

Полученная регрессионная модель хорошо отражает функциональную зависимость коэффициента теплоотдачи от стенок сосуда к кипящей воде.

**Список литературы**

1. Антипина С.Г. Основы хеометрики. 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://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9B%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D0%B0%D1%80%D0%B8%D0%B7%D0%B0%D1%86%D0%B8%D1%8F>.

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СОДЕРЖАНИЯ  
 ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА  
 И ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОСТИ ВУЛКАНИЗАЦИИ  
 НА КАЧЕСТВО РЕЗИН**

Нарыжный Д.А., Харламов Е.В., Антипина С.Г.

*Волжский политехнический институт, филиал  
 Волгоградского государственного технического  
 университета, Волжский, e-mail: 2010kharlamv@rambler.ru*

В промышленности процесс вулканизации является не редкостью. Открытие процесса вулканизации

приписывают Чарльзу Гудьёру, запатентовавшему его в 1844 году. Вулканизация – технологический процесс взаимодействия каучуков с вулканизирующим агентом, при котором происходит сшивание молекул каучука в единую пространственную сетку. Вулканизации подвергается обычно смесь каучука с различными компонентами, обеспечивающими необходимые эксплуатационные свойства резин: наполнителями (технический углерод, мел, каолин, полидисперсная кремнекислота), ускорителями вулканизации (ксантогенатами, тиазолами, сульфенамидами и т. д.). В зависимости от продолжительности вулканизации образуется различное число химических связей между макромолекулами каучука и соответственно изменяется весь комплекс физико-механических свойств получаемой резины. При проведении опыта по изучению влияния рецептурно-технологических факторов на свойства вулканизатов были получены данные сопротивления раздиру, выраженные в кН/м при варьировании содержания технического углерода от 30 до 70 масс. ч. на 100 масс. ч. каучука и продолжительности вулканизации от 15 до 90 мин.

Содержание ТУ, масс.ч	Продолжительность вулканизации, мин				
	15	30	45	60	90
30	39	39	37	37	35
40	61	55	55	50	52
50	80	66	64	64	62
70	87	75	71	68	66

Множественный коэффициент корреляции, характеризующий степень линейной связи резульгитивного признака и совокупности факторных признаков равен  $r = 0,906$  что говорит о наличии сильной линейной зависимости. Найдем уравнение регрессии  $\tilde{z} = \tilde{a}_0 + \tilde{a}_1x + \tilde{a}_2y$ , отражающее эту зависимость. Используя средние значения, дисперсии и коэффициенты ковариации признаков, вычислим параметр регрессии:

$$\tilde{a}_1 = \frac{S_y^2 S_{xz} - S_{xy} S_{yz}}{S_x^2 S_y^2 - (S_{xy})^2} = 0,86 ;$$

$$\tilde{a}_2 = \frac{S_x^2 S_{yz} - S_{xy} S_{xz}}{S_x^2 S_y^2 - (S_{xy})^2} = -0,15 ;$$

$$\tilde{a}_0 = \bar{z} - \tilde{a}_1 \bar{x} - \tilde{a}_2 \bar{y} = 24,57 .$$

Здесь  $x$  – содержание технического углерода,  $y$  – продолжительность вулканизации,  $z$  – сопротивление раздиру.

Тогда уравнение регрессии принимает вид:

$$\tilde{z} = 24,57 + 0,86x - 0,15y .$$

Оценим качество полученной модели. Для этого вычислим коэффициент детерминации:

$$d = \frac{\sum_{i=1}^n (\tilde{z}_i - \bar{z})^2}{\sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z})^2} = 0,82 .$$

Проверка гипотезы о равенстве нулю генерального коэффициента детерминации для случая двух независимых факторов осуществляется с помощью статистики:

$$F = \frac{d \cdot (n-3)}{2(1-d)} = 39,17 .$$

Сравним найденное значение статистики с критической точкой распределения Фишера-Снедекора. Примем уровень значимости  $\alpha = 0,05$ . Число степеней свободы  $k_1 = 2, k_2 = n - 3 = 17$ , тогда  $F_{кр} = 3,59$ .

Так как  $F > F_{кр}$ , то уравнение регрессии признается значимым. Следовательно, полученная функциональная зависимость достаточно хорошо воспроизводит опытные данные.

**Список литературы**

1. Антипина С.Г. Основы хеометрики. Часть 1. Прикладная статистика для химиков-технологов: учеб. пособие / С.Г. Антипина, В.Ф. Каблов; ВПИ (филиал) ВолГТУ. – Волгоград: ИУНЛ ВолГТУ, 2013. – 140 с.  
 2. Патент РФ № 2380386 (27.01.2010). Вулканизуемая резиновая смесь.

**МАТЕМАТИКА НА СЛУЖБЕ У ХИМИИ ИЛИ  
 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ЗАКОНОВ  
 В ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ.**

Некрылов С.С., Кузьмин С.Ю.

*Волжский политехнический институт, филиал  
 Волгоградского государственного технического  
 университета, Волжский, e-mail: Nekrilov\_sergei@mail.ru*

Химия сродни не только искусству, но и волшебству. Многие химические опыты, сопровождающиеся неожиданным изменением цвета, объема или агрегатного состояния, производят на непосвященных людей магическое впечатление. Химикам присущ уникальный, характерный только для них, взгляд на окружающий мир. Химики должны проявлять такие характеристики креативной личности, как быстрота, точность, оригинальность мышления, богатое воображение, самообладание, мобильность, инновационность и уверенность в себе. Креативный химик всегда «чувствует вещество». Это проявляется и в

лаборатории, где создаются рецепты синтеза новых веществ, и в быту, где, например, бывает нужно подобрать подходящий клей или растворитель. Современные креативные химики при изучении химических процессов используют законы математики.

