

## Прогнозирование пожароопасных свойств веществ

**Д.С. Королев**, преподаватель<sup>1</sup>

**А.В. Калач**, заместитель начальника по науке, профессор, д-р хим. наук<sup>1</sup>

**О.Б. Рудаков**, заведующий кафедрой, профессор, д-р хим. наук<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Воронежский институт государственной противопожарной службы МЧС России

<sup>2</sup>Воронежский государственный архитектурно-строительный университет

e-mail: otrid@rambler.ru

### Ключевые слова:

прогнозирование,  
дескрипторы,  
искусственные нейронные сети,  
красители.

*Проблема прогнозирования пожароопасных свойств веществ является одной из приоритетных в настоящее время. Отсутствие сведений об используемом веществе не позволяет в полном объеме разрабатывать системы предотвращения пожара. Для решения данной проблемы был предложен метод прогнозирования, основанный на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. В качестве примера работы метода была спрогнозирована температура самовоспламенения антрахинона и красителей на его основе. Средняя абсолютная погрешность прогнозирования не превысила 13,1 °С.*

Синтетические красители применяются практически во всех отраслях промышленности [1]. С их применением осуществляют окрашивание природных и синтетических волокон, бумаги, дерева, кожи и других материалов. Мировое производство синтетических красителей составляет порядка 1 млн т в год. Кроме того, в связи с появлением на рынке новых красящих соединений остается актуальной проблема разработки мероприятий, направленных на обеспечение пожарной безопасности объекта защиты. Но без сведений о пожароопасных свойствах органических красителей это невозможно.

В главе 13 ФЗ-№123 «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» для обеспечения пожарной безопасности на объектах необходимо создание систем предотвращения пожара, чтобы исключить возникновение горючей среды и источника зажигания, которые становятся причиной пожара. В ст. 49 [2] предлагаются способы исключения образования горючей среды: применение негорючих веществ и материалов; ограничение массы и (или) объема горючих веществ и др. Одна из главных проблем использования данных способов — отсутствие сведений о веществе. Таким образом, разработка универсального метода прогнозирования пожароопасных свойств ве-

ществ позволит решить сложившуюся проблему. Такой подход позволит проводить анализ свойств уже исследованных веществ с целью прогнозирования пожароопасных свойств, которыми обладают новые соединения либо еще не синтезированные, что даст возможность на основе полученных данных разрабатывать мероприятия, направленные на обеспечение пожарной безопасности объектов защиты.

Задача создания и развития новых информационных технологий, обеспечивающих многократное ускорение процесса обработки информации, представляет практический интерес. К таким технологиям можно отнести системы на базе моделирования, включающие молекулярные дескрипторы и искусственные нейронные сети. Поэтому для решения поставленной задачи предлагается использовать метод прогнозирования пожароопасных свойств веществ на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. Ранее этот метод применялся нами [3, 4, 5, 6] и успешно себя зарекомендовал. При прогнозировании пожароопасных свойств веществ не требуется существенных временных и материальных затрат, а также отсутствуют трудности, представленные на рис. 1 и связанные с прогнозированием пожароопасных свойств веществ [7].

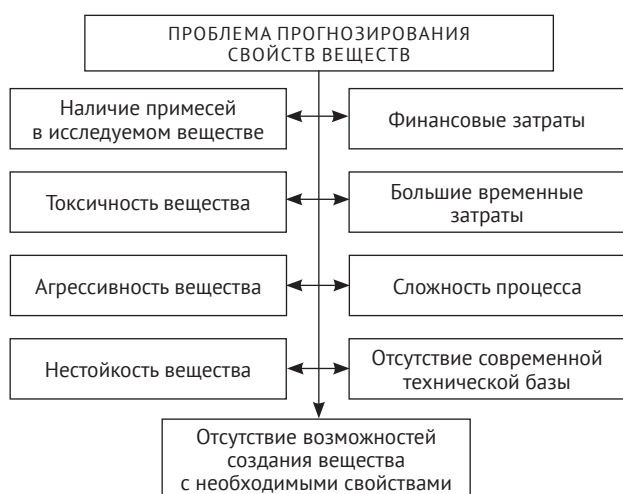


Рис. 1. Проблема прогнозирования пожароопасных свойств веществ

В качестве примера рассмотрим процесс прогнозирования температуры самовоспламенения антрахинона и красителей на его основе. На рис. 2 представлены некоторые структурные формулы соединений, используемых в исследованиях.

