

## XEMOMETRIKA FANINING PREDMETI VA VAZIFALARI.

**Amonova Mahliyo Safarovna**

*Samarqand davlat veterinariya meditsinasi, chorvachilik va biotexnologiyalar universiteti Toshkent filiali, Tabiiy, gumanitar fanlar va jismoniy madaniyat kafedrasida assistentlari*

**Annotatsiya:** *maqolada xemometrika fanining predmeti va vazifalari haqida fikrlar bayon etilgan.*

**Kalit so'zlar:** *Kalibrash va prognozlash, metabolomika va proteomika, spektroskopiya, xemoformatika*

Xemometriya - bu kimyoviy tajribalar va o'lchovlardan olingan ma'lumotlarni tahlil qilish va sharhlash uchun statistika, matematika va kimyo tamoyillarini birlashtirgan fan sohasi. U turli ilmiy va sanoat ilovalarida muhim rol o'ynaydi. Tadqiqotchilar va tahlilchilarga murakkab kimyoviy ma'lumotlar to'plamidan qimmatli tushunchalarni olishda yordam beradi.

Xemometrika fanining predmeti statistik usullar va matematik algoritmlarni ishlab chiqish va qo'llashni o'z ichiga oladi:

Ma'lumotlarni oldindan qayta ishlash: Xemometriklar spektroskopiya, xromatografiya va massa spektrometriyasi kabi turli xil analitik usullardan olingan xom ashyo bilan shug'ullanadilar. Ma'lumotlar sifatini yaxshilash uchun ma'lumotlarni normallashtirish, asosiy tuzatish va shovqinlarni filtrlash kabi dastlabki ishlov berish usullari qo'llaniladi.

Ko'p o'zgaruvchan tahlil: Xemometriya bir vaqtning o'zida bir nechta o'zgaruvchilarga ega (spektral, xromatografik cho'qqilar va boshqalar) ma'lumotlar to'plamini tahlil qilishga qaratilgan. Tegishli ma'lumotlarni ajratib olish va ma'lumotlardagi naqshlarni aniqlash uchun asosiy komponentlar tahlili (PCA), qisman eng kichik kvadratlar (PLS) va ko'p o'zgaruvchan egri aniqlik (MCR) kabi usullar qo'llaniladi.

Kalibrash va prognozlash: Analitik kimyoda xemometrika miqdoriy tahlil uchun kalibrash modellarini yaratish uchun ishlatiladi. O'lchangan kimyoviy xususiyatlarni ma'lum konsentratsiyalar bilan bog'lash orqali ushbu modellar noma'lum namunalarning konsentratsiyasini taxmin qilishlari mumkin.

Eksperimental dizayn: Xemometrik usullar eng kam xarajat va resurslar bilan ma'lumotlarni to'plashni optimallashtiradigan eksperimentlarni loyihalashda yordam beradi. Bunga eksperimental makonni samarali o'rganish uchun Eksperimentlar Dizayni (DOE) kabi usullar kiradi.

**Naqshni tanib olish:** Xemometriya kimyoviy tarkibidagi o'xshashlik yoki farqlarga asoslangan naqsh va guruh namunalari aniqlashga yordam beradi. Bu namunalarni tasniflash va klasterlash kabi vazifalar uchun foydalidir.

**Jarayonni boshqarish:** Sanoat dasturlarida kimyoviy jarayonlarni real vaqt rejimida kuzatish va nazorat qilish, sifat va samaradorlikni ta'minlash uchun xemometrik vositalardan foydalanish mumkin.

Xemometrika - farmatsevtika, atrof-muhit monitoringi, oziq-ovqat va ichimliklar, sud tibbiyoti va materialshunoslik kabi turli sohalarda qo'llaniladi. Murakkab kimyoviy ma'lumotlardan tushunchalar olish orqali xemometriya kimyoviy tizimlarni yaxshiroq tushunishga va tadqiqot, ishlanmalar hamda ishlab chiqarish jarayonlarida asosli qarorlar qabul qilishga yordam beradi.

