ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ВОРОНЕЖСКИЙ ИНСТИТУТ ГОСУДАРСТВЕННОЙ ПРОТИВОПОЖАРНОЙ СЛУЖБЫ МЧС РОССИИ»

На правах рукописи

Королев Денис Сергеевич

МЕТОДИКА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОЖАРООПАСНЫХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПОЖАРНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

Специальность 05.26.03 – пожарная и промышленная безопасность

(нефтегазовая отрасль)

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
доктор химических наук, профессор
Калач Андрей Владимирович

Воронеж – 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение……. 4
Глава 1. Современные аспекты прогнозирования пожароопасных веществ… 10
1.1. Проблемы прогнозирования пожароопасных свойств……. 10
1.2. Основные показатели пожаровзрывоопасности веществ и материалов…. 12
1.3. Современная классификация пожарных рисков……... 18
1.4. Модели пожарного риска…… 21
1.4.1. Полевые (дифференциальные) математические модели пожара в помещении…….. 22
1.4.2. Интегральная математическая модель……..….. 23
1.4.3. Зонная математическая модель…….……. 24
1.5. Методы и модели, применяемые в прогнозировании пожароопасных свойств нефтегазовой и других отраслях…….……... 25
1.5.1. Дескрипторный метод……. 25
а. Топологические и квантово-химические индексы в прогнозировании свойств веществ ……. 30
б. Прогнозирование свойств веществ на основе структуры углеродной цепи 31
1.5.2. Физико-химические и пожароопасные параметры, используемые в прогнозировании свойств веществ…….…. 31
1.5.3. Индикаторные переменные в прогнозировании свойств веществ…….. 33
1.5.4. Прогнозирование свойств веществ с использованием моделей мембранных систем……... 38
1.5.5. Система компьютерного прогнозирования токсичных свойств веществ…….……. 38
Выводы по главе 1…….……. 39
Глава 2. Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей для обеспечения пожарной и промышленной безопасности. 40
2.1.Предпосылки создания новой методики прогнозирования пожароопасных свойств……. 40
2.2.Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей……. 41
2.3.Разработка нейропакета, ориентированного для прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки…….. 47
Выводы по главе 2…….……..… 51

Глава 3. Прогнозирование основных показателей пожаровзрывоопасности продуктов нефтепереработки с помощью молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей…….. 52
3.1. Прогнозирование основных показателей продуктов нефтепереработки, используемых при расчете пожарного риска объектов нефтяного сектора…. 52
3.2.Прогнозирование минимальной энергии зажигания кислородсодержащих производных углеводородов……... 56
Выводы по главе 3……..… 60
Глава 4. Разработка противопожарной защиты для объектов нефтегазовой отрасли с учетом использования методики прогнозирования на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей……. 61
4.1. Проектирование системы молниезащиты……. 61
4.2.Разработка проблемно-ориентированного программного продукта «Молниезащита 1.0»…….. 68
4.3.Определение температурного класса электрооборудования производственного помещения при помощи методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей……. 72
4.4. Обработка экспериментальных данных программными продуктами Convert 1.0……... 77
4.5. Расчет времени эвакуации людей из помещения переработки нефти с использованием методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей……... 78
4.6. Методика расчета категории помещения нефтегазовой отрасли по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей…… 86
Выводы по главе 4……. 92
Заключение ……. 93
Список литературы …… 94
Приложение 1…….. 106

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы. Основными задачами стратегического развития Российской Федерации является совершенствование отечественной промышленности, организация производств и обеспечение импортозамещения. Создание конкурентных преимуществ различных отраслей промышленности возможно на основе разработки и внедрения технологических инноваций, которые невозможны без решения задачи управления рисками. Развитие нефтегазовой отрасли, где наблюдается постоянная интенсификация технологий, способны вывести Россию на новый уровень технологического развития.

Для достижения желаемого результата необходимы разработка методов и инструментов стратегического развития нефтегазовых предприятий, а также осуществление мероприятий, направленных на обеспечение пожаровзрывобезопасности и создание безопасных условий труда, что в полной мере зависит от правильности и полноты оценки риска используемых в нефтегазовой отрасли пожаровзрывоопасных и физико-химических свойств продуктов нефтепереработки.

Следует отметить, что на пути к достижению поставленных целей и задач необходимо снижать риски возникновения пожаров, а также чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера; сокращать и, по возможности, исключать погибших и пострадавших при чрезвычайных ситуациях и пожарах, как и экономический ущерб.

Рассматривая общепринятую методику по определению расчетных величин пожарного риска, утвержденную Приказом МЧС России от 10.07.2009г. № 404 «Об утверждении методики определения расчетных величин пожарного риска на производственных объектах» стоит отметить ее ограниченность в виду отсутствия полноты справочных данных о физико-химических свойствах продуктов нефтепереработки.

Поэтому актуальность темы исследования обусловлена необходимостью разработки методов и средств превентивного и текущего управления

техногенными явлениями разрушительного и пожароопасного характера, которые позволят достоверно определять величину пожарного риска в частности на объектах защиты, где протекает технологический процесс с особой спецификой функционирования, согласно п.4, ст.93 ФЗ-№123 «Технического регламента о требованиях пожарной безопасности», что позволит исключить финансовые затраты на дополнительные инженерно-технические и организационные мероприятия по обеспечению их пожарной безопасности и социальной защиты.

В этой связи предложение способа предотвращения возникновения пожаров на нефтегазовых предприятиях, реализующего прогнозирование пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, позволит устанавливать требования пожарной безопасности к применению этих веществ и материалов, а также обеспечит гибкий подход в расчете пожарного риска.

Целью диссертационного исследования является прогнозирование пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки в режиме реального времени, без проведения сложных технических процессов, связанных с пробоотбором, пробоподготовкой и решением сложных аппроксимационных уравнений.

Достижение цели диссертационного исследования обеспечивается путем решения **научной задачи,** которая заключается в разработке научных положений по осуществлению прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей для обеспечения пожарной и промышленной безопасности.

В качестве объектов исследования выбраны кислородсодержащие производные углеводородов. Такой выбор объектов обусловлен тем, что эти классы кислородсодержащих органических соединений активно применяются в нефтегазовой отрасли.

Так, предельные кетоны применяются для удаления парафиновых углеводородов из керосино-газойлевых и масляных фракций нефти, а предельные альдегиды используются в качестве биоцидов при интенсификации добычи углеводородов.

Предметом исследования являлись показатели пожаровзрывоопасности кислородсодержащих производных углеводородов.

Для достижения поставленной цели **в исследовании решались следующие частные задачи:**

- разработка новой методики прогнозирования основных пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и апробация на примере кислородсодержащих органических соединений;
- создание оригинальной компьютерной программы, реализующей методику прогнозирования продуктов нефтепереработки, основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и проведение сравнительного анализа на примере расчета времени эвакуации людей из помещения, где протекает технологический процесс, связанный с ректификацией нефти, при использовании спрогнозированных значений и данных из нормативных методик ГОСТ 12.1.004-91*;
- определение пожаровзрывобезопасных условий для обращения и хранения ряда органических растворителей, которые применяются в нефтегазовой отрасли на примере системы молниезащиты, взрывозащищенного электрооборудования и установления категории помещении по взрывопожарной и пожарной опасности, с учетом применения предложенной методики прогнозирования свойств продуктов нефтепереработки.

Научная новизна работы заключается в следующем:

- впервые разработана методика, базирующаяся на молекулярных дескрипторах и искусственных нейронных сетях (МДИНС), позволяющая прогнозировать пожаровзрывоопасные свойства продуктов нефтепереработки;
- впервые получены показатели пожаровзрывоопасности ряда кислородсодержащих органических соединений, представляющие практический интерес для нефтегазовой отрасли при установлении требований пожарной безопасности к применению этих веществ;

– усовершенствованы методики расчета системы молниезащиты и времени эвакуации людей, расчета категории помещений по взрывопожарной опасности и выбора взрывозащищенного электрооборудования для объектов нефтегазовой отрасли отличающиеся использованием предлагаемой методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Положения, выносимые на защиту:

1) методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, отличающаяся использованием молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, позволяющая определять физико-химические свойства веществ без проведения сложного эксперимента и больших финансовых затрат (п.5 Паспорта специальности 05.26.03);
2) методика определения величины расчетного времени эвакуации людей и расчетной категории для помещений нефтегазовой отрасли по взрывопожарной и пожарной опасности с использованием молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей (п.4 Паспорта специальности 05.26.03);
3) методика расчета системы молниезащиты зданий нефтегазового сектора, алгоритм выбора температурного класса электрооборудования для исключения источника зажигания в горючей среде с использованием молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и их программная реализация (п.6 Паспорта специальности 05.26.03).

Практическая значимость диссертационного исследования заключается в том, что разработанная методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, основанная на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, позволяет управлять рисками пожарной безопасности, обеспечивая на заданном уровне пожаровзрывобезопасность промышленных предприятий нефтегазовой отрасли. Достоверность полученных результатов и выводов обеспечена методически обоснованным комплексом исследований с использованием современных средств

измерений, применением математических методов планирования экспериментов и статистической обработкой результатов.

Внедрение результатов работы. Разработанные теоретические и научно-методические материалы по обеспечению пожарной и промышленной безопасности объектов защиты путем использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей внедрены в образовательный процесс Воронежского института Государственной противопожарной службы МЧС России, при изучении дисциплин: «Пожарная безопасность электроустановок», «Пожарная безопасность технологических процессов», «Пожарная безопасность в строительстве» курсантами, студентами и слушателями факультета заочного обучения, обучающиеся по специальности – «Пожарная безопасность», а также реализуются в практической деятельности предприятий: АО «Энергия» при разработке мероприятий, направленных на обеспечении пожарной безопасности производственных участков и ООО «ПрофТехноКонсалт» при определении расчетных величин пожарного риска промышленных объектов.

Апробация работы. Основные результаты диссертационного исследования докладывались в рамках: III Всероссийской научно-практической конференции «Проблемы обеспечения безопасности при ликвидации последствий чрезвычайных ситуаций» (Воронеж, 2014г.); IV Всероссийской научно-практической конференции курсантов, слушателей, студентов и молодых ученых с международным участием «Современные технологии обеспечения гражданской обороны и ликвидации последствий чрезвычайных ситуаций» (Воронеж, 2015г.); ФГБУ ВНИИПО МЧС России в рамках VIII Международного салона «Комплексная безопасность 2015» XXVII Международной научно-практической конференции, посвященной 25-летию МЧС России на тему: «Актуальные проблемы пожарной безопасности» (ВНИИПО, Москва, 2015г.); Международного молодежного симпозиума «Современные проблемы математики. Методы, модели, приложения» (Воронеж, 2015г.); VI Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Пожарная безопасность: проблемы и

перспективы» (Воронеж, 2015г.); Международной заочной научно-практической конференции «Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика» (Воронеж, 2015г.).

По результатам работы получены свидетельства о регистрации программы для ЭВМ: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016614070 «Нейропакет КДС 1.0»/ Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов (РФ); правообладатель ФГБОУ ВО Воронежский институт ГПС МЧС России . - № 2016611455; заявлено 24.02.16г.; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 16.04.16г.; свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015663298 «Молниезащита 1.0» (MZ) / Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов (РФ); правообладатель Королев Д.С. - № 2015619192; заявлено 29.09.2015; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 15.12.15г.; свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015610745 «Convert 1.0» / Д.С. Королев (РФ); правообладатель Королев Д.С. - № 2014660420; заявлено 10.10.2014; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 16.01.15г.

Получен регистрационный номер заявки о выдаче патента «Экспресс-способ прогнозирования пожароопасных свойств сложных эфиров масляной и пропионовой кислот с использованием молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей» - № 2016113877.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 20 печатных работ, 12 из которых опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России.

ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННЫЕ АСПЕКТЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОЖАРООПАСНЫХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

В главе рассмотрены методики оценки расчетных величин пожарного риска. Было установлено, что все они имею ограниченность в виду отсутствия достоверных справочных данных о физико-химических свойствах, используемых в расчетах. В связи с этим в главе поднимается актуальный вопрос, посвященный проблеме прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки.

Рассмотрены современные расчетные методы прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки.

1.1. Проблемы прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки

В настоящее время учеными и практиками открыто свыше 110 миллионов различных химических соединений. Ежегодно количество веществ увеличивается на 250 – 300 тыс., что повышает риск угрозы человеку и окружающей среде, ведь одним из потенциальных источников риска возникновения пожаров и взрывов могут быть новые неизученные вещества [1-3].

Функционирование предприятий, например, нефтегазовых, основывается на знании и выполнении установленных действующих норм и правил пожарной безопасности, с учетом возможного определения и минимизации рисков возникновения техногенных чрезвычайных ситуаций.

С целью предотвращения возникновения аварийных ситуаций, необходимо разрабатывать систему предотвращения пожара, работа которой основывается на исключении условий возникновения пожаров, которые достигаются предотвращением образования горючей среды и возможных потенциальных источников зажигания. Согласно ст.49 ФЗ-№123 «Технического регламента о требованиях пожарной безопасности» одним из способов исключения условий образования горючей среды — это использование наиболее безопасных веществ и

материалов, а также материалов, взаимодействие которых друг с другом не приводит к образованию горючей среды [4].

Стоит отметить, что экспериментальное определение свойств веществ, как правило, сопряжены со значительными техническими трудностями, связанными с техникой измерения, наличием примесей в изучаемых образцах, возможной нестойкостью, токсичностью и т.д. Поэтому возникает проблема, связанная с определением физико-химических свойств используемых веществ. Схематичное изображение существующей сложности прогнозирования свойств веществ, приведено на рисунке 1.

Рисунок 1 - Проблема прогнозирования свойств веществ

Из рисунка 1, видно, что проведение эксперимента по прогнозированию пожароопасных свойств горючих веществ и материалов требует больших временных и человеческих затрат, а также это сопряжено с большими финансовыми вложениями, после чего следует их классификация, которая необходима для установления требований пожарной безопасности, т.е. эффективных мероприятий по предупреждению взрывов и пожаров нефтегазовых предприятий.

Таким образом, проблема прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки является актуальным вопросом, решить которую можно путем разработки экспресс-методики анализа свойств веществ. Это позволит определять свойства веществ и материалов в режиме реального времени без трудоемких операций пробоотбора и пробоподготовки, кроме того, существующие стационарные лаборатории не могут обеспечить непрерывности прогнозирования свойств.

Также, оперативная методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки обеспечит решение ряда практических задач – определение необходимого перечня мероприятий, направленных на обеспечение пожарной безопасности.

1.2. Основные показатели пожаровзрывоопасности веществ и материалов

Пожаровзрывоопасные свойства веществ и материалов характеризуется параметрами, которые основываются из их агрегатного состояния, а также условий его применения. Различают: твердые, жидкие, газообразные вещества и пыли, для которых характерны особые показатели [5].

При оценки пожарной опасности газов определяют: максимальное давление взрыва, температуру самовоспламенения, категорию взрывоопасной смеси, минимальную энергию зажигания, минимальное взрывоопасное содержание кислорода и нормальную скорость горения [5].

При определении взрывопожароопасности жидкостей, учитывают: группу горючести, температуру самовоспламенения, температуру вспышки, температуру

воспламенения, температурные пределы, а также те показатели, характерные при оценки пожарной опасности газов [5].

При оценке пожарной опасности твердых материалов определяют: группу горючести, температуру воспламенения и самовоспламенения [5].

При оценке пожарной опасности вещества необходимо тщательно изучить поведение вещества при эксплуатации, выявить его возможные изменения свойств.

В различных развитых странах мира разрабатываются и официально утверждаются многочисленные способы и методы лабораторных испытаний взрывопожароопасных показателей горючих веществ и материалов. Все они имеют значительные различия, ведь создание их не связано одна с другой. Кроме того, международная стандартизация их не проведена, поэтому использование в промышленных масштабах невозможно.

Классификация веществ и материалов по взрывоопасности и пожароопасности определяется ГОСТ 12.1.044 - 89 «ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения", в котором установлено, что пожароопасные свойства веществ и материалов определяют с целью получения необходимых данных при разработке систем, направленных на обеспечение пожарной безопасности и взрывобезопасности, в соответствии с требованиями действующих нормативных документов.

Рассмотрим некоторые из показателей взрывопожароопасности веществ, применяемых в нефтегазовой отрасли:

Температура вспышки – одна из важнейших характеристик пожароопасности вещества, определяющая температурные условия, при которых оно становится огнеопасным в открытом сосуде или при розливе [6-8].

Наряду с экспериментальными методами определения температуры вспышки вещества существуют еще расчетные. Одним из точных расчетных методов определения температуры вспышки является расчет по формуле (1) В.И. Блинова [7].

$$\text{Твс} = \frac{\text{А}_\text{б}}{\text{p}_{\text{вс}\cdot D_o \cdot \beta}} \quad (1)$$

где $T_{вс}$ – температура вспышки, ^{0}К;

- парциальное давление пара горючего вещества при температуре вспышки, мм рт. ст.;

- константа метода определения; рекомендуется при расчете температуры вспышки в закрытом тигле принимать равным 3000 и в открытом тигле 3400.

Для расчета параметров индивидуальных органических горючих веществ данный метод достаточно точен.

Наиболее простым способом расчета температуры вспышки является расчет по формуле (2) Элея [9]:

$$\text{К} = t_{кип} - 18 \cdot \sqrt{\text{К}} \quad (2)$$

где К – коэффициент горючести, который определяется по формуле (3):

$$\text{К} = 4 \cdot m_c + m_H + 4 \cdot m_s + m_n - 2 \cdot m_o - 2 \cdot m_{cl} - 3 \cdot m_f - 5 \cdot m_{br} \quad (3)$$

Анализируя работу [10], можно отметить тот факт, что между температурой вспышки и нижним температурным пределом воспламенения существует взаимосвязь, которую можно описать формулой (4):

$$\Delta t_B = t_{\text{всп}} - t_{\text{н}} = 0{,}125 t_{\text{всп}} + 2 \quad (4)$$

при $0 \leq t_{\text{всп}} \leq 160^0 C$

Используя предложенные формулы, можно ориентировочно определить температуру вспышки.

На основании данных по температурам вспышки производится классификация горючих веществ по воспламеняемости и определяются условия их безопасного хранения, транспортирования и применения. По температуре вспышки осуществляется оценка качества нефтепродуктов, а также категорирование производств по взрывной, взрывопожарной и пожарной опасности.

Температура самовоспламенения - это самая минимальная температура наружной среды, где в специальных лабораторных условиях проводятся

испытания, при которых возможно самовоспламенение горючего вещества или материала [10, 11].

Наряду с экспериментальными методами определения температуры самовоспламенения вещества существуют еще расчетные. Стоит отметить, что температуру самовоспламенения ряда органических соединений можно рассчитать предельно точно, используя понятие средней длины углеродной цепи молекулы соединения [11, 12], которую можно вычислить по формуле (5):

$$\mathrm{L} = \frac{2\sum m_i \cdot n_{ci}}{M \cdot (M-1)} \qquad (5)$$

где m_i – число соответствующих углеродных цепей, содержащие углеродные атомы;

M – число концевых групп в молекулах вещества.

На основании данных по температурам самовоспламенения осуществляют оценку пожаровзрывоопасности вещества, определяют группу смеси для выбора необходимого взрывозащищенного электрооборудования [13].

Максимальное давление взрыва – это максимальное избыточное давление, возникающее при объемном сгорании газо, паро или пылевоздушной смеси в замкнутом сосуде, где изначальное давление смеси составляет 101,3 кПа [14, 15].

Для расчета избыточного давления взрыва газо- и паровоздушных горючих смесей используются следующие выражения:

$$\Delta P = (P_{max} - P_o)\frac{mZ}{V_{св}\,\rho_п} \cdot \frac{100}{C_{ст}} \cdot \frac{1}{K_н}, \qquad (6)$$

где P_{max} - максимальное давление, развиваемое при сгорании стехиометрической газовоздушной или паровоздушной смеси в замкнутом объеме, определяемое экспериментально или по справочным данным в соответствии с требованиями. При отсутствии данных допускается принимать равным 900 кПа;

P_o – начальное давление, кПа (допускается принимать равным 101 кПа); m– масса горючих паров легковоспламеняющихся жидкостей или горючих жидкостей;

Z– коэффициент участия горючих газов и паров в горении, для ЛВЖ Z= 0,3;

$V_{св}$– свободный объем помещения, $м^3$;

$\rho_п$– плотность пара ЛВЖ при расчетной температуре $t_р$, $кг/м^3$;

$C_{ст}$ – стехиометрическая концентрация паров ЛВЖ/ГЖ, % (об.);

$К_н$ – безразмерный коэффициент, учитывающий негерметичность помещения и неадиабатичность процесса горения, $К_н$ = 3;

Кроме того, значение максимального давления взрыва показывает взрывоопасность вещества и дает понятие о необходимых требованиях пожарной безопасности.

Нижний (верхний) концентрационный предел распространения пламени – это такой процент содержания горючего вещества или материала (в пределах от минимума до максимума) в смеси с окислительной средой, что в последствии возможно развитие огня по горючему веществу на любое расстояние от потенциального источника зажигания [16, 17].

Концентрационные пределы распространения пламени относятся к числу не менее важных показателей, характеризующих пожаровзрывоопасность вещества. Однако из-за трудоемкости экспериментального определения данных показателей больше распространение получили расчетные и расчетно-аналитические методы.

Нижний предел распространения пламени (НКПРП) в процентах рассчитывается по формулам (7) [16]:

$$\varphi_н = 100/(1 + \vartheta_в) \quad (7)$$

где - НКПРП, % об.;

- число молей воздуха, приходящегося на 1 моль исходной смеси.

Минимальная энергия зажигания – это минимальная величина электрического разряда, способного воспламенить легковоспламеняющуюся смесь вещества с воздухом [5].

Для приблизительного расчета минимальной энергии зажигания паро- и газовых смесей в воздухе, ξ_{min} (в Мдж) можно пользоваться формулой (8):

$$\xi_{\min} = 0{,}01 \cdot d_{кр}^{2,5} \quad (8)$$

где $d_{кр}^{2,5}$ – критический гасящий диаметр, мм;

Критический диаметр – это минимальный диаметр цилиндрического заряда взрывчатого вещества, который может выступать в роли путей распространения

детонации. Если диаметр заряда не превышает критического, то детонация либо не возникает, либо затухает.

Для определения критического гасящего диаметра, необходимо использовать данные литературных источников, либо при необходимости этот показатель можно рассчитать по формуле (9) [18]:

$$d_{\text{кр}} = \frac{x_b}{v_b} \cdot \sqrt{\frac{32 \cdot e^A}{RT_b}} \qquad (9)$$

где x_b – температуропроводность смеси;

v_b – скорость распространения пламени;

e – основание натурального логарифма;

A – энергия активации реакции в пламени;

T_b – температура, ^{0}К;

R – универсальная газовая постоянная;

b – индекс, относящийся к состоянию, соответствующему продуктам сгорания.

Знания о минимальной энергии зажигания необходимо применять при разработке компенсирующих мероприятий и для обеспечения электростатической искробезопасности технологических процессов.

Таким образом, рассмотренные показатели пожароопасности веществ и материалов различных агрегатных состояний широко используются в нефтегазовой отрасли, например, метанол применяется как средство замедляющее процесс гидратообразования на газовых и конденсатных месторождениях; спиртобензол используется для извлечения веществ кислотного характера (битуминозных компонентов, силикагелевых смол и т.п.); спирты и простые эфиры как присадки к бензинам; уксусная и муравьиная кислоты, сложные эфиры как ингибиторы скорости растворения минеральных пород. Зная температуру самовоспламенения используемых веществ, можно определить температурный класс взрывозащищенного электрооборудования, максимальное давление взрыва и температура вспышки позволит определить категорию помещения по

взрывопожарной и пожарной опасности, что способствует оптимальному выбору мероприятий, необходимых при обеспечении пожарной безопасности объекта. Кроме того, расчетные методики определения пожароопасных показателей, установленные [5], говорят о трудоемкости проведения расчетных операций, а также следует выделить понятие «замкнутости» проведения расчета на одном показателе.

