

ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И УПРАВЛЕНИЕ

Королев Д.С., препод.,
Калач А.В., д-р хим. наук, доц.

Воронежский институт государственной противопожарной службы МЧС России

КАТЕГОРИРОВАНИЕ ПОМЕЩЕНИЙ НА ОСНОВЕ ДЕСКРИПТОРОВ И МЕТОДА НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

otrid@rambler.ru

Использование дескрипторов и нейросетевых технологий позволило спрогнозировать температуру вспышки и максимальное давление взрыва ряда альдегидов. На основании предложенного метода, была установлена корреляция между альдегидной группой, что позволило спрогнозировать максимальное давление взрыва и температуру вспышки как изученных ранее веществ, так и новых. Полученные данные были опробованы при расчете категорий помещений по взрывопожарной и пожарной опасности. На основании результатов проведенных исследований сделан вывод о возможности применения такого подхода к определению категории помещения.

Ключевые слова: альдегиды, температура вспышки, максимальное давление взрыва, дескрипторы, нейросети, пожарная опасность.

Введение. В №123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности», от 22.07.08 г. в гл.3 ст.10 определена классификация веществ по пожаровзрывоопасности [1]. Данную классификацию используют с целью определения уровня обеспечения пожарной безопасности объекта, которая основывается на свойствах веществ и материалов.

Для определения пожароопасных свойств веществ существуют экспериментальные и расчетные методы [2]. Исследованные экспериментальным путем значения для ряда известных соединений приведены в литературе [3-4].

Однако имеющиеся литературные данные можно считать недостаточными, поскольку они охватывают не более 0,1 % от общего количества синтезированных к настоящему времени органических соединений. Экспериментальное определение свойств веществ сопряжено с существенными техническими трудностями, а также экономическими и временными затратами.

Кроме того, важнейшей задачей исследователей в настоящее время является получение новых веществ с заданными свойствами. Поэтому разработка универсальных расчетных методов прогнозирования пожароопасных свойств веществ органических соединений является актуальной задачей.

Постановка задачи. При проектировании новых инновационных промышленных, складских и лабораторных помещений, в которых используются и/или хранятся легко воспламеняю-

щиеся жидкости (ЛВЖ), необходима обязательная проверка на отнесение их к категории взрывоопасных или пожароопасных помещений [5]. Проведение расчетов по каждому случаю достаточно трудоемкая задача, поэтому применение подхода, предложенного в работе [6], облегчает решение этого вопроса, но в сводах правил [7] для расчета избыточного давления взрыва газо- и паровоздушных горючих смесей предлагаются следующие выражения:

$$\Delta P = (P_{\max} - P_0) \frac{mZ}{V_{\text{св}} \rho_{\text{п}}} \cdot \frac{100}{C_{\text{ст}}} \cdot \frac{1}{K_{\text{н}}}, \quad (1)$$

$$\Delta P = \frac{m \Delta H_{\text{гор}} P_0 Z}{V_{\text{св}} \rho_{\text{в}} C_p T_0 K_{\text{н}}}, \quad (2)$$

где P_{\max} - максимальное давление, развиваемое при сгорании стехиометрической газовой или паровой смеси в замкнутом объеме, определяемое экспериментально или по справочным данным в соответствии с требованиями. При отсутствии данных допускается принимать равным 900 кПа; P_0 - начальное давление, кПа (допускается принимать равным 101 кПа [1]); m - масса горючих паров легко воспламеняющихся жидкостей или горючих жидкостей; Z - коэффициент участия горючих газов и паров в горении, для ЛВЖ $Z = 0,3$ [1]; $V_{\text{св}}$ - свободный объем помещения, м^3 ; $\rho_{\text{п}}$ - плотность пара ЛВЖ при расчетной температуре t_p , $\text{кг}/\text{м}^3$, вычисляемая по формуле: $\rho_{\text{п}} = \frac{M}{V_0(1 + 0,00367t_p)}$;

V_0 – мольный объем, равный 22,413 м³/кмоль [1]; t_p – рабочая температура, °С; $C_{ст}$ – стехиометрическая концентрация паров ЛВЖ/ГЖ, % (об.); K_n – безразмерный коэффициент, учитывающий негерметичность помещения и неадиабатичность процесса горения, $K_n = 3$ [1]; $\Delta H_{гор}$ – низшая теплота сгорания, Дж/кг; ρ_v – плотность воздуха при 38 °С, $\rho_v = 1,1355$ кг/м³; C_p – теплоемкость воздуха при постоянном давлении, $C_p = 1,01 \times 10^3$, Дж/(кг×град.) [1]; T_0 – начальная температура воздуха, $T_0 = t_p + 273 = 311$ К.

Основываясь на определении максимального давления взрыва [7], то оно показывает на большую погрешность в определении категории помещения и соответственно неточное предложение мер по обеспечению пожарной безопасности объекта защиты. Решение данной задачи возможно посредством использования дескрипторов.

