

TEHNOLOŠKO-METALURŠKI FAKULTET

UNIVERZITET U BEOGRADU

35/211
(Broj zahteva)
27.08.2013.
(datum)

VEĆE NAUČNIH OBLASTI TEHNIČKIH NAUKA

(naziv veća naučne oblasti kome se zahtev upućuje)

Beograd, Studentski trg br. 1

ZAHTEV

za davanje saglasnosti na referat o urađenoj doktorskoj disertaciji

Molimo da, shodno članu 46. st. 5. Statuta Univerziteta u Beogradu ("Glasnik Univerziteta" broj 131/06), date saglasnost na referat o urađenoj doktorskoj disertaciji kandidata

Mr DRAGANE (Zoran) ŽIVOJINOVIĆ
(ime, ime jednog od roditelja i prezime)

KANDIDAT: Mr DRAGANA (Zoran) ŽIVOJINOVIĆ prijavila je doktorsku disertaciju pod nazivom:
(ime, ime jednog od roditelja i prezime)

„Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode”

Iz naučne oblasti: **HEMIJA I HEMIJSKA TEHNOLOGIJA**

Univerzitet je dana **27.06.2008. godine**, svojim aktom **broj 612-28/124/08**, dao saglasnost na predlog teme doktorske disertacije koja je glasila:

„Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode”

Komisija za ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidata:

Mr DRAGANE (Zoran) ŽIVOJINOVIĆ
(ime, ime jednog od roditelja i prezime)

obrazovana je na sednici održanoj **28.02.2013.** odlukom fakulteta pod br. **35/58.** u sastavu:

Ime i prezime člana komisije	Zvanje	Naučna oblast
1. Dr Ljubinka Rajaković	Redovni profesor	Analitička hemija
2. Dr Aleksandra Perić-Grujić	Vanredni profesor	Kontrola kvaliteta
3. Dr Boris Lončar	Vanredni profesor	Tehnička fizika i fizička elektronika
4. Dr Antonije Onjia	Naučni savetnik	Analitička hemija

Nastavno-naučno veće fakulteta prihvatilo je izveštaj Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije na sednici održanoj dana **27.06.2013. godine.**

DEKAN FAKULTETA

Prof. dr Đorđe Janačković

Prilog:

1. Doktorska disertacija
2. Izveštaj Komisije sa predlogom
3. Akt Nastavno-naučnog veća Fakulteta o usvajanju izveštaja

Na osnovu čl. 123. stav 4. Zakona o visokom obrazovanju i čl. 128. stav 3. Statuta TMF, na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta od 27.06.2013. godine, doneta je

O D L U K A

o prihvatanju Referata o urađenoj doktorskoj disertaciji

Prihvata se Referat Komisije u sastavu: dr Ljubinka Rajaković, redovni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, dr Aleksandra Perić-Grujić, vanredni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, dr Boris Lončar, vanredni profesor Tehnološko-metalurškog fakulteta, dr Antonije Onjia, naučni sarvetnik INN Vinča, o pregledu i oceni urađene doktorske disertacije pod nazivom: „**RAZVOJ I PRIMENA HEMOMETRIJSKIH METODA ZA KLASIFIKACIJU I PROCENU KVALITETA VODE**“ koju je podnela **mr DRAGANA ŽIVOJINOVIĆ** i upućuje se na saglasnost Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu.

Veće naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu dalo je saglasnost na predlog teme doktorske disertacije **mr Dragane Živojinović (rođ. Čičkarić)**, pod nazivom „**RAZVOJ I PRIMENA HEMOMETRIJSKIH METODA ZA KLASIFIKACIJU I PROCENU KVALITETA VODE**“ Odlukom broj: 612-28/124/08 od 01.07.2008. godine.

Rad u vrhunskom časopisu međunarodnog značaja M21

1. **D.Z. Živojinović**, Lj.V. Rajaković, Application and validation of ion chromatography for the analysis of power plants water: Analysis of corrosive anions in conditioned water – steam cycles, *Desalination*, 275 (2011) 17–25, ISSN: 0011-9164, IF(2011)=2,590
2. V.N. Rajaković-Ognjanović, **D.Z. Živojinović**, B.N. Grgur, Lj.V. Rajaković, Improvement of chemical control in the water–steam cycle of thermal power plants, *Appl. Therm. Eng.* 31 (2011) 119–128, ISSN: 1359-4311, IF(2011)=2,064

Rad u časopisu međunarodnog značaja M23

1. **D.Z. Živojinović**, V.N. Rajaković-Ognjanović, A. Onjia, Lj.V. Rajaković, Spatial variations in the distribution of trace ionic impurities in the water–steam cycle in a thermal power plant based on a multivariate statistical approach, *Central European Journal of Chemistry*, prihvaćen za štampu (29.04.2013.), ISSN: 1895-1066, IF(2011)=1,073

Odluku dostaviti: Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta, mentoru, Službi za nastavno-studentske poslove, Biblioteci i Arhivi fakulteta.

