

Что такое хемометрика?

Определение IUPAC:

Хемометрика – это наука о соотношении измерений, сделанных над химической системой или процессом с состоянием системы путем применения математических и статистических методов анализа.

Химия: **Chemo**

Математика, статистика: **metrics**



Chemometrics

Примеры задач в аналитической химии

Можно ли диагностировать заболевание у пациента, сняв ЯМР-спектр образца его слюны?

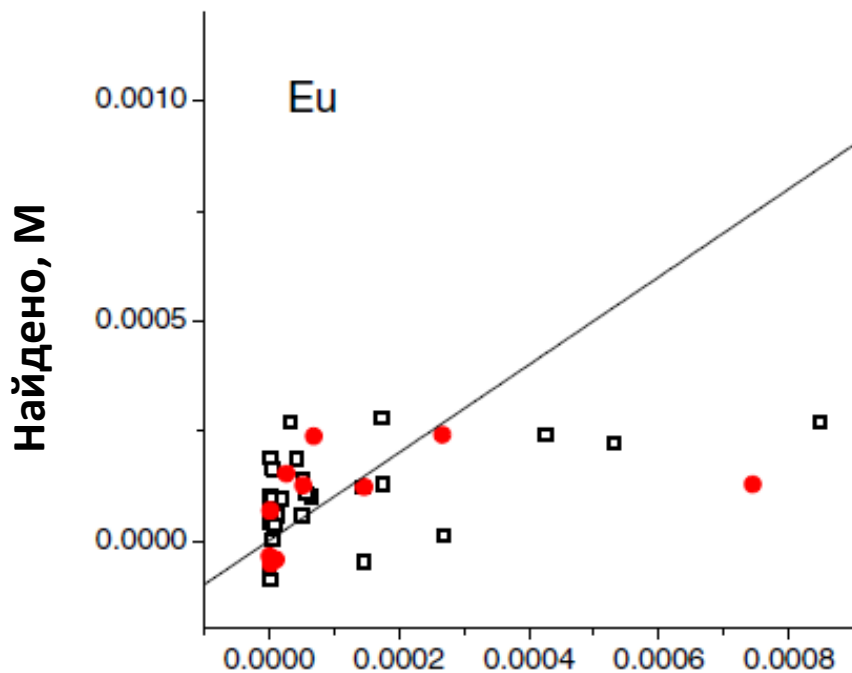
Можно ли по хроматограмме узнать регион происхождения вина и если да, то **какие** именно особенности хроматограммы позволяют это сделать?

Можно ли прогнозировать оценки дегустаторов кофе в образце, измерив вольтамперные характеристики набора электродов в этом образце?

Как, зная содержание элементов в старинной монете, определить место и время ее чеканки?

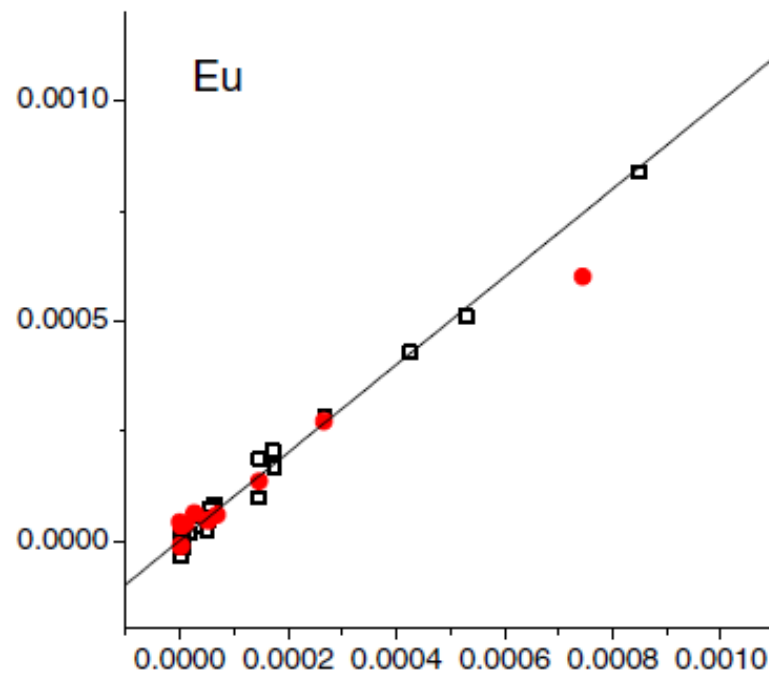
Снижение погрешности определения европия при рентгенофлуоресцентном анализе

