

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна

V Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2013"
(ХКЧ'13)

Тези доповідей

22–25 квітня 2013 року

Харків
2013

V Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання – 2013" (ХКЧ'13), 22–25 квітня 2013 року: тези доповідей.– Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2013.– 305 с.

Представлені тези доповідей за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

НАУКОВИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Калугін О. М.	Голова комітету, декан хімічного факультету, к.х.н., доцент
Дорошенко А. О.	заступник декана з наукової роботи, д.х.н., професор
Мчедлов-Петросян М. О.	зав. каф. фізичної хімії, д.х.н., професор
В'юник І. М.	зав. каф. неорганічної хімії, д.х.н., професор
Юрченко О. І.	зав. каф. хімічної метрології, д.х.н., професор
Орлов В. Д.	зав. каф. органічної хімії, д.х.н., професор
Холін Ю. В.	зав. каф. хімічного матеріалознавства, д.х.н., професор
Чебанов В. А.	зав. каф. теоретичної хімії, д.х.н., професор

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Калугін О. М.	Голова комітету, декан хімічного факультету, к.х.н., доцент
Дорошенко А. О.	заступник декана з наукової роботи, д.х.н., професор
Леонова Н. О.	інженер 1 кат. каф. хімічної метрології
Дерека Б. А.	голова СНТ факультету
Колесник Я. В.	доцент каф. неорганічної хімії, к.х.н.
Марков В. В.	м.н.с., асистент каф. хімічної метрології
Колодезний Д. Ю.	заст. голови СНТ хімічного факультету
Свечкарев Д. А.	с.н.с. НДІ хімії, кандидат хімічних наук
Зубарь В. О.	голова СНТ кафедри органічної хімії
Загорулько О. О.	голова СНТ кафедри фізичної хімії
Вовчинський І. С.	голова СНТ кафедри неорганічної хімії
Батрак А. С.	голова СНТ кафедри хімічної метрології
Захаров А. Б.	голова Ради аспірантів і докторантів хімічного факультету

НОВЫЙ ПОДХОД К КЛАСТЕРИЗАЦИИ ДАННЫХ В КАЧЕСТВЕННОМ ХИМИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ

Холоднюк П. Я., Пушкарева Я. Н.

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина
soul.of.nerevar@gmail.com

Современный качественный анализ трактуется как процедура классификации объектов по их химическим, физико-химическим и другим характеристикам [1, 2]. Алгоритмы классификации «с обучением» (дискриминантный анализ, метод опорных векторов, формальное независимое моделирование аналогий классов) применяют обучающий набор образцов с известной классовой принадлежностью (обучающую выборку) для выработки классификационных правил. Алгоритмы классификации «без обучения» (метод *k*-средних, кластерный анализ) не используют обучающую выборку, но требуют *a priori* задавать число классов. Таким образом, для реализации классификационных алгоритмов как «с обучением», так и «без обучения» необходимой информацией является число классов.

В работе программно реализован алгоритм кластеризации без априорной информации о числе классов и без наличия обучающей выборки на основе объединения сети Кохонена «без обучения» и вероятностной сети «с обучением». Роль сети Кохонена заключалась в предварительной кластеризации данных с целью определения числа классов и формирования обучающей выборки для вероятностной сети; роль вероятностной сети – в получении устойчивой классификации данных. Правильность полученных классификаций оценивали с помощью процедуры перекрестной проверки достоверности – кросс-валидации.

Предложенная процедура была апробирована при классификации образцов цветков ириса (известный тестовый набор для испытания алгоритмов классификации и кластерного анализа), образцов итальянских вин (также популярный набор для тестирования алгоритмов классификации), а также модельных данных, обладающих сложной структурой.

Показано, что реализованная в работе процедура кластеризации является эффективной альтернативой известным методам кластеризации.

Авторы выражают признательность проф. Ю. В. Холину за помощь в подготовке тезисов и выполнении работы.

[1] Vlasov Yu., Legin A., Rudnitskaya A., Di Natale C., D'Amico A. Pure Appl. Chem. 2005. 77(11). P. 1965.

[2] Milman B. L. Trends Anal. Chem. 2005. 24(6). P. 493.