Прогнозирование температуры самовоспламенения будем осуществлять при помощи разработанного нами нейропакета КДС 1.0. Программа позволяет:

- загружать и просматривать базы данных, содержащие структуры химических соединений и их свойства;
- осуществлять корреляцию вводимых данных;

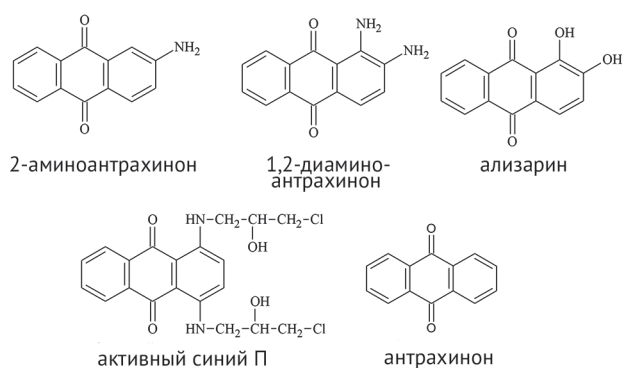


Рис. 2. Структурные формулы некоторых синтетических красителей

- статистически оценивать полученные модели;
- использовать полученные нейросетевые модели для прогнозирования свойств веществ, без проведения сложного эксперимента.

На рис. 3 представлена часть расчетных молекулярных дескрипторов, в дальнейшем используемая нами в прогнозировании.

Из рис. 3 видно, что значение температуры самовоспламенения антрахинона отсутствует. На рис. 4 показано рабочее окно программы.

На рис. 5 показана смоделированная искусственная нейронная сеть, а в табл. 1 приведены полученные результаты прогнозирования температуры самовоспламенения.

Прогнозирование пожароопасных свойств антрахинона и красителей на его основе, в частности

Options	Активный синий П	1,2-диаминоантрахинон	2-аминоантрахинон	Ализарин	Антрахинон
number of atoms	28	18	17	18	16
number of C atoms	20	14	14	14	14
relative number of C atoms	0,7143	0,7778	0,825	0,7778	0,87
number of H atoms	4	0	2	4	2
relative number of H atoms	0,1	0	0,1176	0,222	0,12
number of O atoms	2	2	1	20	18
relative number of O atoms	0,07	0,111	0,05	6	4
number of N atoms	2	2	19	0,3	0,222
relative number of N atoms	0,07	0,111	5	2	2
number of S atoms	30	20	0,26	0,1	0,1111
relative number of S atoms	16	6	2	12	12
number of F atoms	0,5333	0,3	0,1	0,6	0,6667
relative number of F atoms	2	2	12	3	3
number of Cl atoms	0,06667	0,1	0,6316	0,1167	0,18
relative number of Cl atoms	12	0	3	2	2
number of Br atoms	0,4	0	0,1765	0,1111	0,125
relative number of Br atoms	3	12	2	232,155	200,15
number of I atoms	0,1	0,6	0,11	12,8	12,5
self-ignition temperature	570	630	620	570	