1.3. Современная классификация пожарных рисков

На современном этапе развития, для разработки экономически эффективных и оптимальных систем противопожарной защиты в промышленной деятельности, необходимо основываться на возможности гибкого подхода к расчету пожарного риска [18-23].

В работе [24] рассматриваются различные понятия и аспекты риска: добровольный – вынужденный, обычный – катастрофический, немедленный – отложенный, старый – новый (ранее не известный), природный – техногенный, контролируемый – неконтролируемый, непрерывный – случайный.

Проводя анализ российских нормативных документов, требований в области оценки пожарного риска промышленного предприятия можно сделать вывод о необходимости проведения данной процедуры, что может являться достаточным поводом для утверждения об обеспеченности пожарной безопасности объекта защиты. Существует два понятия риска это индивидуальный и социальный [22, 25-27].

Индивидуальный риск – это частота поражения одного человека опасными факторами пожара.

Социальный риск – это некая зависимость или конкретное число, которое определяется исходя из количества событий, возникших в определенное время и впоследствии оказывающее поражающее воздействие на группу людей (не менее 10 человек).

Значения допустимого пожарного риска устанавливаются нормативными и законодательными актами. В разных странах устанавливаются свои допустимые

значения. Максимально допустимое значение индивидуального риска равное 10^{-6} год$^{-1}$, а социального 10^{-5} год$^{-1}$ установлено в Нидерландах [28], а в Великобритании – Комитет по здоровью и безопасности определил для зданий различной пожарной опасности следующие значения индивидуальных рисков на разных границах:

- внутренняя - 10^{-5} год$^{-1}$;
- средняя - 10^{-6} год$^{-1}$;
- внешняя - $3\cdot 10^{-7}$ год$^{-1}$

Что касается Российской Федерации, то здесь определена максимально допустимое значение равное 10^{-6} год$^{-1}$ [18].

Согласно стандарта [18] пожарная безопасность технологических процессов считается выполненной только в том случае, если для населения, находящегося вблизи опасного предприятия, индивидуальный риск от этого предприятия меньше 10^{-8} год$^{-1}$ и социальный риск меньше 10^{-7} год$^{-1}$. Если индивидуальный риск больше 10^{-6} год$^{-1}$ и социальный риск больше 10^{-5} год$^{-1}$, то эксплуатация технологических процессов не возможна.

В случае проведения расчета и получения промежуточных значений риска эксплуатация допускается, но необходимо предусмотреть набор дополнительных компенсирующих мероприятий, а также обосновать их выбор.

В соответствии с Постановлением Правительства «О федеральном государственном пожарном надзоре» от 12.04.12 №290 взаимодействие с надзорными органами строится на основании выставленных собственникам объектов защиты претензий с их стороны [25, 26].

Такие претензии, как правило, оформляются в виде предписаний надзорных органов (государственного пожарного надзора) и содержат перечень мероприятий, необходимых к выполнению со стороны организации (собственника или арендатора объекта защиты).

Следует понимать, что каждый инспектор государственного пожарного надзора имеет субъективную оценку определения пожарной опасности объекта.

Пожарная безопасность объекта защиты – это состояние защищаемого объекта, определяющееся возможностью предотвратить момент возникновения и

распространения пожара, а также исключить последствия для здоровья и жизни людей [4].

Пожарная безопасность объектов различной пожарной опасности считается выполненной только в том случае, когда [4, 26-28]:

1) максимально выполнены требования пожарной безопасности, определенные техническими регламентами;

2) расчетный пожарный риск не превышает значений, установленных Федеральным законом. Алгоритм проведения проверки показан на рисунке 2.

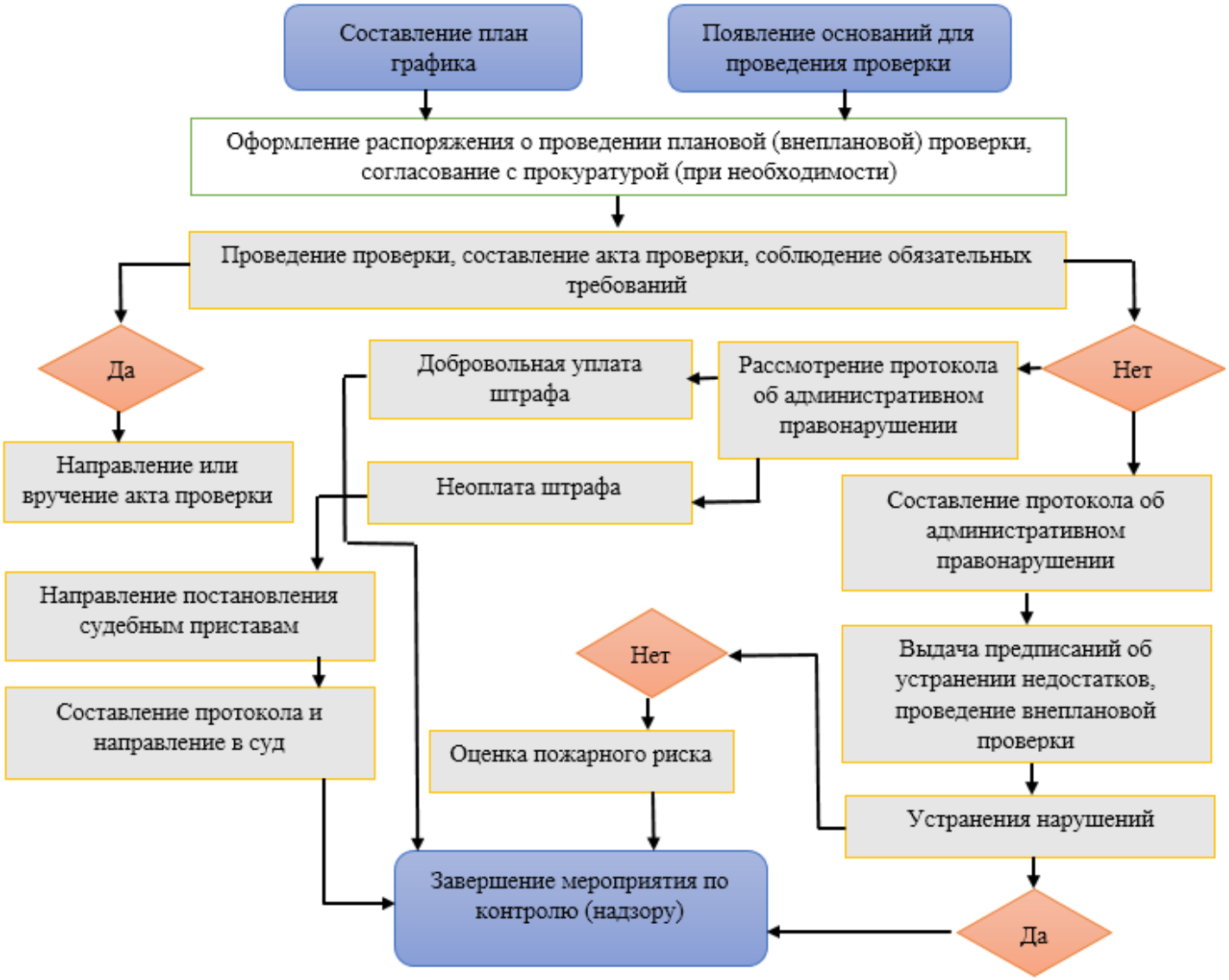

Рисунок 2 - Порядок проведения государственной типовой проверки инспектором отдела надзорной деятельности

Оценка пожарного риска включает в себя пожарно-техническое обследование объекта, расчет риска и составление соответствующего положительного заключения. В случае получения отрицательного результата разрабатывается комплекс дополнительных компенсирующих противопожарных мероприятий, уменьшающих значение пожарного риска до нормативных требований.

Проведение пожарного аудита (проверки соответствия объекта защиты путем независимой оценки пожарного риска) особенно актуально для крупных, многофункциональных, опасных и уникальных объектов. Аудит позволяет четко определить тот перечень требований пожарной безопасности и конкретные факторы риска, которые необходимо учесть при проектировании, строительстве и эксплуатации объекта.

Это в свою очередь, позволяет достичь значительной экономии средств, затрачиваемых на обеспечение безопасности людей и имущества от пожаров, несмотря на затраты, связанные с проведением самого аудита. Причем оптимизация расходов на мероприятия по обеспечению требуемого уровня пожарной безопасности на объектах бывает необходима.

1.4. Модели пожарного риска

На современном этапе развития человечества, определение экономически эффективных противопожарных мероприятий невозможно без прогнозирования динамики опасных факторов пожара [27], поэтому прогноз необходим:

- при определении мероприятий по обеспечению безопасной эвакуации людей при пожаре;
- при разработке и модернизации систем автоматической пожарной сигнализации и систем пожаротушения;
- при подготовке оперативных планов и карточек пожаротушения;
- при расчете фактических пределов огнестойкости и др.

Все представленные методы прогнозирования опасных факторов пожара [27] основываются на математическом моделировании, т.е. на моделировании пожаров различных помещений, которые описывают в общем виде изменения параметров

состояния среды в помещении за определенный промежуток времени, строительных конструкций и технологического оборудования.

Математические модели пожара основываются на основных законах физики: первый закон термодинамики, закон сохранения массы и импульса. Полученные уравнения показывают взаимосвязь процессов, присущих пожару, таких как тепловыделение и дымовыделения, изменение свойств газовой среды, распространение токсичных газов, газообмен, теплообмен и другие [27, 28].

Различают следующие методы прогнозирования опасных факторов пожара в зависимости от вида математической модели пожара:

- интегральная модель;
- зонная модель;
- полевая (дифференциальная).

1.4.1. Полевые (дифференциальные) математические модели пожара в помещении

Основным достоинством полевых моделей является то, что искомыми параметрами являются поля температур, скоростей, давлений, концентраций компонентов газовой среды и частиц дыма по всему объему помещения. На рисунке 3 представлена структура полевой модели пожара [27].

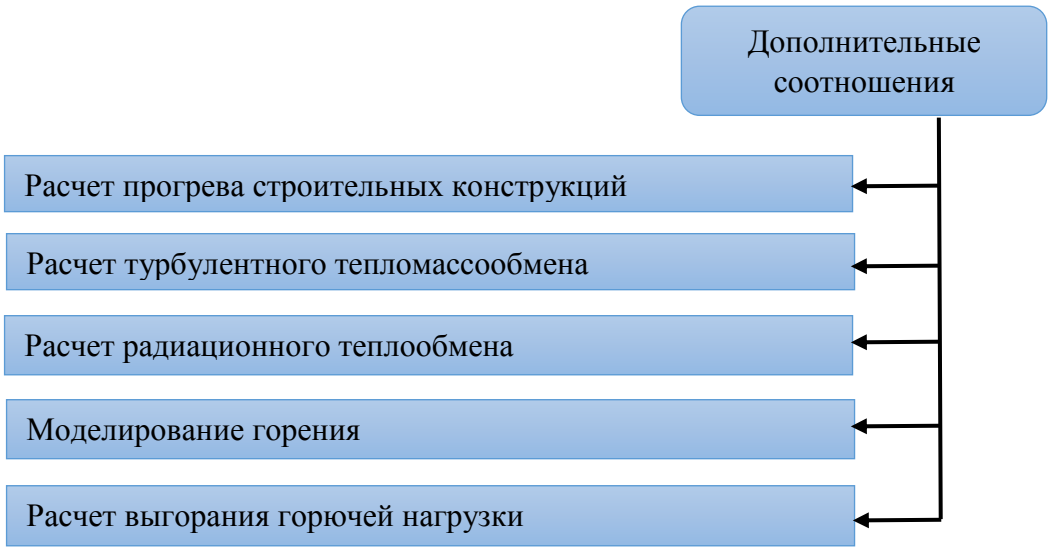

Рисунок 3 - Структура полевой модели пожара

Основная область применения полевого метода заключается:

1) для различных зданий, сооружений, помещений у которых имеется сложная планировка и помещений с многочисленным числом внутренних преград;
2) для сооружений, где величина одного из геометрических размеров меньше (больше) других (например тоннели, стоянки автомобилей большой площади и др.)
3) другие помещения, когда применение данной модели пожара вызывает сомнение.

Полевые модели наиболее сложны в математическом описании, так как они состоят из системы трех или двумерных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных. Система уравнений, показывающих изменение газовой среды в любой точке объема помещения за определенный отрезок времени очень громоздка. Поэтому для решения данной проблемы применяются сверхмощные компьютерные машины [27, 28].

1.4.2. Интегральная математическая модель

Одна из распространенных моделей пожара является интегральная математическая, которая описывает пожар в самом общем виде [27].

В интегральных методах расчета находятся среднеобъемные величины температуры, плотности, массовых концентраций кислорода, токсичных продуктов горения, огнетушащего вещества и оптической концентрации и дыма, а также средние температуры ограждающих конструкций и усредненные характеристики тепломассообмена.

Основным преимуществом является быстрота и низкотрудоемкий инженерный расчет динамики опасных факторов пожара.

Основными недостатками являются:

1) область корректного применения интегральной модели (по объемам и геометрии помещений, расположению горючего материала и т.д.) является нерешенной проблемой;
2) необходимость использования дополнительной экспериментальной информации или моделей более высокого уровня (зонных и полевых) для

получения распределения параметров тепломассообмена по объему помещения;

3) величины ОФП на уровне рабочей зоны не зависят от вида, свойства, места расположения горючего материала и геометрии помещения [27, 28].

Уравнения пожара дают общее представление об изменении среднеобъемных параметров состояния газовой среды в течение промежутка времени, которые являются обычными дифференциальными уравнениями, вытекающие из уравнений математики и физики, а также из основных законов природы. Детальный вывод уравнений представлен в [27, 28].

1.4.3. Зонная математическая модель

Для исследования динамики опасных факторов пожара именно на начальной стадии преимущественно используются математические модели. Сущностью данной модели заключается в том, что она позволяет рассчитать параметры состояния газовой среды в объеме помещения, условно разделив его на ряд характерных зон, когда на начальной стадии пожара газовая среда неоднородна [27].

Так как границы рассматриваемых зон остаются неизменными, а их число может быть очень большим, то при помощи математической модели можно отследить процесс изменения газовой среды в помещении.

Чаще всего в помещении выделяют три характерные зоны:

- конвективную колонку над очагом пожара;
- припотолочный слой нагретого газа;
- воздушная зона с практически неизменными параметрами состояния, равными своим начальным значениям.

Выбор расчетной модели базируется на анализе объемно-планировочных решений объекта и особенностях сценария [27, 28]. В зонных методах расчета определяются среднезонные величины температуры, плотности, массовых концентраций кислорода, токсичных продуктов горения и оптической

концентрации дыма, а также средние температуры ограждающих конструкций и усредненные характеристики теплогазообмена через проемы.

Основными преимуществами зонной математической модели является:

1) быстрый и низкотрудоемкий инженерный расчет динамики опасных факторов пожара;
2) используются закономерности теплового и гидродинамического взаимодействия струйного течения со строительными конструкциями с условным разбиением на характерные области (критическая точка, область ускоренного течения, переходная область и область автомодельного течения).

К основным недостаткам можно отнести следующие моменты:

1) область корректного применения зонной модели является нерешенной проблемой;
2) в случае сложной термогазодинамической картины пожара основные допущения зонной модели не соответствуют реальным условиям.

Основная область применения является следующее:

1) для помещений и систем простой геометрической конфигурации, линейные размеры которых соизмеримы между собой;
2) может использоваться для помещений большого объема, когда размер очага пожара существенно меньше размеров помещения;
3) может применятся для рабочих зон, расположенных на разных уровнях в пределах одного помещения.

1.5. Методы и модели, применяемые в прогнозировании пожароопасных свойств веществ нефтегазовой и других отраслях

1.5.1. Дескрипторный метод

Метод, который основан на построении моделей, отражающих взаимосвязь структуры молекул химических соединений с их свойствами [29]. 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 [30].

Молекулярные дескрипторы играют большую роль в химии, фармацевтических наук, защите окружающей среды, исследования здоровья, поэтому исходя из определения дескрипторов, можно выделить три типа их классификации.

Первый тип классификации представлен в [31], где дескрипторы делятся на чистые, т.е. описывают какой-либо один элемент и на композитные, описывающие два и более элементов. Среди композитных дескрипторов выделяются уникомпозитные и мультикомпозитные.

Второй тип классификации представлен в [32, 33], которая основана на способах оценки дескрипторов – теоретические и экспериментальные.

Третий тип классификации представлен в [34-36] и выделяет такие виды дескрипторов как электронные, стерические и межмолекулярные.

В статье [37] для наглядности представлена своя классификация дескрипторов на рисунке 4.

Дескрипторы элементного уровня показывают информацию об атомах, входящих в молекулу вещества, а иногда в качестве этих дескрипторов берут число атомов [38].

Выделяют топологические дескрипторы, которые рассчитываются на основе описания структурной формулы соединения, при помощи молекулярного графа G, показывающий двумерное отображение молекулы (вершины, ребра) [39].

Дескрипторы электронной группы — это величины, полученные при помощи квантово-химических расчетов. Чаще всего, их еще называют квантово-химические дескрипторы и содержат в себе сведения об: энергии граничных орбиталей, величину заряда атомов и молекул и многое другое [40].

Дескрипторы молекулярной формы указывают на меру сходства (молекулярного подобия) с соединениями из обучающей выборки [41, 42].

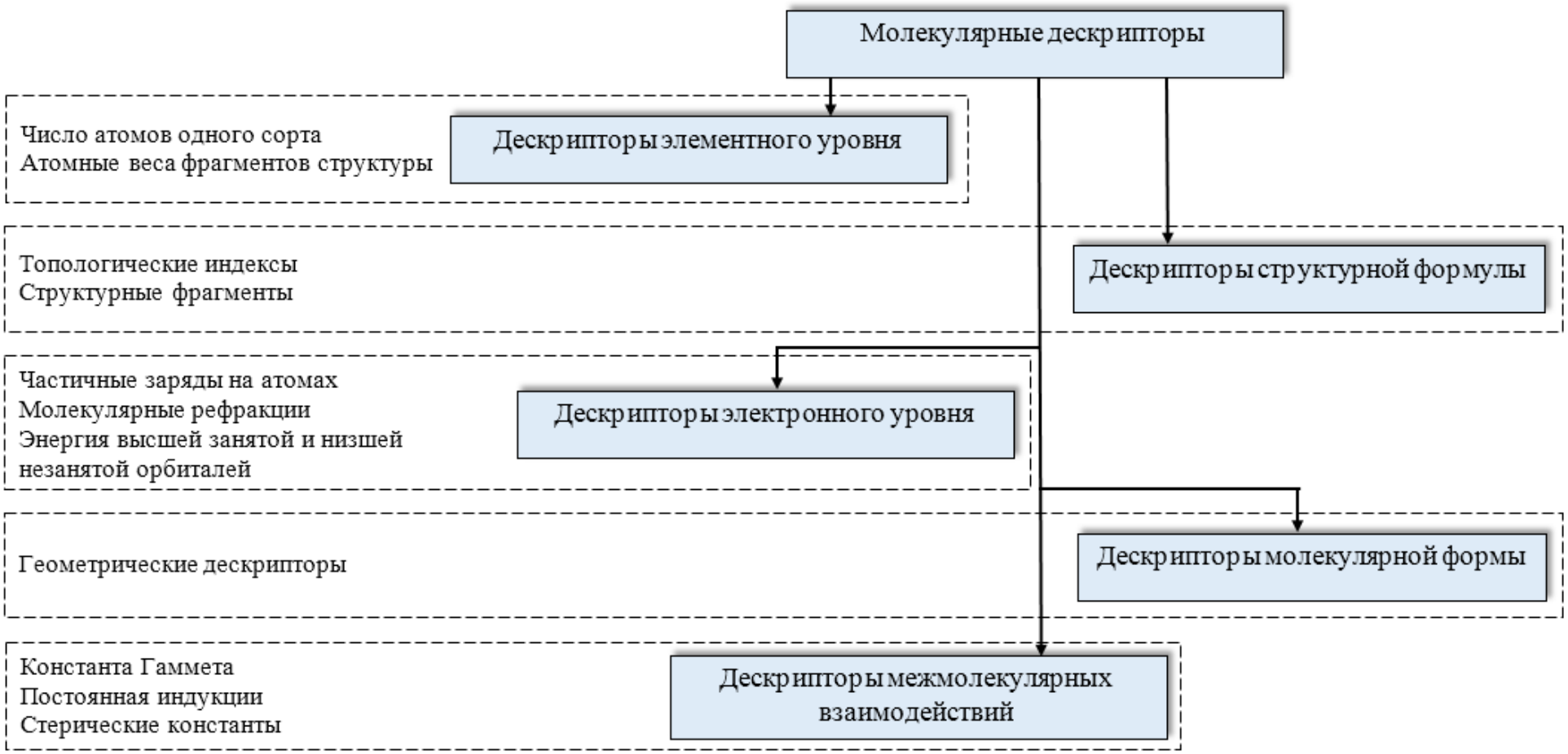

Рисунок 4 – Классификация молекулярных дескрипторов

Дескрипторы межмолекулярных взаимодействий позволяют описать межмолекулярные взаимодействия при установлении взаимосвязей структура – биологическая активность [43, 44].

Дескрипторы структурной формулы являются наиболее распространенным способом описания химического соединения, так как является основой для конструирования многих видов дескрипторов [30] рисунке 5.

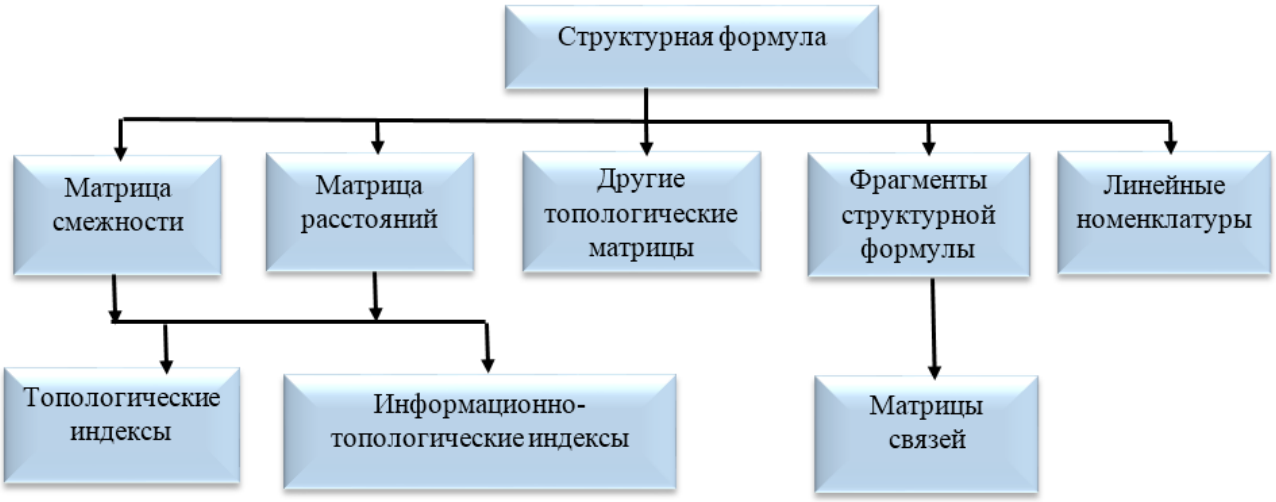

Рисунок 5 - Дескрипторы структурной формулы соединения

Существует множество дескрипторов и углубленное изучение молекулярной структуры вещества заставляет создавать новые модели и новые дескрипторы.

Стоит отметить, что создание новых дескрипторов целесообразно только в некоторых случаях:

- не один из уже существующих не обеспечивает создания устойчивых моделей структура – свойство;

- если новый дескриптор обеспечивает значительное улучшение статистических критериев [32].

Также, новые дескрипторы должны быть доступны для оценки их значений, просты в использовании и т.д. [45].

