

«Компьютерное моделирование в науке и технике»,
ОАЭ (Дубай), 4–10 марта 2017 г.

Физико-математические науки

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕГРЕССИИ СО
СТОХАСТИЧЕСКИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СНИЖЕНИЯ
РАЗМЕРНОСТИ ДАННЫХ

Базилевский М.П.

Иркутский государственный университет путей
сообщения, Иркутск, e-mail: mik2178@yandex.ru

Регрессия со стохастическими переменными [1] имеет вид:

$$y_i = a + bx_i^* + \varepsilon_{y_i}, \quad x_i = x_i^* + \varepsilon_{x_i}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (1)$$

Модель (1) оценивается с помощью полного метода наименьших квадратов:

$$S = \sum_{i=1}^n (x_i - x_i^*)^2 + \frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i^*)^2 \rightarrow \min. \quad (2)$$

Для решения задачи (2) сначала находится оценка параметра b по формуле

$$\hat{b} = \frac{(D_y - \lambda D_x) + \sqrt{(D_y - \lambda D_x)^2 + 4\lambda K_{xy}^2}}{2K_{xy}}, \quad (3)$$

затем оценка параметра a по формуле

$$a = \bar{y} - b\bar{x}, \quad (4)$$

после чего определяются расчетные значения объясняющей переменной по формулам

$$x_i^* = x_i + \frac{b}{\lambda + b^2} (y_i - a - bx_i), \quad i = \overline{1, n}. \quad (5)$$

В работе [1] доказано, что если $\lambda = \sqrt{b}$, то сумма значений критериев детерминации R_x^2 и R_y^2 уравнений модели (1) максимальна, причем, $R_x^2 = R_y^2$. Из этого следует, что переменная x^* , являющаяся линейной комбинацией переменных x и y , сильнее всего коррелирует с каждой из них. Это обстоятельство можно использовать для решения задачи снижения размерности данных.

Список литературы

1. Базилевский М.П. Аналитические зависимости между коэффициентами детерминации и соотношением дисперсий ошибок исследуемых признаков в модели регрессии Деминга // Математическое моделирование и численные методы. – 2016. – №2(10). – С. 104–116.

Химические науки

ТЕПЛОЁМКОСТЬ АЛКЕНОВ

Виноградова М.Г., Тянтов А.В., Крылов П.Н.
Тверской государственный университет, Тверь,
e-mail: mgvinog@mail.ru

Цель данной работы – установление количественных корреляций «структура – теплоёмкость» в алкенах с помощью феноменологических методов, основывающихся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

Для этого в работе проведена оценка состояния численных данных по теплоёмкости алкенов, выведены расчётные схемы. Так для алкенов в четвёртом приближении получаем:

$$\begin{aligned} P_{C_n H_{2n}} = & h_{c-c} p_{c-c} + h'_{c-c} p'_{c-c} + h_{c=c} p_{c=c} + h_{c-n} p_{c-n} + \\ & + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x'_{cc1} \Gamma'_{cc} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x'_{ccc1} \Delta'_{ccc} + \\ & + x_{cc2} \tau_{cc} + x'_{cc2} \tau'_{cc} + x_{cc2}^c \tau_{cc}^c + x'_{cc2} \tau_{cc} + \\ & + x_{cc3} \omega_{cc} + x'_{cc3} \omega_{cc} + x_{cc4} v_{cc} + x'_{cc4} v'_{cc}, \end{aligned}$$

где C' – атом углерода у двойной связи; Γ_{cc} и Γ'_{cc} – эффективные взаимодействия пар атомов C через один атом соответственно во фрагментах $C-C-C$ и $C=C-C$, Δ_{ccc} и Δ'_{ccc} – соответствующие эффективные взаимодействия троек атомов C через один атом и т.д.

По данному уравнению был выполнен расчет теплоёмкости ряда алкенов.

Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметр v_{cc} пропадает, а параметры p_{c-c} , p'_{c-c} , $p_{c=c}$, p_{c-n} были заменены на параметр

$$a = p_{c-c} + p'_{c-c} + p_{c=c} + p_{c-n}.$$

В табл. 1. представлены, найденные МНК значения параметров и результаты расчёта теплоёмкости ряда алкенов

Таблица 1

Параметры и результаты расчета теплоёмкости алкенов (в кДж/моль) в четвёртом приближении

Параметр	a	Γ_{cc}	Γ'_{cc}	Δ_{ccc}	Δ'_{ccc}	τ_{cc}	τ'_{cc}	τ_{cc}^c	τ'_{cc}	ω_{cc}	ω'_{cc}	v'_{cc}
Значения параметров	8,782	20,081	-7,611	-33,885	-10,893	-3,291	4,022	-1,895	4,659	-1,169	-23,950	-9,560
$ \varepsilon $	1,2											
$\varepsilon_{\max}$	5,7											