

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 11-27-13-36 Подраздел: Математические алгоритмы в химии.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.354.081.7:004.021. Поступила в редакцию 8 февраля 2010 г.

Разведочный анализ в термодинамике равновесий. Классификация и прогнозирование силы уксусной кислоты.

© Бондарев Сергей Николаевич,¹ Зайцева Инна Сергеевна²
и Бондарев Николай Васильевич^{1*+}

¹ Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина. пл. Свободы, 4. г. Харьков, 61077.
Украина. E-mail: n_bondarev@ukr.net

² Харьковская национальная академия городского хозяйства. Ул. Маршала Бажанова, 17.
г. Харьков, 61002. Украина. E-mail: inna.zaitseva123@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: разведочные методы, факторный анализ, кластерный анализ, дискриминантный анализ, канонический анализ, деревья классификации, массив данных, константа диссоциации.

Аннотация

Многомерные разведочные методы – факторный анализ, кластерный анализ, дискриминантный анализ, канонический анализ, построение деревьев классификации применены для классификации и прогнозирования силы уксусной кислоты на основе физико-химических свойств водно-органических растворителей. Построены решающие правила классификации и показана перспективность применения нестатистических методов для классификации и прогнозирования силы уксусной кислоты в водно-органических растворителях.