Ранее нами в работах [8, 9] на основе данных о дескрипторах, отражающих особенности

строения молекулы и ее физические характеристики, методами нейронных сетей были спрогнозированы температуры вспышки альдегидов и кетонов. Было показано, что существенными преимуществами данного подхода являются отсутствие экспериментальных измерений и экспрессность прогнозирования.

Таким образом, нейросетевые технологии, открывают новые возможности в самой методике построения компьютерных математических моделей и позволяют строить модели, которые сами извлекают закономерности предметной области, позволяют их эффективно использовать для решения широкого круга практических задач исходя из множества обучающих примеров.

Рассмотрим процесс прогнозирования максимального давления взрыва на примере октаналя, гексаналя, деканаля, 2,3- диметилпентаналя.

В табл. 1 приведена часть данных о дескрипторах некоторых исследованных веществ.

Таблица 1

Некоторые дескрипторы исследованных органических веществ

Сведения	2-метилпропаналь	пропаналь	гептаналь	2-метилнонаналь	бутаналь
Число атомов	6,00	5,00	9,00	12,00	6,00
Число атомов углерода	4,00	3,00	7,00	10,00	4,00
Относительное число углерода	0,67	0,60	0,78	0,83	0,67
Число атомов водорода	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Относительное число атомов водорода	0,17	0,20	0,11	0,08	0,17
Число атомов кислорода	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Относительное число атомов кислорода	1,17	0,20	0,11	0,08	0,17
Количество связей	5,00	4,00	8,00	11,00	5,00
Количество одиночных связей	4,00	3,00	7,00	10,00	4,00
Относительное число связей	0,80	0,75	0,88	0,91	0,80
Количество двойных связей	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Относительное число двойных связей	0,20	0,25	0,13	0,09	0,20
Молекулярная масса	65,05	53,03	101,08	137,12	65,05
Относительная молекулярная масса	10,84	10,60	11,23	11,43	10,84
Гравитационный индекс	358,92	277,37	603,60	849,88	358,93
Гравитационный индекс (пары)	534,55	350,62	837,93	1311,60	469,72
Индекс Винера	18,00	10,00	84,00	206,00	20,00
Индекс Рандича (порядок 0)	4,28	3,41	6,24	8,53	4,12
Индекс Рандича (порядок 1)	2,27	1,91	3,91	5,31	2,41
Индекс Рандича (порядок 2)	1,80	1,00	2,41	3,72	1,35
Индекс Рандича (порядок 3)	0,82	0,50	1,46	2,50	0,71
P_{max} - максимальное давление взрыва	832	858	843	789	858

Нейронная сеть, изображенная на рис. 1, была создана с помощью нейросимулятора, обу-

чена методом градиентного спуска путем использования 13 дескрипторов.

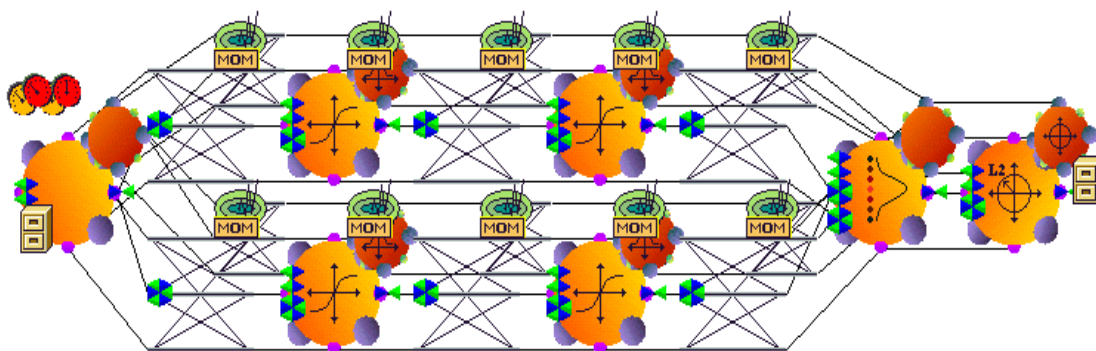


Рис.1 Архитектура нейронной сети

Результаты тестирования нейросети приведены в табл. 2, 3.

Таблица 2

Прогнозирование максимального давления взрыва

Наименование вещества	Справочные данные максимального давления взрыва, кПа	Прогноз, кПа	Относительная погрешность, %
Октаналь	740	710	4,05
Гексаналь	500	495	1
Деканаль	620	650	4,08
2,3- диметилпентаналь	-	864,29	-

Таблица 3

Прогнозирование температуры вспышки

Наименование вещества	Справочные данные температуры вспышки, °С	Прогноз, °С	Относительная погрешность, %
Октаналь	52	65	25
Гексаналь	30	38	24
Деканаль	86	84,96	1,2
2,3- диметилпентаналь	-	2,8	-

В производственном помещении площадью 150 м² храниться емкость с гексаналем. Необхо-

димо определить категорию помещения используя рис. 2.