D E K A N

Prof. dr Đorđe Janačković

**NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
TEHNOLOŠKO-METALURŠKOG FAKULTETA
UNIVERZITETA U BEOGRADU**

Na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta Univerziteta u Beogradu održanoj 28.02.2013. imenovani smo za članove Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije mr Dragane Z. Živojinović (rođ. Čičkarić), dipl. inž. tehnologije pod nazivom:

**RAZVOJ I PRIMENA HEMOMETRIJSKIH METODA ZA
KLASIFIKACIJU I PROCENU KVALITETA VODE**

Posle pregleda i analize doktorske disertacije kandidata, Komisija podnosi Nastavno-naučnom veću Tehnološko-metalurškog fakulteta sledeći

**IZVEŠTAJ
o urađenoj doktorskoj disertaciji**

1. UVOD

Naslov i obim disertacije

Doktorska disertacija pod naslovom „**Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode**”, kandidata mr Dragane Z. Živojinović, dipl. inž. tehnologije, napisana je na 229 strana, sadrži 77 slika, 65 tabela i 275 literaturnih navoda. Sadržaj teze ima uobičajenu strukturu: Rezime (na srpskom i engleskom jeziku), Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Rezultati i diskusija, Zaključak i Literatura.

Hronologija odobravanja i izrade disertacije:

- 29.05.2008. godine - na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka o prihvatanju predloga teme doktorske disertacije mr Dragane Z. Živojinović, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom „**Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode**”, a za mentora je imenovana prof. dr Ljubinka V. Rajaković, redovni profesor TMF-a.
- 27.06.2008. godine - na sednici Veća naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu data je saglasnost na predlog teme doktorske disertacije mr Dragane Z. Živojinović, dipl. inž. tehnologije, pod naslovom „**Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode**”.
- 28.02.2013. godine - na sednici Nastavno-naučnog veća Tehnološko-metalurškog fakulteta doneta je Odluka o imenovanju članova Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije mr Dragane Z. Živojinović, dipl. inž. tehnologije pod naslovom: „**Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode**”.

Mesto disertacije u odgovarajućoj naučnoj oblasti

Istraživanja u okviru ove doktorske disertacije pripadaju naučnoj oblasti Hemija i hemijska tehnologija za koju je matičan Tehnološko-metalurški fakultet Univerziteta u Beogradu. Uža naučna oblast disertacije je kontrola kvaliteta.

Biografski podaci o kandidatu

Mr Dragana Z. Živojinović (rođ. Čičkarić), dipl. ing. tehnologije, rođena je 01.12.1971. godine u Prizrenu. Diplomirala je na Tehnološko-metalurškom fakultetu u Beogradu, 1997. godine. Posredstvom Republičkog zavoda za tržište rada, a na osnovu zajedničkog programa Republičkog ministarstva za nauku i tehnologiju i pomenutog Zavoda, od marta 1998. do juna 2000. godine radila je kao saradnik (istraživač-talenat) na TMF-u, na Katedri za analitičku hemiju. U tom periodu, aktivno je učestvovala u nastavnom procesu i intenzivno se bavila i naučno-istraživačkim radom. Magistrirala 25.06.2004. godine na TMF-u odbranivši magistarski rad pod nazivom „Analiza tragova jonskih vrsta u sistemu voda-para u termoenergetskim objektima” i time stekla akademski naziv magistra tehničkih nauka.

Juna 2000. godine izabrana je u zvanje asistenta-pripravnika, a od marta 2005. godine je u zvanju asistenta. Aktivno učestvuje u izvođenju nastave na II, III i IV godini redovnih studija (predmeti: Analitička hemija, Analitičke tehnike u kontroli kvaliteta, Procesna kontrola, Merenje i upravljanje procesima, Osnovi automatskog upravljanja procesima, Hemometrija).

Oblast istraživačkog rada kandidata je vrlo raznovrsna i veoma aktuelna u svetu. To su analiza tragova, hemometrija i multivarijantne statističke metode i njihova primena, upravljanje tehnološkim procesima, problemi korozije u TE. Bila je angažovana na realizaciji četiri projekta koje je finansiralo Ministarstvo za nauku i zaštitu životne sredine (dva iz osnovnih istraživanja i dva iz oblasti tehnološkog razvoja). Trenutno je angažovana na realizaciji projekta III43009 „Nove tehnologije za monitoring i zaštitu životnog okruženja od štetnih hemijskih supstanci i radijacionog opterećenja” koje finansira Ministarstvo za nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije. Autor je ili koautor većeg broja publikovanih radova, saopštenja, monografija i elaborata.

Koautor je dva pomoćna udžbenika, praktikuma iz Analitičke hemije i zbirke zadataka iz Upravljanja tehnološkim procesima.

U prethodnom periodu, pored nastavnog i istraživačkog rada, bila je višestruko angažovana u radu različitih komisija i radnih grupa na TMF-u i time dala značajan doprinos u radu društvene zajednice.

Pored navedenog, bila je i recenzent za nekoliko međunarodnih časopisa, od kojih treba izdvojiti: International Journal of Environmental Analytical Chemistry, Central European Journal of Chemistry i Hemijska Industrija.

Član je Srpskog hemijskog društva.

Kandidat govori, čita i piše engleski i ruski jezik.

2. OPIS DISERTACIJE

Struktura i sadržaj disertacije

Doktorska disertacija mr Dragane Z. Živojinović „Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode” sadrži sledeća poglavlja: Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Rezultate i diskusiju i Zaključak. Na početku disertacije dat je

Izvod na srpskom i engleskom jeziku, Spisak skraćenica i simbola, Spisak slika i Spisak tabela, dok su na kraju disertacije dati Literatura i Biografija autora sa referentnom listom do sada objavljenih radova i saopštenja i listom radova koji su proistekli iz doktorske disertacije.