Рис. 3. Часть молекулярных дескрипторов

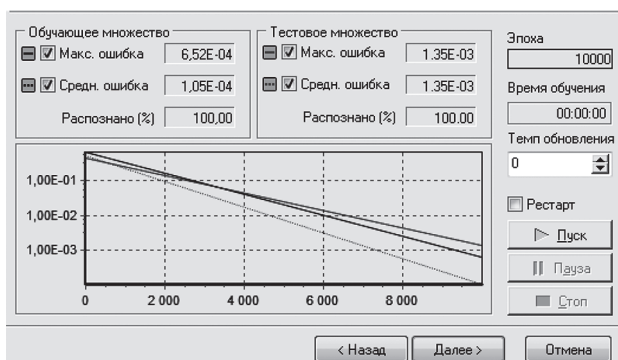


Рис. 4. Процесс обработки данных в нейропакете КДС 1.0

температуры самовоспламенения, на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей дает удовлетворительные результаты. Использование предложенного метода прогнозирования пожароопасных свойств позволило без проведения сложного эксперимента спрогнозировать температуру самовоспламенения антрахинона, а средняя абсолютная погрешность составила 13,1 °С, что является хорошим показателем. Полученные закономерности носят общий характер, поэтому они применимы для прогнозирования и других пожароопасных свойств рассмотренных органических соединений.

Кроме того, способ прогнозирования, основанный на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, выступает как один из способов исключения образования горячей среды в помещении.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Karthik Ya., Meeyanathan S.N., Nageswara R.R. Methods for the analysis of azo dyes employed in food industry // Food Chemistry, Volume 192, 1 February 2016, pp. 813–824
2. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности: Федер. закон от 22.07.08 № 123-ФЗ // Российская газета. — 2008. — № 163.
3. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ и материалов с использованием дескрипторов и нейронных сетей // Вестник БГТУ им. В. Г. Шухова. — 2015. — № 4. — С. 100–103
4. Королев Д.С., Калач А.В. Категорирование помещений на основе дескрипторов и метода нейронных сетей // Вестник БГТУ им. В. Г. Шухова. — 2015. — № 5. С. 210–213

#### REFERENCES

1. Karthik Ya., Meeyanathan S.N., Nageswara R.R. Methods for the analysis of azo dyes employed in food industry. Food Chemistry, Volume 192, 1 February 2016, pp. 813–824

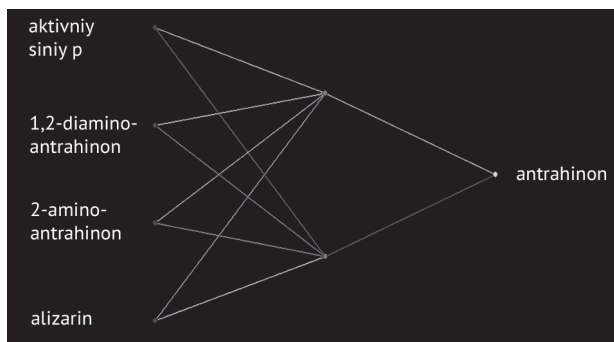


Рис. 5. Смоделированная искусственная нейронная сеть без внешних слоев

Таблица 1

#### Результаты прогноза

Вещество	Температура самовоспламенения, °С		Абсолютная погрешность, °С
	справочная	прогнозируемая	
Антрахинон	620	629,3	9,3
Ализарин	570	550,8	19,2
Хинизарин	630	650,4	20,4
2-Аминоантрахинон	620	625,7	5,7
Пурпурин	513	523,5	10,5
Активный синий П	570	600	30
1,2-диаминоантрахинон	630	623,9	6,1
Дисперсный оранжевый	520	529,3	9,3
Дисперсный синий К	460	450,2	9,8
Дисперсный розовый Ж	510	520,6	10,6

5. Королев Д.С. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ и материалов с использованием дескрипторов // Вестник Воронежского института ГПС МЧС России. — 2014. — № 1. — С. 7–10.
6. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В. и др. Прогнозирование основных показателей пожаровзрывобезопасности 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
7. ГОСТ 12.1.044–89\*. Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения. — Введ. 01.01.91 г. — М.: Стандартинформ, 2006. — 100 с.