Обработка спектров традиционным методом

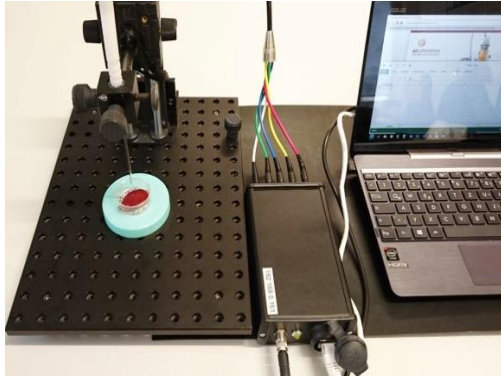


Обработка спектров методами хемометрики

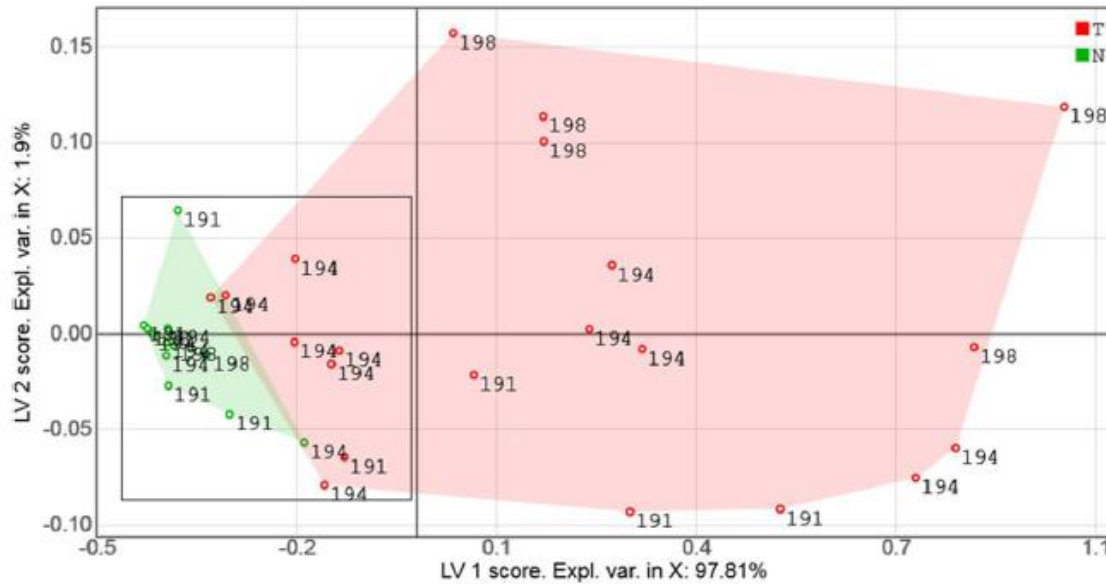
Введено, М



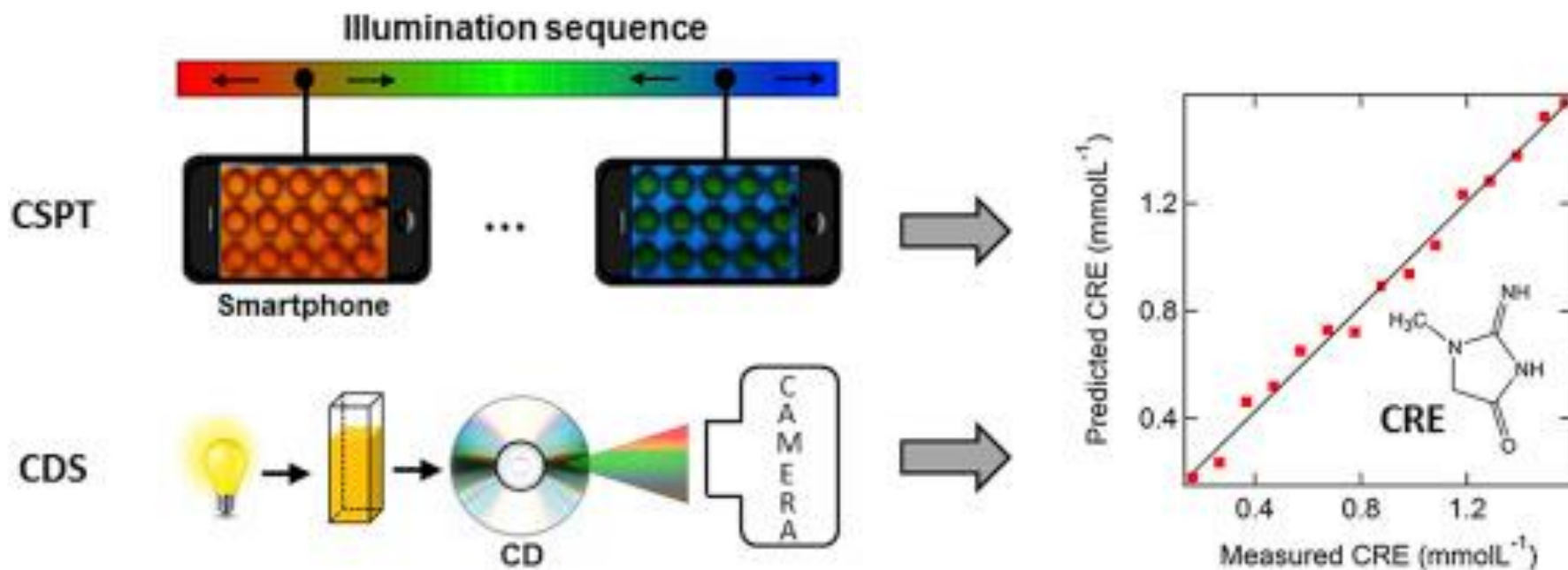
Диагностика границ раковых опухолей с помощью БИК-сенсоров и хемометрики



Зеленые области – здоровая ткань
Красные области – опухоль



Определение креатинина в моче с помощью фотокамеры мобильного телефона



Международное сотрудничество

