS_38	Гістидин 1610.20	322.27	103.44	101.33	101.30
VS_14	Авантавати	99.72	100.93	100.22	100.07	VS_39	нікозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	98.99	100.70	98.61	100.23
VS_15	Седафитон(таб)	98.73	100.59	100.12	100.14	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-495.21	-460.34	1046.11	-1309.34
VS_16	Седафитон(капс)	98.52	100.01	100.28	100.30						
VS_17	М'ята листя	96.99	99.84	100.43	100.19						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.19	100.52	100.14	100.10						
VS_19	Потенза	99.98	99.48	100.36	100.22						
VS_20	Танкор	98.70	100.47	100.25	100.00						
VS_21	Лонгсил	97.48	101.55	100.06	99.91						
VS_22	Вимекс	100.15	99.48	100.70	100.11						
VS_23	Клоксимбекс	97.71	100.82	100.79	99.85						
VS_24	Вератол С	99.55	100.19	100.18	100.09						
VS_25	Корвалтаб Метео	99.37	99.94	100.30	100.20						

Таблиця 4.2аi ЛІВНОФЛОКСАЦИН ГЕМІГДРАТ

INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	100.20	100.25	99.98	99.99	VS_26	Корамаг	88.99	96.48	98.84	104.50
VS_2	Нервоном	100.36	100.15	100.06	99.98	VS_27	DS 1941.21	94.53	100.38	100.02	99.93
VS_3	Антистрес	99.76	100.03	99.88	100.00	VS_28	DS 0214.20	100.12	100.56	100.04	99.77
VS_4	Стресовит	100.48	100.13	99.99	100.01	VS_29	Д-Фенілаланін	-3264.76	63.60	90.11	109.02
VS_5	Пробіоксин	100.03	100.14	100.01	99.98	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	444.02	284.39	108.00	100.89
VS_6	Церебровін	99.94	100.18	99.97	99.99	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	294.36	87.48	107.93	102.27
VS_7	Герба спокій	100.17	100.30	99.86	100.00	VS_32	Рибонуклейнова к-та 0700.21	65.89	93.83	90.96	92.89
VS_8	Калмавіс	100.25	100.14	99.99	99.99	VS_33	DL-карвітину 1602.21	101.61	100.17	100.03	100.07
VS_9	Кропу плоди	100.09	100.25	99.86	100.00	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	91.25	98.42	100.91	100.40
VS_10	Джонмера	99.90	100.04	99.96	100.01	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	99.58	99.81	100.11	100.03
VS_11	Картера	100.40	100.54	99.86	100.01	VS_36	Гліцині 2556.20	101.42	100.54	100.23	99.76
VS_12	Фенхель	99.94	100.12	100.01	100.00	VS_37	L-цистин 1349.21	101.29	100.10	100.29	99.91
VS_13	Виджайсар	100.06	100.20	99.92	100.00	VS_38	Гістидин 1610.20	179.39	100.59	99.61	100.18
VS_14	Авантавати	100.07	100.08	99.98	100.01	VS_39	нікозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	100.51	100.31	100.23	100.00
VS_15	Седафитон(таб)	100.48	100.17	100.02	100.00	VS_40	Ціанокобаламін 1008.21	-267.43	1.34	34.43	-86.86
VS_16	Седафитон(капс)	100.22	100.08	100.01	100.03						
VS_17	М'ята листя	99.61	100.11	99.84	100.00						
VS_18	Моринга-Йоруба	99.94	100.05	99.98	100.00						
VS_19	Потенза	99.77	99.94	99.97	100.03						
VS_20	Танкор	99.89	100.16	99.93	99.98						
VS_21	Лонгсил	99.43	100.18	100.03	99.97						
VS_22	Вимекс	99.99	100.09	100.01	100.00						
VS_23	Клоксимбекс	99.92	100.23	99.94	99.96						
VS_24	Вератол С	100.00	100.07	99.97	100.00						
VS_25	Корвалтаб Метео	100.04	100.12	100.01	100.01						