2. Tekhnicheskiy reglament o trebovaniyakh pozharной bezopasnosti: Feder. zakon ot 22.07.08 № 123-FZ [Technical Regulations on Fire Safety Requirements: Feder. Law FZ

- 22.07.08 №123-FZ). *Rossiyskaya gazeta* [Russian newspaper]. 2008, I. 163.
3. Korolev D.S., Kalach A.V., Kargashilov D.V. Prognozirovanie požharoопасnykh svoystv veshchestv i materialov s ispol'zovaniem deskriptorov i neyronnykh setey [Prediction of properties of substances and flammable materials using descriptors and neural networks]. *Vestnik BGTU im. V.G. Shukhova* [Herald of BSTU. VG Shukhov]. 2015, I. 4, pp. 100–103
  4. Korolev D.S., Kalach A.V. Kategorirovanie pomeshcheniy na osnove deskriptorov i metoda neyronnykh setey [Categorization space-based descriptors and method of neural networks]. *Vestnik BGTU im. V.G. Shukhova* [Herald of BSTU. VG Shukhov]. 2015, I. 5, pp. 210–213
  5. Korolev D.S. Prognozirovanie požharoопасnykh svoystv veshchestv i materialov s ispol'zovaniem deskriptorov [Prediction of properties of substances and flammable materials using descriptors]. *Vestnik Voronezhskogo instituta GPS MChS Rossii* [Herald of the Voronezh Institute of GPS MES Russia]. 2014, I. 1, pp. 7–10.
  6. Korolev D.S., Kalach A.V., Kargashilov D.V. i dr. Prognozirovanie osnovnykh pokazateley požharovzryvobezопасnosti organicheskikh soedineniy s pomoshch'yu deskriptorov i iskusstvennykh neyronnykh setey, ispol'zuemykh v raschete požharnogo riska [Prediction of the main indicators of fire and explosion safety of organic compounds using descriptors and artificial neural networks used in the calculation of fire risk]. *Pozharovzryvobezопасnost'* [Fire and explosion safety]. 2015, V. 24, I. 9, pp. 32–38. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.09.32-38
  7. GOST 12.1.044–89\*. *Sistema standartov bezопасnosti truda. Pozharovzryvobezопасnost' veshchestv i materialov. Nomenklatura pokazateley i metody ikh opredeleniya. Vved. 01.01.91 g.* [Occupational safety standards system. Požharovzryvobezопасnost substances and materials. The range of indicators and methods of their determination. — Enter. 01.01.91]. Moscow, Standartinform Publ., 2006. 100 p.

## Forecasting Flammable Properties of Substances

**Korolyov D.S.**, Lecturer, Voronezh Institute of State Fire Service of Ministry of Emergency Situations of Russia

**Kalach A.V.**, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Deputy-Director for Science, Voronezh Institute of State Fire Service of Ministry of Emergency Situations of Russia

**Roudakov O.B.**, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Head of Department, Voronezh State Institute of Architecture and Construction

*One of the current key problems is forecasting flammable properties of substances. The lack of information about the applied substance prevents developing complete fire-prevention systems. To solve this problem authors suggest a forecasting method based on molecular descriptors and artificial neuron networks. As an example of the method they predicted the self-ignition point of anthraquinone and anthraquinone-based colorants. Average absolute error did not exceed 13,1 °C.*

**Keywords:** forecast, descriptors, artificial neuron networks, colorants.

### Информируем авторов и читателей

Журнал «Безопасность в техносфере» 1 декабря 2015 г. включен в обновленный Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук. Журнал входит в Перечень с 2008 г.

Журнал включен в Перечень по 5 большим группам научных специальностей:

03.02.00 — общая биология;

05.14.00 — энергетика;

05.23.00 — строительство и архитектура;

05.26.00 — безопасность деятельности человека;

25.00.00 — науки о Земле.

Ознакомиться с Перечнем рецензируемых научных журналов можно по адресу: <http://vak.ed.gov.ru/87>. Ознакомиться с паспортами научных специальностей можно по адресу: <http://vak.ed.gov.ru/316>.