

Прогнозирование пожароопасных свойств веществ

Д.С. Королев, преподаватель¹

А.В. Калач, заместитель начальника по науке, профессор, д-р хим. наук¹

О.Б. Рудаков, заведующий кафедрой, профессор, д-р хим. наук²

¹Воронежский институт государственной противопожарной службы МЧС России

²Воронежский 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].

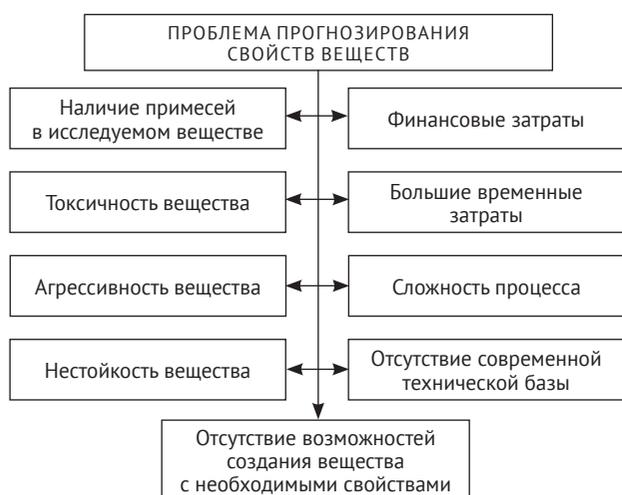


Рис. 1. Проблема прогнозирования пожароопасных свойств веществ

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;

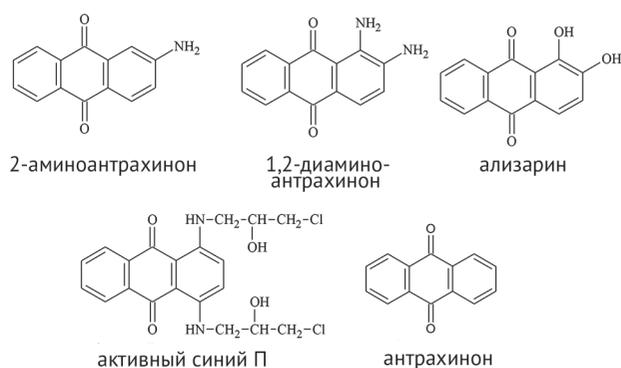


Рис. 2. Структурные формулы некоторых синтетических красителей

- 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

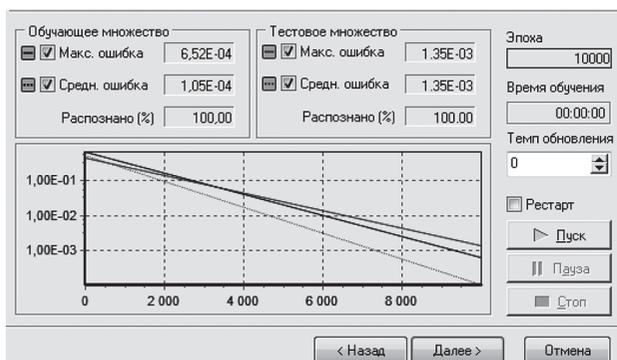


Рис. 4. Процесс обработки данных в нейропакете КДС 1.0

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 горючей 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

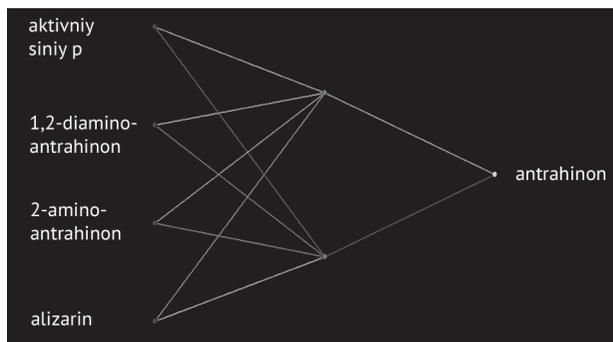


Рис. 5. Смоделированная искусственная нейронная сеть без внешних слоев

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 pozharnoy 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>.