Kratak prikaz pojedinačnih poglavlja

U Uvodu disertacije istaknuti su problemi sve većeg zagađenja voda prvenstveno izazvanih čovekovom aktivnošću, kao i njihov povratni negativni uticaj na živi svet, ekosistem i planetu u celini. Ukazano je na neophodnost poznavanja sastava vode u svakom trenutku, kako bi se utvrdilo prisustvo zagađujućih materija, njihova raspodela i pravci njihovog daljeg kretanja. Navedene su prednosti i značaj povezivanja hemijske analize i praćenja svih kontrolnih parametara koji definišu kvalitet vode (površinske, podzemne, procesne i otpadne), sa hemometrijskom analizom, u cilju redukcije ogromnog broja mernih podataka, izboru ključnih parametara u kompleksnoj matrici i dobijanja važnih informacija o izvorima zagađenja, njihovoj distribuciji i raspodeli, a sve radi efikasnijeg upravljanja vodenim resursima. U uvodnom delu jasno je definisan predmet istraživanja i predstavljeni su ciljevi ove doktorske disertacije. Istaknuti su najvažniji doprinosi istraživanja sprovedenih u okviru ove teze.

Teorijski deo doktorske disertacije podeljen je u tri poglavlja. U prvom poglavlju prikazani su značaj, klasifikacija i karakteristike površinskih i podzemnih voda, definisan je pojam, poreklo, toksičnost i biološka uloga svih konstituenata vode. Opisani su svi bitni parametri koji ukazuju na zahtevani kvalitet vode, propisan našim Pravilnicima i u skladu sa Evropskim direktivama o vodi. Istaknut je značaj redovnog merenja fizičko-hemijskih parametara kvaliteta i potreba za uvođenjem sistema monitoringa, kako bi se omogućilo utvrđivanje efekta mera za efikasno upravljanje vodom i pratio status podzemnih i površinskih voda. Opisani su osnovni izvori i oblici zagađenja sirovih voda, koje se posle prečišćavanja koriste u daljoj obradi u vodu za piće ili u industrijsku tzv. procesnu vodu. Opisana je uloga i značaj procesne vode u radu industrijskih objekata, kao i zahtevane karakteristike koje napojna voda mora da zadovolji, da bi se mogla koristiti u industrijskim procesima, u cilju efikasnijeg i ekonomičnijeg rada postrojenja.

Drugo poglavlje se bavi osnovnim aspektima hemometrije sa posebnim akcentom na multivarijacionu analizu i njenu primenu u savremenim tokovima praćenja kvaliteta vode. Svakodnevno se, hemijske laboratorije i odgovarajuće službe kontrole kvaliteta suočavaju sa ogromnim brojem merenja, koja kao rezultat imaju velike setove (baze) podataka, koje treba pravovremeno obraditi, procesuirati i redukovati s ciljem dobijanja informacija o optimalnom broju podataka i parametara koji bi bili dovoljni da ukažu na postojeći kvalitet vode i koji bi poslužili kao baza za efikasno modelovanje i upravljanje sistemom monitoringa i upravljanja vodenim resursima. Opisan je razvoj, osnovni principi i mogućnosti i prednosti primene najznačajnijih hemometrijskih metoda multivarijacione analize. Statistička evaluacija i multivarijantna analiza doživela je veliki značaj u savremenom društvu, i to na svim poljima, počevši od ekonomije, marketinga, psihologije, socioloških istraživanja, pa do medicine, farmacije, hemije i zaštite životne sredine. Danas se nijedan proces praćenja i redovne kontrole ne može sprovести bez primene ovih analiza i ekspertiza stručnjaka iz ove oblasti u projektovanju i upravljanju monitoringom.

Hemometrijske metode (takođe poznate i kao multivarijantne statističke tehnike), određuju nekoliko pravaca u istraživanju i proceni kvaliteta vode i klasifikaciji kvaliteta vode. Hemometrijske metode identifikuju prirodno grupisanje uzoraka i grupa promenljivih na bazi

sličnosti između uzoraka. Većina hemometrijskih metoda za klasifikaciju su, naime, analize skupova ili klusterske analize (cluster analysis, CA), analize glavnih komponenti (principal component analysis, PCA) i faktorske analize (factor analysis, FA). Linearna diskriminantna analiza (Discriminant analysis, DA) se koristi za utvrđivanje i predviđanje promjenljivih koji najviše doprinose varijaciji unutar grupa promjenljivih prethodno ustanovljenih pomoću CA i PCA. Veliki je broj metoda opisanih u literaturi, jer je to područje koje se neprekidno razvija, tako da se stalno pojavljuju nove ili modifikovane metode i softveri za hemometrijsku obradu podataka. Detaljnije su prikazane i definisane metode koje su korišćene u okviru istraživanja obuhvaćenih disertacijom, a to su: Metoda glavne komponente, Faktorska analiza, Klusterske analize (hijerarhijske i nehijerarhijske), diskriminaciona analiza (linearna i kanonička), kao i veštačke neuronske mreže (ANN).

U trećem poglavlju dat je pregled literaturnih navoda u kojima su multivarijacione metode uspešno primenjene u analizi voda, od sirovih do otpadnih.

U Eksperimentalnom delu data je kompletna metodologija rada. Prikazane su i opisane oblasti ispitivanja, lokacije uzorkovanja, vremenski periodi i sezone u kojima je vršeno uzorkovanje. Dat je kratak opis korišćenih analitičkih metoda i aparata: atomska apsorpciona spektroskopija sa grafitnom kivetom (GFAAS), jonska hromatografija (IC), kao i elektroanalitičke metode za klasična laboratorijska i on-line merenja izabranih parametara. Takođe su definisane primenjene statističke metode za obradu velikog broja eksperimentalnih podataka: faktorska analiza (FA), analiza glavnih komponenti (PCA), klusterska analiza (CA), diskriminaciona analiza (DA), definisani Pearson-ov i Spearman-ov koeficijent korelacije.

