

Прогноз октановых чисел замещенных алканов по топологическим характеристикам молекул

© Доломатов^{1,3*} Михаил Юрьевич, Коледин¹⁺ Олег Сергеевич, Ковалева² Элла Александровна и Арсланбекова⁴ Светлана Анатольевна

¹ Кафедра технологии нефти и газа. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (987) 606-47-91. E-mail: o.s.koledin@yandex.ru

² Кафедра математики. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

³ Кафедра физической электроники и нанотехнологий. Башкирский государственный университет. ул. Заки-Валиди, 32, г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (917) 429-44-63. E-mail: mdolomatov@bk.ru

⁴ Кафедра математики. Башкирский государственный аграрный университет. ул. 50-летия Октября, 34. г. Уфа, 450001. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (917) 467-77-53. E-mail: s.arslanbeckova@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: алканы; октановое число; топологические индексы; собственные значения топологической матрицы; модель QSPR.

Аннотация

При использовании моторного топлива с низким октановым числом, может возникнуть особый режим сгорания топливно-воздушной смеси, называемый детонацией.

Для того чтобы оперативно определить октановые числа не прибегая к использованию дорогостоящей аппаратуры в настоящее время применяются методы математического моделирования. Для прогноза октанового числа нормальных и замещенных алканов-компонентов бензинов, предложена нелинейная многомерная регрессионная модель QSPR.

Модель связывает с октановыми числами набор дескрипторов – топологические характеристики молекулярных графов: индекс Рандича, индекс Винера, а также функции собственных значений топологической матрицы молекулы, отражающие основные структурно-химические факторы, такие как разветвленность, протяженность углеродного скелета и энергетические параметры молекул, например возмущение хюккелевского спектра молекул, а также влияющие на октановые числа.

В качестве объектов исследования использовались замещенные алканы. Исследуемая выборка включала в себя 36 углеводородов ряда замещенных алканов. Предложенная модель, адекватно описывает октановое число алканов. Коэффициент детерминации модели равен 0.972. Была проведена проверка модели на 19 веществах не входящих в базовый ряд, средние абсолютная и относительная ошибка для тестовой выборки ОЧ составляют 1.5 ед. и 2.7% соответственно.

Модель применима для инженерных и научных прогнозов октановых чисел различных алканов, компонентов моторного топлива.