

А. А. Ю н у с о в, А. З. А х м а д е е в а, И. М. Г у б а й д у л л и н
(Уфа, БашГУ, ИНК РАН). **Оценка величины дисперсии адекватности в регрессионном анализе для реакции гидроалюминирования олефинов.**

Прежде чем приступить к построению кинетической модели сложных реакций металлокомплексного катализа с использованием методов математического моделирования, необходимо провести качественный анализ натуральных экспериментальных данных. Универсальным методом для оценки является регрессионный анализ, а конкретно, метод наименьших квадратов. В качестве аппроксимирующей функции рассматривали полиномы n -й степени, которые имеют вид $F(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$, где n — количество наблюдаемых точек по времени изменения концентрации.

При решении системы линейных уравнений для обращения матрицы используется метод исключения Гаусса и Жордана. Для каждой зависимости концентрации олефинов от температуры была рассчитана дисперсия адекватности для полиномов $2 \div n - 1$ степени. В качестве окончательного вывода параметров функции были приняты те параметры, которые соответствуют минимальным значениям дисперсии адекватности (см. табл.).

Таблица. Минимальные значения дисперсии адекватности для разных мольных соотношений: Cp_2ZrCl_2 : $ClAlBu_2^i$: олефин.

Мольное соотношение	1:12:10	0,3:12:10	0,2:12:10
Степень полинома	5	6	6
Дисперсия адекватности	1,31	1,55	6,92

Таким образом, были получены параметры, позволяющие построить качественную зависимость выхода продукта от концентрации катализатора и температуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Джонсон К.* Численные методы в химии. М.: Мир, 1983, 504 с.
2. *Печаткина С. В.* Механизм реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами, катализируемый Cp_2ZrCl_2 . Дис. на соискание уч. ст. канд. физ.-матем. наук. Уфа, 2006, 111 с.