U delu Rezultati i diskusija prikazani su eksperimentalni rezultati istraživanja i izvršena je njihova analiza i diskusija. U prvom delu prikazana je optimizacija i validacija metoda za određivanje tragova elemenata u uzorcima ultračiste vode, kakvi su uzorci vode termoelektrana. Postupak IC metode koja je prethodno razvijena u okviru magistarskog rada testirana je i validirana na realnim uzorcima. Određeni su osnovni parametri validacije: preciznost, tačnost, linearnost, granica detekcije, RSD, reproduktivnost. Potvrđeno je da se ovako definisana metoda može uspešno primeniti na uzorcima vode i pare iz TE. Zatim je izvršena kompletna analiza vrednosti izabranih fizičkih i hemijskih parametara kvaliteta procesne vode (jonske i molekulske vrste koji su uzročnici ili indikatori korozije) po obeleženim lokacijama i u različitim režimima rada termoelektrane objekta. Dobijeni rezultati merenja koji su predstavljali ulaznu matricu podataka podvrgnuti su multivarijacionoj analizi korišćenjem statističkih paketa: *SPSS*, *Minitab* i *Microsoft Excel*, kako bi se izvršila obrada i redukcija podataka, izabrale ključne varijable i utvrdila njihova vremenska (sezonska) i prostorna varijabilnost. Nakon primene PCA/FA, HCA i DA izabran je tačan broj parametara koji mogu biti predstavnici grupa koje treba redovno pratiti i preko kojih se zbog njihovih jakih korelacionih veza sa drugim parametrima može predvideti trenutno stanje i varijabilnost u sastavu vode i pare. Predložen je redukovani sistem monitoringa sa smanjenim brojem parametara koje treba kontinualno pratiti i smanjenom frekvencijom merenja.

U drugom i trećem delu ispitivan je sastav i fizičko-hemijski parametri kvaliteta sirove vode koja se koristi za preradu i pripremu vode za piće koju prerađuje i potrošačima isporučuje Javno komunalno preduzeće Beogradski vodovod i kanalizacija (JKP BVK). Izvršena je sveobuhvatna analiza svih uzoraka vode i izvršena klasifikacija i procena varijacije kvaliteta sirove vode, pre njene prerade u pijaću vodu. Snabdevanje Beograda vodom uglavnom je iz reke Save. Odnos podzemne i površinske vode je 70:30, a osnovu

snabdevanja podzemnim vodama čine bunari u priobalju Save i na Adi Ciganliji. U sistemu JKP BVK voda se prečišćava u pet postrojenja za prečišćavanje: Bele vode, Banovo brdo, Bežanija, Makiš i Vinča. Postrojenja Banovo brdo, Bežanija i deo pogona Bele vode prerađuju podzemnu, a pogoni Bele vode, Makiš i Vinča rečnu vodu.

Uzorci sirove vode ispitivani u ovom radu, uzorkovani su u periodu 2005-2006. i 2008-2010. godine sa različitih postrojenja za preradu površinske i podzemne vode u JKP BVK. Obuhvaćeno je tri pogona: Makiš, Bežanija i Banovo brdo, koji kao sirovu vodu koriste Savsku vodu. U dvogodišnjem periodu (2005-2006) izvršena su preliminarne ispitivanja, kako bi se testirale izabrane hemometrijske metode. Prikupljeni su, analizirani i hemometrijski obrađeni uzorci površinske vode reke Save sa lokacije Makiš. Ispitan je kvalitet vode i sezonska varijacija parametara kvaliteta i zabeležena odstupanja izmerenih vrednosti od MDK. Izabrano je 28 parametara za redovno praćenje. Uzorci su uzorkovani i analizirani dva puta mesečno. Istraživanja su pokazala da su samo neki parametri prekoračili MDK vrednosti (suspendovane materije, nitriti, gvožđe i rastvorni kiseonik), dok je većina varirala u granicama dozvoljenog. Podaci sa vrednostima promenljivih prethodno su vrlo pažljivo pripremljeni i transformisani u standardizovane varijable, a zatim podvrgnuti odabranim multivarijantnim metodama, da bi se ispitala vremensko-prostorna raspodela elemenata i utvrdila zakonomernost u varijaciji ispitivanih parametara kvaliteta vode. Utvrđeno je da su sve primenjene metode pokazale dobru saglasnost u pogledu određivanja ključnih varijabli, njihovom grupisanju u klastere prema sličnosti i predviđanju promenljivih koje su najveći uzročnici varijacija. Diskriminaciona analiza se pokazala najkorisnijom u smislu redukcije dimenzionalnosti matrice (broja parametara i broja opservacija), utvrđivanju i vremenske i prostorne varijacije, određivanju parametra koji su najviše doprineli klasifikaciji i varijaciji i na osnovu kojih se može predvideti o kom se godišnjem dobu ili sezoni radi.

U periodu 2008-2010. uzorkovana je voda sa crpnih stanica sva tri pogona, kako bi se odredile koncentracije ispitivanih elemenata i vrednosti fizičko-hemijskih parametara u sirovoj vodi i ispitao uticaj sastava sirove vode na sadržaj ispitivanih elemenata i parametara u vodi za piće koja se distribuira stanovništvu. Na taj način je izvršena sveobuhvatna analiza sirove vode, i površinske i podzemne, dakle svih tipova voda koje se koriste za preradu i dobijanje pijaće vode u JKP BVK. Ukupno po 36 uzoraka (trogodišnje praćenje, mesečna učestalost uzorkovanja i merenja) je uzeto sa svih odabranih lokacija. Podstanica Banovo brdo nije bila podobna za MA, zbog vrlo malih odstupanja u izmerenim vrednostima.