Таблиця 4.2а) ШРИДОКСИН ГІДРОХЛОРИД (ВІТАМІН В6) у деяких випадках може виступати як АФІ-фальсифікант											
INTERPOLATION						EXTRAPOLATION					
VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm	VS_#		210-305 nm	240-335 nm	270 - 365 nm	300 -395 nm
VS_1	Ферниксил	94.07	99.96	99.97	99.96	VS_26	Корамат	130.72	95.38	99.33	107.27
VS_2	Нервонорм	96.13	99.82	100.02	99.95	VS_27	DS 1941.21	108.79	100.17	99.95	99.87
VS_3	Антистрес	95.08	99.76	99.79	99.98	VS_28	DS 0214.20	95.70	100.41	99.90	99.61
VS_4	Стресовит	100.31	99.86	99.92	99.99	VS_29	Д-Фенилаланин	6726.01	51.16	104.83	108.18
VS_5	Пробіоксин	95.24	99.85	99.98	99.95	VS_30	Тіаміну гідрохлорид 1502.20	-1277.60	329.55	109.66	100.31
VS_6	Перебровин	95.94	99.90	99.94	99.96	VS_31	Аскорбінова к-та 1099.20	-394.11	82.20	113.96	102.32
VS_7	Герба спокій	93.92	100.05	99.71	99.96	VS_32	Рибонуклеїнова к-та 0700.21	182.59	90.49	88.04	88.05
VS_8	Калмавіс	94.23	99.88	99.92	99.95	VS_33	DL-карнітину 1602.21	92.37	99.91	99.94	100.04
VS_9	Кропу плоди	93.47	100.02	99.74	99.96	VS_34	Аргініну гідрохлорид 1723.20	114.68	97.64	101.32	100.69
VS_10	Джонмера	95.29	99.75	99.89	99.99	VS_35	Лізіну гідрохлорид 1545.20	97.37	99.42	100.13	100.01
VS_11	Картера	92.13	100.35	99.77	99.98	VS_36	Гліцин 2556.20	91.66	100.35	100.21	99.70
VS_12	Фенхель	96.75	99.84	100.01	99.99	VS_37	L-цистин 1349.21	92.69	99.81	100.39	99.85
VS_13	Виджайсар	95.27	99.95	99.82	99.96	VS_38	Гістидин 1610.20	-19.92	100.41	99.27	100.27
VS_14	Авантавати	96.62	99.82	99.89	99.96	VS_39	люкозаміну сульфат натрієва сіль 1625.21	93.76	100.05	100.21	100.03
VS_15	Седафитон(таб)	94.00	99.91	100.04	99.97	VS_40	Ціанкобаламін 1008.21	906.67	-25.23	61.38	-220.17
VS_16	Седафитон(капс)	94.82	99.78	100.02	100.00						
VS_17	М'ята листя	95.81	99.82	99.76	99.97						
VS_18	Моринга-Йоруба	95.95	99.79	99.91	99.98						
VS_19	Потенза	97.98	99.67	99.94	100.02						
VS_20	Танікор	94.49	99.90	99.87	99.94						
VS_21	Лонгсил	97.13	99.91	100.03	99.93						
VS_22	Вімекс	95.67	99.79	100.02	99.96						
VS_23	Клоксимбекс	95.04	99.95	99.83	99.91						
VS_24	Вератол С	95.84	99.78	99.90	99.97						
VS_25	Корвалтаб Метео	95.44	99.81	99.97	99.99						

## ВИСНОВКИ:

1. Результати, подані в Таблиці 4.2 (див. розділ 4) свідчать про те, що використаний метод зворотного калібрування дозволяє чудово, причому кількісно, визначати наявність АФІ-фальсифіканта в режимі інтерполяції. Тобто, якщо калібрування охоплює цю ДД або її близький аналог і фальсифікант, то жодних проблем з виявленням цього АФІ у ДД не виникне. На жаль, цього не можна сказати про режим екстраполяції, тому цей режим необхідно спочатку більш детально обговорити, а потім доопрацювати.

2. Слід зауважити, що для деяких наборів аналітичних довжин хвиль, зокрема, для набору 300 – 395 нм результати більш-менш задовільні в цілому, крім тих рідкісних випадків, коли як ДД виступають чисті вітаміни (особливо ціанкоболамін В12) або амінокислота фенілаланін, обидві ці речовини мають дуже сильне поглинання у всьому УФ діапазоні спектра електромагнітних коливань, зокрема в діапазоні 300 -395нм. Якщо вітамін В12 входить в ДД на тому рівні, який є максимально допустимим, а саме 3 мкг у дозі [85], то він природно заважати не буде. З іншого боку ДД може містити чистий фенілаланін у дозі 1 г і більше [86], так що реальну проблему для методики виявлення підозрілих на наявність АФІ або їх аналогів з усіх розглянутих ДД представляє фенілаланін.

