

**Д. С. КОРОЛЕВ**, преподаватель кафедры пожарной безопасности технологических процессов, Воронежский институт ГПС МЧС России (Россия, 394052, г. Воронеж, ул. Краснознаменная, 231; e-mail: otrid@rambler.ru)

**А. В. КАЛАЧ**, д-р хим. наук, профессор, заместитель начальника по научной работе, Воронежский институт ГПС МЧС России (Россия, 394052, г. Воронеж, ул. Краснознаменная, 231)

**О. В. ЩЕРБАКОВ**, д-р техн. наук, профессор, профессор кафедры прикладной математики и информационных технологий, Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России (Россия, 196105, г. Санкт-Петербург, Московский просп., 149)

УДК 614.84

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДИКИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОЖАРООПАСНЫХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ ДЛЯ ОБОСНОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО КЛАССА ВЗРЫВОЗАЩИЩЕННОГО ЭЛЕКТРООБОРУДОВАНИЯ

Показано, что одной из важнейших характеристик взрывозащищенного оборудования является его температурный класс. Установлено, что на определение температурного класса влияет температура самовоспламенения. Ввиду сложности экспериментального нахождения этого показателя пожаровзрывобезопасности предложено использовать методику прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. Верификацию предлагаемой методики проводили на примере прогнозирования температуры самовоспламенения кислородсодержащих предельных углеводородов, в частности сложных эфиров пропионовой кислоты. Установлено, что среднее значение абсолютной погрешности при прогнозировании составило 6,25 °С, а относительной погрешности — 2 %. Сделан вывод, что методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки позволяет определять основные показатели пожаровзрывоопасности свойств веществ с приемлемой точностью, что дает возможность установить температурный класс взрывозащищенного электрооборудования.

**Ключевые слова:** прогнозирование; молекулярные дескрипторы; искусственные нейронные сети; эфиры; оборудование.

**DOI:** 10.18322/PVB.2017.26.06.21-30

### Введение

В то время как совершенствуются технологии, все больше легковоспламеняющихся материалов используется в нефтеперерабатывающих отраслях промышленности. В связи с этим для безопасного обращения с опасными веществами необходимо применять соответствующее взрывобезопасное электрическое оборудование [1].

Допустимая максимальная температура поверхности этого оборудования является одной из важнейших характеристик, определяющих степень их защиты. Немаловажную роль при этом играет также температура самовоспламенения используемых в производстве веществ и материалов. Например, в одном из основных нормативных документов [2] представлена классификация взрывозащищенного электрооборудования, основанная на температуре

самовоспламенения вещества. В [2] указывается минимальная температура, при которой вещество может воспламениться в воздухе при атмосферном давлении без воздействия внешнего источника зажигания, такого как искра или пламя. Следовательно, спонтанное возгорание веществ будет оказывать негативное влияние на людей, которые их транспортируют, хранят и используют.

Основной задачей настоящего исследования была разработка методики, позволяющей прогнозировать пожароопасные свойства продуктов нефтепереработки в режиме реального времени без проведения сложных технических операций [3].

### Методология

Одним из перспективных направлений является методика прогнозирования пожароопасных свойств

продуктов нефтепереработки, основанная на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, которая успешно была применена нами ранее [4–7].

Предлагаемая методика лишена таких проблем, как большие временные и ресурсные затраты, сложности при расчетах, и позволяет в режиме реального времени без прерывания процесса прогнозировать пожароопасные свойства продуктов нефтепереработки.

Данная методика широко применяется для прогнозирования таких показателей пожаровзрывоопасности продуктов нефтепереработки, как: низшая теплота сгорания, массовая скорость выгорания, удельная скорость пламени, используемые в расчетах пожарного риска; максимальное давление взрыва, применяемое в расчетах по определению категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности, и др.

Ниже описана процедура реализации предлагаемой методики.

1. *Загрузка базы данных.* База данных представляет собой молекулярные дескрипторы, описывающие строение молекулы вещества.

2. *Определение параметров сети.* На данном этапе устанавливают количество слоев, их размеры, а также номера для текущих слоев  $i = 0$ .

3. *Построение сети для слоев  $i, i + 1$ .* Множество сигналов, поступающих на вход искусственного нейрона, одновременно являются и выходом нейрона, и входным сигналом искусственной нейронной сети. Величина входящего сигнала умножается на поправочный коэффициент, так называемый вес, который аналогичен синаптической силе биологического нейрона. Затем с помощью коэффициентов определяется параметр, влияющий на состояние

нейрона. Все произведения суммируются, и по полученной сумме устанавливается уровень активации нейрона  $s$ .