Kompleksna matrica podataka (broj *serija* x broj *parametara*) podvrgnuta je hemometrijskoj analizi, primenom multivarijantnih statističkih tehnika kao što su PCA, FA, CA i DA, kako bi se otkrio odnos između parametra odgovornih za kvalitet vode, izabrale ključne varijable koje najviše doprinose vremenskoj i prostornoj varijaciji vode i mogućim izvorima zagađenja, redukovao broj promenljivih koje treba redovno pratiti, izvršila klasifikacija uzoraka vode u klastere na osnovu sličnosti i razlika između izabranih lokacija uzorkovanja, optimizovao i pojednostavio proces monitoringa, a sve u cilju smanjenja vremena i troškova upravljanja vodnim resursima.

Izvršeno je modelovanje parametara i predviđanje parametra koji najviše doprinose prostorno/vremenskoj varijaciji rečne vode primenom ANN.

Izvršena je uporedna analiza svih primenjenih metoda na svim uzorcima voda i istaknute su prednosti i mane hemometrijskih metoda u statističkoj analizi voda.

Na kraju disetacije su izneta zaključna razmatranja sa istaknutim rezultatima i doprinosima ovih istraživanja, dat je spisak korišćene literature, biografija kandidata sa

referencama, kao i formalne strane sa izjavama o autorstvu i istovetnosti štampane i elektronske verzije rada.

3. OCENA DISERTACIJE

Savremenost, originalnost i značaj

Rezultati hemijskih analiza su rezultati hemijskog merenja. Hemijska merenja (hemometrija) u okviru metrologije imaju specifično mesto zbog kompleksnosti metoda merenja. Tumačenje i izdvajanje bitnih veličina u okviru velikog broja podataka predmet je izučavanja hemometrijskih metoda. Kompromis između egzaktnih metroloških zahteva i rešavanja hemijskog problema predstavlja vrlo složen zadatak da se primenom savremenih hemometrijskih metoda utvrdi presek optimalnog broja parametara koji omogućuju procenu kvaliteta uzorka i preciznosti kojom se ti parametri mere.

U uzorcima vode iz životne sredine, kao što su površinske, podzemne i otpadne vode nalazi se veliki broj elemenata i jedinjenja, koji redovno moraju biti praćeni, kako bi blagovremeno bili uklonjeni u cilju prečišćavanja vode i održavanja kvaliteta vode u propisanim granicama. Sirova voda predstavlja ulaznu sirovinu za dobijanje pijaće i procesne vode, koje moraju biti u skladu sa još strožim propisima o graničnim vrednostima parametara kvaliteta. Zbog toga je veoma važno na vreme utvrditi pravilnost i zakonitost u pogledu promene raspodele sadržaja zagađujućih materija i predvideti pravac njihovog daljeg kretanja. U ovom radu pažnja je posvećena analizi sadržaja najvažnijih elemenata koji su bitni za kvalitet vode (specifični katjoni i anjoni, teški metali, organska jedinjenja), a takođe su mereni i određeni fizičko-hemijski parametri (temperatura, pH, boja, mutnoća, provodljivost), od kojih zavise ravnotežni procesi u vodi i opšti kvalitet vode.

Savremeno društvo karakteriše intenzivna industrijalizacija i urbanizacija, što ima za posledicu sve obimnije iscrpljivanje prirodnih resursa i sve opasnije ugrožavanje životne sredine. U uslovima globalnog razvoja, briga o vodi predstavlja pitanje opstanka civilizacije. Stoga upravljanje vodama i kontrola kvaliteta voda postaju suštinska društvena potreba. Timovi stručnjaka iz različitih oblasti pokušavaju da nađu obrasce i modele za modelovanje parametra kvaliteta vode i predviđanje promenljivih odgovornih za promene u kvalitetu vode, da otkriju ključne varijable koje dovode do vremensko/prostorne varijacije i grupisanja sličnih lokacija i objekata, identifikuju izvore zagađenja i procene raspodelu zagađenja, u cilju optimizacije sistema monitoringa i očuvanja prirodnih vodenih resursa.

Redovno praćenje parametara u procesnoj vodi, smanjenje broja on-line parametara i frekvencije merenja, prioritet je službi kontrole u industriji. Na osnovu prethodno definisanih ključnih varijabli, koje se mere direktno, a preko kojih se indirektno dobijaju informacije o ostalim parametrima, zbog njihovih jakih korelacionih veza, pojednostavljuje se sistem monitoringa i obezbeđuje pravovremena aktivnost i sprečava se havarija.

U okviru doktorske disertacije mr Dragane Z. Živojinović, dipl. inž. tehnologije, pod nazivom „Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode“ sistemski je praćena koncentracija svih jonskih vrsta i drugih bitnih fizičko-hemijskih parametara u procesnoj ultračistoj vodi iz sistema voda-para i izvršena kompletna evaluacija merenja. Prethodno razvijena IC metoda za određivanje jona na nivou tragova (ppb-ppt) testirana je na realnim uzorcima, izvršena je optimizacija i validacija metode. U literaturi ima malo podataka o hemometrijskoj analizi ultračistih voda. Razlozi su osetljivost merenja, reproduktivnost rezultata, niske granice detekcije i zahtev za velikom preciznošću, tačnošću i

ponovljivosti merenja. Dobijene vrednosti su često ispod granice detekcije. Upravo to je bio izazov kandidatu, da pokuša da primeni različite hemometrijske metode na primeru ovog tipa vode i ispita koja kombinacija multivarijacionih tehnika može najviše pomoći u redukciji podataka, izboru ključnih parametara, predviđanju parametra koji će najviše doprinosti promenama u kvalitetu vode i projektovanju budućeg sistema monitoringa. Definisane su lokacije sa najvećim zagađenjem u odnosu na ispitivane elemente, kao i izvori njihovog mogućeg porekla. Na osnovu koeficijenta korelacije ustanovljeno je postojanje čvrstih veza između određenih elemenata, kao i mogući mehanizmi putem kojih dospevaju u ciklus voda-pa. Predložen je sistem monitoringa sa redukovanim brojem parametara i smanjenom frekvencijom merenja.