В некоторых работа [46, 47], проведен сравнительный анализ моделей классификации агонистов и антогонистов среди замещенных фенилэтиламинов на основе ряда топологических и физико-химических дескрипторов с

использованием линейного дискриминантного анализа, дискретно-регрессионной модели [46] и кластер значимого анализа [48].

Самым лучшим результатом из всех представленных работ был получен при использовании дескрипторов водородной связи. Есть примеры и других работ [49-51].

На сегодняшний день дескрипторы молекулярной структуры составляет неотъемлемую часть всех исследований и широко используется при оптимизации характеристик соединений в процессе молекулярного дизайна. Существует много различных примеров успешного использование дескрипторов различного типа, с целью описания разнообразных свойств и видов веществ [52-55].

Несмотря на это, полученные модели должны отвечать законам природы, быть простыми, иметь ясный смысл и многое другое.

В настоящее время существует множество компьютерных программ в области химии и молекулярного дизайна, которые можно использовать для расчета дескрипторов. Ниже представлены самые распространенные.

MOLSURF – генератор химических дескрипторов для QSAR [55].

Данная программа позволяет описывать молекулы химическими терминами – водородные связи, нуклеофилы, электрофилы, основания, кислоты, гидрофобность и т.д. Кроме того, продукты основывается на корреляциях рассчитываемых значений дескрипторов с экспериментальными данными и отдает предпочтение дескрипторам заместителям, поскольку они более точно отражают изменение свойств при модификации структуры, что дает возможность более точно рассчитать их значения.

CoMFA – программа позволяющая проводить расчеты энергии стерических и электростатических взаимодействий и используются соответствующие дескрипторы для установления взаимосвязи структура – свойство [56].

Изначально, программа рассчитывала энергии стерических и электростатических взаимодействий между рассматриваемыми соединениями и пробными атомами, размещаемых в различных узлах.

В течении последних десяти лет программа совершенствовалась, о чем посвящены ряд статей [56, 57] и теперь продукт использовался для изучения многих типов биологической активности различных соединений.

Не смотря на положительные стороны, CoMFA имела некоторые недостатки. Прежде всего необходимо отметить, что она до последнего времени не могла рассчитывать энергию водородных связей, которая играет значительную роль во многих биологических процесса.

Похожие алгоритмы работы программы CoMFA имеет программа GRID [58], где также применяются различные виды атомов и их комбинации с целью определения взаимодействия с макромолекулами. Однако, GRID учитывает наряду со стерическими и электростатическими воздействиями еще и водородные связи.

а) Топологические и квантово-химические индексы в прогнозировании свойств веществ

В то время, как взрывопожароопасные материалы используются в обрабатывающих промышленностях, также должно использоваться и соответствующее взрывозащищенное электрооборудование, чтобы уменьшить вероятность возникновения пожара или взрыва. Температура самовоспламенения вещества или материала является основной характеристикой при определении технических характеристик этого оборудования [59].

Поэтому на основании обработки 820 органических соединений было выведено уравнение (10), которое позволяет рассчитать температуру самовоспламенения вещества:

$$T_{свс} = 495,39 + 57,79MS + 194,80ARR - 388,70RBF + 49,06(C^{*}040) \quad (10)$$

где MS – молекулярный дескриптор, рассматривающий электротопологическое состояние молекулы горючего вещества;

ARR – показатель ароматических связей к общему количеству не водородных связей;

RBF – количество связей, обладающих функцией вращения, деленное на количество связей в молекуле;

C*040 – количество последующих фрагментов, C(=X)–X, R–C≡X, X=C=X (X = O N, S, P, Se, галоген).

б) Прогнозирование свойств веществ на основе структуры углеродной цепи

Проведение анализа зависимостей температур вспышки, воспламенения, самовоспламенения, температурных и концентрационных пределов от длины углеводородной цепи позволяет определить линейные и степенные показатели пожарной опасности, которые зависят от длины углеводородной цепи [60].

Совместное использование формул и правила «углеродной цепи» дает возможность спрогнозировать основные показатели пожарной опасности вещества.

Метод углеродной цепи (МУЦ) является синтез-методикой, созданной на основе дескрипторного и сравнительного подходов прогнозирования показателей пожарной опасности. Из сравнительного метода прогнозирования МУЦ заимствовал подход сравнения пожароопасных свойств в гомологическом ряду. Отличие в данном случае заключается в том, что сравнение производится не между родственными классами органических соединений, а только в пределах одного гомологического ряда. При этом свойства в одном классе соединений в пределах 2-3 ближайших гомологов нормального строения изменяются по линейному закону.

1.5.2. Физико-химические и пожароопасные параметры, используемые в прогнозировании свойств веществ

Рассматривая данный способ прогнозирования, видно, что для оценки пожарной опасности всех видов горючих газов и их смесей предлагается использовать новый индекс [61]. Данный коэффициент показывает общее понимание пожарной опасности сгорания исходя из группы горючести и пределов теплоты сгорания ($H_{сг}$, Мдж/моль) для индивидуального вещества (известных и неизвестных) и тем самым позволяет спрогнозировать некоторые параметры пожароопасных свойств веществ [62, 63]. Например, в случае с верхним концентрационным пределом ($C_В$) имеется следующая связь [64]:

$$C_B = 6{,}30H_{сг} + 0{,}567(H_{сг})^2 + 23{,}5 \ (H_{сг} \text{ в МДж/моль}) \quad (11)$$

$$C_B = 13514(H_{сг})^{-0{,}81} + 6{,}71 \ (H_{сг} \text{ в кДж/моль}) \quad (12)$$

Наряду с выше сказанным, для прогнозирования температуры вспышки – одной из наиболее широко используемых физических свойств для оценки опасной воспламеняемости горючих жидкостей используется эмпирический способ, включающий нормальную температуру точки кипения и число атомов углерода в чистых соединениях [61].

Поэтому формула (13) для нахождения температуры вспышки ($T_{всп}$) показана как один из вариантов усовершенствованного уравнения Ormandy-Craven [62].

$$T_{всп} = -18,44 + 0,8493T_{кип} - 3,723N_C \quad (13)$$

где $T_{всп}$, $T_{кип}$ – температуры вспышки и кипения, К;

N_C – число атомов углерода в молекуле горючего вещества.

Еще не менее важным свойством, которым не стоит пренебрегать является температура самовоспламенения ($T_{свс}$). В работе [63] в качестве исследуемых горючих смесей использовали аммиак (NH_3), метан (CH_4) и водород (H_2), входящих в группу карбамидов. Эксперименты проводились в закрытом сферическом сосуде объемом до 8 дм^3, после чего определили зависимость давления (Р) от температуры, а также концентрацию. Полученные значения сравнивали с расчетным методом, описанным формулами (14) и (15), разработанными Н.Н. Семеновым и показанных в работах [63, 64]

$$\ln\left(\frac{P}{T_{свс}}\right) = A\frac{1}{T_{свс}} + B \quad (14)$$

$$\ln\left(\frac{P}{T_{свс}}\right) = A\frac{1}{T_{свс}} + B' + \ln\left(\frac{1}{d}\right) \quad (15)$$

где A, B, B’ – константы соответствующего соединения; d – диаметр взрывной камеры, м.

1.5.3. Индикаторные переменные в прогнозировании свойств веществ

Одним из авторитетных изданий в области химии является справочник Perry «Инженер химик», который охватывает все аспекты химического машиностроения, от основ до сведений о компьютерных приложениях и управления.

В справочнике, для определения нижнего ($C_н$) (верхнего ($C_в$)) концентрационного предела воспламенения, а также температуры самовоспламенения, предлагается метод Pintar [65].

$$C_H = \frac{100}{\sum n_i x_i} \tag{16}$$

$$C_B = \frac{100}{\sum n_i y_i} \tag{17}$$

$$T_{свс} = \sum n_i z_i \tag{18}$$

где n_i – количество i групп (фрагментов);

x_i, y_i, z_i – структурные дескрипторы i группы (фрагмента) для расчета КПВ и $T_{свс}$.

В руководстве по расчету основных показателей пожароопасности вещества представлен широкий спектр сложных формул, позволяющих рассчитывать температуру самовоспламенения ($t_{свс}$) газов и паров различных органических соединений через возможную среднюю длину молекулы($l_{ср}$) [66].

$$t_{свс} = 300 + 116\sqrt{5 - l_{ср}} \quad \text{при } l_{ср} \le 5 \tag{19}$$

$$t_{свс} = 300 - 38\sqrt{5 - l_{ср}} \quad \text{при } l_{ср} > 5 \tag{20}$$

Для расчета температуры самовоспламенения фосфорорганических соединений возможно использование формул (19) и (20), используя лишь другие индикаторные переменные (116 меняем на 127 и 38 на 44). Погрешность расчета не превысит нескольких процентов [67].

Наряду с этим, температура самовоспламенения различных органических классов соединений может рассчитываться, используя одно из предложенных уравнений [66, 68]:

Спирты (погрешность расчета составляет 28 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,6796 \cdot t_{св}^{(алк)*} + 121,2 \quad (21)$$

Для соединений с группами H_2 (погрешность составляет 19,8 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,4722 \cdot t_{св}^{(алк)*} + 170,4 \quad (22)$$

Для ароматических соединений (погрешность составляет 15 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,6412 \cdot t_{св}^{(алк)} + 252,9 \quad (23)$$

Для формиатов (погрешность составляет 19,2 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,7719 \cdot t_{св}^{(алк)} + 81,5 \quad (24)$$

Для ацетатов (погрешность составляет 15 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,7909 \cdot t_{св}^{(алк)} + 52,0 \quad (25)$$

Для пропионатов (погрешность составляет 10 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,7158 \cdot t_{св}^{(алк)} + 91,3 \quad (26)$$

Для кислот (погрешность составляет 17 ^{0}C):

$$t_{св} = 0,7556 \cdot t_{св}^{(алк)} + 86,0 \quad (27)$$

$t_{св}^{(алк)}$ - значение температуры самовоспламенения алкана, для соответствующего соединения.

Авторами работы [69] были проанализированы степень изменения некоторых пожароопасных предельных парафинов нормального строения в их гомологическом ряду, выявили линейную зависимость и вывели формулы (28) и (29), которые описывают эту зависимость. На их базе возможно определение температуры вспышки для алканов, исходя из числа атомов углерода [69]

$$\ln(t_{свс}) = 199,15189 + 510,33872\left(e^{-N_C/3,1845309}\right) \quad (28)$$

$$t_{всп} = 215,13166\left(N_C\right)^{0,32862864} \quad (29)$$

В работах G.W. Jones [70] и P. Lloyd [71] используются количественные расчеты, позволяющие определить возможность распространения пламени в различное время на примере двигателя внутреннего сгорания. Полученный метод описывается уравнениями (30) и (31).

$$C_H = 0,55C_{стх} \quad (30)$$

$$C_B = 4{,}8(C_{стх})^{0,5} \quad (31)$$

Данный метод позволяет рассмотреть эффект опережения зажигания в двигателе, а также рассчитать верхний концентрационный предел воспламенения [72, 73].

Еще одним перспективным методом, позволяющим предсказывать пожароопасные свойства веществ, является метод на основе закона мощности с участием 21 аддативной массы, связанные с не водородными атомами и кольцевыми структурами и называется Artificial Neural Network. На основе предложенного способа, были рассчитаны температуры вспышки 287 простых органических соединений, где средняя абсолютная погрешность составила 8,6 К [74].

Этот метод описывается уравнением (32):

$$f = \sum_i n_i f_i = \sum_i n_i f_i^{1/\alpha} \quad (32)$$

где n_i – количество i фрагментов;

f_i, t_i – структурные дескрипторы;

α – параметр, учитывающий класс органических соединений.

Примечательно то, что данный метод считается достаточно простым в использовании, поскольку содержит малое количество параметров, участвующих в расчете, кроме того данный метод показывает влияние отдельных функциональных групп на возможность возгорания.

Структурный метод групповых вкладов представлен для прогнозирования характеристики воспламеняемости чистых углеводородных жидкостей, который имеет название Structural Group Contribution [75]. Данный метод использовался для исследования структурных групп, имеющих большое значение. Как и предыдущие способы прогнозирования, данный метод описывается уравнением (33) и позволяет прогнозировать концентрационные пределы воспламенения, температуру вспышки и самовоспламенения.

$$X = 84{,}65 + 64{,}18\sum_{i=1} \Phi_i - 5{,}6345\left(\sum_{i=1} \Phi_i\right)^2 + 0{,}360\left(\sum_{i=1} \Phi_i\right)^3 - 0{,}0101\left(\sum_{i=1} \Phi_i\right)^4 \quad (33)$$

Стоит отметить, что средний процент ошибок составляет в промежутке от 0,4% до 5%.

где X – НКПВ, ВКПВ, температуры вспышки и самовоспламенения;

$Ф_i$ – структурный молекулярный дескриптор n фрагмента.

Для определения температуры самовоспламенения ($Т_{свс}$) различных органических соединений, предлагается использовать структурные групповые вклады. Данный подход описан формулой (34):

$$T_{свс} = 750,3065\sum_i \nu_i f_i - 8,644\times10^{-4}\times\left(\sum_i \nu_i f_i\right)^2 - 4,5604\times10^{-6}\times\left(\sum_i \nu_i f_i\right)^3 \quad (34)$$

где ν_i – число i групп;

f_i – структурный дескриптор.

Эта модель прогнозирования была основана на знании о 400 соединений и дальнейшей способностью к обучению. На примере 83 соединений, была показана работоспособность метода. Абсолютная погрешность не превысила 70 К, что является хорошим показателем, а средний процент ошибки 11% [76].

В настоящее время появилась большая потребность в новых антибактериальных препаратах с новым механизмом воздействия на бактерии. Стоит отметить, что новые препараты обладают новыми физико-химическими свойствами и пожароопасными параметрами. Поэтому в 1991 году японский ученый T. Suzuki вывел уравнение (35):

$$t_{всп} = 25,57\times\chi_1 + \sum n_i G_i - 86 \quad (35)$$

При помощи этого уравнения появилась возможность предсказывать возможную температуру вспышки органического соединения, основываясь на двух показателях. Этими показателями являются индекс первого порядка связей и индекс полярных характеристик функциональной группы [77].

Все чаще при прогнозировании пожароопасных свойств веществ, в частности температуры вспышки (FP) используются структурные методы, которые содержат в себе данные об чистых углеводородных жидкостях. Все проводимые работы описываются уравнением (36) [78]:

$$T_{всп} = 367,069 + 6,300SCBO - 397,659VEp2 + 1,616(C*002) \quad (36)$$

где FP – $T_{всп}$, К;

SCBO – структурный дескриптор, характеризующий степень ненасыщенности молекулы горючего вещества;

VEp2 – индекс Eigen, определяющий структуру и размеры молекулы горючего вещества;

C*002 – количество метиленовых групп в молекуле.

Из-за большого числа всевозможных горючих углеводородов, сведения о которых отсутствует в справочной и другой нормативной литературе, иранскими исследователями было предложено уравнение (37), которое позволяет с удовлетворительной точностью рассчитать температуру самовоспламенения веществ [79]:

$$T_{свс} = 647 + 33,33N_C - 20,79N_H + 58,20F_{SH} + 81,03F_{BH} \quad (37)$$

где N_C, N_H – количество атомов углеводорода в молекуле горючего вещества;

F_{SH}, F_{BH} – молекулярные дескрипторы.

Полученные данные имеют большое значение при разработке комплекса мероприятий при транспортировки горючих веществ.

Еще одним интересным методом расчета нижнего и верхнего концентрационных пределов воспламенения является метод, основанный на F-фактор (F). Под этим фактором понимается определенное количество расчетных операций, проводимых над органическими соединениями. В конечном итоге получается уравнение (38), в котором показатель F определяется как отношение верхнего концентрационного предела воспламенения к нижнему и имеет вид [80-82]:

$$F = 1 - \left(\frac{C_H}{C_B} \right)^{0,5} \quad (38)$$

В результате расчетов были получены три группы соединений. Которые отличаются друг от друга по тем или иным признакам. Стоит отметить, что процент погрешности составляет от 4 -13%.

1.5.4. Прогнозирование свойств веществ с использованием моделей мембранных систем

Сущность метода прогнозирования основана на использовании модели искусственных биомембран и проницаемости лекарственных веществ. В качестве модели биосистемы предложены фосфолипидные моно- и бислои, везикулы и медьсодержащие полиамидокислоты (Cu-ПАК).

В результате корреляции между хорошей проницаемостью и биологической активностью, можно спрогнозировать ряд показателей пожароопасных веществ [83].

1.5.5. Система компьютерного прогнозирования токсичных свойств веществ

Сущность метода основывается на гибридном использовании структурно-числового описания объекта, а также содержательных моделей и моделей процесса. Система позволяет дополнять имеющиеся данные об исследуемом веществе в виде числовых выражений, а затем проводить исследование с целью выявления свойств [84].

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 1

Анализ современных литературных и нормативных документов показал, что обеспечение пожарной безопасности любого объекта заключается в:

- расчете пожарного риска, присущего объекту;
- разработке технологий управления риском;
- разработка компенсирующих мероприятий с целью снижения рисков до допустимых уровней.

Пожарные риски, во-первых, характеризуют возможность реализации пожарной опасности в виде пожара, а во-вторых, содержат оценки его возможных последствий.

Расчет пожарного риска зависит от наличия имеющейся достоверной информации, как об объекте защиты, так и физико-химических свойствах вещества, используемых в помещении. Зачастую, информация о вторых отсутствует, в связи со сложностью проведения экспериментов по прогнозированию пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки.

Поэтому в главе поднималась актуальная задача, связанная с прогнозированием пожаровзрывоопасных свойств продуктов нефтепереработки. Это в первую очередь связано с тем, что при отсутствии знаний о физико-химических свойствах вещества невозможно определить перечень мероприятий, направленных на обеспечение пожарной безопасности нефтегазового сектора.

Для решения поставленной задачи применяются современные методики расчета пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки анализ которых показал их отрицательные стороны, выраженные сложностью вычислительных операций и требующим больших временных затрат на их реализацию.

Рассмотрены основные пожароопасные показатели веществ, а также их роль в обеспечении пожарной безопасности объектов защиты.

ГЛАВА 2. МЕТОДИКА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОЖАРООПАСНЫХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ И ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПОЖАРНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

В качестве альтернативы была предложена методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. Данная методика сочетает в себе два современных направления — это молекулярные дескрипторы структурной формулы вещества, которые полностью описывают свойство изучаемого вещества и искусственные нейронные сети. Вторые позволяют проводить компьютерную обработку вводимых данных и получать искомый показатель пожаровзрывоопасности.

2.1. Предпосылки создания новой методики прогнозирования пожароопасных свойств

Установлено, что современные методики прогнозирования свойств веществ имеют ряд недостатков. Так, все методы прогнозирования пожароопасных показателей сводятся к двум основным подходам. Первый – это расчетный подход, который основывается на применении различных дескрипторов, второй – на сравнительном анализе представителей стандартного и изучаемого рядов.

Таким образом, анализируя выше сказанное, видно, что для получения необходимого пожароопасного показателя необходимо столкнуться с решением сложных аппроксимационных уравнений, что требует больших временных ресурсов. Поэтому в качестве альтернативы расчетным методам определения пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки было решено разработать методику прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Предлагаемая методика обеспечит непрерывность прогнозирования пожароопасных свойств веществ нефтегазовой отрасли в режиме реального времени и без проведения сложных вычислительных операций.

2.2. Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

В качестве системы позволяющей обрабатывать входные данные (молекулярные дескрипторы глава 1 диссертационного исследования) необходимо использовать искусственные нейронные сети (ИНС). Все ИНС различаются алгоритмами функционирования, архитектурой, а также областью их использования.

Для решения задачи по прогнозированию пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки ИНС должна реализовать функциональную зависимость Y=F(X) где X– входной вектор (обучающая выборка, база данных), а Y– выходное значение (показатель вещества). Учитывая тот факт, что имеется обучающая выборка, то для обучения искусственной нейронной сети будем использовать алгоритм обучения с учителем.

В качестве одного из способа обучения выберем алгоритм обратного распространения ошибки, где ошибка распространяется от выходного слоя к входному, т.е. в направлении, противоположном направлению распространения сигнала при адекватном функционировании сети.

В целях уменьшения бесконечного множества решений, получаемых от ИНС ставится задача минимизации целевой функции ошибки искусственной нейронной сети, которая определяется по методу наименьших квадратов:

$$E(\omega) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{p}\left(y_j - d_j\right)^2 \qquad (39)$$

где y_j– реальное значение j-го выхода нейросети;

d_j– целевое (желаемое) значение j-го выхода;

p– число нейронов в выходном слое .

Причем суммирование ведется по всем нейронам выходного слоя и по всем обрабатываемым сетью образам.

Силы связей или веса характеризуют между нейронами искусственной нейронной сети. Процесс обучения начинается с определения весовых коэффициентов случайных значений. Сети показывают различные данные, а веса связи определяются согласно выбранной математической схеме. После проведения процесса обучения искусственная нейронная сеть может распознавать входные данные и информация, получаемая во время обучения, сохраняется в виде весовых коэффициентов.

Обучение искусственной нейронной сети производится методом градиентного спуска, т. е. на каждой итерации изменение веса производится по формуле:

$$W(t+1) = W(t) + E + \frac{de}{dw}, \quad (40)$$

где e- коэффициент обучения,

W(t) – функция состояния

Таким образом, полный алгоритм обучения искусственной нейронной сети можно представить в следующем виде:

1. Необходимо подать вход ИНС один из требуемых образов и определить значения нейронов искусственной нейронной сети.
2. Определить n- слой для выходного слоя искусственной нейронной сети и определить изменение весов выходного слоя.
3. Коррекция веса искусственной нейронной сети
4. Если ошибка существенна, то следует перейти на шаг 1.

Таким образом, алгоритм повторяется. На каждом входе сети постепенно вводятся все обучающие элементы, значения выхода сети сравниваются с целевыми значениями и определяется ошибка.

Значения величин ошибок применяются для корректировки весов, затем все действия опять повторяются. Стоит отметить, что исходная структура сети определяется случайно и процесс обучения останавливается тогда, когда ошибка достигла установленных значений пользователем или не уменьшается вовсе.

При построении структуры искусственной нейронной сети для данной задачи, используется сеть прямого распространения.

Основными причинами такого выбора являлись:

- широкий круг многомерных задач;
- универсальность;
- эффективность персептрона с точки зрения вычислительной сложности устройства.

Таким образом, для обработки и прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки необходимо использовать искусственную нейронную сеть, которая состоит из нескольких слоев нейрон, причем каждый нейрон слоя i связан с каждым нейроном слоя i+1 – многослойный персептрон.

