

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 $y = a \cdot b^x$.

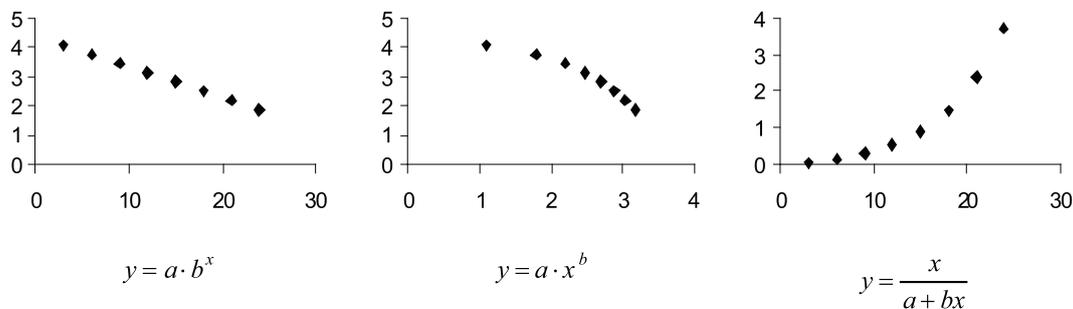


Рис. 1. Диаграммы рассеяния

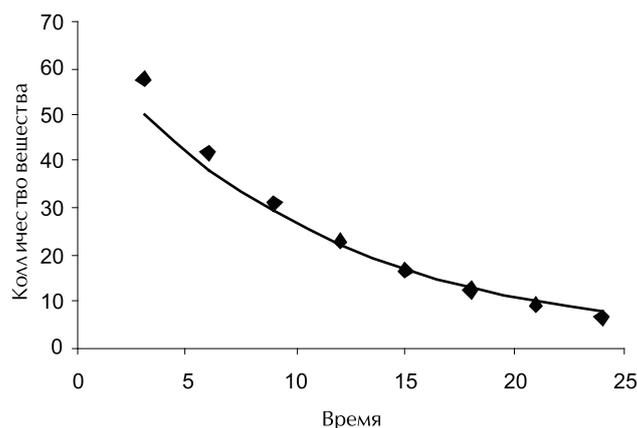


Рис. 2. Диаграмма рассеяния и выравнивающая опытные данные линия регрессии

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