Drugi objekat i predmet ispitivanja u ovoj disertaciji su sirova površinska i podzemna voda iz sistema JKP Beogradski vodovod i kanalizacija. Zbog aktuelne problematike o sve većem zagađenju voda i potrebi definisanja parametara koji su odgovorni za kvalitet vode i dobijanje trenutnih informacija o sastavu kvalitativnom i kvantitativnom sastojaka vode, veliki broj radova objavljenih u svetu se fokusira na razvijanje modela i uspešnu primenu hemometrijskih metoda u oblasti površinskih voda (reke, jezera, morska voda). Ovo područje se neprekidno razvija. Na osnovu merenja parametra, formirane su baze tzv. *data setovi* koji su podvrgnuti multivarijacionoj analizi. Predložene su hemometrijske metode koje daju najbolje tumačenje prostorno/vremenskih varijacija i najtačnije predviđanje i modelovanje parametara koji su odgovorni za ispoljene varijacije u kvalitetu vode. Ispitani su uzroci varijacija sa svih aspekata: lokacijski, sezonski i godišnje. Otkriveni su parametri koji su doveli do svih ovih oblika varijabilnosti parametara vode. Izvršeno je i modelovanje pomoću DA i ANN metoda. Na osnovu opsežnog pregleda literature, može se zaključiti da se istraživanja u okviru ove doktorske disertacije uklapaju u svetske trendove i ukazuju na značaj i aktuelnost proučavane problematike.

Osvrt na referentnu i korišćenu literaturu

U literaturnom pregledu doktorske disertacije dat je veliki broj literaturnih navoda, od kojih najveći broj čine radovi objavljeni u međunarodnim časopisima koji se bave tematikom značajnom za izradu doktorske disertacije. Navedene reference su novijeg datuma i sadrže eksperimentalne rezultate istraživanja mnogih istraživača, analizu i diskusiju dobijenih rezultata i izvedene zaključke, kao i teorijske osnove primenjenih metoda ispitivanja, njihove prednosti i ograničenja. Kandidat je proširio svoja saznanja iz oblasti hemometrije i multivarijantne analize, produbio prethodna znanja o metodama za analizu tragova jonskih i molekulskih vrsta u vodi, kao vrlo kompleksnom medijumu. Iz obrazloženja predložene teme doktorske disertacije i objavljenih radova koje je kandidat priložio, kao i iz pregleda literature koja je korišćena u istraživanju, uočava se adekvatno poznavanje predmetne oblasti istraživanja, kao i poznavanje aktuelnog stanja istraživanja u ovoj oblasti u svetu.

Analiza primenjenih naučnih metoda i njihova adekvatnost za sprovedeno istraživanje

U ovoj doktorskoj disertaciji primenjene su savremene analitičke metode za određivanje koncentracija elemenata i jona u tri karakteristična tipa vode: površinska, podzemna i industrijska procesna. Primenjene su spektroskopske metode: plamena atomska apsorpciona spektrometrija (FAAS), atomska apsorpciona spektrometrija sa grafitnom kivetom (GF-AAS), UV-VIS spektrofotometrija, hromatografske: jonska hromatografija (IC) tečna hromatografija (HPLC), elektroanalitičke: potenciometrija, konduktometrija,

turbidimetrija, kolorimetrija. U hemometrijskoj obradi rezultata primenjene su multivarijantne statističke tehnike: faktorska analiza (FA), analiza glavne komponente (PCA), analize grupisanja tzv. klusterske (HCA, K-means), linearna i kanonička diskriminaciona analiza (LDA, CDA), veštačke neuronske mreže (ANN). Za izvođenje ovih analiza korišćeni su statistički i matematički programi SPSS 20, Minitab 16, Matlab R2007b itd.

Ocena primenljivosti i verifikacije ostvarenih rezultata

Rezultati doktorske disertacije mr Dragane Z. Živojinović pružaju značajan doprinos razvoju i primeni savremenih analitičkih metoda, za potrebe analize i kontrole kvaliteta vode. Postignuti su originalni eksperimentalni rezultati u oblasti koncentrisanja, razdvajanja i određivanja tragova jonskih vrsta u ultračistoj vodi.

Naučni cilj doktorske disertacije bio je usmeren je na proučavanje hemometrijskih metoda njihov razvoj i primenu na svim tipovima voda: od ultračistih do otpadnih. Izvršena je karakterizacija voda, klasifikacija, modelovanje parametara kvaliteta, izbor optimalnih promenljivih kojima bi se definisala, objasnila i predvidela vremenska i prostorna varijacija.

Verifikacija rezultata je potvrđena i od strane međunarodne naučne javnosti, objavljivanjem rezultata ovih istraživanja u međunarodnim časopisima iz domena ove problematike (*Desalination, Central European Journal of Chemistry*).