Принципиальная архитектура этой нейронной сети может иметь следующий вид:

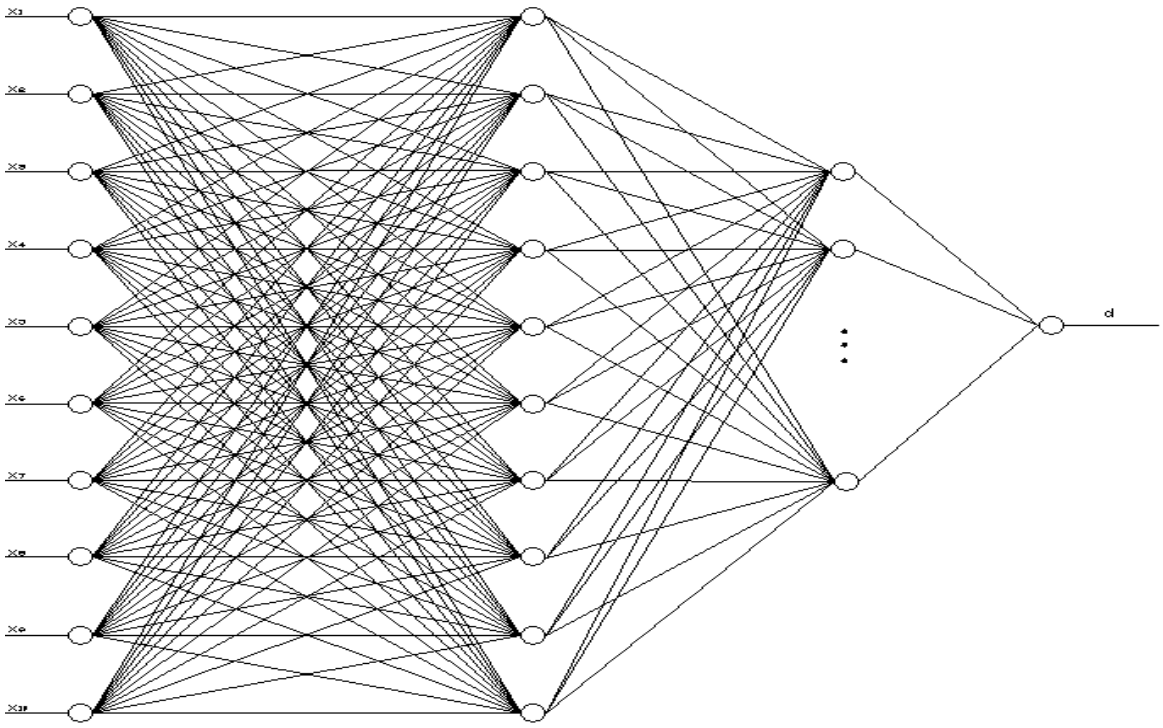

Рисунок 6 – Архитектура искусственной нейронной сети (а) – входной слой; б) – промежуточные (скрытые слои); в) – выходной слой)

Выбор такой структуры обусловлен следующим:

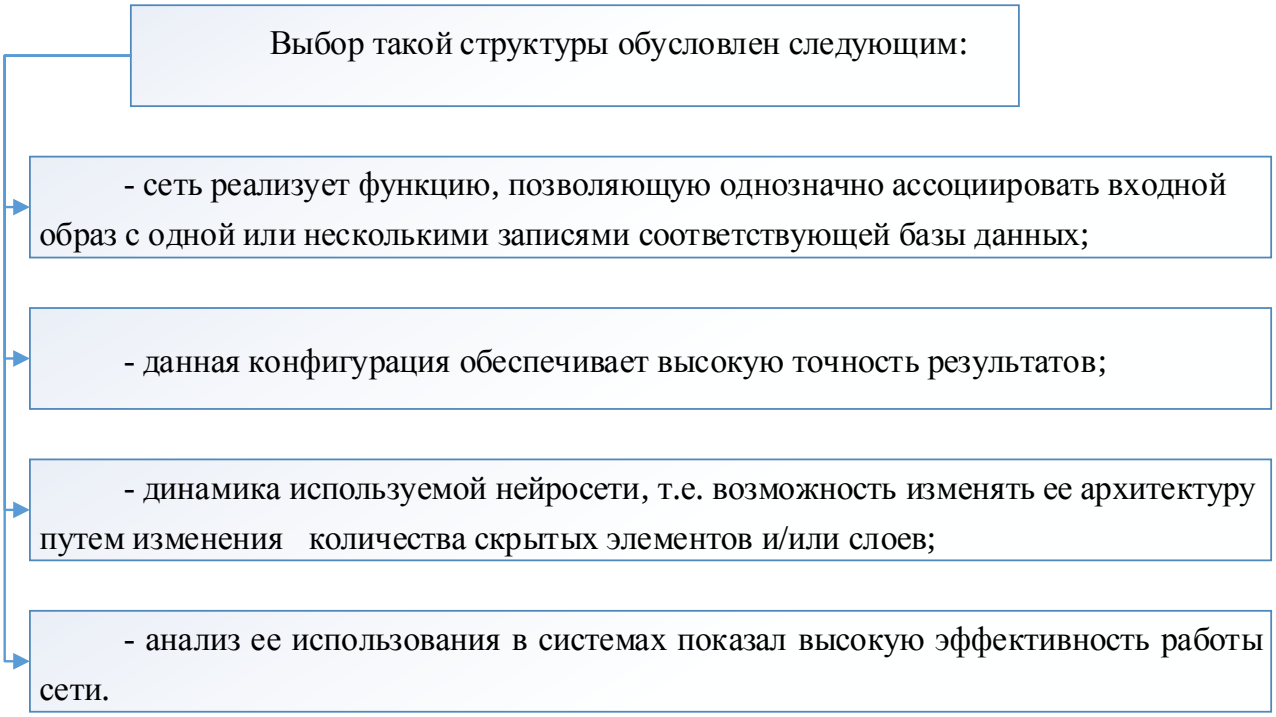

Рисунок 7 – Схема положительных качеств выбранной сети

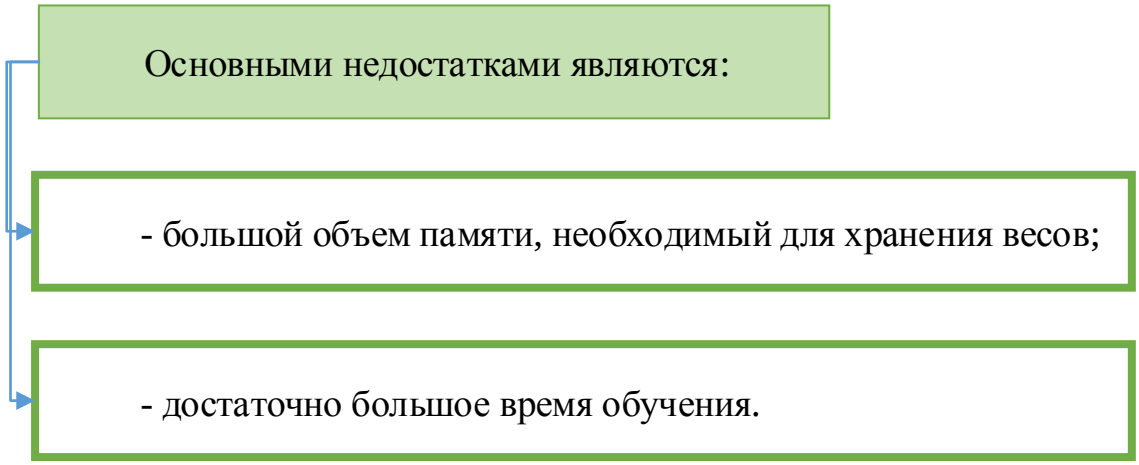

Рисунок 8 – Схема основных недостатков выбранной сети

На основе выше сказанного была разработана методика прогнозирования: «Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей». Схематически методика представлена на рисунке 9 в виде схемы.

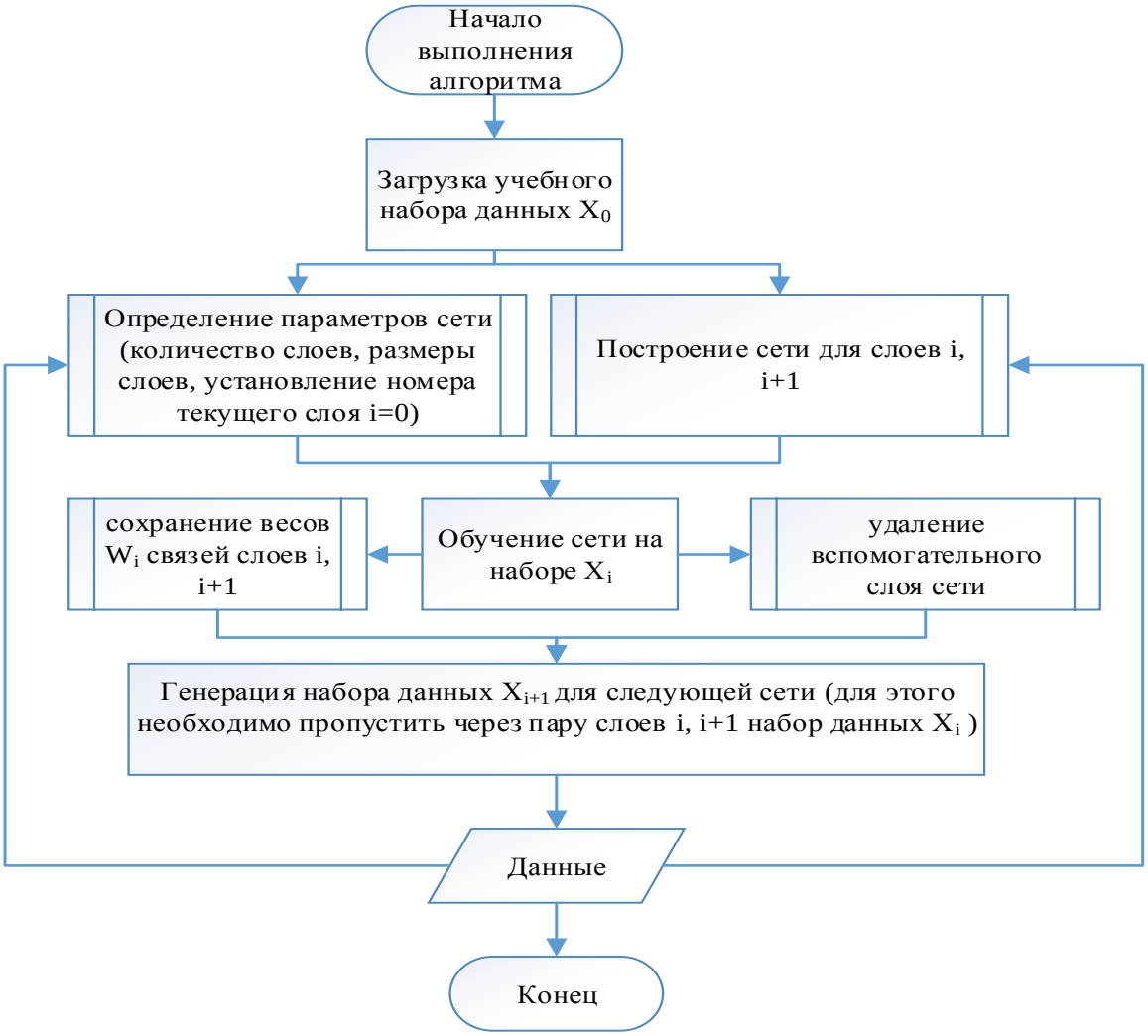

Рисунок 9 – Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки

1. На первоначальном этапе осуществляли загрузку учебного набора данных X_0.

В качестве учебного набора данных выступают представленные на рисунке 9 молекулярные дескрипторы, которые с наибольшей точностью описывают строение молекул, а также разницу в строении между структурными изомерами.

2. Определение параметров сети.

На данном этапе реализации методики определяют количество слоев, размеры слоев, а также устанавливают номера для текущих слоев *i=0*.

3. Построение сети для слоев *i*, *i+1*.

Множество сигналов, поступающих на вход искусственного нейрона одновременно является и выходом нефрона и входным сигналом искусственной нейронной сети. Соответственно, величина входящего сигнала умножается на

поправочный коэффициент, так называемый вес, который аналогичен синаптической силе биологического нейрона. Затем коэффициенты определяют параметр, влияющий на состояние нейрона. Таким образом все полученные произведения суммируются, тем самым определяя уровень активации нейрона s.

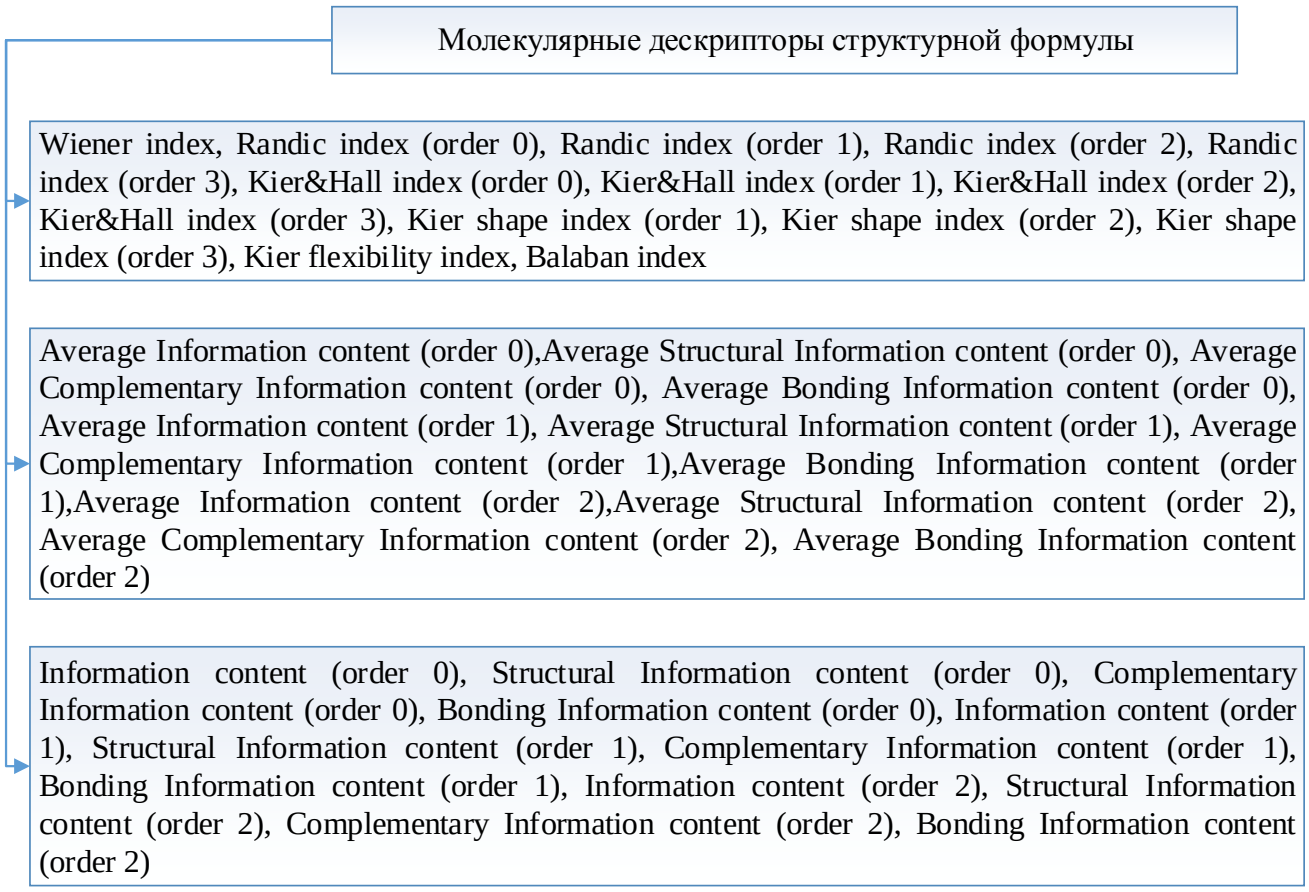

Рисунок 10 – Основные молекулярные дескрипторы

Состояние нейрона определяется по формуле:

$$S=\sum_{i=1}^{n} \varphi_i w_i, \tag{41}$$

где φ_i – *множество сигналов, поступающих на входе,* w_i –*весовые коэффициенты нейрона*

4.Обучение сети на наборе X_i. Обучение искусственной нейронной сети производится методом градиентного спуска, т. е. на каждой итерации изменение веса производится по формуле:

$$W(t+1) = W(t) + E + \frac{de}{dw}, \tag{42}$$

где *e- коэффициент обучения, W(t) – функция состояния*

5. Удаление вспомогательного слоя сети.

6. Сохранение весов W_i связей слоев *i, i+1*.

7. Генерация набора данных X_{i+1} для следующей сети (для этого необходимо пропустить через пару слоев *i, i+1* набор данных X_i).

8. Получение параметра.

2.3. Разработка нейропакета, ориентированного для прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки (КДС 1.0)

На сегодняшний день существует огромное количество компьютерных программ, моделирующих работу искусственной нейронной сети. Нейросимуляторы выпускаются рядом фирм, а также рядовыми исследователями, что в свою очередь позволяют решать ряд практических задач.

Существующие решения можно разделить на три группы, представленные ниже в виде схемы на рисунке 11. К основным недостаткам программ можно отнести тот факт, что компьютерные программы позволяют решать только задачи конкретного класса. Причем способ решения определяет сам разработчик.

Разработки рядовых исследователей, которые можно получить бесплатно, также содержат в себе ряд недостатков: сложный для восприятия и взаимодействия интерфейс, посредственная работа компьютерной программы, не возможность модификации и модернизации используемых алгоритмов, малофункциональность.

Большинство перечисленных на рисунке 11 программ практически не распространяет свое действие на прогнозирование пожароопасных свойств веществ, а это является актуальным вопросом на сегодняшний день. Отсутствие удобного симулятора, обеспечивающего анализ вводимых данных и дальнейшего моделирования искусственных нейронных сетей, является одной из причин разработки компьютерной программы, основывающейся на методологии искусственных нейронных сетей и ориентированной на работу с химической информацией, закодированной в молекулярном дескрипторе.

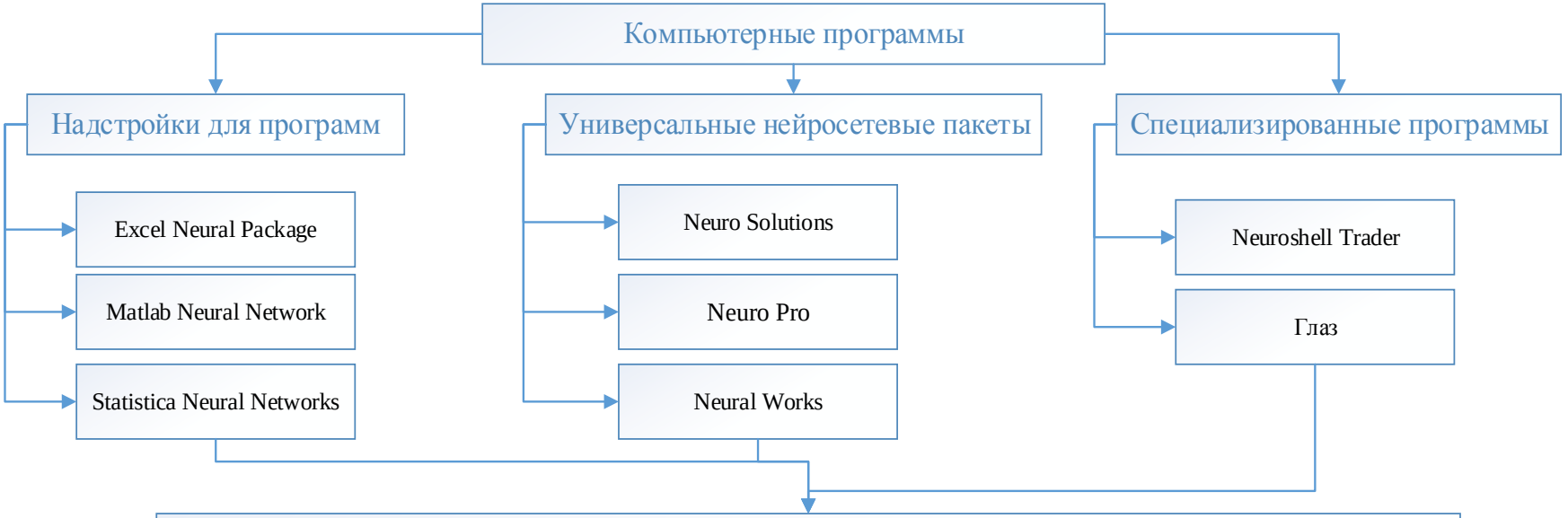

Рисунок 11 – Программы, моделирующие работу искусственной нейронной сети

Авторская компьютерная программа «Нейропакет КДС 1.0» разработано на языке программирования Python 2.7.10 [Anaconda 2.3.0 (64 – bit)] default, May 28.2015 MSC v.1500 64 bit (AMD 64) on win 32 и предназначена для решения задачи связанной с компьютерным прогнозированием пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. В составе общего компьютерного программного обеспечения применяется операционная система Windows 10. Объем авторской программы составляет 10,1 Мб. При разработке и использовании базы данных в виде молекулярных дескрипторов применяется документы формата txt, xlxs. На авторскую компьютерную программу в Федеральном институте промышленной собственности было получено свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2016614070 от 16.04.16г.

Нейропакет КДС 1.0 позволяет [92, 97]:

1) загружать и просматривать базы данных, содержащие структуры химических соединений и их свойства;
2) осуществлять корреляцию вводимых данных;
3) анализировать полученные модели;
4) применять полученные нейросетевые модели для прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, без проведения сложного эксперимента.

Наряду с общепринятыми алгоритмами работы с искусственными нейронными сетями, «Нейропакет КДС 1.0» обладает множеством характерных черт, которые делают эту программу уникальным инструментом для исследования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки. Рассмотрим основные возможности, которые предоставляет программа «Нейропакет КДС 1.0».

Представление химической информации. « Нейропакет КДС 1.0» может работать с базами данных, записанными в самых распространенных форматах, поддерживаемыми основными существующими коммерческими программами. При необходимости произвести конвертацию между необходимыми форматами, «Нейропакет КДС 1.0» обеспечивает интегрированную работу с разработанной

нами программой «Convert 1.0» [98]. Также важно отметить, что «Нейропакет КДС 1.0» позволяет работать и с неполными базами данных. Такие базы очень часто встречаются, т.к. не для всех соединений представлены значения свойств или получены все значения молекулярных дескрипторов.

Обработка данных. В результате корреляции осуществляется статическая взаимосвязь двух и более величин. После изменения значений одной или нескольких из этих величин сопутствуют систематическому изменению значений другой или других величин.

Визуализация полученных данных. При обработке баз данных очень важно знать, какая химическая структура скрывается за каждой записью в базе данных, из-за чего использование для этой цели статистических либо нейросетевых пакетов крайне неэффективным. «Нейропакет КДС 1.0» позволяет абсолютно на всех этапах взаимодействия значений базы данных, а также пользователя и программного обеспечения видеть входные данные, что резко повышает удобство и эффективность работы с программой.

Прогнозирование свойств веществ. Кроме выше перечисленных уникальных свойств, основным ориентиром программы «Нейропакет КДС 1.0» является прогнозирование пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки. Работа программы основана на том, что в ней предусмотрена возможность записи построенной модели в виде файла, содержащий исходные данные. Интерактивный вычислительный клиент представляет собой программу, работающую под управлением операционной системы Windows 10, которая позволяет пользователю в интерактивном режиме загружать файлы, содержащие данные по прогнозу.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 2

Для решения проблемы связанной с прогнозированием пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки было решено разработать методику прогнозирования на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Предлагаемая методика отличается от уже имеющихся тем, что в ее основе лежат сведения о молекулярных дескрипторах, которые представляют собой закодированную информация в виде цифрового выражения о параметрах вещества. Такая база данных обрабатывается при помощи программного продукта, реализующего искусственные нейронные сети.

Также, данная методика, представляет собой способ предотвращения или ограничения образования горючей среды и источников зажигания, что в свою очередь позволит решить главную проблему – обеспечение пожарной безопасности промышленных объектов путем использования веществ и материалов с заранее известными или заданными свойствами, а также позволяет определить перечень мероприятий, необходимый для безопасного использования веществ.

В целях реализации предлагаемой методики была разработана авторская компьютерная программа «Нейропакет КДС 1.0», представлены ее основные характеристики и достоинства.

ГЛАВА 3. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТИ ПРОДУКТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛРЯНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ И ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Прогнозирование пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки осуществляли при помощи методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, о которой рассказывалось в главе 2. Данная методика, позволяет получить физико-химические данные вещества без проведения сложного эксперимента. При помощи разработанного «Нейропакета КДС 1.0», реализующего предложенную методику, были спрогнозированы: низшая теплота сгорания, удельная скорость выгорания, линейная скорость пламени, минимальная энергия зажигания для предельных альдегидов и кетонов, широко используемых в нефтегазовой отрасли. Это дает возможность разрабатывать меры обеспечения пожаровзрывобезопасности для помещений различного функционального назначения, где используются эти продукты.

