

*Королев Д.С. препод.,  
Калач А.В. д-р хим. наук, доц.,  
Каргашилов Д.В., начальник кафедры*

*Воронежский институт государственной противопожарной службы МЧС России*

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОЖАРООПАСНЫХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕСКРИПТОРОВ И НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

otrid@rambler.ru

*Предложен метод прогнозирования пожароопасных свойств синтетических полимеров с использованием дескрипторов и метода искусственных нейронных сетей. Такой подход к прогнозированию пожароопасных свойств веществ и материалов обеспечивает получение точных данных о веществе без проведения сложного эксперимента и значительных финансовых затрат. Корреляцию исходных данных проводили на примере таких веществ как 2-метилнонаналь, диметилкетон. Относительная погрешность прогнозирования температуры вспышки составила не более 5%.*

**Ключевые слова:** *прогнозирование свойств, синтетические полимеры, дескриптор, нейронная сеть*

**Введение.** В настоящее время экспериментально изучены пожароопасные свойства многих органических веществ, однако их количество увеличивается на 250-300 тысяч ежегодно [1].

Стоит отметить, что быстро развивающимся классом веществ является синтетические полимеры, производство которых является взрывопожароопасным процессом, нередко сопровождающийся взрывами и пожарами, тем самым причиняя большой материальный ущерб [2].

Для обеспечения пожарной безопасности этих производств, необходимо осуществлять своевременное определение пожароопасных свойств, полученных новых веществ.

Одним из основных нормативных документов, устанавливающих методики определения свойств веществ является ГОСТ 12.1.044-89 «Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения». Настоящий стандарт распространяется на простые вещества, химические соединения и их смеси в различных агрегатных состояниях и комбинациях, в том числе полимерные и композитные материалы [4].

Рассматривая одну из предложенных методик по определению температуры вспышки, можно сделать вывод о том, что такие исследования, как правило, сопряжены со значительными техническими трудностями, связанными с техникой измерения, наличием примесей в изучаемых образцах, возможной нестойкостью, токсичностью и агрессивностью веществ.

Кроме того, это возможно только после получения вещества. Схематичное изображение существующей сложности прогнозирования свойств веществ, приведено на (рис. 1).

**Постановка задачи.** Таким образом, актуальным является вопрос разработки и обоснования способа прогнозирования пожароопасных свойств с использованием дескрипторов и метода искусственных нейронных сетей, не требующего проведения сложного эксперимента.

Метод прогнозирования с использованием дескрипторов ранее использовался в работе по определению температуры вспышки предельных альдегидов и алкилацетатов [5].

Дескрипторы – это финальный результат логических и математических процедур, которые трансформируют химическую информацию, закодированную в рамках символического представления молекулы, в полезное число или результат какого-либо стандартизированного эксперимента. Важнейшим элементом метода использующего дескрипторы является описание представителей гомологического ряда структуры химических соединений [6].

Молекулярная структура определяется тремя составляющими:

- конституцией, т.е. подразумевает определенный порядок и последовательность связывания атомов;
- конфигурацией, т.е. отражает трехмерное расположение атомов;
- конформацией, т.е. представляет термодинамически стабильное положение валентно несвязанных атомов по отношению друг к другу.

При компьютерной обработке, каждый из указанных компонентов молекулярной структуры описывают с помощью совокупности дескрипторов [6].

В данном исследовании наряду с дескрипторами использовали метод искусственных нейронных сетей. Программный продукт, сов-

мещает модульный с иконным представлением интерфейс разработки нейронной сети, с реализацией усовершенствованных процедур обучения. При этом объектно-ориентированный ди-

зайн разбивает нейронную сеть на нейронные компоненты.

Такая структура обеспечивает возможность моделирования любой нейронной сети (рис. 2).