3. Очевидно, що необхідно розширювати базис як ДД, так і АФІ і розробляти на їх основі більш універсальну методику з використанням методу головних компонентів та удосконалювати її до програмного продукту, який можна завантажити на комп'ютер, приєднати до спектрофотометра, причому в ідеалі це має бути компактний переносний спектрофотометр, який можна використовувати в польових умовах при пошуках фальсифікованих ДД *in situ* (на місці, наприклад, при виконанні контрольної покупки).

## Література

1. <https://www.who.int/data/nutrition/nlis/info/iodine-deficiency>
2. [https://www.who.int/health-topics/micronutrients#tab=tab\\_1](https://www.who.int/health-topics/micronutrients#tab=tab_1)
3. [https://en.wikipedia.org/wiki/Human\\_microbiome](https://en.wikipedia.org/wiki/Human_microbiome)
4. Argano, C.; Mallaci Bocchio, R.; Natoli, G.; Scibetta, S.; Lo Monaco, M.; Corrao, S. Protective Effect of Vitamin D Supplementation on COVID-19-Related Intensive Care Hospitalization and Mortality: Definitive Evidence from Meta-Analysis and Trial Sequential Analysis. *Pharmaceuticals* 2023, 16, 130. <https://doi.org/10.3390/ph16010130>
5. Coates, P.M., Betz, J.M., Blackman, M.R., Cragg, G.M., Levine, M., Moss, J., & White, J.D. (Eds.). (2015). *Encyclopedia of Dietary Supplements* (2nd ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b14669>
6. Pintauro, S.J. (2018). *The Regulation of Dietary Supplements: A Historical Analysis* (1st ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9780429442285>
7. *Dietary Supplements: Harmless, Helpful, or Hurtful?* 96p. bibliog. chart. filmog. further reading. glossary. index. notes. photos. websites. Twenty-First Century. Aug. 2015. RTE \$34.65. ISBN 9781467738484. LC 2014024851.
8. Berginc, Katja & Kreft, Samo. (2014). *Dietary Supplements: Safety, Efficacy and Quality. NUTRACEUTICALS AND DIETARY SUPPLEMENTS Applications in Health Improvement and Disease Management* Edited by Raj K. Keservani, MPharm
9. Raj K. Keservani, Anil K. Sharma, Rajesh K. Kesharwani(2022). *NUTRACEUTICALS AND DIETARY SUPPLEMENTS Applications in Health Improvement and Disease Management*(1<sup>st</sup> edition)
10. Gopi, S., AMALRAJ, A., Nair, A., & Chandradhara, D. (Eds.). (2022). *Clinical Studies on Nutraceuticals and Dietary Supplements* (1st ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9780367815486>
11. Ronald Watson, Victor Preedy.(2014). *Bioactive Nutraceuticals and Dietary Supplements in Neurological and Brain Disease*(1<sup>st</sup> ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1016/C2012-0-06799-3>

12. Ronald Watson, Victor Preedy.(2019). Dietary Interventions in Gastrointestinal Diseases Foods, Nutrients, and Dietary Supplements.(1<sup>st</sup> edition). ISBN: 9780128144695
13. Ronald Watson, Victor Preedy.(2019). Dietary Interventions in Liver Disease Foods, Nutrients, and Dietary Supplements(1<sup>st</sup> edition). ISBN: 9780128144671
14. Ronald Watson.(2015). FOODS AND DIETARY SUPPLEMENTS IN THE PREVENTION AND TREATMENT OF DISEASE IN OLDER ADULTS(1<sup>st</sup> edition). ISBN: 9780124186866
15. Кузнецова О.М. Вдосконалення системи контролю якості та безпеки дієтичних добавок.
16. Dwyer JT, Coates PM, Smith MJ. Dietary Supplements: Regulatory Challenges and Research Resources. *Nutrients*. 2018 Jan 4;10(1):41. doi: 10.3390/nu10010041. PMID: 29300341; PMCID: PMC5793269.
17. Regulation of Dietary Supplements: Background and Issues for Congress Updated September 20, 2021 Congressional Research Service <https://crsreports.congress.gov> R43062
18. Thakkar S, Anklam E, Xu A, Ulberth F, Li J, Li B, Hugas M, Sarma N, Crerar S, Swift S, Hakamatsuka T, Curtui V, Yan W, Geng X, Slikker W, Tong W. Regulatory landscape of dietary supplements and herbal medicines from a global perspective. *Regul Toxicol Pharmacol*. 2020 Jul;114:104647. doi: 10.1016/j.yrtph.2020.104647. Epub 2020 Apr 16. PMID: 32305367.
19. Cohen PA. The FDA and Adulterated Supplements-Dereliction of Duty. *JAMA Netw Open*. 2018 Oct 5;1(6):e183329. doi: 10.1001/jamanetworkopen.2018.3329. PMID: 30646231.
20. Rocha T, Amaral JS, Oliveira MBPP. Adulteration of Dietary Supplements by the Illegal Addition of Synthetic Drugs: A Review. *Compr Rev Food Sci Food Saf*. 2016 Jan;15(1):43-62. doi: 10.1111/1541-4337.12173. Epub 2015 Oct 19. PMID: 33371574.