Кроме того, полученные параметры, расширяют базу данных справочной литературы и могут использоваться при расчете времени эвакуации людей.

3.1. Прогнозирование основных показателей продуктов нефтепереработки, используемых при расчете пожарного риска объектов нефтяного сектора

Методика расчета пожарного риска подразумевает под собой использование физико-химических свойств веществ, которые используются на объекте защиты. В большинстве справочных данных, как и данных типовой горючей нагрузки имеются поверхностные данные о веществе, такие как температура вспышки, температура кипения и т.д., а для некоторых новых синтезированных веществ и вовсе отсутствуют.

Кроме того, прогнозирование необходимых для расчета риска свойств вещества: низшей теплоты сгорания, линейной скорости пламени и других не предоставляется возможности, связанной со сложностью процесса.

Спрогнозируем низшую теплоту сгорания, линейную скорость пламени и удельную скорость выгорания веществ, широко используемых в нефтегазовой отрасли при помощи методики прогнозирования на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей представленную в главе 2 диссертационного исследования. Данная методика использовалась нами в работе и хорошо себя зарекомендовала [91].

Для описания строения молекул исследуемых соединений применяли дескрипторы структурной формулы, рассмотренные в главе 1 настоящего исследования, которые наиболее точно описывают разницу в строении между структурными изомерами.

Указанные молекулярные дескрипторы были выбраны на основе сопоставления закономерности *структура-свойство*. Установлено, что с увеличением длины углеводородного радикала соединения, наблюдается возрастание гравитационных индексов, Wiener index, Randic index.

Далее полученные данные обрабатывали в программе «Нейропакет КДС 1.0», реализующая искусственные нейронные сети [92]. Сравним полученные результаты с данными, представленными в базе данных горючей нагрузки и справочной литературе, (таблица 1 и таблица 2).

Из таблицы 1 видно, что относительная погрешность не превышает 11 %, а также установлено, что теплота сгорания вещества хорошо коррелирует с числом атомов углерода в молекуле и возрастает с увеличением длины углеводородной цепи. Предлагаемая методика прогнозирования также учитывает структуру углеводородного радикала: для разветвленных альдегидов значение теплоты сгорания выше, чем у веществ нормального строения.

Результаты таблицы 2 показали относительную погрешность, не превышающую 10% от значений, представленных в справочной литературе, следовательно, результаты прогнозирования можно считать удовлетворительными.

Таблица 1 - Результаты прогнозирования пожароопасных свойств предельных углеводородов (кетоны)

№ п\п	Наименование вещества	Низшая теплота сгорания, мДж/кг		Удельная скорость выгорания, кг/\м^{2}с		Линейная скорость пламени, м/с	
		справочные данные [87-89]	результаты прогноза	справочные данные [87-89]	результаты прогноза	справочные данные [87-89]	результаты прогноза
1	Ацетон	2,9	3,4	0,044	0,034	790	818
2	Дипропилкетон	3,9	3,5	-	0,045	-	815
3	Бутилметилкетон	3,5	4,8	-	0,042	-	768
4	6 – Ундеканон	6,6	6,9	0,038	0,046	-	827
5	2 – Пентанон	-	5,7	-	0,002	-	400
6	2- Октанон	-	6,9	-	0,037	-	824
7	2,4-Диметил-1,3-пентандион	-	3,7	-	0,046	-	474
8	3-Пентанон	-	3,3	-	0,011	-	402
9	3-Октанон	-	6,9	-	0,002	-	668
10	3-Гексанон	-	4,5	-	0,037	-	827
11	2-Гептанон	-	6,8	-	0,011	-	202
12	3-Метил-2-бутанон	-	3,4	-	0,002	-	416
13	2-Додеканон	-	6,9	-	0,046	-	830
14	2,6-Диметилпентанон	-	6,9	-	0,046	-	827
15	3- Нонанон	-	6,9	-	0,003	-	827

Таблица 2 - Результаты прогнозирования пожароопасных свойств предельных углеводородов (альдегиды)

№ п\п	Наименование вещества	Теплота сгорания, мДж/кг		Удельная скорость выгорания, кг/м^{2}с		Линейная скорость пламени, м/с	
		справочные данные [87-89]	результаты прогноза	справочные данные [87-89]	результаты прогноза	справочные данные [87-89]	результаты прогноза
1	2-Метилпропаналь	-	373,8	-	0,045	-	378
2	2-Метилнонаналь	-	189,6	-	0,018	-	350
3	3-Метилнонаналь	-	258,3	-	0,038	-	459
4	Пропаналь	181,6	206,3	-	0,060	-	369
5	Октаналь	479,3	375,8	-	0,045	-	457
6	Додеканаль	722,6	689,5	-	0,056	-	209
7	Гексаналь	356,3	349,4	-	0,002	-	233
8	Деканаль	602,5	589,7	-	0,470	-	286
9	Пентаналь	336,8	300,7	0,06	0,046	-	378
10	Бутаналь	233,6	240,8	-	0,039	-	445
11	2-Этилбутаналь	-	256,3	-	0,020	-	584
12	Гептаналь	-	348,9	-	0,033	-	335
13	Ундеканаль	696	705,9	-	0,042	403	398
14	2-Метилбутаналь	-	584,1	-	0,070	-	456
15	2,3-Диметилпентаналь	403,5	399,8	-	0,089	-	285

Кроме того, было установлено, что на величину топологического *Wiener index, W* существенно влияют длина молекулы, наличие в ее структуре разветвлений, а также природа заместителей. Аналогичная зависимость установлена и для геометрических индексов G_1, G_2 и площади поверхности молекулы *S*. Wiener index и площадь поверхности молекулы возрастают при увеличении числа атомов углерода в цепи, причем для кетонов разветвленного строения эти дескрипторы имеют более низкие значения по сравнению с нормальными кетонами при одинаковом числе атомов углерода в молекуле. Наибольшую чувствительность к положению карбонильной группы в углеродной цепи проявляют гравитационные индексы.

3.2. Прогнозирование минимальной энергии зажигания кислородсодержащих производных углеводородов

Достойная работоспособность нефтегазовых предприятий основывается на знаниях и успешном выполнении необходимых правил техники безопасности, а также норм пожарной безопасности, с учетом проведения прогнозирования и минимизации рисков различных ситуаций техногенного и природного характера.

С целью предотвращения возникновения аварийных ситуаций, ФЗ-№ 123 «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» предлагает разрабатывать систему предотвращения пожара на территории Российской Федерации [4].

Работа этой системы основывается на исключении условий возникновения пожаров, которые достигаются путем предотвращения появления горючей среды [4].

Согласно ст. 49 ФЗ-№123 «Технического регламента о требованиях пожарной безопасности» одним из способов исключения условий образования горючей среды является безопасное применение горючих веществ и материалов, а также веществ, при взаимодействии которых друг с другом исключит вероятность образования в объеме помещения, здания горючей среды.

Возникает проблема, связанная с определением физико-химических свойств используемых веществ. Ведь экспериментальное определение свойств веществ сопутствует существенным техническим трудностям, экономическим и временным затратам, после чего следует их классификация, которая необходима для установления требований пожарной безопасности, т.е. эффективных мероприятий по предупреждению взрывов и пожаров.

Потребность во внелабораторном оперативном химическом анализе свойств веществ и материалов без проведения сложного эксперимента – велика. Это диктуется потребностью в решении различных задач, выполнение которых иногда невозможно или иногда не имеет смысла в связи с изменениями в пробе в результате транспортировки или предварительной подготовки.

Колоссальное место в развитии нефтегазовой промышленности имеют экспрессные методики анализа, позволяющие прогнозировать пожароопасные свойства веществ и материалов в режиме реального времени без сложных операций пробоотбора и подготовки, а также имеющиеся производственные лаборатории не могут обеспечить непрерывности процесса прогнозирования пожароопасных свойств веществ, обращающихся в нефтегазовом секторе.

В качестве сравнительного анализа, проводили расчет минимальной энергии зажигания согласно [5] и прогнозировали значения при помощи методики, основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей (глава 2 диссертационного исследования).

Используя справочные данные [93-95] для исследуемых веществ, рассчитывали минимальную энергию зажигания паров и газов в воздухе, ξ_{min} (в Мдж)по формуле (43):

$$\xi_{\min} = 0{,}01 \cdot d_{кр}^{2,5} \qquad (43)$$

где $d_{кр}^{2,5}$ – критический гасящий диаметр, мм.

Полученные результаты представлены в таблице 3.

Таблица 3 - Сравнительный анализ предлагаемой методики и расчетной

Расчетные значения минимальной энергии зажигания				
Горючее вещество	Расчетные значения МЭЗ, мДж	Справочные значения МЭЗ, мДж [87-89]	Абсолютная погрешность, мДж	Δ, %
Пропаналь	0,15	0,29	0,14	48,2
Бутаналь	0,21	0,25	0,04	16
2-метилпропаналь	0,26	0,27	0,01	3,7
Пентаналь	0,21	0,22	0,01	4,5
Гексаналь	0,19	0,25	0,06	24
Гептаналь	0,03	0,24	0,21	87,5
Спрогнозированные значения минимальной энергии зажигания				
Горючее вещество	Спрогнозированные значения МЭЗ, мДж	Справочные значения МЭЗ, мДж [87-89]	Абсолютная погрешность, мДж	Δ, %
Пропаналь	0,28	0,29	0,01	3,4
Бутаналь	0,26	0,25	0,01	4
2-Метилпропаналь	0,24	0,27	0,03	11,1
Пентаналь	0,23	0,22	0,01	4,5
Гексаналь	0,25	0,25	0	-
Гептаналь	0,23	0,24	0,01	4,1
Сравнительный анализ				
Горючее вещество	Спрогнозированные значения, мДж	Справочные значения, мДж [87-89]	Расчетные значения, мДж	
Пропаналь	0,28	0,29	0,15	
Бутаналь	0,26	0,25	0,21	
2-Метилпропаналь	0,24	0,27	0,26	
Пентаналь	0,23	0,22	0,21	
Гексаналь	0,25	0,25	0,19	
Гептаналь	0,23	0,24	0,03	
Средняя абсолютная погрешность, мДж	0,01	-	0,07	

Установлено, что увеличение количества атомов углерода в структуре рассматриваемых альдегидов приводит к снижению минимальной энергии зажигания и имеют среднюю абсолютную погрешность 0,07 мДж (Таблица 3).

Наиболее усовершенствованной экспресс-методикой определения физико-химических свойств продуктов нефтепереработки является методика, основанная на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей [96].

При компьютерной обработке каждый из указанных компонентов молекулярной структуры описывали с помощью совокупности дескрипторов (глава 1 диссертационного исследования). Анализ полученных в ходе прогнозирования значений минимальной энергии зажигания при помощи методики, основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, показал, что средняя абсолютная погрешность составляет 0,01 мДж.

Из таблицы 3 видно, что методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей дает лучший результат по сравнению с общепринятой расчетной методикой.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 3

Установили, что разработанная методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетях успешно апробирована на классах кислородсодержащих производных углеводородов и позволила получить показатели веществ, используемых при расчете пожарного риска.

Выявили, что методика прогнозирования на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетях позволяет с удовлетворительной точностью оценить показатели пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки и, в отличие от стандартных расчетных методов, не требует использования других экспериментальных данных (температуры кипения, давления насыщенного пара). Результат спрогнозированных значений предельных кетонов показал относительную погрешность, не превышающую 11 % от значений, представленных в справочной литературе, а результат спрогнозированных значений предельных альдегидов показал относительную погрешность, не превышающую 10 %, а средняя абсолютная погрешность составила 0,01 мДж, что также является хорошим результатом.

Проведен сравнительный анализ предлагаемой методики прогнозирования на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей с методиками ГОСТ 12.1.044 и расчетным способом по формуле. Установлено, что в случае кислородсодержащих производных углеводородов предлагаемая новая методика дает лучшие прогнозы в сравнении с расчетными.

ГЛАВА 4. РАЗРАБОТКА ПРОТИВОПОЖАРНОЙ ЗАЩИТЫ ДЛЯ ОБЪЕКТОВ НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛИ С УЧЕТОМ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДИКИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ И ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

В данной главе поднимался актуальный вопрос разработки системы предотвращения пожаров. Работоспособность такой системы основывается на исключении источника зажигания (ИЗ) или горючей среды (ГС). Для достижения одного из условий, в ФЗ-№123 «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности», предлагаются способы по исключению ИЗ и ГС.

Поэтому в качестве примера, на базе методики прогнозирования пожароопасных свойств веществ, основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей были разработаны новые методики проектирования системы молниезащиты и выбора температурного класса взрывозащищенного электрооборудования, а также усовершенствованы методы расчета времени эвакуации людей из помещений нефтегазового сектора и расчета категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности, предложены оригинальные компьютерные программы.

4.1. Проектировании системы молниезащиты

Воздействия атмосферного электричества способны вызывать пожары, взрывы, механические повреждения зданий и сооружений. Они также приводят к гибели и травмированию людей. Кроме того, возникающие при воздействиях молнии пожары и аварии могут приводить к выбросам опасных продуктов – радиоактивных и ядовитых веществ, бактерий и вирусов.

Первичные воздействия молнии, вызванные прямым ударом, и вторичные ее проявления, индуцированные близкими разрядами или занесенные в здания по металлическим коммуникациям, определяются, свойствами молнии и особенностями здания: наличием взрывоопасных и пожароопасных зон, пожарной опасностью и огнестойкостью строительных конструкций, характеристикой вводимых в здание коммуникаций и их расположение внутри здания, и т.д.

Согласно статистическим данным МЧС России за последние 5 лет от грозовых разрядов возникло 4440 пожаров в зданиях и сооружениях, что составляет чуть меньше 0,5 % от общего количества пожаров. Столь низкая доля пожаров по данной причине вовсе не означает низкую опасность молнии. Скорее это показатель эффективности средств молниезащиты. В то же время ежегодно от проявлений атмосферного электричества возникает от 1100 до 5100 лесных пожаров, охватывающих площадь от 22 до 890 тыс. га, что почти в 3 раза превышает площадь лесных пожаров от антропогенных источников огня.

Мероприятия, направленные на защиту объекта от поражающих факторов молнии или ее последствий, а также от вторичных проявлений, в комплексе представляет собой молниезащиту.

В соответствии с ФЗ- №123 «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» ст.48 в целях обеспечения пожарной безопасности и взрывобезопасности объектов защиты необходимо разрабатывать системы противопожарной защиты. Система противопожарной защиты основывается на исключении условий, способствующих возникновению пожара, а именно исключение появления горючей среды и исключение источников зажигания.

Исключением источников зажигания в соответствии со ст. 50 [4] является устройство молниезащиты зданий, сооружений, строений и оборудования.

В настоящее время, на территории Российской Федерации существует непростая ситуация, связанная с разработкой системы молниезащиты зданий. Это связано в первую очередь с тем, что действуют два нормативных документа, при помощи которых можно спроектировать систему предотвращения пожара, вызванного воздействием атмосферного электричества. Это «Инструкция по устройству молниезащиты зданий и сооружений» РД 34.21.122-87 и «Инструкция по устройству молниезащиты зданий, сооружений и промышленных коммуникаций» СО 153-343.21.122-2003.

Стоит отметить, что второй нормативный документ имеет рекомендательный характер, так как был подписан и утвержден органами исполнительной власти субъекта Российской Федерации. Таким образом все надзорные органы в лице отделов надзорной деятельности, а также проектные организации, при разработке системы предотвращения пожара, вызванного воздействием атмосферного

электричества, должны основываться на комплексе нормативных документов, перечисленных выше. Ниже представлена методика определения системы молниезащиты с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей [93, 94].

Предлагаемая методика определения системы молниезащиты предназначена для применения при проведении пожарно-технической экспертизы систем молниезащиты зданий, сооружений, строений и обеспечивает возможность реализации п.4, ст.50 ФЗ-№123 «Технического регламента о требованиях пожарной безопасности», что позволит исключить источник зажигания в горючей среде, вызванный разрядами атмосферного электричества.

Основные положения данной методики опубликованы в работе [95]. Стоит отметить, что предлагаемая методика определения системы молниезащиты не исключает, а дополняет возможности существующих (базовых) методик, определенные основными руководящими документами (РД 34.21.122-87, СО 153-34.21.122-2003). Применение предлагаемой методики целесообразно в таких случаях, когда возможности существующих методик не обеспечивают получение достоверного результата.

Сценарии реализации предлагаемой методики по определению системы молниезащиты с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей предусматривает выполнение ряда основных этапов (рисунок 12).

Рассмотрим основные этапы предлагаемой методики.

Этап 1. Анализ технической документации на объект защиты. Определение основных параметров.

К выбору системы молниезащиты необходимо подходить ответственно и комплексно, так как эта система обеспечивает сохранность жизни и здоровья людей, находящихся на нефтегазовом объекте защиты, а также технологического имущества.

Рисунок 12 – Методика определения системы молниезащиты

На данном этапе специалистами пожарно-технического профиля должно быть обеспечено выполнение всех общих мероприятий, т.е. необходимо оценить общее состояние объекта и геометрические размеры, его территориальное расположение, соответствующий рельеф местности, возможность расположения

объекта вблизи водоемов, ЛЭП и т.д. Все эти факторы имеют важное значение, так как разряды атмосферного электричества бьют в самую высокую точку здания, водоемы, высокие деревья и др. приняв на себя удар молнии создают экранирующий эффект, в результате чего поражению могут быть подвержены рядом стоящие объекты.

Этап 2. Определение наиболее пожаровзрывоопасного продукта нефтепереработки, используемого на объекте защиты и установление его пожароопасных характеристик.

Знания пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, используемых в помещениях нефтегазовой отрасли, обеспечивает выполнение ряда практических задач – определение необходимого перечня мероприятий, направленных на обсечение пожарной и промышленной безопасности. Важнейшим показателем в частности выбора системы молниезащиты является температура вспышки.

Поэтому на данном этапе необходимо провести анализ существующих справочных и нормативно-правовых документов, на предмет определения пожароопасных характеристик вещества, используемого в нефтегазовых помещениях, в частности температуру вспышки.

Стоит отметить, что ежегодно количество кислородсодержащих производных углеводородов увеличивается на несколько миллионов соединений, а их пожароопасные характеристики изучены частично и лишь для нескольких тысяч соединений, то зачастую обращаясь к справочной и нормативной литературе необходимый пожароопасный показатель не имеется возможности определить. Поэтому для решения задачи принято целесообразным применение методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей о которой рассказывалось в главе 2 диссертационного исследования.

С целью минимизации затрат времени на трудоемкий процесс по расчету и экспериментальному определению температуры вспышки допускается применить на данном этапе решения рассмотренной выше задачи оригинальную компьютерную программу «Нейропакет КДС 1.0», о которой рассказывалось в главе 2 диссертационного исследования.

В качестве исходных данных для работы данной компьютерной программы вводятся молекулярные дескрипторы, представляющие собой исходную базу данных об веществах. Возможности программы позволяют определять различные пожароопасные показатели. В качестве примера спрогнозируем температуру вспышки предельных углеводородов используя предлагаемую методику. Объекты исследования выбраны кетоны, результаты прогнозирования представлены в таблице 4.

Таблица 4 - Результаты прогнозирования температуры вспышки предельных кетонов

Вещество	Температура вспышки, К		Абсолютная погрешность расчетов, К	Класс зоны помещения
	прогнозируемая	справочная [87-89]		
3-Пентанон	286	-		В (0,1,2)*
2,4Диметил-1,3-пентанон	288	298	10	В (0,1,2)*
2-Гексанон	299	298	1	В (0,1,2)*
3-Гексанон	305	-		В (0,1,2)*
4-гептанон	331	322	9	В (0,1,2)*
2-Гептанон	319	-		В (0,1,2)*
3-Октанон	326	-		В (0,1,2)*
2-Октанон	305	333	28	В (0,1,2)*
2,6-Диметил-4-гептанон	335	-		П-1
3-Нонанон	343	-		П-1
2-Деканон	354	-		П-1
4-Деканон	350	344	6	П-1
6-Ундеканон	366	-		П-1
4-Ундеканон	365	361	4	П-1
2-Додеканон	380	-		П-1
Ацетон	-305	-291	4	В (0,1,2)*
Дипропилкетон	318	322	1	В (0,1,2)*
Бутилметилкетон	284	296	4	В (0,1,2)*
Средняя абсолютная погрешность, К			7,5	

Примечание* - взрывоопасный класс зоны, в зависимости от условий

Анализируя полученные значения, было установлено, что средняя абсолютная погрешность не превышает 7,5 К и к тому же, были получены значения для веществ, сведения о которых отсутствуют в справочной и нормативной литературе.

Этап 3. Определение класса зоны, категории и типа молниезащиты

Классификация помещений по взрывоопасным и пожароопасным зонам необходима для установления необходимого оборудования применяемого на объекте защиты. Поэтому на данном этапе по результатам спрогнозированных значений температуры вспышки, представленных в таблице 4 можно определить класс зоны. Полученные результаты классов зон также представлены в таблице 4.

Основываясь на знаниях о классе зоны в соответствии с таблицей 1[93] целесообразно определить тип и категорию молниезащиты.

Этап 4. Расчет основных параметров системы молниезащиты в автоматизированном режиме с использованием авторской компьютерной программы.

В целях экспресс определения основных параметров системы молниезащиты (высота зоны защиты, радиус зоны защиты, количество поражений молнией в год в землю и др.) целесообразно использовать оригинальную компьютерную программу «Молниезащита 1.0», реализующая основные расчетные формулы [93].

На данную компьютерную программу в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (г. Москва) получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015663298 от 15.12.15г. [96]. Предлагаемое специальное программное обеспечение разработано на языке Python 8.0, а в составе общего программного обеспечения персонального компьютера используется операционная система Windows 10.

В качестве исходных данных для работы программы необходимы геометрические размеры защищаемого здания, а также класс зоны, тип и категория молниезащиты определенные на этапе 3.

Этап 5. Определение места установки системы молниезащиты

На данном этапе осуществляется определение места установки системы молниезащиты. Согласно [93], если у вещества, используемого в здании температура вспышки меньше 61^0C, то системы защиты от атмосферного электричества должна устанавливаться непосредственно вблизи объекта защиты, при этом необходимо предусмотреть дополнительный моно фундамент для опор (ы). Если температура вспышки более 61^0C, то установку системы допускается осуществлять на объект защиты, что исключает дополнительных финансовых затрат.

Этап 6. Формирование полученных результатов

Полученные результаты являются результатом реализации методики определения системы молниезащиты с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и позволяют разработать систему предотвращения пожара, вызванного разрядами атмосферного электричества.

Отметим, что предлагаемая методика позволяет проводить экспресс-анализ систем, обеспечивая получение достоверные результаты в ходе надзорных проверок инспекторами отделов пожарного надзора и в целом повышает пожарную безопасность объекта защиты.

4.2. Разработка проблемно-ориентированного программного продукта «Молниезащита 1.0 (MZ)»

Одной из причин появления большого материального ущерба в ряде случаев стоит отметить пожар, который также затрагивает здоровье и жизнь людей. Поэтому обеспечение безопасности граждан и имущества является важнейшей обязанность каждого человека. Достичь высоких показателей в этой области можно путем рационального использования сил и технических средств тушения, а также разработкой комплекса обоснованных мероприятий по пожарной безопасности.

В соответствии с ст.9 ФЗ – № 294 «О защите прав юридических лиц, индивидуальных предпринимателей при осуществлении государственного надзора

и муниципального контроля» в целях профилактики пожаров необходима организация и проведение плановой проверки.

Плановые проверки – это вид контроля, который проводится органами надзора по пожарной безопасности не чаще 1 раза в три года (либо по истечению 3х лет с момента регистрации в налоговом органе), на основании разработанных ими ежегодных планов [25].

Целью плановой проверки является выявление нарушений требований пожарной безопасности при осуществлении деятельности юридическим или физически лицом, а также контроль полученных сведений, содержащихся в уведомлении о начале осуществления деятельности.