Ocena sposobnosti kandidata za samostalan naučni rad

Kandidat mr Dragana Z. Živojinović, dipl. inž. tehnologije je tokom izrade doktorske disertacije ispoljila izuzetnu sposobnost i stručnost u postavci, pripremi i realizaciji eksperimenata, korišćenju različitih instrumentalnih tehnika, analizi rezultata merenja i kompletnoj statističkoj evaluaciji, poznavanju savremenih statističkih i matematičkih programskih paketa (*SPSS, MiniTab, Matlab, Statistica*). Kandidat poseduje sve kvalitete koji su neophodni za samostalni naučni rad, kompetentnost za rešavanje novih izazova i problema, kao i izuzetnu sposobnost za saradnju sa kolegama iz različitih oblasti istraživanja, koja je ispoljena tokom izrade ove doktorske disertacije.

4. OSTVARENI NAUČNI DOPRINOS

Prikaz ostvarenih naučnih doprinosa

Krajnji rezultat ove doktorske disertacije ima dvostruki značaj:

- naučni, jer je osnova celog rada bila razrada metoda i postupaka u okviru analitičke hemije, sa posebnim akcentom na izbor, primenu i definisanje hemometrijskih metoda za kompleksnu analizu matrica dobijenih višegodišnjim merenjem i praćenjem parametara kvaliteta različitih tipova voda;
- praktični, jer predložene metode i postupci mogu da budu primenjene za analizu u realnim uzorcima vode, od ultračistih do otpadnih voda.

Poseban naučni doprinos ove doktorske disertacije ogleda se u sistematskom ispitivanju kvaliteta vode (površinske, podzemne i procesne) primenom izabranih analitičkih metoda i multivarijacionih hemometrijskih tehnika za ispitivanje uzroka prostorno/vremenske varijacije u kvalitetu vode. U okviru ove doktorske disertacije ostvaren je značajan doprinos u otkrivanju i razumevanju međusobnih odnosa pojedinih elemenata i parametara u složenom sistemu kakav je voda.

Na osnovu izloženog može se zaključiti da je kandidat svojim rezultatima dao značajan naučni doprinos pre svega u oblasti razvoja i primene hemometrijskih metoda za analizu, modelovanje i praćenje vodenih resursa u cilju projektovanja budućeg monitoringa. Izborom optimalnih parametara kvaliteta vode, dakle izdvajanjem ključnih varijabli iz kompleksne matrice izvršeno je modelovanje podataka, definisane su grupe zavisnih promenljivih, klasifikovani su objekti po sličnosti, razvijeni su modeli za predviđanje parametara koji najviše doprinose razdvajanju uzoraka po lokacijama, po sezonama uzorkovanja (godišnja doba) ili po godinama praćenja.

Na osnovu izloženog može se zaključiti da je kandidat svojim rezultatima dao značajan naučni doprinos pre svega u oblasti razvoja i primene hemometrije i multivarijacione statističke analize u procesu karakterizacije, klasifikacije i procene kvaliteta voda.

Kritička analiza rezultata

Istraživanja u okviru ove disertacije koncipirana su na osnovu definisanih ciljeva i detaljne analize literaturnih podataka iz oblasti istraživanja o vodama i vodnim resursima, zaštite životne sredine, i primene hemometrijskih metoda u oblasti kontrole i praćenja zagađenja voda. S obzirom na složenost problematike i činjenicu da trenutni kvalitet vode nije jednostavno i lako pratiti, primenjena je naučna metodologija koja problem kvaliteta vode posmatra u vidu jednog kompleksnog sistema. Osnovni elementi ove metodologije sastojali su se u odabiru i razradi metoda za ispitivani predmet istraživanja, izboru lokacija na kojima će se vršiti uzorkovanje, izboru adekvatnih analitičkih metoda za merenje i praćenje koncentracija jona u svim tipovima voda i razradi i primeni odabranih hemometrijskih metoda. Primenjena metodologija omogućila je da se dobiju relevantni podaci o kvalitetu vode, koje je potrebno procesuirati i redukovati, izabrati ključne promenljive i izvršiti modelovanje pomoću tih parametara. Poseban doprinos predstavlja celovitost i povezanost analitičkog i statističkog pristupa, koji je rezultirao u otkrivanju veza između elemenata, grupisanju na osnovu njihovih sličnosti ili razlika u grupe, ukazao na način pojavljivanja promenljivih, njihovo poreklo u vodi i uzroke njihove varijabilnosti. Uvidom u u literaturu iz ove oblasti istraživanja, može se zaključiti da rezultati postignuti u okviru ove disertacije predstavljaju doprinos i napredak u ovoj oblasti. Posebno su značajni rezultati koji predstavljaju primenu hemometrijskih metoda u oblasti ultračistih procesnih voda, jer ta oblast nije dovoljno ispitana, i može se označiti kao početak praktične primene statističkih multivarijacionih tehnika u analizi kompleksnih sistema, kakav je sistem voda-para.

Očekivana primena rezultata u praksi

Kako su istraživanja obuhvaćena ovom doktorskom disertacijom izvedena prateći najsavremenije svetske trendove, postignuti rezultati mogu se koristiti kao osnova za ispitivanje, analizu i praćenje kvaliteta voda, i površinskih i podzemnih i procesnih. S obzirom na korisnost i veliki potencijal multivarijacionih statističkih tehnika u svim segmentima savremenog društva, kao i ekonomski značaj pravovremenog upravljanja vodnim resursima, rezultati ove doktorske disertacije mogu se upotrebiti za poboljšanje monitoring sistema tako što bi se redukovao broj parametara koje treba pratiti i smanjila učestanost merenja u vodovodu, industriji i drugim kategorijama društva, konkretno u termoelektranama EPS-a i u JKP BVK. Prikazani rezultati se mogu primeniti i kao osnova za dalja istraživanja u ovoj oblasti, sa ciljem poboljšanja efikasnosti procesa monitoringa.