21. Tucker J, Fischer T, Upjohn L, Mazzer D, Kumar M. Unapproved Pharmaceutical Ingredients Included in Dietary Supplements Associated With US Food and Drug Administration Warnings. *JAMA Netw Open*. 2018 Oct 5;1(6):e183337. doi: 10.1001/jamanetworkopen.2018.3337. Erratum in: *JAMA Netw Open*. 2018 Nov 2;1(7):e185765. PMID: 30646238; PMCID: PMC6324457.
22. Balayssac S, Danoun S, Gilard V, Martino R, Malet-Martino M. The POWER saga from 2007 to 2022: An example of a sexual enhancement dietary supplement tainted by different adulterants and still on the market. *J Pharm Biomed Anal*. 2023 Apr 1;227:115283. doi: 10.1016/j.jpba.2023.115283. Epub 2023 Feb 9. PMID: 36780864.
23. Dasom Shin, Jeongeun Kwon, Hui-Seung Kang, Junghyuck Suh, Eunju Lee, The presence of unauthorized ingredients in dietary supplements: An analysis of the risk warning data in Korea, *Journal of Food Composition and Analysis*, Volume 108, 2022, 104462, ISSN 0889-1575, <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.104462>.
24. Irena Vovk, Vesna Glavnik, Chapter 21 - Applications of thin-layer chromatography to the quality control of dietary supplements, Editor(s): Colin F. Poole, In *Handbooks in Separation Science, Instrumental Thin-Layer Chromatography (Second Edition)*, Elsevier, 2023, Pages 615-663, ISBN 9780323999700, <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-99970-0.00001-6>.
25. Jialing Liu, Jian Sun, Huan Wei, Hong Yu, Xiangdong Dai, Qing Hu, Isolation and characterization of a novel tadalafil analogue adulterant, N-cyclohexyl nortadalafil, in a dietary supplement, *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, Volume 227, 2023, 115144, ISSN 0731-7085, <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2022.115144>.
26. Tran BN, Okoniewski R, Spink BC, LeMaster DM, Aldous KM, Spink DC. Androgenic steroids in Over-the-Counter dietary Supplements: Analysis for association with adverse health effects. *Steroids*. 2023 May;193:109199. doi: 10.1016/j.steroids.2023.109199. Epub 2023 Feb 14. PMID: 36796473.
27. Liu ZX, Tang SH, Wang Y, Tan J, Jiang ZT. Rapid, simultaneous and non-destructive determination of multiple adulterants in Panax notoginseng powder

by front-face total synchronous fluorescence spectroscopy. *Fitoterapia*. 2023 Apr;166:105469. doi: 10.1016/j.fitote.2023.105469. Epub 2023 Mar 11. PMID: 36907229.

28. Sarma N, Upton R, Rose U, Guo DA, Marles R, Khan I, Giancaspro G. Pharmacopeial Standards for the Quality Control of Botanical Dietary Supplements in the United States. *J Diet Suppl*. 2023;20(3):485-504. doi: 10.1080/19390211.2021.1990171. Epub 2021 Oct 26. PMID: 34699287.

29. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (2251) Screening for Undeclared Drugs and Drug Analogues*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M8206\\_01\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M8206_01_01)

30. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (857) Ultraviolet-Visible Spectroscopy*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M3209\\_04\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M3209_04_01)

31. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1857) Ultraviolet-Visible Spectroscopy—Theory and Practice*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M5513\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M5513_02_01)

32. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (856) Near-Infrared Spectroscopy*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M8189\\_03\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M8189_03_01)

33. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1856) Near-Infrared Spectroscopy—Theory and Practice*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M99838\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M99838_02_01)

34. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (854) Mid-Infrared Spectroscopy*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M3208\\_04\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M3208_04_01)

35. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1854) Mid-Infrared Spectroscopy—Theory and Practice*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M5512\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M5512_02_01)

36. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (858) Raman Spectroscopy*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M8188\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M8188_02_01)
37. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1858) Raman Spectroscopy-Theory and Practice*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia .DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M1017\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M1017_02_01)
38. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1039) Chemometrics*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M2345\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M2345_02_01)
39. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (782) Vibrational Circular Dichroism Spectroscopy*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia .DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M9233\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M9233_02_01)
40. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1097) Bulk Powder Sampling Procedures*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia .DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M99265\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M99265_02_01)
41. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1005) Acoustic Emission*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia .DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M1476\\_01\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M1476_01_01)
42. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (197) Spectrophotometric Identification Tests*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M98947\\_05\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M98947_05_01)
43. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (922) Water Activity*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M12475\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M12475_02_01)
44. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1225) Validation of Compendial Procedures*. USP-NF. Rockville, MD: United States Pharmacopeia .DOI: [https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M99945\\_04\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M99945_04_01)
45. United States Pharmacopeia (2023). *General Chapter, (1782) Vibrational Circular Dichroism Spectroscopy—Theory and Practice*. USP-NF.

Rockville, MD: United States Pharmacopeia . DOI:

[https://doi.org/10.31003/USPNF\\_M9234\\_02\\_01](https://doi.org/10.31003/USPNF_M9234_02_01)

46. Agriopoulou, S., Tarapoulouzi, M., & Varzakas, T. (Eds.). (2022). *Chemometrics and Authenticity of Foods of Plant Origin* (1st ed.). CRC Press.

<https://doi.org/10.1201/9781003266167>

47. John Wiley & Sons, (2022). *Chemometrics and Numerical Methods in LIBS* Edited by Vincenzo Palleschi Applied and Laser Spectroscopy Laboratory, Institute of Chemistry of Organometallic Compounds, Research Area of National Research Council Pisa, Italy

48. Kunal Roy(2021). *Chemometrics and Cheminformatics in Aquatic Toxicology*. Print ISBN:9781119681595

49. Ron Wehrens *Chemometrics with R Multivariate Data Analysis in the Natural and Life Sciences Second Edition*

50. Thorsten Gressling(2020). *Data Science in Chemistry*. ISBN 978-3-11-062939-2

51. Steven Brown, Roma Tauler, Beata Walczak (2020). *COMPREHENSIVE CHEMOMETRICS: CHEMICAL AND BIOCHEMICAL DATA ANALYSIS SECOND EDITION EDITORS IN CHIEF*. Hardcover ISBN: 9780444641656

52. José Manuel Díaz-Cruz, Miquel Esteban, Cristina Ariño(2019). *Chemometrics in Electroanalysis*. ISBN : 978-3-030-21383-1

53. Burgard, D.R. (1990). *Chemometrics: Chemical and Sensory Data* (1st ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781351070607>

54. Łukasz Komsta, Yvan Vander Heyden, Joseph Sherma.(2020). *Chemometrics in Chromatography*. ISBN 9780367572235

55. Richard G. Brereton. (2018). *Chemometrics Data Driven Extraction for Science*. Print ISBN:9781118904664

56. James N. Miller Jane C. Miller Robert D.(2018). *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*(7<sup>th</sup> edition). ISBN-10: 1292186712