При обследовании объекта защиты особое внимание уделяется проверке систем предотвращения пожаров [25]. Согласно ст. 50 ФЗ – №123 «Технического регламента о требованиях пожарной безопасности» к таким системам относиться и устройство молниезащиты зданий, сооружений и оборудования, где оцениваются такие параметры:

- целостность доступных обзору деталей;
- степень их износа;
- защищенность от коррозии видимых элементов токоотводов и молниеприемников;
- сопротивление тока в заземлителях и в отдельно стоящих молниеотводах.

Первым делом проводится визуальный осмотр системы. Он позволяет оценить насколько надежно соединение токоотводом и их крепление к мачте. Определяется механическая прочность отдельных элементов, необходимость их замены или ремонта. Также смотрится, насколько запущена коррозия и в случае необходимости принимаются меры.

После этого проверяют надежность токоведущих элементов, также оценивается общее состояние системы и ее соответствие нынешним положениям и нормам. В случае если за последнее время в нормативы были внесены изменения, то молниезащиту необходимо модернизировать в соответствии с ними.

При помощи специальных приборов измеряются показатели сопротивления и импульсных перенапряжений, значения электромагнитных полей, а также

проверяется наличие специальной документации на грозозащиту. Помимо того, раз в шесть лет на любых объектах вскрываются заземлители, токоотводы, а также места их соединения. Каждый же год инспекция проверяет более 20% от их общего числа. На новые заменяются те элементы, которые были повреждены коррозией более чем на 25%. Все результаты проверки тщательно документируются, составляются акты, которые остаются у заказчика.

Одним из проблемных вопросов, который невозможно решить при помощи вышеизложенного метода остается проверка правильности выбора высоты молниеотвода и обеспечение им необходимого радиуса защиты.

Как уже ранее отмечалось в п.4.1. главы 4, на территории Российской Федерации действуют несколько нормативных документов. И при разработке комплекса мероприятий по защите жизни и здоровья людей от первичных и вторичных проявлений молнии следует использовать комплекс имеющихся документов.

Рассматривая методику расчета высоты молниеотвода и зоны защиты, представленной в РД 34.21.122-87 можно сделать вывод о многообразии различных формул и сопутствующем сложном расчете. Поэтому на сегодня актуальным является вопрос разработки системы молниезащиты, обеспечивающей максимальную защиту объекта и наличие экспресс метода расчета ее параметров.

Первую часть вопроса была решена нами ранее [95], где мы использовали молекулярные дескрипторы [97] и искусственные нейронные сети [98] при выборе системы молниезащиты, который дает возможность без проведения сложного эксперимента рассчитать температуру вспышки предельных кетонов, в том числе тех, для которых отсутствуют литературные данные [87-89] по пожароопасным свойствам.

Полученные закономерности носят общий характер, поэтому они применимы для прогнозирования и других пожароопасных свойств рассмотренных органических соединений. Кроме того, для ряда веществ был определен класс зоны помещения, что способствует оптимизации выбора системы молниезащиты согласно.

Вторую часть проблемы можно решить путем использования оригинальной компьютерной программы «Молниезащита 1.0» [96]. Рассмотрим возможности программного продукта. Интерфейс программы представлен на рисунке 13.

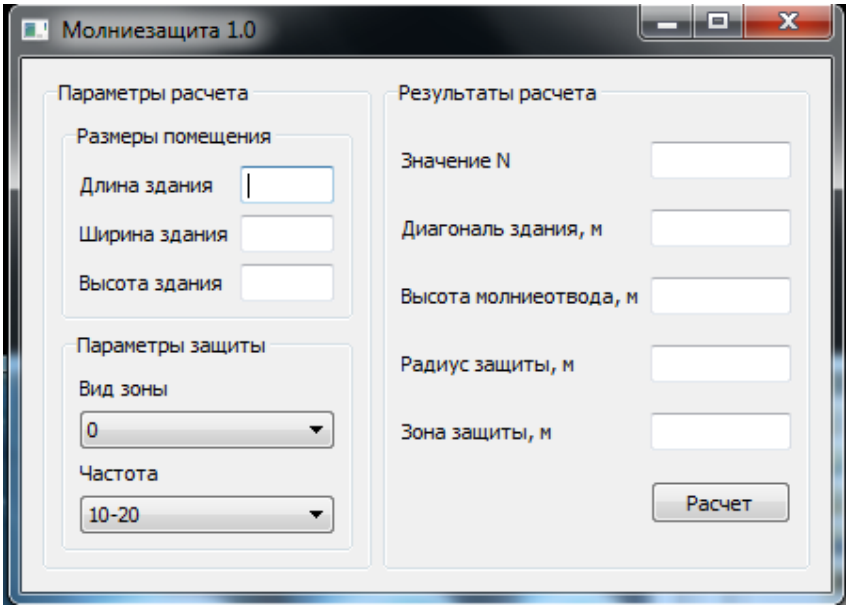

Рисунок 13 - Интерфейс программы «Молниезащита 1.0» (MZ)

В имеющиеся поля подставляем геометрические параметры объекта защиты и среднегодовое число ударов молнии в 1 км^2 земной поверхности в месте расположения здания n. Данный параметр определяется по карте средней за год продолжительности гроз в часах для конкретного региона.

Определив необходимую категорию и тип молниезащиты начинаем подбирать необходимую высоту молниеотвода и высоту над уровнем земли. Подставляя значения параметров. Компьютерная программа автоматически рассчитывает высоту зоны защиты, радиус зоны защиты, радиус зоны защиты на высоте h_x. Полученные результаты сравниваем с параметрами объекта защиты и делаем соответствующий вывод.

Таким образом, использование оригинальной компьютерной программы «Молниезащита 1.0» позволит инспектору отдела надзорной деятельности провести экспресс расчет основных параметров системы молниезащиты, что в комплексе позволит сделать точные выводы о ее работоспособности.

4.3. Определение температурного класса электрооборудования производственного помещения с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

В соответствии с ФЗ-№123 «Техническим регламентом о требованиях пожарной безопасности», на всех объектах защиты должны разрабатываться системы пожарной безопасности. Такая система должна обеспечить создание условий, при которых возникновение или распространение пожара будет не возможным [4].

Работоспособность такой системы базируется на основе исключения условий, способствующих возникновению пожара, а именно исключение источника зажигания и горючей среды [4].

В некоторых статьях нормативного документа (ст. 49,50) [4], имеются способы, позволяющие достичь заданные цели, например, применение специального взрывопожарообезопасного электрооборудования [4]. Все оборудование, которое используется во взрывоопасной зоне должно иметь соответствующий уровень взрывозащиты, вид взрывозащиты, группу электрооборудования, температурный класс и в конечном счете не должно является источником зажигания [4].

К взрывоопасным производствам относятся не только нефтегазодобывающие предприятия, но также объекты химической промышленности, винно-водочные предприятия, целлюлозно-бумажные комбинаты, цементные и железобетонные заводы и т. д., а также стоит отметить, что любое современное предприятие в своей структуре имеет бытовки, склады, в которых могут хранится различные ГСМ.

На начальном этапе выбора взрывозащищенного электрооборудования необходимо провести анализ физико-химических свойств используемых веществ в помещении, здании и уже после этого начинается подбор основных показателей взрывозащищенного электрооборудования и делается вывод о полученной маркировке. Одним из важных компонентов маркировки взрывозащищенного электрооборудования является уровень взрывозащиты, группа электрооборудования и температурный класс. Известно, что и уровень целиком и

полностью зависит от класса взрывоопасной зоны, где обращаются используемые вещества, группа определяется на основе безопасного экспериментального зазора, то температурный класс взрывозащищенного электрооборудования требует особого внимания, так как тут ставка делается на температуру самовоспламенения. В таблице 5 приведены примеры существующих температурных классов.

Таблица 5 - Температурные классы электрооборудования

Знак температурного класса электрооборудования	Максимальная температура, °С	Категория взрывоопасной смеси, для которой электрооборудование является взрывозащищенным	Средняя стоимость электрооборудования, руб.
Т1	450	Т1	1749,50
Т2	300	Т1, Т2	1983,43
Т3	200	Т1 - Т3	2165,80
Т4	135	Т1 - Т4	3286,34
Т5	100	Т1 - Т5	4631,50
Т6	85	Т1 - Т6	7189,50

Для получения информации об температуре самовоспламенения вещества необходимо использовать экспериментальны и расчетные методы [6]. Справочная и нормативная литература не всегда может предоставить необходимую информацию, так как существующие справочные данные, охватывают всего 0,1% от общего числа синтезированных к настоящему времени химических соединений. Поэтому, возникает задача, связанная с экономически обоснованным выбором взрывозащищенного электрооборудования для различных помещений.

Для решения этого вопроса необходимо использовать методику определения температурного класса взрывозащищенного электрооборудования с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

Предлагаемая методика [99] предназначена для проведения пожарно-технической экспертизы специалистами пожарной охраны нефтегазовых объектов и обеспечивает реализацию п.1, ст. 50 ФЗ-№123 «Технического регламента о

требованиях пожарной безопасности». Отметим, что данная методика разработана на основе действующих нормативных документов (Правила устройства электроустановок) и применяется в тех случаях, когда определение температурного класса взрывозащищенного электрооборудования невозможно. Сценарий реализации предлагаемой методики предусматривает выполнение ряда основных этапов (рисунок 14). Рассмотрим основные этапы методики.

Рисунок 14 –Этапы методики определения температурного класса взрывозащищенного электрооборудования

Ниже предлагаемая методика представлена в виде схемы на рисунке 15.

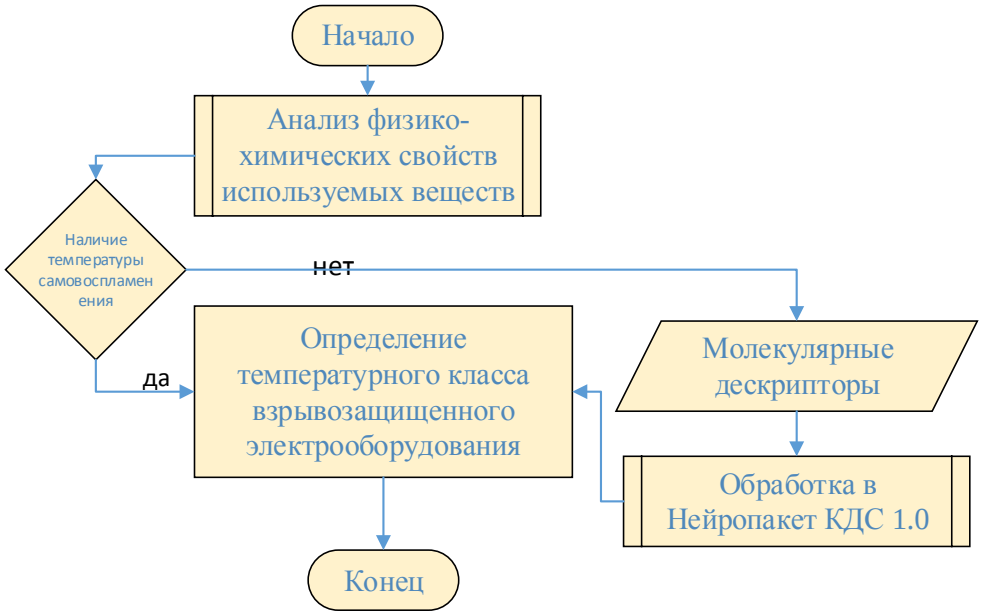

Рисунок 15 – Методика определения температурного класса взрывозащищенного электрооборудования

Этап 1. Анализ технической документации на объект защиты. Определение необходимости использования взрывозащищенного электрооборудования

На данном этапе специалистами пожарно-технического профиля собирается достоверная информация об технологическом процессе протекающем на нефтегазовом объекте и определяется класс зоны в котором будет применяться электрооборудование. Отметим, что также необходимо учитывать условия окружающей среды (химическую активность, атмосферные осадки и т.п.).

Этап 2. Определение наиболее пожаровзрывоопасного продукта нефтепереработки, используемого на объекте защиты и установление его пожароопасных характеристик.

Знания пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, используемых в помещениях нефтегазовой отрасли, обеспечивает выполнение ряда практических задач – определение необходимого перечня мероприятий, направленных на обсечение пожарной и промышленной безопасности. Важнейшим показателем в

части определения температурного класса взрывозащищенного объекта является температура самовоспламенения.

Поэтому на данном этапе необходимо провести анализ существующих справочных и нормативно-правовых документов, на предмет определения пожароопасных характеристик вещества, используемого в нефтегазовых помещениях, в частности температуру самовоспламенения.

Как ранее говорилось, не всегда есть возможность определить необходимый показатель опираясь на справочные и нормативные документы, поэтому целесообразно применить методику прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Для реализации предлагаемой методики используем авторскую компьютерную программу «Нейропакет КДС 1.0» о которой говорилось ранее.

В качестве примера спрогнозируем температуру самовоспламенения кислородсодержащих производных углеводородов, используя предлагаемую методику. В качестве объектов исследования выбраны предельные альдегиды, результаты прогнозирования представлены в таблице 2.

Таблица 6 - Прогнозирование температуры самовоспламенения

№ п/п	Наименование вещества	Прогноз,^{0}C	Прогнозируемый температурный класс электрооборудования
1	2-Фенилпропаналь	364,24	T2
2	4-Метилбензальдегид	538,49	T1
3	2-Метилбензальдегид	547,18	T1
4	2,5-Диметилбензальдегид	537,02	T1
5	4-Этилбензальдегид	365,89	T2
6	2,6-Диметилбензальдегид	585,69	T1
7	3,5-диметилбензальдегид	498,73	T1
8	2,3-Диметилбензальдегид	389,42	T2
9	4-Бутилбензальдегид	438,46	T1
10	2,4,6-Триметилбензальдегид	389,56	T2
11	2,4,5-Триметилбензальдегид	450,23	T1

Этап 3. Определение температурного класса взрывозащищенного электрооборудования.

На данном этапе, основываясь на полученных результатах целесообразно определение температурного класса взрывозащищенного электрооборудования. На основе температурных пределов группы смеси, определяем необходимый показатель. Полученные результаты также представлены в таблице 6.

Этап 4. Формирование полученных результатов

Полученные результаты являются результатом реализации методики определения температурного класса взрывозащищенного электрооборудования с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и позволяют разработать систему предотвращения пожара, вызванного не правильным выбором электротехнической продукции. Отметим, что предлагаемая методика позволяет проводить экспресс-анализ систем, обеспечивая получение достоверных результатов в ходе надзорных проверок инспекторами отделов пожарного надзора и в целом повышает пожарную безопасность объекта защиты.

4.4. Обработка экспериментальных данных программными продуктами. Convert 1.0

На сегодняшний день одним их актуальных вопросов является вопрос разработки и обоснования способа прогнозирования пожароопасных свойств еще не изученных веществ, который не требует проведение сложного эксперимента и тем самым позволит использовать те вещества, которые (согласно прогнозу) подходят поставленным требованиям [100].

В одной из работ [101] предлагается осуществлять прогнозирование с использованием молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. Одной из проблем, с которой можно столкнуться при использовании компьютерных продуктов, является не возможность обработки предложенных исходных данных. Для упрощения использования и ускорения процесса

прогнозирования была разработана программа Convert 1.0. [92] Данная программа представляет собой упрощенный и оптимальный конвектор исходных данных.

Программа обеспечивает выполнение следующих функций: распознавание предложенного исходного файла, его конвертацию в формат txt, xls и обработку полученных данных.

Таким образом, протестировав оригинальную компьютерную программу Convert 1.0 убедились в ее эффективности обработки и предоставлении исходных данных для программных продуктов, специализирующихся на прогнозировании свойств веществ.

4.5. Расчет времени эвакуации людей из помещения переработки нефти с использованием методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

В предыдущих работах [102, 103] нами были показаны возможности данной методики. На примере решения задачи, связанной с прогнозированием свойств продуктов нефтепереработки, применяли полученные данные в выборе класса зоны (температурного класса электрооборудования, определяли место установки системы молниезащиты и т.д.).

В качестве объекта исследования выбран метод, изложенный в ГОСТ 12.1.004 – 91* «Пожарная безопасность. Общие требования» [18]. Метод усовершенствовали за счет применения методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Такой выбор не случаен, поскольку в оригинальном алгоритме расчета времени эвакуации заложена взаимосвязь с низшей теплотой сгорания вещества, линейной скоростью распространения пламени, удельной массовой скоростью выгорания. Ранее нами было отмечено, что отечественная методика ограничена, в виду отсутствия в ней полного набора пожароопасных характеристик исследуемых веществ. Поэтому была разработана методика, представленная ниже.

Предлагаемая методика расчета времени эвакуации людей с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей предназначена для проведения пожарно-технической экспертизы в частности определения величины пожарного риска.

Основные положения данной методики опубликованы в работе [104]. Следует отметить, что, рассматривая методику по определению расчетных величин пожарного риска, утвержденную Приказом МЧС России № 404 «Об утверждении методики по определению расчетных величин пожарного риска» было установлено, что данная методика имеет ограниченность, которая выражается отсутствием достоверных данных о физико-химических свойствах используемых веществ в нефтегазовой отрасли. Поэтому предлагаемая методика не исключает, а дополняет существующую методику и ее целесообразно применять в тех случаях, когда возможности существующей методики не обеспечивает необходимого результата.

Сценарий реализации предлагаемой методики по расчету времени эвакуации людей с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей предусматривает выполнение ряда основных этапов (рисунок 15). Рассмотрим основные этапы предлагаемой методики.

Этап 1. Анализ технической документации на объект защиты и технологический процесс осуществляемый в помещении.

На данном этапе сотрудниками пожарной охраны или независимыми экспертными организациями проводится анализ технологического процесса, протекающего в помещении. Кроме того, для определения времени эвакуации людей необходим сбор информации об основных эвакуационных путях и выходах (ширина, длина, высота), количестве эвакуирующихся людях. Полученные параметры в дальнейшем используются в определении величины людского потока и возможности образования задержки при эвакуации.

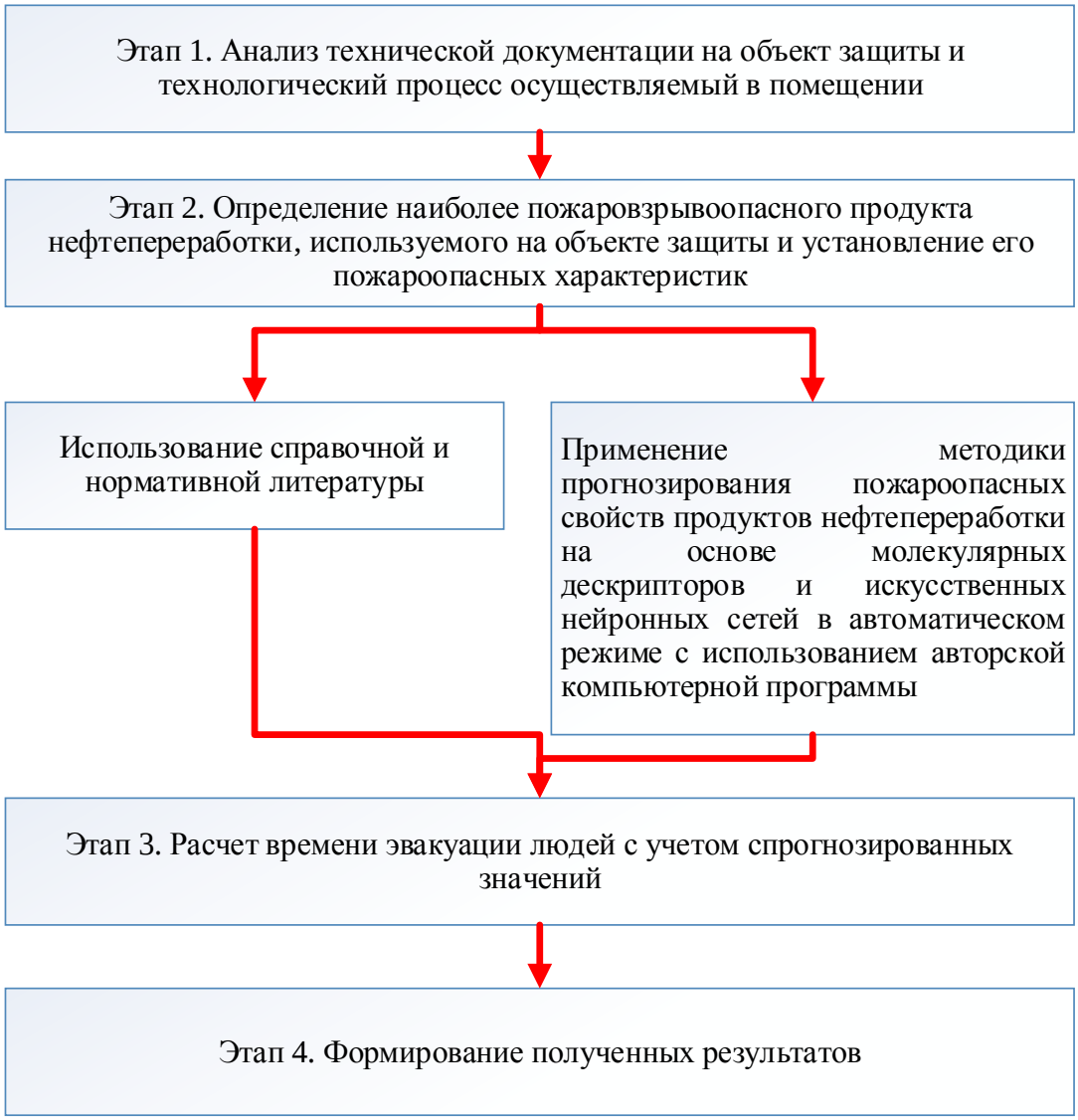

Рисунок 15 – Методика расчета величины времени эвакуации людей

Этап 2. Определение наиболее пожаровзрывоопасного продукта нефтепереработки, используемого на объекте защиты и установление его пожароопасных характеристик.

Знания пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, используемых в помещениях нефтегазовой отрасли, обеспечивает выполнение ряда практических задач – определение необходимого перечня мероприятий, направленных на обсечение пожарной и промышленной безопасности. Важнейшим показателем в части определения расчетного времени эвакуации людей является низшая теплота сгорания, удельная скорость выгорания, линейная скорость пламени исследуемого вещества.

Поэтому на данном этапе необходимо провести анализ существующих справочных и нормативно-правовых документов, на предмет определения пожароопасных характеристик вещества, используемого в нефтегазовых помещениях.

Стоит отметить, что зачастую не всегда есть возможность определить необходимый показатель опираясь на справочные и нормативные документы, поэтому целесообразно применить методику прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. Для реализации предлагаемой методики используем авторскую компьютерную программу «Нейропакет КДС 1.0», о которой говорилось ранее.

В качестве примера спрогнозируем выше перечисленные показатели пожаровзрывоопасности кислородсодержащих производных углеводородов используя предлагаемую методику. Результаты прогнозирования представлены в таблице 7.

В качестве объектов исследования выступают бензол и дипропилкетон. Отметим, что сведения для первого взяты из справочной и нормативной литературы.

Этап 3. Расчет времени эвакуации людей с учетом спрогнозированных значений.

В качестве примера проведем расчет времени эвакуации людей из производственного помещения по переработки нефти размерами 54х212х6 м, с располагающемся в нем технологическим оборудованием, представленном на рисунке 16. В качестве рабочей зоны людей примем отметку 3,5 м, начальная температура 20^0С, освещенность 60лк. Из таблицы 7 видно, что полученные значения разнятся. Целесообразно установить в каком из расчетов время эвакуации людей будет больше.