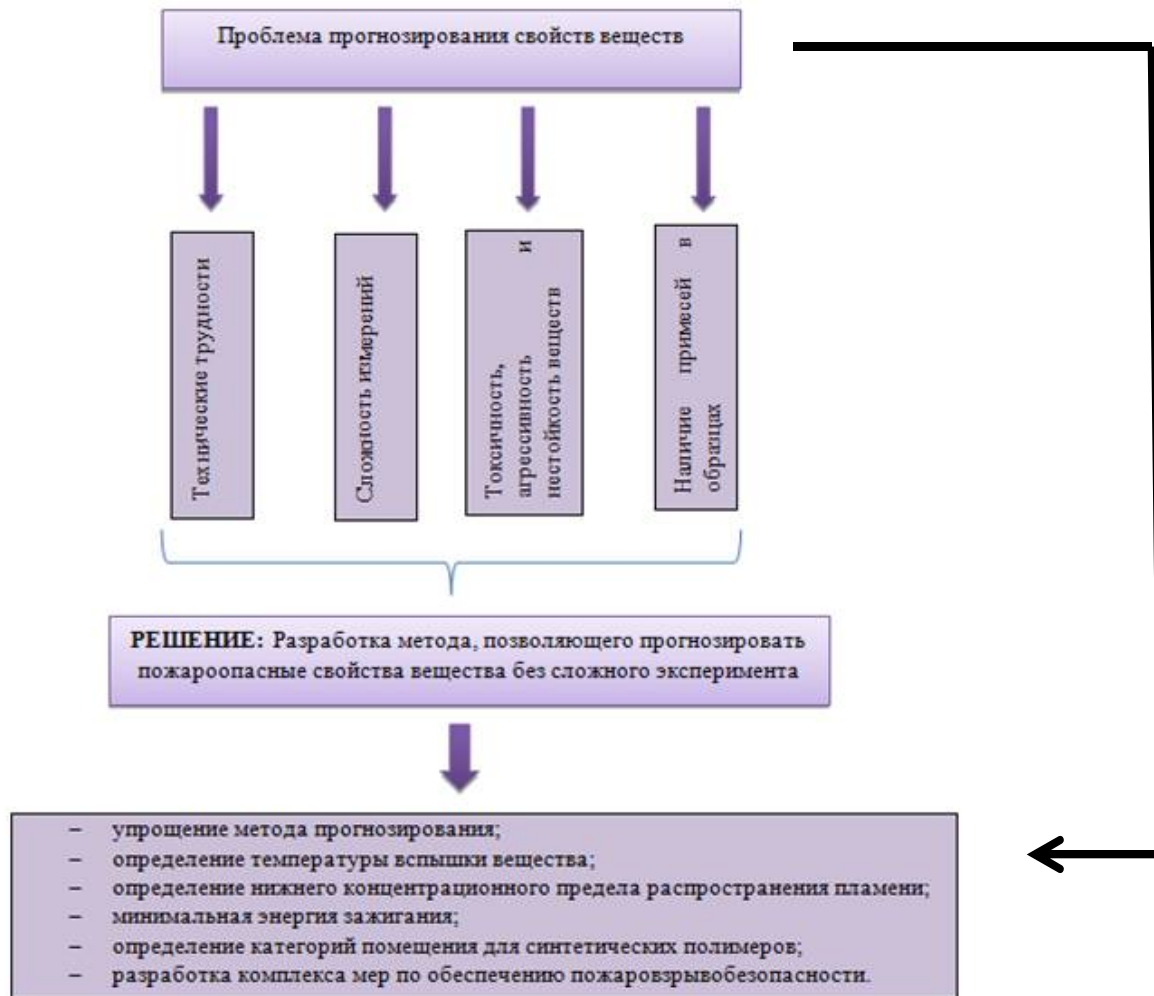


Рис. 1. Проблема прогнозирования свойств веществ

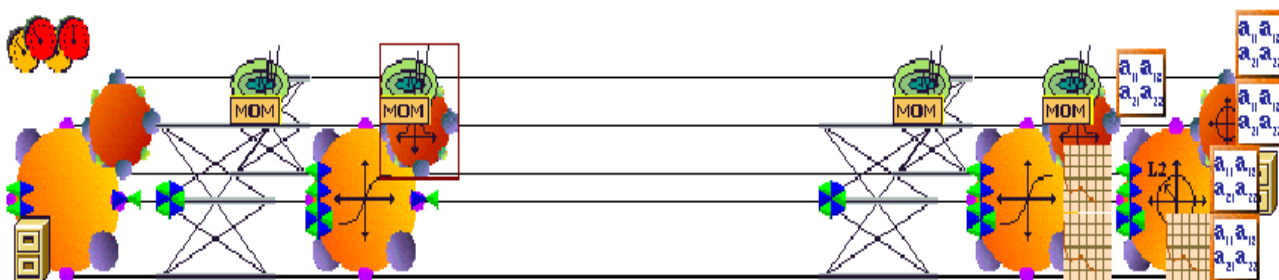


Рис. 2. Наглядное изображение нейронных связей в модели

**Результаты исследований.** Для ускорения процесса прогнозирования была разработана оригинальная программа Convert 1.0, обеспечивающая распознавание предложенного исходного файла, его конвертацию в формат txt, xls, обработку данных.