Состояние нейрона определяется по формуле

$$S = \sum_{i=1}^n \varphi_i w_i, \quad (1)$$

где  $\varphi_i$  — множество сигналов, поступающих на вход;  
 $w_i$  — весовые коэффициенты нейрона.

4. *Обучение сети на наборе  $X_i$ .* Обучение искусственной нейронной сети проводится методом градиентного спуска, т. е. на каждой итерации изменение веса определяется по формуле

$$W(t+1) = W(t) + e + \frac{de}{dw}, \quad (2)$$

где  $W(t)$  — функция состояния;  
 $e$  — коэффициент обучения.

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 параметров сети.*

В целях реализации предлагаемой методики прогнозирования была разработана оригинальная объектно-ориентированная компьютерная программа “Нейропакет КДС 1.0” [8].

Работоспособность программы основывается на проектировании персептрона, который адекватно реагирует на предоставленные примеры (молекулярные дескрипторы изученных веществ). Причем при увеличении числа нейронов внутреннего слоя персептрона погрешность обучения обычно падает. На рис. 1 схематически показана работа программы.

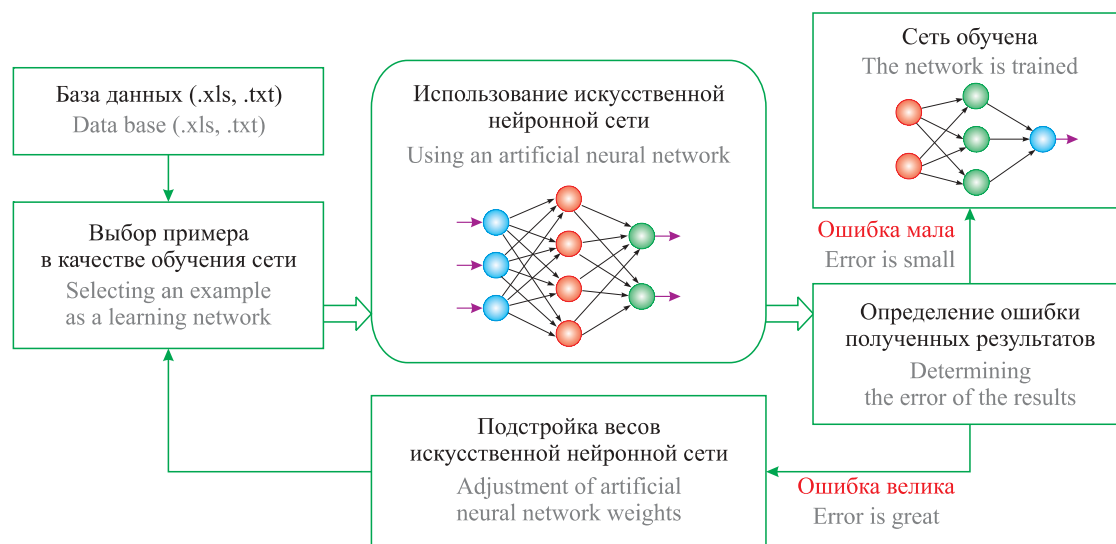


Рис. 1. Процесс работы компьютерной программы “Нейропакет КДС 1.0”

Fig. 1. The work of the computer program “NeuroPacket KDS 1.0”

Более детально работа авторской компьютерной программы “Нейропакет КДС 1.0” базируется на алгоритме, представленном на рис. 2.

В табл. 1 приведены данные, использованные в качестве исходной базы для нашего исследования. Это показатели физико-химических и пожароопасных свойств сложных эфиров пропионовой кислоты, взятые из электронных баз данных и справочной литературы [9–11] и представляющие собой молекулярный дескриптор.

Молекулярный дескриптор — это некоторая величина, которая представляет собой числовое значе-

ние и содержит закодированную информацию о физико-химических свойствах вещества [12]. На рис. 3 приведена классификация основных молекулярных дескрипторов, применяемых в прогнозировании пожароопасных свойств соединений.

