

Уникальность: на данный момент отсутствуют реализации аналогичного программного продукта;

Универсальность: метод работает как с реляционными, так и с нетабличными БД;

Простота использования пользователем: при анализе нереляционных баз данных пользователю необходимо указать только имя тэга;

Дешевизна реализации: описанный в данной статье метод достаточно прост для реализации, поскольку является лишь одним компонентом программного комплекса, осуществляющего интеллектуальный анализ данных.

Выводы

В работе проведен анализ предметной области, связанной с применением средств визуализации

технологии Data Mining. Рассмотрены актуальные программные приложения. Обозначена концепция выявления параметров данных, влияющих на тип их визуализации. Описаны алгоритмы работы анализаторов для реляционных данных и предложен алгоритм ранжирования типов визуализации для нереляционных данных.

Список литературы

1. http://ru.wikipedia.org/wiki/Data_mining
2. Коваленко О.С. Обзор проблем и перспектив анализа данных
3. http://megaputer.ru/data_mining.php
4. <http://www.kxen.com/>
5. <http://www.findpatent.ru/patent/248/2488159.html>
6. <http://ru.wikipedia.org/wiki/XML>
7. http://ru.wikipedia.org/wiki/Document_Object_Model

**Секция «Математическое моделирование химико-технологических процессов»,
научный руководитель – Антипина С.Г.**

**ИЗУЧЕНИЕ СКОРОСТИ МОНОМОЛЕКУЛЯРНОЙ
ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ**

Базова А.В., Самохвалова И.О., Антипина С. Г.
Волжский политехнический институт, филиал
Волгоградского государственного технического
университета, Волжский, e-mail: gelfj@live.ru

В истории химической кинетики мономолекулярные реакции занимают особое место, так как статистическая обработка экспериментальных данных при изучении скорости мономолекулярной химической реакции используется повседневно в химической

промышленности. Мономолекулярные реакции – химические реакции, в которых одна молекула подвергается превращению. К мономолекулярным реакциям относят многочисленные реакции распада сложных молекул (диссоциация) и изомеризации. Скорость химической реакции – количество вещества, которое вступает в реакцию или образуется при реакции за единицу времени в единице объема системы.

На практике при изучении скорости мономолекулярной химической реакции получили зависимость количества вещества в реакционной смеси к моменту времени, прошедшего от начала опыта:

x	3	6	9	12	15	18	21	24
y	57,6	41,9	31,0	22,7	16,6	12,2	8,9	6,5

Значительное число нелинейных зависимостей, встречающихся в химической практике, может быть описано следующими уравнениями:

$$y = a \cdot b^x; \quad y = a \cdot x^b; \quad y = \frac{x}{a + bx}$$

Первое и второе уравнения легко привести к линейному виду, прологарифмировав их:

$$(1) \ln y = \ln a + x \cdot \ln b \Rightarrow Y = A + Bx,$$

где $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $B = \ln b$;

$$(2) \ln y = \ln a + b \cdot \ln x \Rightarrow Y = A + bX,$$

где $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $X = \ln x$.

Для приведения третьего уравнения к линейному виду выполним преобразование:

$$y = \frac{x}{a + bx} \Rightarrow \frac{x}{y} = a + bx \Rightarrow Y = a + bx,$$

где $Y = \frac{x}{y}$.

На рис. 1. отображены диаграммы значений новых переменных (X_i , Y_i) для каждой из рассмотренных моделей. Для первой модели точки располагаются вдоль некоторой прямой, поэтому зависимость y от x выражается формулой $y = a \cdot b^x$.