Xemometrika kimyoning turli sohalarida dolzarbdir, jumladan:

1. **Analitik kimyo:** Xemometriya spektroskopik ma'lumotlar (masalan, UV ko'rinadigan, IR, NMR), xromatografik ma'lumotlar (masalan, HPLC, GC) va massa spektrometriya ma'lumotlari kabi murakkab kimyoviy ma'lumotlarni tahlil qilishda muhim rol o'ynaydi.

2. **Farmatsevtika fanlari:** Dori vositalarini ishlab chiqish, dori vositalarini ishlab chiqish va farmatsevtika mahsulotlari sifatini nazorat qilishda qo'llaniladi.

3. **Atrof-muhit kimyosi:** Xemometriya ifloslanish darajasini tushunish va manbalarni aniqlash uchun havo va suv sifati o'lchovlari kabi atrof-muhit ma'lumotlarini tahlil qilishda yordam beradi.

4. **Oziq-ovqat fani:** Oziq-ovqat mahsulotlarini tahlil qilish va autentifikatsiya qilish, ifloslantiruvchi moddalarni aniqlash va oziq-ovqat mahsulotlarini qayta ishlash usullarini optimallashtirish uchun ishlatiladi.

5. **Jarayonni nazorat qilish va monitoringi:** Xemometrika sanoat jarayonlarida kimyoviy reaksiyalarni kuzatish va nazorat qilish, mahsulot sifati va barqarorligini ta'minlash uchun ishlatiladi.

6. **Metabolomika va proteomika:** Biologik tizimlarni o'rganishda xemometrika metabolomik va proteomik tajribalarning keng ko'lamli ma'lumotlarini tahlil qilishga yordam beradi.

Umumiy xemometrik usullarga asosiy komponentlar tahlili (PCA), qisman eng kichik kvadratlar regressiyasi (PLS), klaster tahlili va spektral va xromatografik ma'lumotlarni qayta ishlashning turli shakllari kabi ko'p o'lchovli tahlil usullari kiradi. Ushbu usullar tadqiqotchilarga ma'lumotlarning naqshlari, korrelyatsiyalari va tendensiyalarini aniqlash, bashorat qilish va asosiy kimyo haqida ko'proq ma'lumot olishga yordam beradi.

7. **Spektroskopiya:** Xemometriya infraqizil spektroskopiya, ultrabinafsha va ko'rinadigan spektroskopiya va yadro magnit-rezonans (NMR) spektroskopiya kabi spektroskopik usullarda keng qo'llaniladi. U murakkab spektral ma'lumotlarni tahlil

qilishda yordam beradi va materialshunoslik, farmatsevtika va atrof-muhit monitoringi kabi sohalarda qo'llanilishi mumkin.

8. Kalibrlash va miqdorni aniqlash: Xemometriya kalibrlash modellarida asboblarning javoblari va namunalardagi analit konsentratsiyasi o'rtasidagi munosabatni o'rnatish uchun ishlatiladi. Ushbu modellar aralashuv va shovqin mavjud bo'lganda ham aniq miqdorni ta'minlaydi.

9. Xemoinformatika: Xemometriya molekulyar tuzilish, biologik faollik va kimyoviy xossalarning kabi kimyoviy ma'lumotlarni qayta ishlash uchun hisoblash usullari bilan birlashtiriladi. Bu dori vositalarini ishlab chiqish, virtual skrining va tuzilma-faollik munosabatlari (SAR) tadqiqotlarida juda muhimdir.

10. Jarayonni optimallashtirish: Xemometriya tajribalardan olingan katta ma'lumotlar to'plamini tahlil qilish va eksperimental parametrlar maydonini samarali o'rganish orqali kimyoviy jarayonlarni optimallashtirishga yordam beradi. Bu tadqiqotchilarga optimal reaksiya sharoitlarini aniqlash va kerakli natijalarni maksimal darajada oshirish imkonini beradi.

11. Naqshni aniqlash: Xemometrik namunalarni kimyoviy xossalari asosida tasniflash kabi naqshlarni aniqlash vazifalari uchun ishlatiladi. Bu xemotaksonomiyada (kimyoviy profillar asosida o'simlik va hayvon turlarini aniqlash) va murakkab aralashmalarning sifatini nazorat qilishda qo'llaniladi.