Прогнозирование проводили на группе альдегидов и кетонов [7,8]. В качестве примера в табл. 1,2 приведены результаты прогнозирования свойств изучаемых веществ.

Анализируя результаты табл. 1 и табл. 2, полученные при прогнозировании свойств изучаемых веществ, можно сделать вывод о целесообразности применения данного метода, поскольку прогнозируемая температура вспышки имеет относительную погрешность в 5%, от экспериментального значения и 3,8% соответственно.

Таблица 1

**Результаты прогнозирования свойств 2-метилнонаналя**

Свойства	Исходные данные дескрипторов	Полученные данные в ходе прогнозирования	Абсолютная погрешность	Относительная погрешность
Температура вспышки, °С	85	89,32	4,3	5
Атомов водорода, шт.	1	1,089	0,089	8,9
Число атомов углерода, шт.	10	9,99	0,1	1
Количество атомов кислорода, шт	1	1,04	0,04	0,03
Молекулярная масса, г/моль	137,11	146,65	9,54	0,06

Таблица 2

**Результаты прогнозирования свойств диметилкетона**

Свойства	Исходные данные дескрипторов	Полученные данные в ходе прогнозирования	Абсолютная погрешность	Относительная погрешность
Температура вспышки, °С	-9	-5,57	3,43	3,8
Число атомов углерода, шт	3	4,84	1,84	6,1
Количество атомов кислорода, шт	1	1,05	0,05	5
Молекулярная масса, г/моль	52,03	74,43	22,4	4,3

**Заключение.** Таким образом, разработана методика прогнозирования пожароопасных свойств синтетических полимеров с использованием дескрипторов и метода искусственных нейронных сетей позволит избежать таких проблем как технические трудности, сложности в измерениях, не точностей в исходных данных, так как некоторые вещества могут содержать примеси, а также защитить здоровье человека если будет использоваться токсичный материал.

Сведения, полученные о веществе в ходе прогнозирования, позволят снизить вероятность возникновения пожаров и взрывов на предприятиях (на предприятиях люди за чистую не обращают должного внимания на состояние тары, площадок и т.д.), а это снизит вероятность поражения человека опасными факторами пожара и величину пожарного риска.

**БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК**

1. Кара-Мурза Г., Айзатулин, Т. А. Химическая энциклопедия. М.: Химлит, 2007. 585с.
2. Поликарпов В.В. Повышение эффективности нефтехимических и производств за счет

внедрения технологии по герметизации утечек под давлением. М.: Стройиздат., 1995. 144 с.

3. Статистика пожаров сайт МЧС России. - 2014 [Электронный ресурс] URL: [http://statistica\\_pozharov\\_RF-2013](http://statistica_pozharov_RF-2013)

4. 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.

5. Калач А. В., Карташова Т. В., Сорокина Ю. Н., Спичкин Ю. В. Оценка пожароопасных свойств органических соединений с применением дескрипторов // Пожаровзрывобезопасность. 2013. Т. 22, № 2. С. 18–21.

6. Раевский О.А. Свойства химических соединений и лекарств как функции их структуры. М.: 2013. 353 с.

7. 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.

8. 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.

9. Козлов А.Ю., Мхитарян В.С., Шишков В.Ф. Статистический анализ данных в MS Excel:

учебное пособие/ Козлов А.Ю., Мхитарян В.С., Шишков В.Ф. М.:ИНФРА-М, 2012.320с.

---

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

**PREDICTING FIRE RISK PROPERTIES OF SUBSTANCES AND MATERIALS USING DESCRIPTORS AND NEURAL NETWORKS**

*A method for predicting fire hazard properties of synthetic-ski polymers using descriptors and method of artificial neuron-governmental networks is proposed. This approach to the prediction of fire hazard properties of substances and materials provides you with accurate data about the substance without carrying out complex experiments and considerable financial costs. The correlation of the outcome of the data was carried out on the example of substances such as 2-methylnonane, dimethyl-ketone. The relative error in the prediction of the flash point of not more than 5%.*

**Key words:** forecasting properties, synthetic polymers, the handle, neural network.