

Прогноз цетановых чисел циклоалканов и аренов по типологическим характеристикам молекул

Коледин¹⁺ Олег Сергеевич, Доломатов^{1,3*} Михаил Юрьевич,
Ковалева² Элла Александровна, Федина¹ Регина Алсыновна,
Арсланбекова⁴ Светлана Анатольевна, Гарипов¹ Роберт Венерович,
Валеев¹ Малик Рамилевич

¹ Кафедра технологии нефти и газа; ² Кафедра автоматизация, телекоммуникация и метрология.
Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1.
г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: +7 (987) 606-47-91. E-mail: o.s.koledin@yandex.ru

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

Тел.: +7 (917) 429-44-63. E-mail: mdolomatov@bk.ru

⁴ Кафедра математики. Башкирский государственный аграрный университет.
ул. 50 лет Октября, 34. г. Уфа, 450001. Республика Башкортостан.
Россия. Тел.: +7 (917) 467-77-53. E-mail: s.arslanbeckova@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: циклоалканы, арены, цетановое число, топологические индексы, собственные значения топологической матрицы, модель QSPR.

Аннотация

Для расчета цетанового числа циклоалканов и аренов – компонентов дизельных топлив, предложена нелинейная многомерная регрессионная модель QSPR, связывающая цетановые числа соединений с двумя группами дескрипторов – топологические структурные характеристики молекулярных графов и энергетические топологические характеристики к которым относятся суммы квадратов собственных значений графа молекулы. Объектами исследования стали 18 углеводородов ряда алкилзамещенных циклоалканов и 19 углеводородов ряда аренов, отбор в базовую и тестовую выборки сделан случайным образом с использованием компьютерной базы данных физико-химических свойств. Адекватность моделей подтверждена статистической обработкой данных, так коэффициент детерминации модели равен $R^2 = 0.916$ для циклоалканов и $R^2 = 0.929$ для аренов. Для характеристики качества модели QSPR был вычислен коэффициент множественной корреляции $r = 0.957$ для циклоалканов и $r = 0.964$ для аренов, что подтверждает сильную связь предложенных топологических характеристик молекул спиртов с их температурами вспышки. Для оценки статистической достоверности модели была рассчитана и использована корреляционная поправка и стандартная ошибка регрессии. Небольшое значение стандартной ошибки регрессии, в нашем случае $S_{regression} = 1.37$ ед. для циклоалканов, $S_{regression} = 0.37$ ед. для аренов соответственно, по сравнению со значениями зависимой переменной подтверждает адекватность предложенной модели. Абсолютная и относительная ошибка для тестовой выборки цетановых чисел находятся в интервале $0.2 \leq \Delta_{abc} \leq 1.7$ ед. и $2.1\% \leq \Delta_{omi} \leq 6.5\%$ для циклоалканов, $0.3 \leq \Delta_{abc} \leq 0.4$ ед. и $3.8\% \leq \Delta_{omi} \leq 5.7\%$ для аренов соответственно. Предложенная модель, адекватно описывает цетановое число циклоалканов и аренов и может быть использована для прогноза цетановых чисел компонентов дизельных топлив.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Коледин О.С., Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Федина Р.А., Арсланбекова С. А., Гарипов Р. В., Валеев М. Р. Прогноз цетановых чисел циклоалканов и аренов по типологическим характеристикам молекул. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №2. С.7-14. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-2-7.

или

Oleg S. Koledin, Mikhail Yu. Dolomatov, Ella A. Kovaleva, Regina A. Fedina, Svetlana A. Arslanbekova, Robert V. Garipov, Malik R. Valeev. Forecast of cetane numbers of cycloalkanes and arenes for typological characteristics of molecules. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.2. P.7-14. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-2-7. (Russian)