



# ХЕМОМЕТРИКА

Авторы: А. Л. Померанцев

---

ХЕМОМЕТРИКА (от *хемо...* и *...метрия*), междисциплинарная наука, целью которой является получение химич. информации с помощью математич. методов анализа данных. Использует базовые методы из смежных областей (статистика, прикладная математика, информатика) для решения проблем, относящихся к химии, биохимии, медицине, биологии и технологии. Х. зародилась в 1974 как раздел *аналитической химии*, которая до сих пор остаётся гл. потребителем методов Х. Сейчас Х. активно применяется для решения разл. прикладных задач, если есть необходимость в анализе больших данных и поиске закономерностей. Некоторые крупные подразделы Х. выделились в самостоят. науч. дисциплины, напр. молекулярное моделирование (QSAR), *хемоинформатика*, а также вошли в такие дисциплины, как геномика, протеомика, метаболомика, статистич. и аналитич. контроль процессов.

Гл. принцип Х. – использование многомерного подхода при планировании эксперимента и анализе его результатов, что позволяет уменьшить неопределённость результата за счёт увеличения числа переменных. Выявление в данных полезной информации, т. е. отделение её от несодержательной информации, называемой шумом, всегда проводится с учётом поставленных целей. Многомерность и шум приводят к тому, что в данных проявляются не систематические (т. е. причинные), а случайные (т. е. корреляционные) связи между переменными. Для выявления связей используются проекционные методы, такие как метод главных компонент (principal component analysis, PCA) и метод проекций на латентные переменные (projection on latent structures, PLS). В Х. применяются в осн. формальные многофакторные линейные модели, которые полезны в тех случаях, когда нельзя использовать содержательный физико-химич. подход. Применимость формальных моделей подтверждается эмпирически с помощью независимого проверочного набора или методом перекрёстной проверки.

В Х. выделяют три осн. направления. Градуировка (калибровка) – метод, моделирующий причинные связи между двумя блоками переменных (X и Y) с целью предсказания значений переменных Y по известным значениям переменных X. Классификация – метод моделирования групп переменных (классов) с целью выявления принадлежности нового объекта к одному или нескольким классам. Разделение кривых – метод разделения составного сигнала (напр., в [спектроскопии](#)) на составные части (т. н. чистые спектры). В Х. развиваются и др. направления: планирование эксперимента, метрология, контроль качества, тензорный анализ.

## Литература

Лит.: Родионова О. Е., Померанцев А. Л. Хемометрика: достижения и перспективы // Успехи химии. 2006. Т. 75. № 4; Practical guide to chemometrics / Ed. by P. Gemperline. 2nd ed. Boca Raton, 2006; Померанцев А. Л. Хемометрика в Excel. Томск, 2014.