

## 05.26.00 «Безопасность деятельности человека»

УДК 614.8

### Определение класса взрывопожароопасных и пожароопасных зон при помощи молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

### Definition of the class of fire and explosion hazardous and fire hazardous zones by means of molecular descriptors and artificial neural networks

*Д.С. Королев,  
А.В. Калач*

*д-р хим. наук, проф.*

*ФГБОУ ВО Воронежский  
институт ГПС МЧС России*

*otrid@rambler.ru*

*D.S. Korolev,  
A.V. Kalach*

*Doctor of Chemical Sciences,  
Full Professor  
VISFS of EMERCOM  
of Russia*

**Рецензент:**

*А.А. Мельник*

*канд. техн. наук, доц.*

#### **Аннотация:**

В данной работе поднимается вопрос определения класса зоны, применяемый для выбора электротехнического и другого оборудования по степени их защиты, обеспечивающей их пожаровзрывобезопасную эксплуатацию в указанной зоне. Для решения поставленной задачи использовался способ прогнозирования пожароопасных свойств веществ, основанный на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. Был предложен алгоритм определения класса зоны и спрогнозирована температура вспышки предельных кетон, альдегидов и сложных эфиров масляной кислоты. Для условных помещений предложен класс зоны помещения.

**Ключевые слова:** класс зоны, электрооборудование, дескрипторы, искусственные нейронные сети, прогнозирование, температура вспышки.

#### **Abstract:**

In this work the question of definition of a class of a zone applied to the choice of electrotechnical and other equipment on extent of their protection providing their pozharovzryvobezopasny operation in the specified zone is brought up. For the solution of an objective the way of forecasting of fire-dangerous properties of substances based on use of molecular descriptors and artificial neural networks was used. The algorithm of definition of a class of a zone has been offered and temperature of flash limit ketone, aldehydes and esters of oleic acid is predicted. For conditional rooms the room zone class is offered.

**Key words:** zone class, electric equipment, descriptors, artificial neural networks, forecasting, flash temperature.

Согласно статистическим данным МЧС России за прошедший 2015г. на территории Российской Федерации было зарегистрировано 145686 пожаров, что на 4,6% меньше чем ранее за аналогичный период. Основные причины пожаров представлены на рис.1.



Рис. 1. Основные причины пожаров

Видно, что наибольшее число пожаров возникло по причине неправильного обращения с электрооборудованием и не соответствие его классу зоны – 32%.

С целью предотвращения возникновения пожаров необходимо разрабатывать и предусматривать мероприятия согласно [1], необходимые для исключения образования горючей среды и источника загорания, в частности, в ст. 50 [1] предлагается использование электрооборудования, соответствующего классу пожарной и взрывоопасной зоны.

Класс зоны определяется на основании физико-химических свойств веществ (температуры вспышки), обращающихся в помещении и на обобщении сведений об технологическом процессе.

Стоит отметить, что найденные опытным путем физико-химические свойства, в частности Твсп для ряда известных соединений приведены в литературе [2, 3]. Однако имеющиеся литературные данные можно считать недостаточными, поскольку они охватывают не более 0,1 % от общего количества синтезированных к настоящему времени органических соединений, ведь ежегодно количество соединений увеличивается на 250-300 тыс., а экспериментальное определение температуры вспышки сопряжено с существенными техническими трудностями, а также экономическими и временными затратами [4].

Поэтому на сегодняшний день актуальным является вопрос разработки универсальных методов прогнозирования свойств веществ органических соединений без проведения сложного эксперимента и больших финансовых затрат. Рассматривая выше изложенное, можно сделать вывод о том, что в целях правильного определения класса зоны необходимо использовать метод прогнозирования пожароопасных свойств веществ основанный на молекулярных дескрипторах [5] и искусственных нейронных сетей [6].

Ранее этот метод использовался в работах [7-9], и показал удовлетворительные результаты. На рис. 2 представлен методический алгоритм определения класса зоны.



Рис. 2 Усовершенствованный алгоритм определения класса зоны

Рассмотрим процесс прогнозирования температуры вспышки ряда органических соединений, сведения о которых отсутствуют в справочной литературе. Прогнозирование температуры вспышки будем осуществлять при помощи разработанного нами нейропакета КДС 1.0, главное окно программы представлено на рис. 3, а в табл. 1 представлены результаты прогнозирования с определенными классами зон.