68. ICH HARMONISED TRIPARTITE GUIDELINE IMPURITIES IN NEW DRUG PRODUCTS Q3B(R2) Current Step 4 version dated 2 June 2006
69. Гризодуб А.И., Левин М.Г., Георгиевский В.П. Модифицированный метод Фирордта // Журн. аналит. химии. - 1984. - Т.39,N11. - С.1987 - 1990.
70. Контроль качества препарата "Ингалипт"/ Гризодуб А.И., Левин М.Г., Георгиевский В.П. и др.// Хим.- фармац. журн. - 1985. - Т.19, N 2. - С.242-244.
71. Левин М.Г., Гризодуб А.И., Георгиевский В.П. Дифференциальный вариант модифицированного метода Фирордта // Журн. аналит. химии - 1986. Т.41,N4. - С.702-704.
72. Гризодуб А.И., Левин М.Г., Георгиевский В.П. Оценка сходимости результатов анализа в модифицированном методе Фирордта // Журн. аналит. химии. - 1986. - Т.41,N 11. - С.1984-1988.
73. Левин М.Г., Гризодуб А.И., Георгиевский В.П. Применение модифицированного метода Фирордта для контроля качества 2 - компонентных таблетированных лекарственных средств// Хим. фармац. журн. - 1987. Т.21,N6. - С.748-751.
74. Гризодуб А.И., Левин М.Г., Георгиевский В.П. Априорный выбор аналитических длин волн в методе Фирордта //Журн. аналит. химии. - 1987. - Т.42,N9. - С.1589-1597.
75. Прогнозирование погрешностей определения концентраций методом наименьших квадратов и производной спектрофотометрии / Гризодуб А.И., Асмолова Н.Н., Левин М.Г., Георгиевский В.П.// Журн. аналит. химии. - 1988. -Т.43,N8. - С.1391-1396.
76. Левин М.Г., Гризодуб А.И., Георгиевский В.П. Относительный метод Фирордта. // Журн. аналит. химии. - 1989. - Т.44,N2. - С.234-242.
77. Левін М.Г. Гризодуб О.І., Георгієвський В.П. Застосування модифікованого та відносного методів Фіордту до контролю якості 3-компонентних таблетированих лікарських асобів // Фармацевтичний ж. - 1990. - N1. - С.40-44.

78. Alejandro C. Olivieri, Practical guidelines for reporting results in single- and multi-component analytical calibration: A tutorial, *Analytica Chimica Acta*, Volume 868, 2015, Pages 10-22, ISSN 0003-2670, <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.01.017>.

79. Spiegelman CH, McShane MJ, Goetz MJ, Motamedi M, Yue QL, Coté GL. Theoretical Justification of Wavelength Selection in PLS Calibration: Development of a New Algorithm. *Anal Chem*. 1998 Jan 1;70(1):35-44. doi: 10.1021/ac9705733. PMID: 21644597.

80. Cannon Giglio, Yi Yang, Paul Kilmartin, Analysis of phenolics in New Zealand Pinot noir wines using UV-visible spectroscopy and chemometrics, *Journal of Food Composition and Analysis*, Volume 117, 2023, 105106, ISSN 0889-1575, <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.105106>.

81. Ming Zhang, Ying Xu, Ke-Qing Xiao, Chun-Hui Gao, Shuang Wang, Di Zhu, Yichao Wu, Qiaoyun Huang, Peng Cai, Characterising soil extracellular polymeric substances (EPS) by application of spectral-chemometrics and deconstruction of the extraction process, *Chemical Geology*, Volume 618, 2023, 121271, ISSN 0009-2541, <https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2022.121271>.

82. Venhuis BJ, Tan J, Vredembregt MJ, Ge X, Low MY, de Kaste D. Capsule shells adulterated with tadalafil. *Forensic Sci Int*. 2012 Jan 10;214(1-3):e20-2. doi: 10.1016/j.forsciint.2011.07.013. Epub 2011 Aug 2. PMID: 21813256.

83. Martens H. Understanding the root cause(s) of nonlinearities in near infrared spectroscopy. *NIR news*. 2021;32(1-2):20-26. doi:10.1177/09603360211003758 A Tutorial on Near Infrared Spectroscopy and its' Calibration Lidia Esteve Agelet \* Department of Agriculture and Biosystems Engineering, Iowa State University, Ames, IA, USA

84. Lidia Esteve Agelet & Charles R. Hurburgh Jr. (2010) A Tutorial on Near Infrared Spectroscopy and Its Calibration, *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 40:4, 246-260, DOI: [10.1080/10408347.2010.515468](https://doi.org/10.1080/10408347.2010.515468)

85. <https://ods.od.nih.gov/factsheets/VitaminB12-HealthProfessional/?print=1>

86. Frøyland, L., Haugen, M., Holvik, K., Løvik, M., Strand, T. A., Tell, G. S., & Iversen, P. O. (2020). Risk Assessment of "Other Substances" – L-phenylalanine and DL-phenylalanine. *European Journal of Nutrition & Food Safety*, 12(3), 32–34. <https://doi.org/10.9734/ejnfs/2020/v12i330205>