12. Organoleptik tahlil: Oziq-ovqat va ichimliklar sanoatida xemometriya sensorli tahlil uchun qo'llaniladi, bu erda hissiy sezgilarni (masalan, ta'm, xushbo'y) kimyoviy tarkib bilan bog'laydi, natijada mahsulot rivojlanishi va sifati yaxshilanadi.

13. Tadqiqot va ishlanmalarda xemometrika: Tadqiqotchilar eksperimental ma'lumotlardan tushuncha olish, eksperimental dizaynlarni optimallashtirish va natijalarga ta'sir qiluvchi tegishli o'zgaruvchilar yoki omillarni aniqlash uchun xemometrik usullardan foydalanadilar. Bu tadqiqot faoliyatini tartibga solish va muhim jihatlarga e'tibor qaratish uchun bebahodir.

14. Analitik uskunalarning: Xemometriya asboblarning siljishi, shovqin va tizimli xatolarni tuzatish orqali analitik asboblarning ishlashini yaxshilashga yordam beradi, natijada o'lchov aniqligi yaxshilanadi.

15. Sifatni ta'minlash va sifat nazorati: To'g'ri va izchil kimyoviy o'lchovlar muhim bo'lgan sohalarda mahsulot sifati va me'yoriy hujjatlarga muvofiqligini ta'minlash uchun sifatni ta'minlash va nazorat qilish uchun kimyoviy o'lchovlar qo'llaniladi.

Umuman olganda, xemometrika zamonaviy analitik kimyoda muhim rol o'ynaydi, tadqiqotchilar va korxonalarni murakkab kimyoviy ma'lumotlardan qimmatli tushunchalarni olish uchun kuchli vositalar bilan ta'minlaydi. U murakkab ma'lumotlarni tahlil qilish texnikasi va hisoblash resurslarining mavjudligi ortib borishi bilan rivojlanishda davom etmoqda.

16. Ma'lumotlarni oldindan qayta ishlashda xemometriya: Xemometrik usullarni qo'llashdan oldin, ko'pincha shovqinni olib tashlash, asosiy siljishlarni tuzatish, ma'lumotlarni normallashtirish va etishmayotgan qiymatlarni qayta ishlash uchun ma'lumotlarni oldindan qayta ishlash talab qilinadi. Xemometrika ma'lumotlar tahlil qilish uchun mos shaklda bo'lishini ta'minlash uchun ma'lumotlarni oldindan qayta ishlashning turli usullarini taklif qiladi.

17. Analitik usullarni tekshirish: Analitik usullarni tasdiqlashda, ularning aniqligi, o'ziga xosligi va ishonchliligini ta'minlashda xemometrika muhim rol o'ynaydi. Xemometrik modellardan foydalangan holda tadqiqotchilar tahliliy usullarning ishlashini baholashlari hamda farmatsevtika va atrof-muhit monitoringi kabi sohalarda tartibga soluvchi talablarga rioya qilishlari mumkin.

18. Ko'p o'lchovli kalibrlash: Xemometriya ko'p o'lchovli kalibrlash imkonini beradi hamda analitik asboblarni kalibrlash va bir vaqtning o'zida bir nechta tahlil qiluvchi moddalar konsentratsiyasini bashorat qilish uchun ishlatiladigan kuchli usul. Bu, ayniqsa, an'anaviy bir o'lchovli usullar etarli bo'lmasligi mumkin bo'lgan murakkab aralashmalarda foydalidir.

19. Katta ma'lumotlarni tahlil qilishda xemometrika: Ma'lumotlar ishlab chiqarish imkoniyatlarining o'sishi bilan, ayniqsa, analitik kimyo va tegishli sohalarda xemometrika katta ma'lumotlar to'plamlaridan qimmatli ma'lumotlarni boshqarish, tahlil qilish va olishda muhim rol o'ynaydi. Bu tadqiqotchilarga katta hajmdagi ma'lumotlarni samarali qayta ishlash va yashirin naqsh va tendensiyalarni ochish imkonini beradi.