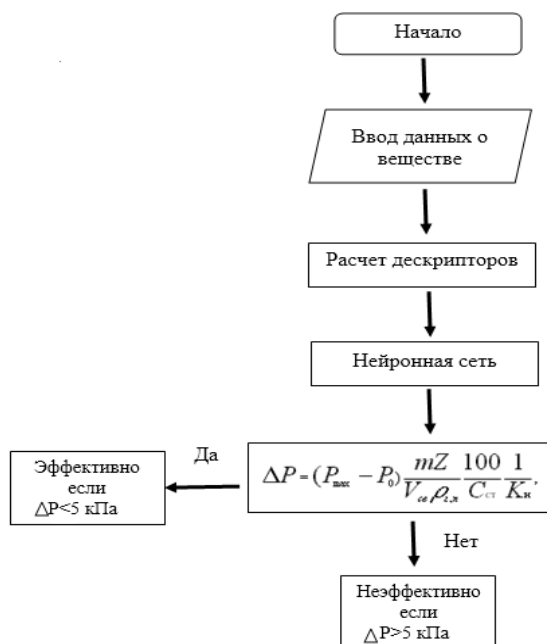


Рис. 2. Алгоритм расчета категории помещения на основе данных о дескрипторах

Результаты исследования. Произведем расчет категории помещения со всеми равными параметрами вещества и помещения, за исключением максимального давления взрыва. В пер-

$$1) \Delta P = (495 - 101) \cdot \frac{0,28 \cdot 0,3}{120 \cdot 0,8} \cdot \frac{100}{2,44} \cdot \frac{1}{3} = 3,6 \text{ кПа} \quad (G = 36,67 \text{ МДж/м}^2, \text{ кат. В4})$$

$$2) \Delta P = (900 - 101) \cdot \frac{0,28 \cdot 0,3}{120 \cdot 0,8} \cdot \frac{100}{2,44} \cdot \frac{1}{3} = 7,3 \text{ кПа}$$

Анализируя полученные результаты расчета и определения категорий помещений по взрывопожарной и пожарной опасности [7], можно отнести данное помещение к пожароопасной категории В4, т.к. ($G = 36,67 \text{ МДж/м}^2$).

Проведенный расчет показывает, что производственное помещение относится к категории В4, хотя изначально подразумевалась категория «А». Экономическое сравнение денежных затрат на выполнения комплекса мероприятий по обеспечению надлежащего уровня пожарной безопасности в соответствии с категорией «В4», обеспечивает экономию почти в 2 млн. рублей.

Вывод. Таким образом, прогнозирование пожароопасных свойств гексаналя, на основе данных о молекулярных дескрипторах дает удовлетворительные результаты. Использование нейронной сети позволяет получить без проведения сложного эксперимента температуру вспышки, максимальное давление взрыва в том числе тех, для которых отсутствуют литературные данные по пожароопасным свойствам. В качестве примера приведем экспериментальные значения 2,3- диметилпентаналь $P_{\max} = 864,29 \text{ кПа}$, $T_{\text{всп}} = 2,8 \text{ }^\circ\text{C}$.

Полученные закономерности позволяют более точно определять категорию помещения и тем самым появляется возможность целесообразно использовать средства на обеспечение определенного уровня пожарной безопасности помещения.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. №123 – ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности», от 22.07.08г. М.: ПРОСПЕКТ, 2014.112 с.
2. ГОСТ 12.1.044–89*. Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопас-

вом случае используем прогнозируемую $P_{\max} = 495 \text{ кПа}$, во втором случае $P_{\max} = 900$, как предлагает СП 12.13130.2009

ность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения. Введ. 01.01.91 г. М.: Стандартиформ, 2006. 100 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. I. 713 с.

4. 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.

5. Постановление Правительства №390 «О противопожарном режиме», от 25.04.12г.;

6. Алексеев С.Г., Пищальников А.В., Барбин Н.М., Калач А.В, Калач Е.В., Плаксицкий А.Б. Сравнительный анализ методов определения удельных безопасных объемов помещений с легковоспламеняющимися жидкостями// Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова. 2013. №1. С. 39-46.

7. СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности. Доступ из справ.-правовой системы «КонсультантПлюс».

8. 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. 2014. №4.

9. Королев Д.С. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ и материалов с использованием дескрипторов// Вестник Воронежского института ГПС МЧС России. 2014. №1. С. 7-10.

Korolev D.S., Kalach A.V.

CATEGORIZATION OF PREMISES ON THE BASIS DESCRIPTORS AND NEURAL NETWORK METHOD

Using descriptors and neural network technologies allowed to predict the flash point and the maximum explosion pressure of a number of aldehydes. On the basis of the proposed method was a correlation between the aldehyde group, allowing to predict the maximum explosion pressure and the temperature of the flash as previously studied substances and new. The data obtained were tested in the calculation of categories of premises on fire and explosion hazard. Based on the results of the research concluded that the possibility of applying this approach to the definition of the category of the room.

Key words: aldehydes, flashpoint, the maximum explosion pressure, descriptors, neural networks, fire danger.