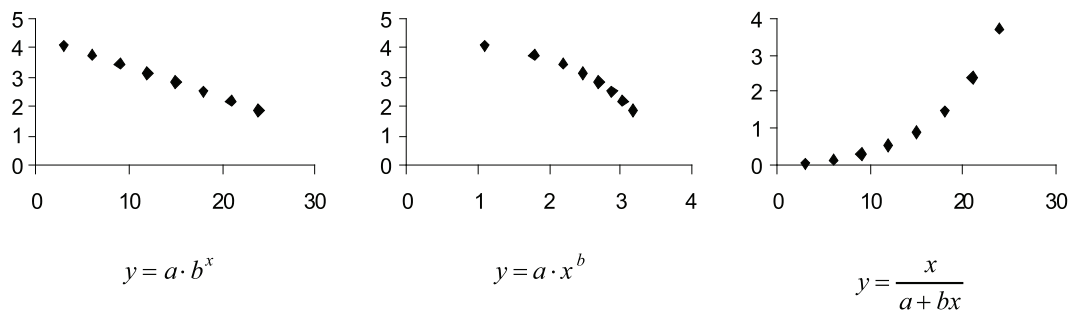


Рис. 1. Диаграммы рассеяния

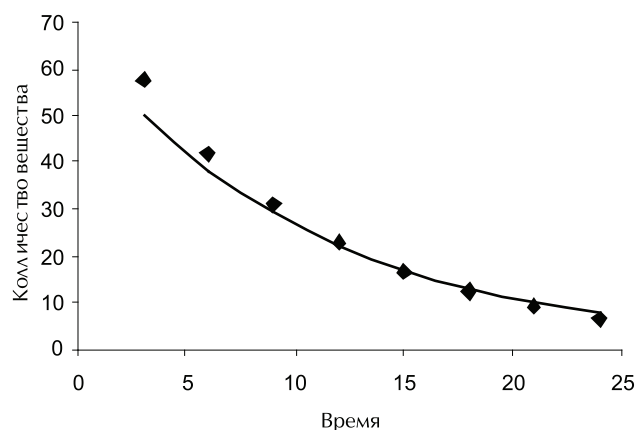


Рис. 2. Диаграмма рассеяния и выравнивающая опытные данные линия регрессии

Вычислив все необходимые параметры, построим уравнение линейной регрессии: $Y = 4,19 - 0,09x$. Тогда уравнение нелинейной регрессии будет иметь вид:

$$y = 65,96 \cdot 0,91^x.$$

На рисунке 2 построен график полученной зависимости, который подтверждает, что составленная модель хорошо воспроизводит опытные данные. Полученная регрессия позволяет находить оценки предполагаемого количества вещества в реакционной смеси к заданному моменту времени.

Список литературы

1. Антипина С.Г. Основы хемометрики. Часть 1. Прикладная статистика для химиков-технологов: учебное пособие / С.Г. Антипина, В.Ф. Каблов; ВПИ(филиал) ВолГТУ. – Волгоград: ИУНЛ ВолГТУ, 2013. – 140 с.
2. http://enc-dic.com/enc_chemistry/Monomolekuljarneg-reakcii-1882.html
3. Ахметов Н. С. Общая и неорганическая химия. Учеб. для вузов. 4-е изд., испр. М.: Высш. шк., Изд. центр «Академия», 2001. 743 с.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ РЕЦЕПТУРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ НА НАПРЯЖЕНИЕ ВУЛКАНИЗАТОВ ПРИ ИХ РАСТЯЖЕНИИ

Высочинская О.А., Гайдукова С.А., Антипина С.Г.
*Волжский политехнический институт, филиал
 Волгоградского государственного технического
 университета, Волжский,
 e-mail: olga8654@mail.ru www.volpi.ru*

Резина (вулканизат) – продукт вулканизации композиций на основе каучука. Промышленное производство резиновых изделий (вулканизатов) в России начало развиваться в конце XIX века. Ассортимент

выпускаемых резиновых изделий непрерывно изменялся в зависимости от развития техники и уровня промышленного производства. Резиновые изделия получили широкое распространение в быту и промышленной технике благодаря специфическим особенностям физических свойств резины. Резина обладает высокой эластичностью, способностью поглощать вибрации и ударные нагрузки (амортизировать их), достаточной механической прочностью, сопротивлением износу, стойкостью к воздействию масел, кислот, щелочей и прочих агрессивных химических сред, теплостойкостью, морозостойкостью и другими свойствами.

К резинам, применяемым для изготовления изделий, предъявляется определенный комплекс требований в соответствии с конкретными условиями эксплуатации. Поскольку изготовление и переработка резиновых смесей является наиболее энергоемкими процессами шинного и резинотехнического производства, снижение времени изготовления смесей и их вулканизации является важной задачей для предприятий резинотехнической промышленности.

Изучение влияния технологических добавок проводили в системах на основе каучуков, полученных растворной полимеризацией, характеризующихся низким содержанием некаучуковых компонентов.

В работе рассматривалось влияние рецептурно – технологических факторов на свойства вулканизатов. В ходе исследования были получены данные условного напряжения при удлинении 300% в МПа (признак Z) при варьировании содержания технического углерода от 30 до 70 масс. ч. на 100 масс. ч. каучука (признак X) и продолжительности вулканизации от 15 до 90 мин (признак Y).

Содержание ТУ, масс. ч	Продолжительность вулканизации, мин				
	15	30	45	60	90
30	1,7	3,4	3,8	4,2	4,0
40	1,8	4,8	5,5	6,0	5,6
50	2,9	6,9	8,0	8,0	8,1
70	6,6	12,4	14,5	14,9	15,2

Найдем значения выборочных коэффициентов корреляции результативного признака с каждым из факторных: $r_{xz} = 0,851$; $r_{yz} = 0,357$. Полученные коэффициенты корреляции показывают довольно сильную линейную зависимость напряжения при удлинении от содержания технического углерода; зави-

симость же напряжения от времени вулканизации не может считаться значимой.

Зависимость между двумя величинами при фиксированном значении третьей величины оценивается с помощью частного коэффициента корреляции первого порядка. Вычислим частный коэффициент