20. Avtomatlashtirish va robototexnika: Avtomatlashtirish va robototexnika zamonaviy laboratoriyalarda va sanoatda tobora ko'proq foydalanilmoqda. Xemometrika sizga analitik vositalarni avtomatlashtirish tizimlari bilan birlashtirishga yordam beradi, bu esa real vaqt rejimida ma'lumotlarni tahlil qilish va qarorlar qabul qilish imkonini beradi, natijada tezroq va samaraliroq ish jarayonlari amalga oshiriladi.

21. Dizayn bo'yicha sifatda xemometriya (QbD): Sifat dizayn bo'yicha - bu mahsulot va jarayonni chuqur tushunish orqali mahsulot sifatini ta'minlash uchun farmatsevtika rivojlanishida qo'llaniladigan tizimli yondashuv. Xemometriya QbD da muhim rol o'ynaydi. Eksperimentni loyihalash, jarayonni optimallashtirish va xavflarni baholashni osonlashtiradi.

22. Spektral tasvirlashda xemometriya: Spektral tasvir ko'p o'lchovli ma'lumotlar to'plamini yaratish uchun spektroskopiya va tasvirlash usullarini birlashtiradi. Xemometriya ushbu ma'lumotlar to'plamidan mazmunli ma'lumot olish uchun talab qilinadi, bu uni tibbiyot, qishloq xo'jaligi va masofadan zondlash kabi turli sohalarda qo'llash imkonini beradi.

23. Xemometriya va sun'iy intellekt (SI): Xemometrikani SI texnikasi bilan birlashtirish, masalan, mashinani o'rganish va chuqur o'rganish turli xil kimyoviy

ilovalarda muhim va'da berdi. SI ga asoslangan xemometriya aniqroq bashoratlarga, avtomatlashtirishga olib kelishi mumkin.

Obrazni aniqlash. Xemometrikada - tasvirni aniqlash, kimyoviy va spektroskopik tasvirlarga tasvirni tahlil qilish va naqshni aniqlash usullarini qo'llashni anglatadi. Ushbu soha kimyo va tegishli fanlardagi turli ilovalar uchun juda qimmatli bo'lishi mumkin bo'lgan tasvirlardan tegishli kimyoviy ma'lumotlarni olish uchun xemometrik, kompyuter ko'rish va tasvirni qayta ishlash elementlarini birlashtiradi.

Kimyoviy tahlilning yakuniy bosqichi tadqiqot savoli yoki analitik maqsad kontekstida ma'lumotlarni tahlil qilish natijalarini sharhlashni o'z ichiga oladi. Tadqiqotchilar natijalarni sharhlaydi, xulosalar chiqaradi va natijalarini ilmiy nashrlarda yoki texnik hisobotlarda hisobot qiladi. Butun jarayon davomida tahlilning ishonchliligi va aniqligini ta'minlash uchun sifat nazorati choralari talab qilinadi. Kalibrlash standartlari, blankalar va nusxalar analitik usulning ishlashini tekshirish va nazorat qilish uchun ishlatiladi. Umuman olganda, kimyoviy tahlilning alohida bosqichlari o'rtasidagi bog'liqlik yuqori iterativ va o'zaro bog'liqlikdir. Har bir bosqichning to'g'ri bajarilishi tahlilning umumiy muvaffaqiyatiga yordam beradi. Bu tahlil qilinadigan namunaning tarkibi va xususiyatlarini to'g'ri va qimmatli tushunishga olib keladi

#### FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Дребущак Т. Н. Введение в хемометрику. Новосибир. гос. ун-т, Новосибирск, 2013.
2. Hughes I. G., Hase T. P. A. Measurements and their uncertainties. Oxford Univ. Press Inc., 2010.
3. Brereton R. G. Chemometrics. Data analysis for the laboratory and chemical plant. Wiley, Chichester, UK, 2003. 489 p.
4. Брандт З. Анализ данных. Статистические и вычислительные методы для научных работников и инженеров: Пер. с англ. М.: Мир; АСТ, 2003. 686 с.
5. Родионова О. Е., Померанцев А. Л. Хемометрика в аналитической химии. 2006. URL: [http://www.chemometrics.ru/materials/articles/chemometrics\\_review.pdf](http://www.chemometrics.ru/materials/articles/chemometrics_review.pdf).