Таблица 7 - Результаты прогнозирования пожароопасных свойств веществ

№ п\п	Наименование вещества	Низшая теплота сгорания, мДж/кг		Удельная скорость выгорания, кг/м^{2}с		Линейная скорость пламени, м/с	
		справочные данные [87-89]	результаты прогноза	справочные данные [87-89]	результаты прогноза	справочные данные [87-89]	результаты прогноза
1	Диметилкетон	2,9	3,4	0,044	0,034	790	818
2	Дипропилкетон	-	3,5	-	0,045	-	815
3	Бутилметилкетон	3,5	4,8	-	0,042	-	768
4	6 - Ундеканон	6,6	6,9	0,038	0,046	-	827
5	2 – Пентанон	-	5,7	-	0,002	-	400
6	2- Октанон	-	6,9	-	0,037	-	824
7	2,4-Диметил-1,3-пентандион	-	3,7	-	0,046	-	474
8	3-Пентанон	-	3,3	-	0,011	-	402
9	3-Октанон	-	6,9	-	0,002	-	668
10	3-Гексанон	-	4,5	-	0,037	-	827
11	2-Гептанон	-	6,8	-	0,011	-	202
12	3-Метил-2-бутанон	-	3,4	-	0,002	-	416
13	2-Додеканон	-	6,9	-	0,046	-	830
14	2,6-Диметилпентанон	-	6,9	-	0,046	-	827
15	3- Нонанон	-	6,9	-	0,003	-	827

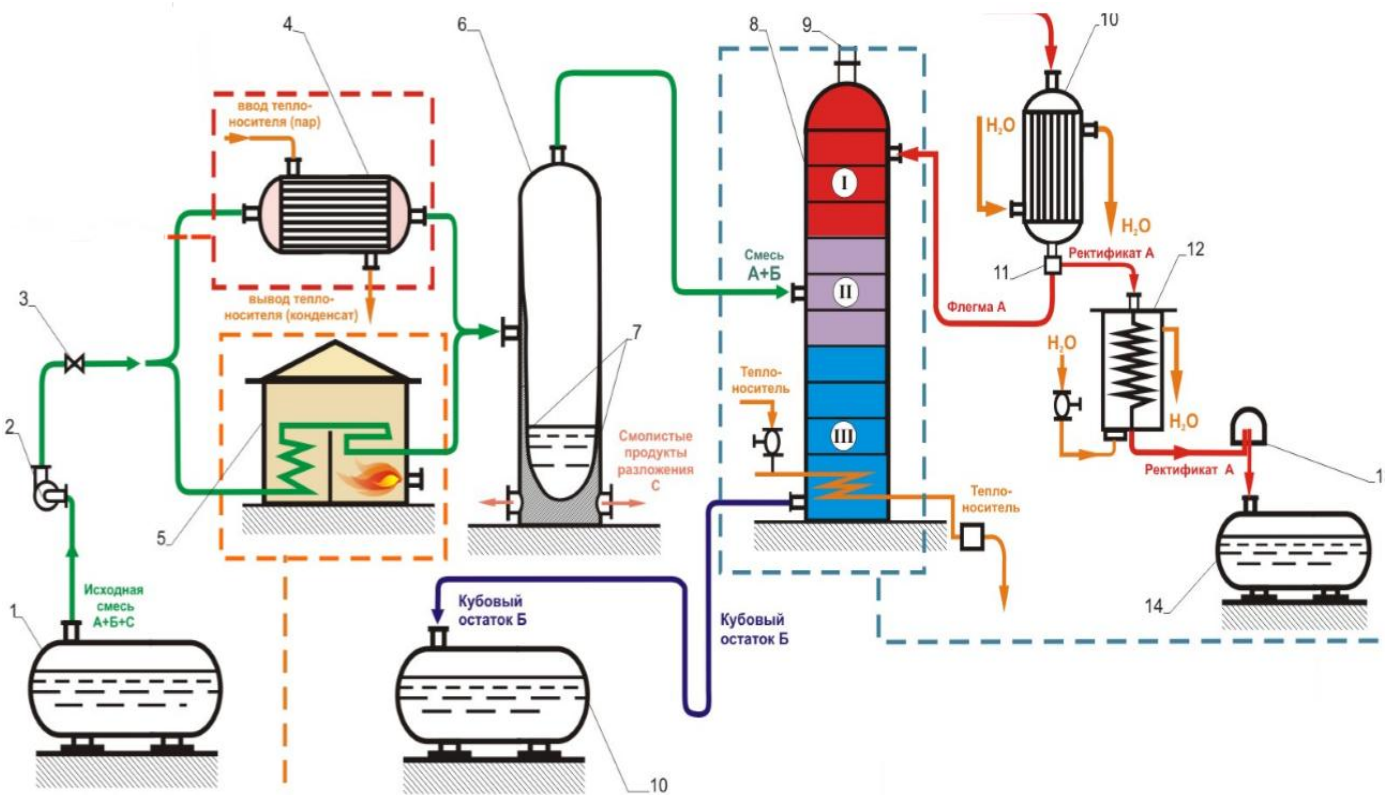

Рисунок 16 – Принципиальная схема помещения по переработки нефти с расстановкой технологического оборудования: *1 – емкость начальной смеси; 2 – насос; 3 – регулятор расхода; 4 – паровой подогреватель; 5 – трубчатая печь; 6 – испаритель – сепаратор; 7 – продукты разложения; 8 – реактор; 9 – шлемовая трубка; 10 – дефлегматор; 11 – сепаратор; 12 – конденсатор-холодльник; 13 – смотровой фонарь; 14 – сборник остатка; 15 – кипятильник; 16 – сборник готового вещества.*

Используя известные формулы для нахождения и спрогнозированные значения определили: А- размерный параметр, учитывающий удельную массовую скорость выгорания горючего материала, В – размерный комплекс, зависящий от теплоты сгорания материала, n- показателя степени, учитывающий изменение массы выгорания материала. Результаты показаны в таблице 8.

Значения, полученные в результате расчета с использованием методики прогнозирования, основанной на молекулярных дескрипторах и искусственных нейронных сетях, показывает, что время воздействия опасных факторов пожара на людей начинается на 1,76 мин. с момента эвакуации. При расчете обычным способом время составило 2,05 мин. Учитывая, что время эвакуации людей составляет 1,9 мин, то в первом случае пожарный риск не обеспечивается, во-втором обеспечивается. Анализируя выше сказанное, можно сделать вывод о том, что при использовании более простого подхода, риск человеческих жертв возрастает.

На рисунке 17 представлена схема эвакуации людей при пожаре с учетом МДИНС:

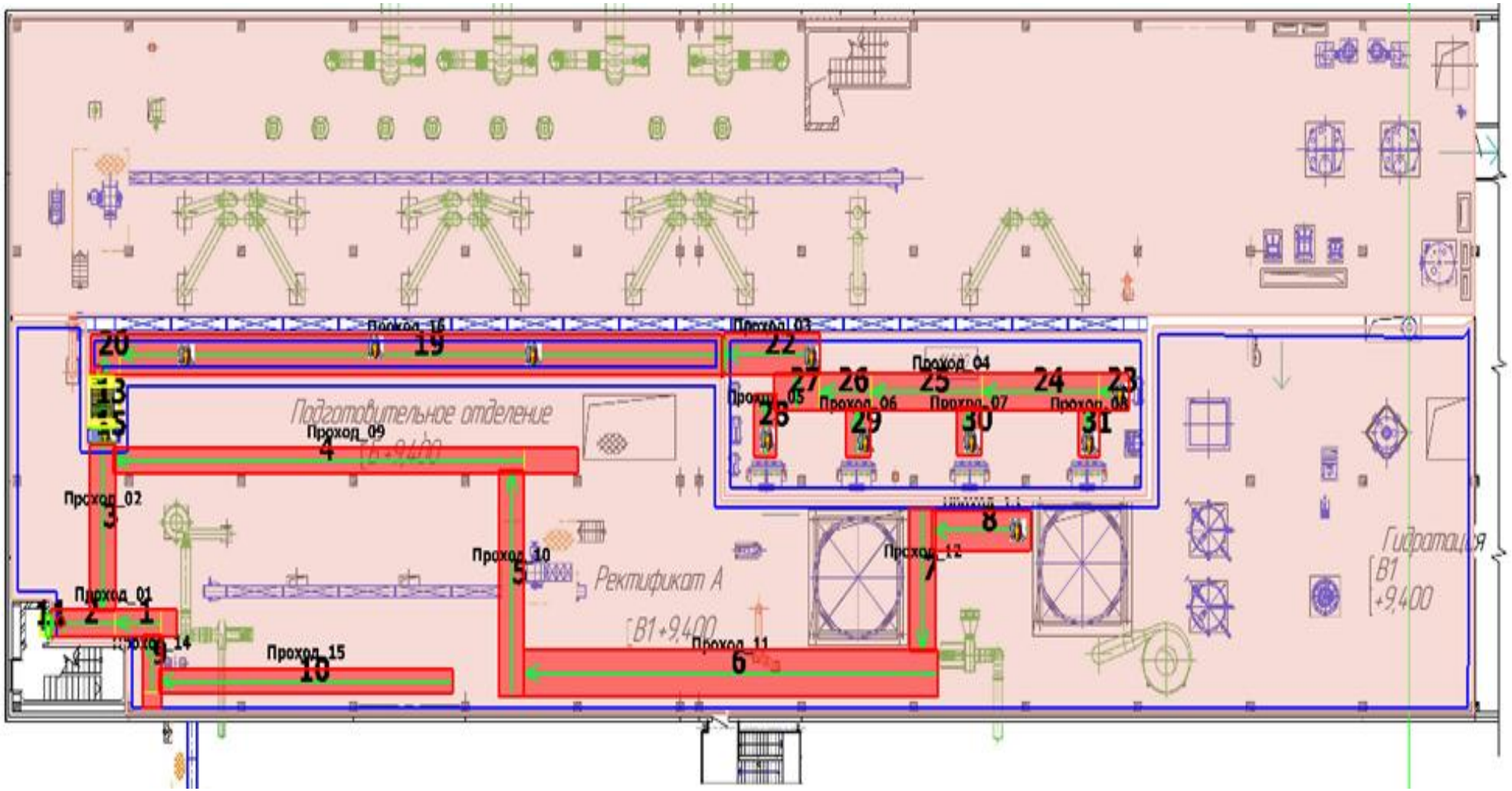

Рисунок 17 – Принципиальная схема эвакуации людей: *1-31 – номера участков, проход 1- проход 15 – места эвакуации людей*

Таблица 8 - Результаты расчета

Основной показатель	Полученные значения		Абсолютная погрешность
	Бензол	Дипропилкетон	
Высота рабочей зоны, м	3,5	3,5	-
Объем помещения, $м^3$	54950	54950	-
Размерный параметр A, $кг \times с^{-n}$	0,02	0,03	0,00003
Размерный параметр B, кг	53509	43345,2	217,7
Размерный параметр Z	1,32	1,32	-
Начальная температура воздуха, °C	20	20	-
Безразмерный параметр, z	0,845	0,845	-
Удельная изобарная теплоемкость газа, $МДж \times_x кг^{-1}$	0,001	0,001	-
Коэффициент теплопотерь	0,75	0,75	-
Коэффициент полноты горения	0,5	0,5	-
Низшая теплота сгорания материала, $МДж \times кг^{-1}$	2,9	3,5	0,6
Удельная массовая скорость выгорания, $кг \times м^{-2} \times с^{-1}$	0,044	0,045	0,001
Линейная скорость распространения пламени, $м \times с^{-1}$	0,79	0,815	0,025
Коэффициент отражения предметов на путях эвакуации	0,3	0,3	-
Начальная освещенность, лк	60	60	-
Предельная дальность видимости в дыму, м	20	20	-
Дымообразующая способность, $Нп \times м^2 \times кг^{-1}$	3,37	3,37	-
Удельный расход кислорода, $кг \times кг^{-1}$	3,34	3,34	-
Время блокировки по потере видимости, с	154,3	159,3	11,8
Время блокировки по предельной температуре, с	163,3	132,2	21,6
Время блокировки по пониженному содержанию кислорода, с	337,6	306,8	30,8
Время блокировки по CO_2, с	176,8	142,4	34,4
Время блокировки по CO, с	195,6	187,3	8,3
Время блокировки по HCl, с	292,9	254,7	38,2
Расчетное время блокировки, с	2,05	1,76	0,29
Расчетное время эвакуации, с	1,9		

Кроме того, методика ГОСТ 12.1.004-91* при расчете времени блокировки людей в комплексе с методом прогнозирования основанном на дескрипторах и искусственных сетях позволяют определять время эвакуации людей с приемлемой точностью.

Этап 4. Формирование полученных результатов

Полученные результаты являются результатом реализации методики расчета времени эвакуации людей с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и позволяют определять величину времени эвакуации людей из производственного помещения, а в дальнейшем величину пожарного риска, сведения о которых необходимы при разработке комплекса дополнительных мероприятий, направленных на обеспечение пожарной и промышленной безопасности.

4.6. Методика расчета категории помещения нефтегазовой отрасли по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

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

При проектировании новых инновационных промышленных, складских и лабораторных помещений, в которых используются и/или хранятся легковоспламеняющиеся жидкости (ЛВЖ), необходима обязательная проверка на отнесение их к категории взрывоопасных или пожароопасных помещений. Проведение расчетов по каждому случаю достаточно трудоемкая задача, поэтому применение подхода, предложенного в работе, облегчает

решение этого вопроса. Основываясь на определении максимального давления взрыва, 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 молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Ранее нами в работах на основе данных о молекулярных дескрипторах, отражающих особенности строения молекулы и ее физические характеристики с учетом обработки искусственными нейронными сетями, были спрогнозированы ряд показателей кислородсодержащих производных углеводородов. 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. Поэтому была разработана методика [105] расчета категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Предлагаемая методика предназначена для проведения пожарно-технической экспертизы нефтегазового сектора и обеспечивает формирование комплекса мероприятий, направленных на повышение пожарной безопасности объекта защиты.

Следует отметить, что предлагаемая методика расчета категории помещений по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей

дополняет существующую методику (СП 12.13130.2009) и применяется в тех случаях, когда «штатная» методика не обеспечивает получение содержательного и достоверного результата.

Сценарии реализации предлагаемой методики предусматривает выполнение ряда основных этапов (рисунок 3). Рассмотрим основные этапы.

Рисунок 18 – Основные этапы методики расчета категории помещения

Схематически методика представлена на рисунке 19.

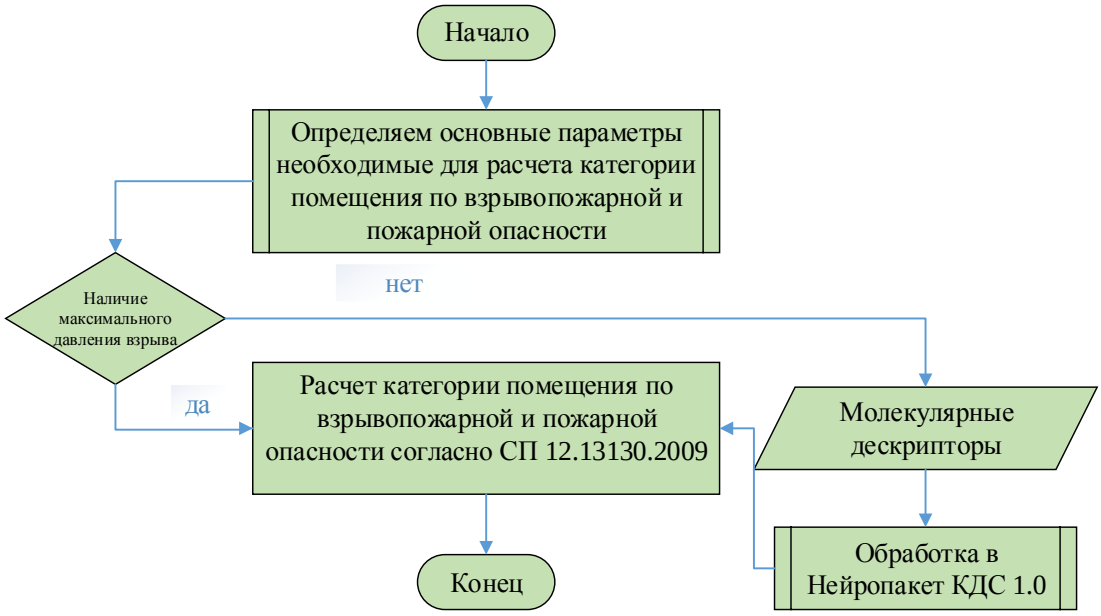

Рисунок 19 - Методика расчета категории помещения на основе данных о дескрипторах

Этап 1. Анализ технической документации на объект защиты и технологический процесс осуществляемый в помещении.

На данном этапе происходит анализ технологического процесса, протекающий в помещениях нефтегазового сектора. Определяют самый неблагоприятный вариант аварии или период нормальной работы, при котором взрывоопасная концентрация образуется в максимальных объемах, количество вещества поступившего в помещение, основные геометрические параметры помещения с целью дальнейшего определения свободного объема.

Этап 2. Определение наиболее пожаровзрывоопасного вещества, используемого на объекте защиты и установление его пожароопасных характеристик.

Знания пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, используемых в помещениях нефтегазовой отрасли, обеспечивает выполнение ряда практических задач – определение необходимого перечня мероприятий, направленных на обсечение пожарной и промышленной безопасности. Важнейшим показателем в части определения расчетной категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности является максимальное давление взрыва исследуемого вещества.

Поэтому на данном этапе необходимо провести анализ существующих справочных и нормативно-правовых документов, на предмет определения пожароопасных характеристик вещества, используемого в нефтегазовых помещениях, в частности максимальное давление взрыва.

Стоит отметить, что зачастую не всегда есть возможность определить необходимый показатель опираясь на справочные и нормативные документы, поэтому целесообразно применить методику прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Для реализации предлагаемой методики используем авторскую компьютерную программу «Нейропакет КДС 1.0».

В качестве примера спрогнозируем максимальное давление взрыва кислородсодержащих производных углеводородов используя предлагаемую методику. Результаты прогноза представлены в таблице 9.

Таблица 9 - Прогнозирование максимального давления взрыва

Наименование вещества	Справочные данные максимального давления взрыва, кПа [87-89]	Прогноз, кПа	Относительная погрешность, %
Октаналь	740	710	4,05
Гексаналь	-	495	-
Деканаль	620	650	4,08
2,3- Диметилпентаналь	-	864,29	-

Этап 3. Расчет избыточного давления и определение категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности.

На данном этапе проведем сравнительный расчет категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом спрогнозированного значения максимального давления взрыва и значения, рекомендованного к использованию в случае отсутствия такого СП 12.13130.2009. Отметим, что расчет будет производиться при всех равных условиях. Площадь производственного помещения нефтегазовой отрасли 150 м^2, где храниться

емкость с гексаналем за исключением максимального давления взрыва. В первом случае используем прогнозируемую P_{max}=495 кПа, во втором случае P_{max}=900, как предлагает СП 12.13130.2009

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

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

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 $МДж/м^2$).

Проведенный расчет показывает, что производственное помещение относиться 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.

Этап 4. Формирование полученных результатов

Полученные результаты являются результатом реализации методики расчета категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом использования методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей и позволяют разработать комплекс мероприятий, направленных на обеспечение пожарной и промышленной безопасности объектов нефтегазового сектора.

Отметим, что предлагаемая методика позволяет проводить расчет категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности с приемлемой точностью, тем самым обеспечивая снижения финансовых затрат на разработку мероприятий по обеспечению пожарной безопасности.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 4

На основе методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки основанной на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей были разработаны и дополнены существующие методики связанные с определением системы молниезащиты зданий нефтегазового сектора, определением температурного класса взрывозащищенного электрооборудования, с расчетом категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности, а также с расчетом времени эвакуации людей из производственного помещения, связанного с ректификацией нефти.

Предлагаемые методики будут полезны сотрудникам государственной противопожарной службы при разработке комплекса мероприятий, направленных на обеспечение пожарной и промышленной безопасности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Путем комбинации двух основных современных направлений (молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей» на базе выборки из основных кислородсодержащих производных углеводородов, разработана инновационная методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки. Разработан комплекс проблемно - ориентированных программ, обеспечивающих пожарную и промышленную безопасность объектов защиты: нейропакет КДС 1.0 (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016614070); Молниезащита 1.0» (MZ) (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015663298); «Convert 1.0» (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015610745).
2. Спрогнозированы пожароопасные свойства кислородсодержащих производных углеводородов: а) низшая теплота сгорания; б) удельная скорость выгорания; в) линейная скорость пламени (средняя относительная погрешность первых не превысила 10%, а вторых 11%); г) минимальная энергия зажигания (средняя относительная погрешность составила 4,5%); д) температура вспышки (где средняя относительная погрешность составила 2,2%); е) температура самовоспламенения (получены новые значения); ж) максимальное давление взрыва (средняя относительная погрешность составила 3,04%). Предлагаемая методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей с приемлемой точностью позволяет определять неизвестные пожаровзрывоопасные свойства кислородсодержащих органических соединений и дополняет существующие базы данных по физико-химическим свойствам веществ.
3. Предложена усовершенствованная методика выбора молниезащиты, температурного класса взрывозащищенного электрооборудования, расчету категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности, а также времени эвакуации людей из помещения, где протекает технологический процесс, связанный с ректификацией нефти. Полученные результаты могут быть использованы при составлении разделов по безопасности технологических регламентов и планов локализации аварийных ситуаций для объектов нефтегазовой отрасли.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Энциклопедия нефтегазовой отрасли. Издание в 3 т. / Под. ред. Ю.В. Вадецкого. – М. : Московское отд. «Нефть и газ» МИА, ОАО «ВНИИОЭНГ», 2002. – Т. 1. 354 с.
2. Энциклопедия нефтегазовой отрасли. Издание в 3 т. / Под. ред. Ю.В. Вадецкого. – М. : Московское отд. «Нефть и газ» МИА, ОАО «ВНИИОЭНГ», 2003. – Т. 2. – 380с.
3. Энциклопедия нефтегазовой отрасли. Издание в 3 т. / Под. ред. Ю.В. Вадецкого. – М. :Московское отд. «Нефть и газ» МИА, ОАО «ВНИИОЭНГ», 2004. – Т. 3. – 308с.
4. Федеральный закон от 22.07.08 г. № 123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности». Принят Государственной Думой 04.07.08 г. Одобрен Советом Федерации 11.07.08 г.
5. ГОСТ 12.1.044-89*. ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения (с изм. №1, утв. Постановлением Госкомитета СССР по управлению качеством продукции и стандартам от 12.12.89 № 3683). – М.: Стандартинформ, 2003.
6. Колмаков Г.А. Определение температуры вспышки и воспламенения органических соединений / Г.А. Колмаков. – М. : Химия. Минералогия, 1998 . – 250 с.
7. Блинов В.И., Худяков Г.Н. Диффузионное горение жидкостей / В.И. Блинов, Г.Н. Худяков. – М. : СССР, 1961. – 208 с.
8. Korol’chenko, Ya.A. Calculating the flash point of inflammable liquids / Ya.A. Korol’chenko, A.S. Bobkov, V.S. Zhuravlev, L.V. Lantykhova // Chem. Techn. Fuels Oils. – 1969. – Vol. 5, No 8. – P. 556-558.
9. Benson, S.W. Additivity rules for the estimation of thermochemical properties/ S.W. Benson, F.R. Cruickshank, D.M. Golden et al // Chem. Rev. – 1969. – Vol. 69, No 3. – P. 279–324.

10. Монахов, В.Т. Методы исследования пожарной опасности веществ / В.Т. Монахов. – М. : Химия, 1979. – 424 с.

11. Kosarev I.N., Kindysheva S.V., Aleksandrov N.L., Starikovskiy A.Yu. Ignition of ethanol-containing mixtures excited by nanosecond discharge above self-ignition threshold // Combustion and Flame Volume 162, Issue 1, January 2015, P. 50-59

12. Zabetakis, M.G. Flammability characteristics of combustible gases and vapors / M.G. Zabetakis // U.S. Bureau of Mines. Bulletin 627. – Washington : U.S. Dept. of the Interior, Bureau of Mines, 1965. – 121 p.

13. Соловьев Н.В., Стрельчук Н.А., Ермило П.И Основы техники безопасности и противопожарной техники в химической промышленности / Н.В. Соловьев, Н.А. Стрельчук, П.И. Ермило. – М. :Госхимиздат, 1960 . – 394 с.

