

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_{кр}), соответствующая по способу определения изокинетической температуре Т_{изо}.

Кроме этого, проведен анализ «природы» компенсационной зависимости и отмечена возможная связь Т_{кр} 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