

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: МАС Хемија; МАС Професор хемије; МАС Заштита животне средине			
Назив предмета: Хемометрика			Шифра МН310
Наставник: Сања Армаковић			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: Нема			
Циљ предмета			
Теоријско и практично оспособљавање студента за сакупљање квалитетних експерименталних података. Примена статистичких и математичких метода за анализу хемијских резултата ради доношења исправних закључака и интерпретације резултата мерења.			
Исход предмета			
Након успешног завршетка курса студент ће бити у стању да да сакупља квалитетне експерименталне податке и примењује методе за њихову обраду и оптимизацију. Такође ће моћи да користи статистичке и математичке методе за анализу хемијских резултата, укључујући једнофакторијалну и вишефакторијалну анализу варијансе (ANOVA), мултиваријантну анализу, анализу главних компоненти (PCA) и кластер анализу. Ове вештине омогућиће студенту да ефикасно интерпретира сложене експерименталне податке и доноси адекватне закључке на основу њих.			
Садржај предмета			
Теоријска настава			
Значај и примена хемометрике. Методе и технике за обраду и управљање подацима. Једнофакторијална и вишефакторијална ANOVA. Принципи и примена мултиваријантне анализе у хемији. Теоријске основе PCA, интерпретација резултата и примена PCA. Основи кластер анализе, методе кластеровања и примена у хемијским истраживањима. Интерпретација резултата и доношење закључака на основу истих.			
Практична настава			
Припрема и обрада експерименталних података. Примена статистичких метода на реалним подацима. Употреба одговарајућих софтвера за ANOVA, мултиваријантну, PCA и кластер анализе. Израда табела и графикона за приказивање резултата, израда и презентација извештаја.			
Литература			
1. Xiaoli Chu, Yue Huang, Yong-Huan Yun, Xihui Bian, <i>Chemometric Methods in Analytical Spectroscopy Technology</i> , Springer, 2022.			
2. Ron Wehrens, <i>Chemometrics with R Multivariate Data Analysis in the Natural and Life Sciences</i> , Second Edition, Springer, Wageningen University, Wageningen, The Netherlands, 2020.			
3. Matthias Otto, <i>Chemometrics Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry</i> , Third Edition, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2017.			
Помоћна литература			
1. С. Армаковић, М. Узелац, <i>Статистичка обрада резултата у хемији: задаци са елементима теорије</i> , Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, 2021.			
2. А. Перић-Грујић, <i>Основи хемометрије</i> , Технолошко-металуршки факултет, Београд, 2012.			
Број часова активне наставе 5		Теоријска настава: 3	Практична настава: АВ 2
Методе извођења наставе			
Предавања, рачунске вежбе и консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	30
практична настава	30	усмени испт	30