

**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,<sup>1</sup> Зайцева Инна Сергеевна<sup>2</sup>  
и Бондарев Николай Васильевич<sup>1\*+</sup>

<sup>1</sup> Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина. пл. Свободы, 4. г. Харьков, 61077.  
Украина. E-mail: n\_bondarev@ukr.net

<sup>2</sup> 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.