14. Razus D.; Brinzea V.; Mitu M.; Movileanu C.; Oancea D. Temperature and pressure influence on maximum rates of pressure rise during explosions of propane–air mixtures in a spherical vessel // Journal of Hazardous Materials, Volume 190, Issues 1–3, 15 June 2011, Pages 891-896

15. СП 12.13130.2009 Определение категории помещений зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности. – М.: ВНИИПО МЧС РФ, 2009

16. Нижний концентрационный предел распространения пламени [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/ . – Концентрационные пределы распространения пламени. – (Дата обращения: 18.05.15)

17. Карапетьянц, М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств / М.Х. Карапетьянц. – М. : Наука, 1965. – 404 с.

18. ГОСТ 12.1.004-91 ССБТ. Пожарная безопасность общие требования. — Введ. 01.07.92 г. — М. : Издательство стандартов, 1996. — 50 с.

19. ГОСТ 12.3.047-98. ССБТ. Пожарная безопасность технологических процессов. Общие требования. Методы контроля. – М.: Изд. Стандартов, 1998. – 85 с.

20. Шевчук А.Л., Иванов В.А., Косачев А.А. Проблемы количественной оценки пожарного риска // Пожаровзрывобезопасность, 1994, Т.3, №1. – С. 42-48

21. Методика определения расчетных величин пожарного риска на производственных объектах: приказ МЧС РФ от 10.07.2009 № 404; зарег. В Минюсте РФ 17.08.2009, рег. № 14541; введ. 10.07.2009. – М.: ФГУ ВНИИПО МЧС России, 2009.

22. Wolski A., Dembsey N.A. Accommodation perceptions of risk in performance based buildings fire safety code development // Fire Safety V. 34, № 3, 257 - 309 p. 2000

23. Воробьев Ю.Л., Копылов Н.П., Шебеко Ю.Н., Черноплеков А.Н. Нормирование рисков техногенных ЧС. Материалы IX Всероссийской научно-практической конференции по проблемам защиты населения и территорий от ЧС. – 20 – 21.04.2004г. / МЧС России. М.: Триада, птд, 2004. 427 с.

24. Alle B.J.M. Risk analysis and risk policy in the Netherlands and the EEC // Jornal of Loss Prevention in the Process Industries, 1991, V.4, №1, 58 – 64 p.

25. О федеральном государственном пожарном надзоре : постановление Правительства РФ от 12.04.2012 № 290 // Российская газета . – 2012. - № 93.

26. О пожарной безопасности : Федер. Закон от 21.12.94 № 69- ФЗ; принят. Гос. Думой 18.11.1994 // Российская газета . – 1995.- № 3

27. Кошмаров Ю.А. Прогнозирование опасных факторов пожара в помещении / Ю.А. Кошмаров. – М. : Стандартинформ, 2006. – 100 с.

28. Cox G. Combustion fundamentals of fire. – London: Academic Press, 1995. – 476 p.

29. Калач А. В., Карташова Т. В., Сорокина Ю. Н., Облиенко М. В. Прогнозирование пожароопасных свойств органических соединений с применением дескрипторов // Пожарная безопасность. — 2013. — № 1. — С. 70–74

30. Сайт википедии [Электронный ресурс] / Режим доступа: http:// www. wikipedia.org/wiki/QSAR (дата обращения 01.15-31.03.2016).

31. Franklin J.L. Prediction of Heat and Free Energies of Organic Compounds. // Ind. Eng. Chem. - 1949. - V. 41, № 5. - P. 1070-1076.

32. Franklin J.L. Calculation of the Heats of Formation of Gaseous Free Radicals and Ions. // J. Chem. Phys. - 1953. - V. 21, № 11. - P. 2029-2033.

33. Татевский В.М. Химическое строение углеводородов и их теплоты образования. // ДАН СССР. - 1950. - Т. 25, № 6. - С. 819-822.

34. Bernstein H.J. The Physical Properties of Molecules in Relation to Their Structure. I. Relations between Additive Molecular Properties in Several Homologous Series. // J. Chem. Phys. - 1952. - V. 20, № 2. - P. 263-269.

35. Laidler K.J. System of Molecular Thermochemistry for Organic Gases and Liquids. // Canadian J. Chem. - 1956. - V. 34. - P. 626-648.

36. Benson S.W.; Buss J.H. Additivity Rules for the Estimation of Molecular Properties. Thermodynamic Properties. // J. Chem. Phys. - 1958. - V. 29, № 3. - P. 546- 572.

37. Allen T.L. Bond Energies and the Interactions between Next-Nearest Neighbors. I. Saturated Hydrocarbons, Diamond, Sulfanes, S[sub 8], and Organic Sulfur Compounds. // J. Chem. Phys. - 1959. - V. 31, № 4. - P. 1039-1049.

38. Смоленский Е.А. Применение теории графов для вычисления структурно-аддитивных свойств углеводородов. // Журн. физ. химии. - 1964. - Т. 38, № 5. - С. 1288-1291.

39. Free S.M., Jr.; Wilson J.W. A Mathematical Contribution to Structure-Activity Studies. // J. Med. Chem. - 1964. - V. 7, № 4 - P. 395-399.

40. Golender V.E.; Rozenblit A.B. Logico-structural approach to computer-assisted drug design. // Med. Chem. (Academic Press). - 1980. - V. 11, №. 9. - P. 299-337.

41. Avidon V.V.; Pomerantsev I.A.; Golender V.E.; Rozenblit A.B. Structure-Activity Relationship Oriented Languages for Chemical Structure Representation. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 1982. - V. 22, № 4. - P. 207-214.

42. Cramer R.D., 3rd; Redl G.; Berkoff C.E. Substructural analysis. A novel approach to the problem of drug design. // J. Med. Chem. - 1974. - V. 17, № 5. - P. 533-535.

43. Brugger W.E.; Stuper A.J.; Jurs P.C. Generation of Descriptors from Molecular Structures. // J. Chem. Inf. Model. - 1976. - V. 16, № 2. - P. 105-110.

44. Stuper A.J.; Jurs P.C. ADAPT: A Computer System for Automated Data Analysis Using Pattern Recognition Techniques. // J. Chem. Inf. Model. - 1976. - V. 16, № 2. - P. 99-105.

45. Hodes L.; Hazard G.F.; Geran R.I.; Richman S. A statistical-heuristic methods for automated selection of drugs for screening. // J. Med. Chem. - 1977. - V. 20, № 4. - P. 469-475.

46. Adamson G.W. Automatic methods of handling chemical structure and property information. // Proc. Analyt. Div. Chem. Soc.. - 1977. - V. 14, № 2. - P. 26-28.

47. Adamson G.W.; Bush J.A. Method for relating the structure and properties of chemical compounds. // Nature. - 1974. - V. 248, № 5447. - P. 406-407.

48. Adamson G.W.; Bawden D. Method of structure-activity correlation using Wiswesser line notation. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 1975. - V. 15, № 4. - P. 215- 220.

49. Adamson G.W.; Bush J.A. Evaluation of an empirical structure-activity relation for property prediction in a structurally diverse group of local anesthetics. // J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1. - 1976. - № 2. - P. 168-172.

50. Adamson G.W.; Bawden D. A substructural analysis method for structure-activity correlation of heterocyclic compounds using Wiswesser line notation. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 1977. - V. 17, № 3. - P. 164-171.

51. Adamson G.W.; Bawden D. An empirical method of structure-activity correlation for polysubstituted cyclic compounds using Wiswesser Line Notation. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 1976. - V. 16, № 3. - P. 161-165.

52. Milne M.; Lefkovitz D.; Hill H.; Powers R. Search of CA Registry (1.25 Million Compounds) with the Topological Screens System. // J. Chem. Doc. - 1972. - V. 12, № 3. - P. 183-189.

53. Adamson G.W.; Cowell J.; Lynch M.F.; McLure A.H.W.; Town W.G.; Yapp A.M. Strategic Considerations in the Design of a Screening System for Substructure Searches of Chemical Structure Files. // J. Chem. Doc. - 1973. - V. 13, № 3. - P. 153- 157.

54. Feldman A.; Hodes L. An Efficient Design for Chemical Structure Searching. I. The Screens. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 1975. - V. 15, № 3. - P. 147-152.

55. Willett P. A Screen Set Generation Algorithm. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 1979. - V. 19, № 3. - P. 159-162.

56. Zefirov N.S.; Palyulin V.A. Fragmental Approach in QSPR. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. - 2002. - V. 42, № 5. - P. 1112-1122.

57. Varnek A.; Fourches D.; Hoonakker F.; Solov'ev V.P. Substructural fragments:an universal language to encode reactions, molecular and supramolecular structures. // J. Comput. Aided Mol. Des. - 2005. - V. 19, № 9-10. - P. 693-703.

58. Baskin I.; Varnek A. Building a chemical space based on fragment descriptors. // Comb. Chem. High Throughput Screening. - 2008. - V. 11, № 8. - P. 661-668.

59. Kondo S., Urano Y., Tokuhashi K. et al. Prediction of flammability of gases by using *F*-number analysis // J. Hazard. Mater. – 2001. – Vol. 82, No 2. – P. 113-128.

60. Tsai F-Y., Chen C.-C., Liaw H.-J. A model for predicting the auto-ignition temperature using quantitative structure property relationship approach // Procedia Eng. – 2012. – Vol. 45. – P. 512-517.

61. Kondo S., Takahashi A., Tokuhashi K., Sekiva A. RF number as a new index for assessing combustion hazard of flammable gases // J. Hazard. Mater. – 2002. – Vol. 93, No 3. – P. 259-267.

62. Ma T., Wang Q., Larrañaga M.D. Correlations for estimating flammability limits of pure fuels and fuel-inert mixtures // Fire Saf. J. – 2013. – Vol. 56. – P. 9–19.

63. Васин А.Я., Райкова В.М. О влиянии химического строения органических веществ на взрывоопасность пылей // Пожаровзрывобезопасность. – 2007. – Т. 16, № 1. – С. 14-18.

64. Hshieh F.-Y., Hirsch D.B., Williams J.H., Beeson H.D. Upper flammability limits of some organosilicon compounds // Fire Mater. – 2004. – Vol. 28, No 6. – P. 459–465.

65. Gharagheizi F., Eslamimanesh A., Mohammadi A.H., Richon D. Empirical method for representing the flash-point temperature of pure compounds // Ind. Eng. Chem. Res. – 2011 – Vol. 50, No 9. – P. 5877-5880.

66. Алексеев С.Г., Смирнов В.В., Барбин Н.М. Температура вспышки. Часть II. Расчет через давление насыщенного пара / С.Г. Алексеев, В.В. Смирнов, Н.М. Барбин // Пожаровзрывобезопасность. – 2012. – Т. 21, № 10. – С. 21-35.

67. Vandebroek L., Verplaetsen F., Berghmans J. et al. Auto-ignition hazard of mixtures of ammonia, hydrogen, methane and air in urea plant // J. Hazard. Mater. – 2002. – Vol. 93, No 1. – P. 123-136.

68. Семенов Н.Н. Избранные труды: в 4 т. / Н.Н. Семенов. – М.: Наука, 2005. – Т. 2. – 704 с.

69. Perry's Chemical Engineers' Handbook / by ed. D. W. Green, R. H. Perry. – N.Y. : Mc-Graw-Hill, 2008. – P. 2-516–2-517.

70. Шебеко Ю.Н., В.Ю. Навценя, С.Н. Копылов и др. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов: руководство. – М.: ВНИИПО, 2002. – 77 с.

71. Shimy A.A. Calculating flammability characteristics of hydrocarbons and alcohols // Fire Techn. – 1970. – Vol. 6, № 2. – P. 135-139.

72. Donaldson A.B., Yilmaz N., Shouman A. Correlation of the flammability limits of hydrocarbons with the equivalence ratio // Int. J. Appl. Eng. Res. – 2006. – Vol. 1, No 1. – P. 77-85.

73. Агафонов И.А., Гаркушин И.К., Люстрицкая Д.В., Снопов С.Г. Анализ и прогнозирование пожароопасных свойств индивиальных алканов // Пожаровзрывобезопасность. – 2009. – Т. 18, № 2. – С. 16-19.

74. Jones G.W. Inflammation limits and their practical application in hazardous industrial operations // Chem. Rev. – 1938. – Vol. 22, No 1. – P. 1-26.

75. Lloyd P. The Fuel Problem in Gas Turbines // Proc. Inst. Mech. Eng. – 1948. – Vol. 159, No 4 – P. 220-23.

76. Zabetakis M.G. Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors // U.S. Bureau of Mines. Bulletin 627. – Washington: U.S. Dept. of the Interior, Bureau of Mines, 1965. – 121 P.

77. Britton L.G. Using heats of oxidation to evaluate flammability hazards // Process Saf. Progress. – 2002. – Vol. 21, No 1. – P. 31-54.

78. Ha D.-M. Prediction of upper explosion limits (UEL) by measurement of upper flash point using setaflash apparatus for *n*-alcohols // J. KOSOS. – 2010. – Vol. 25, No 2. – P. 35-40.

79. Mathieu D., Alaime T. Insight into the contribution of individual functional groups to the flash point of organic compounds // J. Hazard. Mater. – 2014. – Vol. 267. – P. 169-174.

80. Albahri T.A. Flammability characteristics of pure hydrocarbons // Chem. Eng. Sci. – 2003. – Vol. 58, No 16. – P. 3629-3641.

81. Chen C.-C., Liaw H.-H., Kuo Y.-Y. Prediction of autoignition temperatures of organic compounds by the structural group contribution approach // J. Hazard. Mater. – 2009. – Vol. 162, No 2–3. – P. 746-762.

82. In silico prediction of physicochemical properties: JRC scientific and technical report EUR 23051 EN – 2007 / Dearden J., Worth A. – Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities, 2007. – 73 P.

83. Pan Y., Jiang J., Wang R. et al. Prediction of flammability characteristics of pure hydrocarbons from molecular structures // AIChE J. – 2010. – Vol. 56, No 3. – P. 690-701.

84. Keshavarz M.H., Gharagheizi F., Ghanbarzadeh M. A simple correlation for prediction of autoignition temperature of various classes of hydrocarbons // J. Iran. Chem. Soc. – 2013. – Vol. 10, No 3. – P. 545-557.

85. 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 / Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов, Ю.Н. Сорокина // Пожаровзрывобезопасность.- 2015.- №9. - С.32-38

86. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016614070 «Нейропакет КДС 1.0»/ Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов (РФ); правообладатель ФГБОУ ВО Воронежский институт ГПС МЧС России . - № 2016611455; заявлено 24.02.16г.; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 16.04.16г.

87. 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.

88. 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.

89. Сайт компании Sigma-Aldrich [Электронный ресурс] / Режим доступа: http:// www. Sigmaaldrich.com/catalog (дата обращения 01.15-31.03.2016).

90. Королев Д.С., Калач А.В., Сорокина Ю.Н. Сравнительный анализ способов прогнозирования физико-химических свойств веществ / Д.С. Королев, А.В. Калач, Ю.Н. Сорокина // Вестник Командно-инженерного института МЧС Республики Беларусь. – 2016. – Т.23, №1. – С. 78-84

91. Королев Д.С., Калач А.В. Нейропакет для прогнозирования пожароопасных свойств веществ (КДС 1.0) / Д.С. Королев, А.В. Калач // Чрезвычайные ситуации: образования и наука.- 2015. – Т.10, №2. – С. 98-102

92. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015610745 «Convert 1.0» / Д.С. Королев (РФ); правообладатель Королев Д.С.. - № 2014660420; заявлено 10.10.2014; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 16.01.15г.

93. РД 34.21.122-87 Инструкция по устройству молниезащиты зданий и сооружений. М.: ГНИЭИ, 1995

94. СО 153-343.21.122-2003 Инструкция по устройству молниезащиты зданий, сооружений и промышленных коммуникаций. М., 2003

95. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В. Управление основными параметрами системы молниезащиты / Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов // Проблемы управления рисками в техносфере. -2015.- №4 (36). – С. 38-42

96. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015663298 «Молниезащита 1.0» (MZ) / Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов (РФ); правообладатель Королев Д.С. - № 2015619192; заявлено 29.09.2015; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 15.12.15г.

97. Королев Д.С. К вопросу понятия о дескрипторах / Д.С. Королев, С.В. Потеха // Современные технологии обеспечения гражданской обороны и ликвидации последствий чрезвычайных ситуаций: сборник статей по материалам VI Всероссийской научно-практической конференции курсантов, слушателей, студентов и молодых ученых с международным участием. Воронежский институт ГПС МЧС России 17 апреля 2015г. ч.2. Воронеж. 2015. С. 31-34

98. Королев Д.С. К вопросу понятия об искусственных нейронных сетях /Д.С. Королев, Н.С. Гунин, С.А. Слауцкий // Проблемы обеспечения безопасности при ликвидации последствий чрезвычайных ситуаций: сборник статей по материалам IV Всероссийской научно-практической конференции с международным участием Воронежский институт ГПС МЧС России 15-16 декабря 2015г.Воронеж. 2015г.С. 61-63

99. Д.С. Королев Выбор температурного класса взрывозащищенного электрооборудования при проектировании производственных помещений

с использованием дескрипторов и нейронных сетей // Вестник Воронежского института ГПС МЧС России. – 2015. - №1 (14). - С. 26 -30.

100. Королев Д.С., Калач А.В., Зенин А.Ю. Важность принятия решений при обеспечении пожарной безопасности / Д.С. Королев, А.В. Калач, А.Ю. Зенин // Вестник Воронежского института ГПС МЧС России. - 2015.- №2 (15). - С. 42-46.

101. Королев Д.С. Сравнительный анализ методов прогнозирования пожароопасных свойств веществ (на примере температуры вспышки) / Д.С. Королев, А.В. Калач // Современные проблемы математики. Методы, модели, приложения: сборник научных трудов международного молодежного симпозиума. ВГЛУ им. Г.Ф. Морозова 17-20 ноября 2015г. Воронеж. 2015. С. 223-225

102. 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 . – Т. 56, №5. – С. 3 – 6. DOI: 10.12737/16957

103. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В. Прогнозирование температуры вспышки с помощью нейропакета КДС 1.0 на примере сложных эфиров масляной кислоты / Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов // Пожаровзрывобезопасность.- 2016.- №3 – С. 21-26. DOI: 10.18322/PVB.2016.25.03.21-26

104. Королев Д.С., Калач А.В., Каргашилов Д.В. Определение времени эвакуации людей с применением метода прогнозирования, основанного на использовании дескрипторов и искусственных нейронных сетей/ Д.С. Королев, А.В. Калач, Д.В. Каргашилов // Вестник Командно-инженерного института МЧС Республики Беларусь. – 2016. - №2 (24) – С. 72-80

105 Королев Д.С., Калач А.В. Категорирование помещений на основе дескрипторов и метода нейронных сетей / Д.С. Королев, А.В. Калач // Научно-теоретический журнал «Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова.- 2015.- №5. - С. 210-213.

Приложение 1

УТВЕРЖДАЮ
ВрИО начальника ФГБОУ ВО
Воронежский институт ГПС
МЧС России
полковник внутренней службы

_____А.Н. Шуткин
«___» _____2017г.

АКТ ВНЕДРЕНИЯ

в образовательный процесс ФГБОУ ВО Воронежский институт ГПС МЧС России результатов диссертационного исследования Д.С. Королева «Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки для обеспечения пожарной и промышленной безопасности» на соискание ученой степени кандидата технических наук

Комиссия в составе:
председателя – начальника организационно-научного и редакционно-издательского отдела, кандидата технических наук, полковника внутренней службы Шимона Николая Степановича; заместителя председателя - начальника учебного отдела полковника внутренней службы Исаева Андрея Александровича; секретаря комиссии – заместителя начальника учебного отдела, полковника внутренней службы Зинченко Геннадия Александровича; членов комиссии: начальника кафедры пожарной безопасности технологических процессов, кандидата технических наук, полковника внутренней службы Каргашилова Дмитрия Валентиновича; профессора кафедры пожарной безопасности в строительстве, кандидата технических наук, доцента Сметанкиной Галины Июльевны составила настоящий акт о том, что методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтегазовой отрасли для обеспечения пожарной и промышленной безопасности успешно применяется в образовательном процессе Воронежского института ГПС МЧС России.

Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтегазовой отрасли на основе молекулярных дескрипторов в комплексе с методиками расчета категории помещений по взрывопожарной и пожарной опасности и расчета времени эвакуации людей при пожаре используются при проведении практических занятий по дисциплинам «Пожарная безопасность технологических процессов» по теме - «Пожарный риск для производственных объектов» и «Пожарная безопасность в строительстве» по теме - «Эвакуация людей из зданий и сооружений при пожаре». Авторская программа «Нейропакет КДС 1.0» обеспечивает прогнозирование пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, сведения о которых отсутствуют в справочной и нормативной литературе, а полученные результаты используются в дальнейших расчетах.

Методика выбора системы молниезащиты в комплексе с методикой прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей используется при проведении практических занятий по дисциплине «Пожарная безопасность электроустановок» по теме - «Защита зданий, сооружений и коммуникаций от статического и атмосферного электричества». Данная методика работает в симбиозе с авторской компьютерной программой «Молниезащита 1.0», что обеспечивает расчет основных параметров системы молниезащиты в режиме реального времени без проведения сложных вычислительных операций.

Использование результатов позволило повысить качество образовательного процесса по направлению специальности 20.05.01 – «Пожарная безопасность», 20.03.01 – «Техносферная безопасность» у студентов, курсантов очного обучения и слушателей заочного обучения.

Председатель комиссии:
Начальник организационно-научного
и редакционно-издательского отдела
полковник внутренней службы Н.С. Шимон

Заместитель председателя комиссии:
Начальник учебного отдела
полковник внутренней службы А.А. Исаев

Секретарь комиссии:
Заместитель начальника учебного отдела
полковник внутренней службы Г.А. Зинченко

Члены комиссии:
Начальник кафедры
пожарной безопасности
технологических процессов
полковник внутренней службы Д.В. Каргашилов

Профессор кафедры
пожарной безопасности в строительстве Г.И. Сметанкина

АКТ
о внедрении результатов
диссертационного исследования Д.С. Королева
«Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки для обеспечения пожарной и промышленной безопасности», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.26.03 – пожарная и промышленная безопасность (нефтегазовая отрасль)

Выдан Королеву Денису Сергеевичу о том, что результаты его диссертационного исследования «Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки для обеспечения пожарной и промышленной безопасности» рассмотрены на нормативно-техническом совете АО «Энергия» и применяются производственными участками предприятия с декабря 2016 г.

Применение результатов диссертационного исследования снизило экономические затраты на экспериментальное определение свойств веществ, используемых в производстве, повлияло на качество производимой продукции, позволило разработать и применить на практике ряд мероприятий, направленных на обеспечение пожарной безопасности производственных участков промышленного предприятия АО «Энергия».

Ген.директор АО «Энергия» *С.А. Мартынов.*

АКТ О ВНЕДРЕНИИ

ООО «ПрофТехноКонсалт»

394019, г. Воронеж, ул. Керамическая, 76
тел. (473) 227-12-86;
факс (473) 227-04-02
E-mail: proftehnokonsalt@yandex.ru
_____№_____

АКТ
о внедрении результатов
диссертационного исследования Д.С. Королева
«Методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки для обеспечения пожарной и промышленной безопасности», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.26.03 – пожарная и промышленная безопасность (нефтегазовая отрасль)

Нормативная комиссия ООО «ПрофТехноКонсалт» рассмотрела вопрос об использовании результатов диссертационного исследования Королева Дениса Сергеевича и установила следующее:

разработанная в рамках диссертационного исследования методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей для обеспечения пожарной и промышленной безопасности, реализуемая авторской программой «Нейропакет КДС 1.0» внедрена в корпоративную систему поддержки и принятия решений компании, и используется нашими специалистами в повседневной работе при определении расчетных величин пожарного риска на промышленных объектах.

Директор ООО «ПрофТехноКонсалт» **Е.В. Шкарупета**