

«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:

$$P_{C_n H_{2n}} = h_{c-c} P_{c-c} + h'_{c-c} P'_{c-c} + h_{c=c} P_{c=c} + h_{c-n} P_{c-n} +$$

$$+ x_{cc1} \Gamma_{cc} + x'_{cc1} \Gamma'_{cc} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x'_{ccc1} \Delta'_{ccc} +$$

$$+ x_{cc2} \tau_{cc} + x'_{cc2} \tau'_{cc} + x_{cc2}^c \tau_{cc}^c + x'_{cc2} \tau_{cc} +$$

$$+ x_{cc3} \omega_{cc} + x'_{cc3} \omega_{cc} + x_{cc4} \upsilon_{cc} + x'_{cc4} \upsilon'_{cc},$$

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 υ_{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_{ccc}	τ'_{ccc}	ω_{cc}	ω'_{cc}	υ'_{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
$ \bar{\varepsilon} $	1,2											
ε_{max}	5,7											

Таблица 2

Результаты расчета теплоёмкости ряда алкенов (Дж/мольК)

№	Молекула	C _p ⁰ (г, 298 К)		№	Молекула	C _p ⁰ (г, 298 К)	
		Опыт [1]	Расчет			Опыт [1]	Расчет
1	CH ₂ =CH ₂	42,9	43,9	16	c-CH ₃ CH ₂ CH=CHCH ₂ CH ₃	–	165,6
2	CH ₂ =CHCH ₃	64,3	62,6	17	t-CH ₃ CH ₂ CH=CHCH ₂ CH ₃	–	171,5
3	CH ₂ =CHCH ₂ CH ₃	85,7	86,0	18	CH ₂ =C(CH ₃)(CH ₂) ₂ CH ₃	135,6	136,6
4	c-CH ₃ CH=CHCH ₃	78,9	79,5	19	CH ₂ =CHCH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	142,4	137,8
5	t-CH ₃ CH=CHCH ₃	87,8	85,4	20	CH ₂ =CHCH ₂ CH(CH ₃) ₂	126,5	126,5
6	CH ₂ =C(CH ₃) ₂	89,1	90,6	21	(CH ₃) ₂ C=CHCH ₂ CH ₃	–	151,5
7	CH ₂ =CH(CH ₂) ₂ CH ₃	109,6	113,2	22	c-CH ₃ CH=C(CH ₃)CH ₂ CH ₃	–	150,7
8	c-CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₃	101,8	101,7	23	t-CH ₃ CH=C(CH ₃)CH ₂ CH ₃	126,6	132,3
9	t-CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₃	108,5	107,6	24	c-CH ₃ CH=CHCH(CH ₃) ₂	133,6	133,1
10	CH ₂ =C(CH ₃)CH ₂ CH ₃	110,0	110,7	25	t-CH ₃ CH=CHCH(CH ₃) ₂	141,4	139,0
11	CH ₂ =CHCH(CH ₃) ₂	118,6	118,6	26	CH ₂ =C(CH ₂ CH ₃) ₂	–	156,1
12	(CH ₃) ₂ C=CHCH ₃	105,0	102,7	27	CH ₂ =C(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	–	172,4
13	CH ₂ =CH(CH ₂) ₃ CH ₃	–	165,3	28	CH ₂ =CH(CH ₃) ₃	126,5	126,5
14	c-CH ₃ CH=CH(CH ₂) ₂ CH ₃	–	139,0	29	(CH ₃) ₂ C=C(CH ₃) ₂	123,6	124,1
15	t-CH ₃ CH=CH(CH ₂) ₂ CH ₃	–	145,6				

Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать (в пределах ошибок опыта) недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

В табл. 2. представлены результаты расчёта теплоёмкости алкенов с C₂–C₆.

Список литературы

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill, 1999. [Электронный ресурс]. – URL: <http://ftp1.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 10.12.16).

«Развитие научного потенциала высшей школы», ОАЭ (Дубай), 4–10 марта 2017 г.

Педагогические науки

УЧЕНИК – СУБЪЕКТ ЛИЧНОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Далингер В.А.

Омский государственный педагогический университет, Омск, e-mail: dalinger@omgru.ru

Издавна ясно, что организация учебного процесса должна проводиться с учетом индивидуальных особенностей учащихся, что позволит создать оптимальные условия для реализации потенциальных возможностей каждого ученика.

Идея необходимости индивидуального подхода к учащимся в условиях коллективной работы принадлежит Я.А. Коменскому (1592 – 1670). В своем труде «Великая дидактика» он предлагает делить детей на шесть типов и указывает организационные вопросы деятельности учителя.

Идею индивидуализации в обучении поддерживали и разработали классики педагогики: Ж.Ж. Руссо, А. Дистервег, К.Д. Ушинский и др.

Широко известен знаменитый тезис К.Д. Ушинского: «Если педагогика хочет воспитать человека во всех отношениях, то она должна прежде узнать его тоже во всех отношениях» [16, с. 301]. К.Д. Ушинский положил начало развитию педагогической антропологии в России.

Классики педагогики, занимавшиеся проблемой индивидуализации обучения, большое значение придавали самостоятельной работе учащихся.

И.Г. Песталоцци отмечал: «Мои ученики будут узнавать новое не от меня; они будут открывать это новое сами. Моя главная задача – помочь им раскрыться, развить собственные идеи».

Л.Н. Толстой писал: «Знание только тогда знание, когда оно обрето усилиями своей мысли, а не памятью».

В свое время Ж.Ж. Руссо писал: «Пусть ребенок узнает не потому, что вы ему сказали, а потому, что сам понял; пусть он не выучивает науку, а выдумывает ее. Если когда-нибудь вы замените в его уме рассуждение авторитетом он не будет уже рассуждать: он станет лишь игрушкой чужого мнения... Жить – вот ремесло, которому я хочу учить его» [15, с. 202].

Эта же мысль высказана К.Д. Ушинским: «Если сам ученик выработает мысль, самостоятельное освоив новое знание, то мысль эта делается его собственностью» [16, с. 101].

У педагогов появляется стремление к психологизации процесса обучения и воспитания.