

УДК 543:51(075)
ББК Г4:22.1я7
У52

*Печатается по решению редакционно-издательского совета
Казанского национального исследовательского технологического университета*

*Рецензенты:
д-р хим. наук, проф. Г. А. Евтюгин
канд. геол.-минерал. наук, доц. Э. А. Королев*

Умарова Н. Н.
У22 Введение в хемометрику : учебно-методическое пособие / Н. Н. Умарова, Н. И. Валеева; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2020. – 116 с.

ISBN 978-5-7882-2843-3

Издание включает теоретические основы по наиболее важным методам анализа многомерных данных: методу главных компонент и проекции на латентные структуры, а также практические задания для самостоятельного выполнения.

Предназначено для магистров, обучающихся по направлению подготовки 27.04.01 «Стандартизация и метрология», а также для аспирантов специальности «Аналитическая химия» и специалистов, интересующихся современными методами анализа данных.

Подготовлено на кафедре аналитической химии, сертификации и менеджмента качества.

УДК 543:51(075)
ББК Г4:22.1я7

ISBN 978-5-7882-2843-3

© Умарова Н. Н., Валеева Н. И., 2020
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2020

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1. МАТРИЦЫ МНОГОМЕРНЫХ ДАННЫХ.....	5
2. МНОЖЕСТВЕННЫЙ КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ И РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ	10
2.1. Корреляционный анализ	10
2.2. Множественная линейная регрессия (МЛР).....	13
3. МЕТОДЫ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ.....	19
3.1. Предварительная обработка данных.....	19
3.2. Кластерный анализ	21
3.2.1. Меры расстояния.....	21
3.2.2. Иерархическая кластеризация	23
3.2.3. Неиерархическая кластеризация.....	29
4. МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ (МГК)	32
4.1. Метод главных компонент на примере «Люди и страны».....	41
4.2. Наглядное представление результатов МГК-анализа	47
4.2.1. Графики счетов.....	47
4.2.2. Графики нагрузок	48
4.3. МГК: шаг за шагом.....	50
Задания	53
5. МНОГОМЕРНАЯ КАЛИБРОВКА	65
5.1. Стадии калибровки и предсказания	65
5.2. Требования к калибровочному и тестовому наборам	66
5.3. Одномерная регрессия и множественная линейная регрессия (МЛР).....	68
5.4. Регрессия на главные компоненты (РГК)	71
5.5. Проекция на латентные структуры (ПЛС).....	72
5.6. Особенности многомерной калибровки многокомпонентных смесей.....	83
Задания	90
ЛИТЕРАТУРА.....	102
ПРИЛОЖЕНИЕ	104