

Задачи к занятию 5

Задача 1. Имеется набор точек. Аппроксимируйте их линейной зависимостью $y = a + bx$ в MS Excel, используя линию тренда на точечной диаграмме, пакет анализа данных (если есть) и формулы коэффициентов регрессии:

$$\begin{cases} b = \frac{\overline{xy} - \bar{x}\bar{y}}{\overline{x^2} - (\bar{x})^2} = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\text{cov}(x, y)}{\text{Var}[x]} \\ a = \bar{y} - b\bar{x} \end{cases}$$

Также рассчитайте RSS (сумму квадратов отклонений), TSS (общая сумма квадратов), R^2 (коэффициент детерминации) и F , пользуясь соотношениями

$$F_{\text{эмп}} = \frac{ESS/f_1}{RSS/f_2} = \frac{R^2}{1 - R^2} \frac{f_2}{f_1}; \quad f_2 = n - k; \quad f_1 = k - 1$$

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS} = \frac{ESS}{TSS}$$

где n — число точек, k — число параметров модели, и проверьте статистическую значимость регрессии.

Совет: используйте функции MS Excel КОРРЕЛ, КОВАРИАЦИЯ.В, ДИСП.В, КОВАРИАЦИЯ.Г, ДИСП.Г, КОВАР, ДИСП.Г, СРЗНАЧ, СУММКВРАЗН, СУММКВ.

x	10	8	13	9	11	14	6	4	12	7	5
y	8.04	6.95	7.58	8.81	8.33	9.96	7.24	4.26	10.84	4.82	5.68

Задача 2. Имеются экспериментальные данные по скорости химической реакции (см. таблицу). Аппроксимируйте их уравнением Аррениуса $k = k_0 \exp(-\frac{E_a}{RT})$. Результат проиллюстрируйте графиком.

$t, \text{ }^\circ\text{C}$	25	35	50	60	70	92
$k_1, \text{ моль} \cdot \text{л}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	57.8	128.5	270.4	453.8	728.8	1907.7

Задача 3. Имеются экспериментальные данные по энтальпии смешения бинарного раствора (см. таблицу). Аппроксимируйте их моделью субрегулярного раствора $\Delta_{\text{mix}}H(x) = x(1-x)(A+Bx)$. Результат проиллюстрируйте графиком.

Совет: линеаризуйте данные, используя подстановку

$$A + Bx = \frac{\Delta_{\text{mix}}H}{x(1-x)}$$

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$\Delta_{\text{mix}}H, \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$	981	1576	2262	2885	2997	2840	2561	2020	1122