Для описания веществ и реакций используют теории, в которых роль математики настолько велика, что иногда трудно понять, где химия, а где математика. Отсюда следует, что и химия немислима без математики.

Математика для химиков – это, в первую очередь, полезный инструмент решения многих химических задач. Очень трудно найти какой-либо раздел математики, который совсем не используется в химии. Функциональный анализ и теория групп широко применяются в квантовой химии, теория вероятностей составляет основу статистической термодинамики, теория графов используется в органической химии для предсказания свойств сложных органических молекул, дифференциальные уравнения – основной инструмент химической кинетики, методы топологии и дифференциальной геометрии применяются в химической термодинамике. Выражение «математическая химия» прочно вошло в лексикон химиков. Многие статьи в серьезных химических журналах не содержат ни одной химической формулы, зато изобилуют математическими уравнениями.

Приложения математики в химии обширны и разнообразны. Ограниченности объема нашей статьи не позволяет нам показать много примеров, покажем это на двух примерах.

$$\frac{dN}{dt} = -\beta N (\beta > 0) \Rightarrow \frac{dN}{N} = -\beta dt \Rightarrow \ln N = -\beta t + C_1 \Rightarrow N = Ce^{-\beta t};$$

$$N(0) = C = N_0 \Rightarrow N = N_0 e^{-\beta t}.$$

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\beta \tau_{1/2}} \Rightarrow \tau_{1/2} = \frac{1}{\beta} \ln 2.$$

Вот лишь несколько примеров многогранности математики в химии. Они дают определенное, хотя, конечно, неполное представление о задачах, решаемых химиками с помощью математики, и ограничениях, которые химия накладывает на применяемую в ней математику.

#### Список литературы

1. Кузьмин, С.Ю. Креативность как личностная характеристика студента / С.Ю. Кузьмин // Качество. Инновации. Образование. – 2012. – № 5. – С. 20-26.
2. Химия и жизнь – XXI век, 1997, № 2, с. 5.

#### АДСОРБЦИЯ ДИОКСИДА СЕРЫ

Савинков И.И., Дейнекин М.А., Антипина С.Г., Матвеева Т.А.

*Волжский политехнический институт, филиал Волгоградского государственного технического университета, Волжский, e-mail: podval4eg@mail.ru*

Адсорбция – увеличение концентрации растворенного вещества у поверхности раздела двух фаз (твердая фаза-жидкость, конденсированная фаза – газ) вследствие нескомпенсированности сил межмолекулярного взаимодействия на разделе фаз. Адсорбция – всеобщее и повсеместное явление, имеющее место всегда и везде, где есть поверхность раздела между фазами. Наибольшее практическое значение имеет адсорбция поверхностно-активных веществ и адсорбция примесей из газа либо жидкости специальными высокоэффективными адсорбентами. В качестве адсорбентов могут выступать разнообразные материалы с высокой удельной поверхностью: пори-

Пример 1. Простое уравнение  $12x + y = 16$  в математике описывает прямую линию на плоскости. Оно имеет бесконечно много решений, в том числе и целочисленных. А для химика выражение  $12x + y$  описывает молекулярную массу углеводорода  $C_xH_y$  ( $12$  – атомная масса углерода,  $1$  – водорода). Молекулярную массу  $16$  имеет единственный углеводород – метан  $CH_4$ , поэтому только одно решение данного уравнения обладает химическим смыслом:  $x = 1$ ,  $y = 4$ .

Пример 2. Скорость химической реакции – это изменение количества вещества в единицу времени: для гомогенных процессов – в единице объема, для гетерогенных процессов – на единице поверхности раздела фаз. Математическая запись этого определения может быть записана: в виде

$$v_r = \pm \frac{dN}{Vdt} \text{ или } v_r = \pm \frac{dN}{sdt}$$

где  $N$  – количество вещества;  $t$  – время;  $V$  – объем;  $s$  – поверхность раздела фаз.

Пример 3. В радиоволновом распаде можно использовать дифференциального уравнения. Если  $N(t)$  – число не распавшихся частиц, то в соответствии с законом радиоактивного распада скорость распада пропорциональна числу не распавшихся частиц и следовательно можно найти период полураспада ( $\tau_{1/2}$ ), т.е. время, за которое распадается половина вещества, с помощью дифференциального уравнения:

стый углерод (наиболее распространённая форма – активированный уголь), силикагели, цеолиты, а также некоторые другие группы природных минералов и синтетических веществ.

Силикагель представляет собой высушенный гель, образующийся из перенасыщенных растворов кремниевых кислот ( $nSiO_2 \cdot mH_2O$ ) при  $pH > 5-6$ . Твердый гидрофильный сорбент.

Рассмотрим процесс адсорбции диоксида серы силикагелем.  $x$  – содержание  $SO_2$  в исходном газе, в объемных %,  $y$  – количество адсорбированного  $SO_2$ , в % от веса силикагеля.

$x$	2	4	6	8	10
$y$	8,8	13,7	17	18,9	20,4

Определим вид зависимости, соответствующей этим данным. Диаграмма данных представляет собой некоторую кривую (рис. 1). Для ее выпрямления воспользуемся формулой

$$\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x}.$$

Точки с координатами  $\left(\frac{1}{x_i}; \frac{1}{y_i}\right)$  лежат вдоль некоторой прямой (рис. 2), что отражает их линейную связь. Сделав замену переменных  $Y = \frac{1}{y}$ ,  $X = \frac{1}{x}$ , приходим к линейной функции  $Y = a + b \cdot X$ .