

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Физико-химические исследования.  
Утверждённая научная специальность ВАК: 1.4.4. Физическая химия; 1.4.14. Кинетика и катализ;  
2.6.12. Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ  
Дополнительная научная специальность ВАК: 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика  
экстремальных состояний вещества  
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/24-78-5-34  
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-5-34  
УДК 629.7. Поступила в редакцию 15 апреля 2024 г.

## Корреляционный и регрессионный анализ кинетических зависимостей термического разложения некоторых соединений

© Попок\*+ Владимир Николаевич, Сербов Даниил Алексеевич

МИРЭА-Российский технологический университет, пр-т Вернадского, 78, г. Москва, 119454, Россия.  
Тел.: +7 (499) 600-80-80, доб. 43005. E-mail: vnpopok@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** термическое разложение, кинетические кривые, аппроксимация, уравнение регрессии, коэффициенты уравнения регрессии, асимптотика, точки пересечения пучков прямых, энергия активации, предэкспоненциальный множитель, критическая температура.

### Аннотация

Представлены результаты анализа первичных экспериментальных кинетических данных (кинетических кривых) термического разложения ряда энергетических соединений на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант. В качестве основного фактора влияния на кинетику разложения выбрана температура. Рассматривается метод и алгоритм анализа первичных данных, их трансформации к линейным зависимостям с асимптотической точкой пересечения пучков прямых в новых переменных. В качестве новых переменных используются коэффициенты линейных уравнений регрессии аппроксимации кинетических кривых. На примере аппроксимации линейной функцией некоторых типичных и нетипичных кинетических кривых показана работоспособность правила определения максимального количества участков кривых, дающих разные линейные уравнения регрессии. Использование степенной зависимости для аппроксимации кинетических кривых позволяет в большинстве случаев описать всю кинетическую кривую одним уравнением регрессии – в новых переменных, с сохранением асимптотик в виде точек пересечения пучков прямых. Последнее позволяет построить зависимость, инвариантную к варьированию условий испытаний. С использованием рассматриваемого метода определены уравнения регрессии, соответствующие кинетическим кривым, для достаточно широкой группы соединений разных классов: нитроэфиров, нитраминов, С-нитросоединений и других. Наличие асимптотических точек пересечения прямых, соответствующих уравнениям регрессии, позволяет свести (последний шаг алгоритма) задачу определения кинетических констант температурной чувствительности к линейной связи коэффициента уравнения регрессии с температурой (Т) или обратной температурой (1/Т). В последнем случае определены значения энергии активации и предэкспоненциального множителя, которые для рассмотренных соединений хорошо соответствуют литературным данным. С использованием асимптотического перехода, определена критическая температура (Т<sub>кр</sub>), соответствующая по способу определения изокинетической температуре Т<sub>изо</sub>.

Кроме этого, проведен анализ «природы» компенсационной зависимости и отмечена возможная связь Т<sub>кр</sub> с температурой вспышки, критической температурой теплового взрыва и характерными точками на кривых дифференциальной сканирующей калориметрии при термическом разложении рассмотренных соединений в нестационарных условиях.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н., Сербов Д.А. Корреляционный и регрессионный анализ кинетических зависимостей термического разложения некоторых соединений. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.78. №5. С.34-45. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-5-34

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н., Сербов Д.А. Корреляционный и регрессионный анализ кинетических зависимостей термического разложения некоторых соединений. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.7. №2. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-5-34/ROI-jbc-RB/24-7-2-6

### The output for citing the English online version of the article:

Vladimir N. Popok, Daniil A. Serbov. Correlation and regression analysis of kinetic dependences of thermal decomposition of some compounds. *Butlerov Communications B*. 2024. Vol.7. No.2. Id.6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-5-34/ROI-jbc-B/24-7-2-6