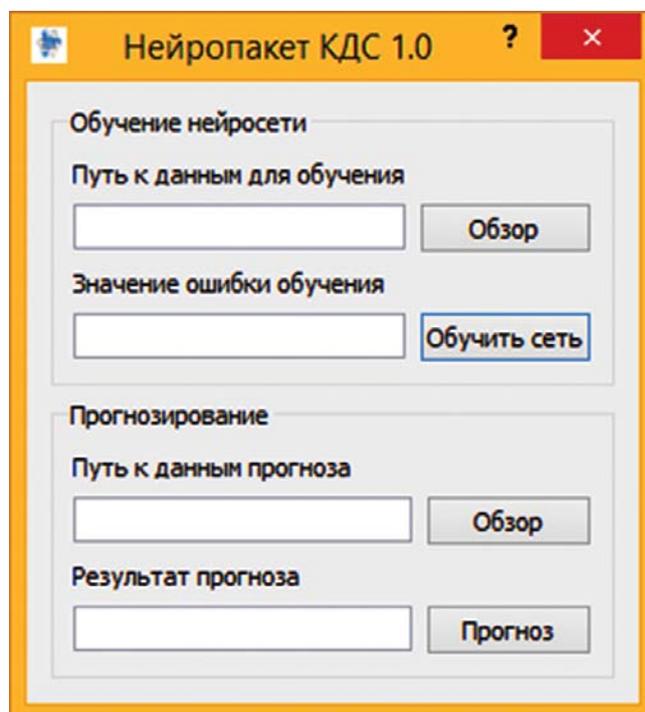


Рис. 3 Нейропакет КДС 1.0

**Таблица.** Результаты прогнозирования температуры вспышки органических соединений и определение класса зоны

Вещество	Температура вспышки, °С		Относительная погрешность расчетов, %	Класс зоны помещения
	прогнозируемая	справочная		
Предельные кетоны				
3-Пентанон	13	-	-	V*(0,1,2)
3-Гексанон	32	-	-	V*(0,1,2)
2-Гептанон	46	-	-	V*(0,1,2)
3-Октанон	53	-	-	V*(0,1,2)
2-Октанон	59	-	-	V*(0,1,2)
3-Нонанон	70	-	-	П-1
2-Деканон	81	-	-	П-1
6-Ундеканон	93	-	-	П-1
2-Додеканон	107	-	-	П-1
Ацетон	-23	-18	27	V*(0,1,2)
Дипропилкетон	45	49	8,1	V*(0,1,2)
Бутилметилкетон	11	13	15	V*(0,1,2)
Средняя относительная погрешность			16,7	
Предельные альдегиды				
2-Фенилпропаналь	70	69	1,4	П-1
2-Метилбензальдегид	80	79	11,3	П-1
2,5-Диметилбензальдегид	90	88	2,2	П-1
4-Этилбензальдегид	85	92	7,6	П-1
2,6-Диметилбензальдегид	98	96	2	П-1
3,5-диметилбензальдегид	95	99	4	П-1
2,3-Диметилбензальдегид	102	101,7	0,2	П-1
4-Бутилбензальдегид	99	103	3,8	П-1
2,4,6-Триметилбензальдегид	101	105	3,8	П-1
2,4,5-Триметилбензальдегид	105	110	4,5	П-1
Средняя относительная погрешность			4,08	
Сложные эфиры масляной кислоты				
Гексилбутират	180	178	1,1	П-1
Бутилбутират	154	-	-	П-1
Метилбутират	139	-	-	П-1
Амилбутират	120	-	-	П-1
Гептилбутират	99	100	1	П-1
Децилбутират	129	120	7,5	П-1
Изобутилбутират	53	50	6	V*(0,1,2)
Пропилбутират	79	-	-	П-1
Изопропилбутират	62	-	-	П-1
Изоамилбутират	55	-	-	V*(0,1,2)
Этилбутират	118	-	-	П-1
Средняя относительная погрешность			3,9	

Примечание\* - взрывоопасный класс зоны, в зависимости от условий

### ВЫВОД:

Таким образом, прогнозирование пожароопасных свойств предельных кетонов, альдегидов и сложных эфиров масляной кислоты, в частности температуры вспышки, на основе данных о молекулярных дескрипторах дает удовлетворительные результаты. Использование разработанного нейрокета КДС 1.0 дает возможность без проведения сложного эксперимента спрогнозировать темпера-

туру вспышки, в том числе тех, для которых отсутствуют литературные данные по пожароопасным свойствам. Стоит отметить, что общая относительная погрешность не превысила 15%, также полученные закономерности носят общий характер, поэтому данный способ прогнозирования применим для прогнозирования и других пожароопасных свойств органических соединений.

### Литература

1. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности : Федер. закон от 22.07.08 №123-ФЗ; одобр. Сов. Федерации 11.07.2008 // Российская газета. – 2008. – № 163; Собр. законодательства РФ. – 2008. - № 30 (ч. I), ст. 3579
2. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения : справочник. — В 2-х ч. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Асс. «Пожнаука», 2004. — Ч. I. — 713 с.
3. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения : справочник. — В 2-х ч. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Асс. «Пожнаука», 2004. — Ч. II. — 774 с.
4. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ и материалов с использованием дескрипторов и нейронных сетей // Научно-теоретический журнал «Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова.- 2015.- №4.- С. 100-103.
5. Королев Д.С. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ и материалов с использованием дескрипторов / Д.С. Королев // Вестник Воронежского института ГПС МЧС России. - 2014. - №1. - С. 7-10.
6. Королев Д.С. Выбор температурного класса взрывозащищенного электрооборудования при проектировании производственных помещений с использованием дескрипторов и искусственных нейронных сетей / Д.С. Королев // Вестник Воронежского института ГПС МЧС России. - 2015. - №1. - С. 26-30.
7. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В., Сорокина Ю.Н. Прогнозирование основных показателей пожаровзрывоопасности органических соединений с помощью дескрипторов и искусственных нейронных сетей, используемых в расчете пожарного риска // Пожаровзрывобезопасность . – 2015 . – Т.24, № 9 . – С. 32-38. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.09.32-38
8. Королев Д.С., Калач А.В., Сорокина Ю.Н. Сравнительный анализ способов прогнозирования физико-химических свойств веществ // Вестник Командно-инженерного института МЧС Республики Беларусь. – 2016. – Т.23, №1. – С. 78-84
9. Королев Д.С., Калач А.В., Рудаков О.Б. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ / Д.С. Королев, А.В. Калач, О.Б. Рудаков // Безопасность в техносфере. – 2015. - №5. – С. 3 – 6. DOI: 10.12737/16957