



## 6. sastanak Sekcije za analitičku kemiju i spektroskopiju Hrvatskog kemijskog društva



### Primjena *multi-way* analize u procesiranju spektralnih podataka

Prof. dr. sc. Tomica Hrenar

*Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, Zagreb*  
[hrenar@chem.pmf.hr](mailto:hrenar@chem.pmf.hr)

*Multi-way* analiza (MWA) je numerička analiza velikih skupova podataka sadržanih u višedimenzijским tenzorima i predstavlja ekstenziju analize glavnih komponentata (PCA) na više od dvije dimenzije. Tenzori podataka mogu sadržavati nizove spektara snimljenih u ovisnosti o jednoj, dvije, tri ili više varijabli (npr. ovisnost o valnom broju, vremenu i temperaturi ili sl.). Cilj MWA je redukcija tih ogromnih skupova podataka na jednu, dvije ili tri glavne komponente po svakoj dimenziji u kojima se nalaze sve informacije sadržane u originalnim spektrima, a koje prikazuju glavne trendove unutar tih skupova podataka. Tako reducirani podaci mogu se vizualno ispitati te se mogu odrediti kemijski smislene latentne varijable koje su inicijalno bile skrivene u originalnim podacima. Takve latentne varijable mogu se iskoristiti za kvantitativnu i/ili kvalitativnu analizu, detekciju patvorenja, određivanje pKa, klasifikaciju i grupiranje uzoraka, za praćenje reakcijskih profila ili uspostavu regresijskih modela i to neovisno o tipu spektralnih podataka (IR, Raman, UV-VIS, NMR, PXRD, DSC, potenciometrijska titracija, kvantno-kemijski proračuni, ...).

Acknowledgement: This work was supported by the Croatian Science Foundation (Project No: IP-2016-06-3775, Activity and *in silico* guided design of bioactive small molecules, ADESIRE).