Verifikacija rezultata u časopisima i saopštenjima na konferencijama

Kandidat mr Dragana Z. Živojinović je svoje rezultate potvrdila objavljivanjem radova u časopisima međunarodnog značaja i saopštavanjem radova na međunarodnim skupovima. Iz disertacije su proistekla dva rada objavljena u vrhunskim međunarodnim časopisima, jedan rad objavljen u časopisu međunarodnog značaja, jedno saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u celini, dva saopštenja sa međunarodnih skupova štampanih u izvodu i jedno saopštenje sa domaćeg skupa.

U vrhunskom časopisu međunarodnog značaja M21

3. **D.Z. Živojinović**, Lj.V. Rajaković, Application and validation of ion chromatography for the analysis of power plants water: Analysis of corrosive anions in conditioned water – steam cycles, *Desalination*, 275 (2011) 17–25, ISSN: 0011-9164, IF(2011)=2,590
4. V.N. Rajaković-Ognjanović, **D.Z. Živojinović**, B.N. Grgur, Lj.V. Rajaković, Improvement of chemical control in the water–steam cycle of thermal power plants, *Appl. Therm. Eng.* 31 (2011) 119–128, ISSN: 1359-4311, IF(2011)=2,064

Rad u časopisu međunarodnog značaja M23

2. **D.Z. Živojinović**, V.N. Rajaković-Ognjanović, A. Onjia, Lj.V. Rajaković, Spatial variations in the distribution of trace ionic impurities in the water–steam cycle in a thermal power plant based on a multivariate statistical approach, *Central European Journal of Chemistry*, prihvaćen za štampu (29.04.2013.), ISSN: 1895-1066, IF(2011)=1,073

Rad u časopisu nacionalnog značaja M52

1. **D. Čičkarić**, J. Marković, Lj. Rajaković, Određivanje tragova jona gvožđa u ultra čistim vodama metodom GF-AAS, *Kvalitet voda*, 2, (2004) 14-16.

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u celini – M33

1. **D.Z. Čičkarić-Živojinović**, Lj.V. Rajaković, Analysis of corrosion parameters in conditioned water-steam cycle in the power plants, Second Regional Symposium on Electrochemistry, South-East Europe RSE-SEE 2, Book of Abstracts, p. 39, Proceedings on CD-rom, Belgrade, Serbia (2010), ISBN 978-86-7132-044-3.

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u izvodu – M34

1. D.Z. Živojinović, A. Perić-Grujić, S. Stanković, N. Lukić, **Lj.V. Rajaković**, Chemometry and metrology. Tools for extracting important information of water purification units, International Conference, *Extraction of the organic compounds*, ICEOC-2010, Voronezh, Book of abstracts, 65 (2010)
2. D.Z. Živojinović, N.A. Lukić, S.S. Ražić, **Lj.V. Rajaković**, Assessment of river water quality by applying multivariate analysis, European Conference on Analytical Chemistry, Euroanalysis, Belgrade, 2011, Poster SC05.

Saopštenje sa domaćeg skupa štampano u izvodu – M64

1. D.Z. Živojinović, N.A. Lukić, **Lj.V. Rajaković**, Primena multivarijantne analize u proceni kvaliteta površinske vode: reka Sava, Poster AH P5, Jubilarno 50. savetovanje Srpskog hemijskog društva, Beograd, Knjiga izvoda radova (2012)

5. ZAKLJUČAK

Kratak osvrt na disertaciju u celini

Na osnovu svega iznetog Komisija smatra da doktorska disertacija kandidata mr Dragane Z. Živojinović (rođ. Čičkarić), dipl. inž. tehnologije, pod nazivom „**Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode**” predstavlja značajan i originalan naučni doprinos u oblasti Hemije i hemijske tehnologije, što je potvrđeno objavljivanjem radova u časopisima međunarodnog značaja i saopštenjima na međunarodnim i domaćim konferencijama. Predmet i ciljevi istraživanja su jasno definisani i ostvareni.

Komisija takođe smatra da doktorska disertacija pod nazivom „**Razvoj i primena hemometrijskih metoda za klasifikaciju i procenu kvaliteta vode**” u potpunosti ispunjava sve zahtevane kriterijume kvaliteta, te da je kandidat ispoljio izuzetnu naučno-istraživačku sposobnost i zrelost u svim fazama izrade ove disertacije.

Predlog komisije Nastavno-naučnom veću

Imajući u vidu kvalitet, obim i naučni doprinos postignutih rezultata u okviru ove disertacije, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću TMF-a da prihvati ovaj Izveštaj i da ga zajedno sa podnetom disertacijom kandidata da na uvid javnosti u zakonski predviđenom roku, i uputi na konačno usvajanje Veću naučnih oblasti tehničkih nauka Univerziteta u Beogradu, te da, nakon završetka ove procedure, pozove kandidata na usmenu odbranu disertacije, pred Komisijom u istom sastavu.

Beograd, 17.06.2013.

ČLANOVI KOMISIJE

Dr Ljubinka Rajaković, red. prof. TMF-a

Dr Aleksandra Perić-Grujić, van. prof. TMF-a

Dr Boris Lončar, van. prof. TMF-a

Dr Antonije Onjia, naučni savetnik, INN Vinča