

С. В. Кучерявский, В. В. Панчук, Ю. Б. Монахова, Д. О. Кирсанов

ВВЕДЕНИЕ В ХЕМОМЕТРИКУ**Интернет-издание, 2023. 372 с.**

В сентябре 2023 года на сайте Российского хеометрического общества [1] размещена электронная версия учебника “Введение в хеометрику”. Книга доступна для свободного скачивания. Хеометрические методы и подходы сейчас стремительно набирают популярность как в аналитической химии, так и во многих смежных областях. Количество различных учебных материалов по хеометрике в настоящее время поистине огромно, однако число русскоязычных пособий по этой теме можно пересчитать по пальцам. Авторы поставили перед собой задачу восполнить этот пробел. Весь авторский коллектив – преподаватели российских и зарубежных университетов, поэтому в книге использован простой и доступный язык изложения с множеством практических примеров и без глубокого погружения в математические подробности методов хеометрики. Именно такой вариант изложения материала подходит для студентов и аспирантов химических и смежных специальностей, для которых знакомство с высшей математикой и линейной алгеброй заканчивается, как правило, на втором курсе обучения.

Одной из особенностей предлагаемого учебника является его практическая ориентированность. Например, изложение сути алгоритма проекций на латентные структуры без навыков его практического применения вряд ли будет полезно читателям, поэтому все описанные в учебнике хеометрические алгоритмы сопровождаются примерами вычислений и программным кодом, выполненным в среде R [2]. Приведенный код позволяет самостоятельно применять изложенные алгоритмы на практике, используя, например, свои собственные данные или примеры из учебника. Выбор именно R в качестве рабочей среды для этого учебника неслучаен. R доступен бесплатно для всех популярных платформ и очень востребован как инструмент для анализа и визуализации данных. Абсолютно все классические методы хеометрики и практически все самые последние разработки в этой

области реализованы в виде подключаемых библиотек R, что избавляет пользователя от необходимости самостоятельно писать код для их реализации.

Учебник состоит из небольшого введения и шести глав. Рассмотрены все наиболее широко применяемые методы и подходы к обработке многомерных данных в химии: метод главных компонент, алгоритмы классификации (метод k ближайших соседей, SIMCA, логистическая регрессия, дискриминационный анализ), методы многомерной регрессии (регрессия по главным компонентам, проекции на латентные структуры), методы предварительной обработки данных и анализ независимых компонент. Кроме этого, первая глава дает подробное введение в методы прикладной статистики, необходимое для понимания многомерных методов.

Выбор в пользу открытой публикации в виде интернет-издания сделан авторами сознательно, чтобы обеспечить максимально широкую доступность материалов и способствовать популяризации хеометрических подходов к обработке и анализу данных среди самой широкой аудитории. Кроме того, такой вариант предполагает “открытую архитектуру” и дает возможность легко постепенно добавлять новые материалы к учебнику, поскольку большое количество тем современной хеометрики осталось “за кадром” этой первой версии книги. Этот учебник, несомненно, будет полезен в освоении предмета хеометрики всем заинтересованным читателям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

<https://www.chemometrics.ru/ru/>
(дата обращения 25.12.2023).

<https://www.r-project.org/>
(дата обращения 25.12.2023).

В.П. Колотов