Для описания строения молекул исследуемых соединений применяли дескрипторы структурной формулы — топологические индексы (индексы Винера  $W$  и Рандича  $\chi$ ) и геометрические дескрипторы (площадь поверхности молекулы  $S$ , гравитационные индексы  $G_1$  (всех связей) и  $G_2$  (всех пар)). Указанные дескрипторы были выбраны на основе

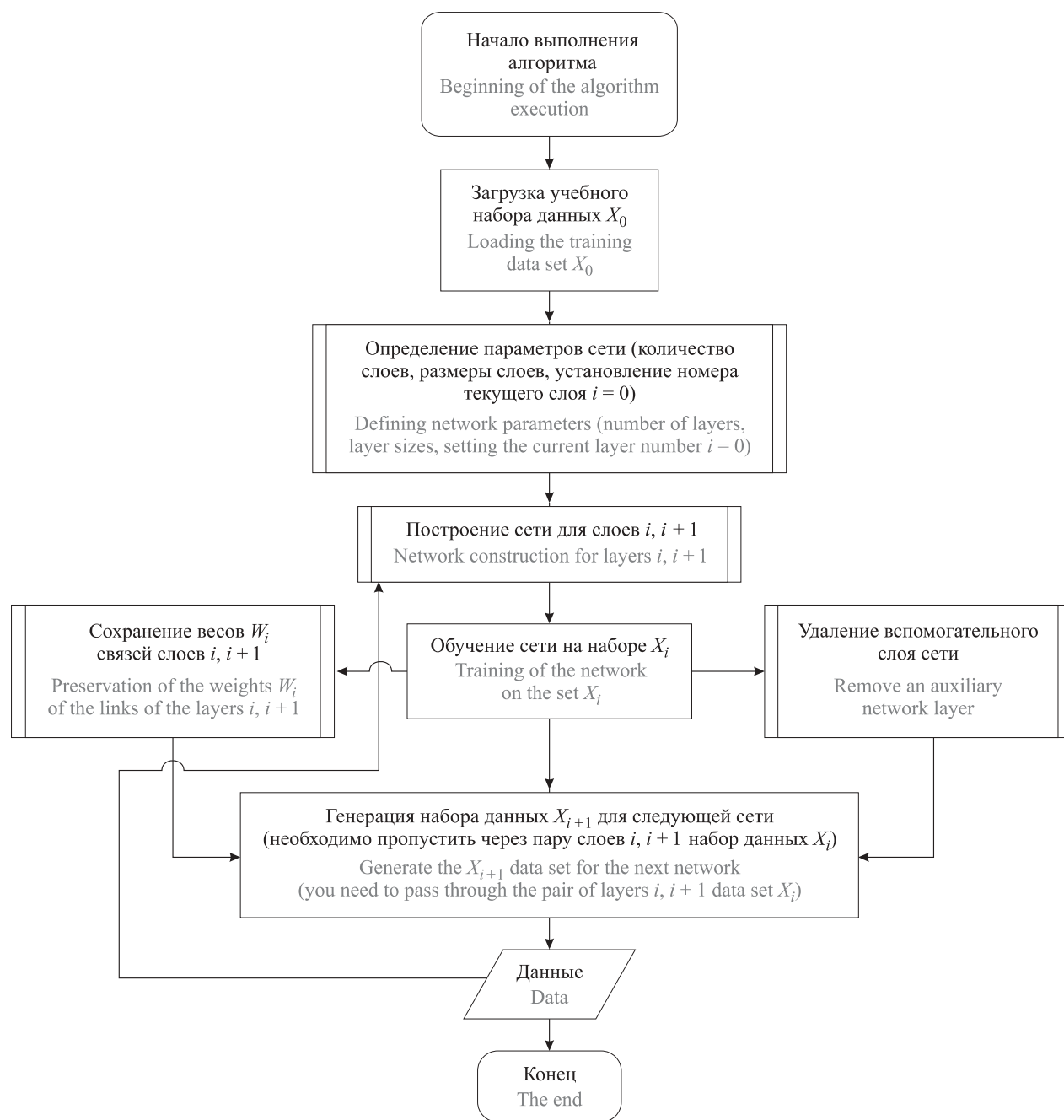


Рис. 2. Алгоритм работы компьютерной программы “Нейропакет КДС 1.0”

Fig. 2. Algorithm of the computer program “Neuropacket KDS 1.0”

**Таблица 1.** Справочные и расчетные физико-химические и пожароопасные свойства сложных эфиров пропионовой кислоты  
**Table 1.** Reference and calculated physico-chemical and fire-hazardous properties of propionic acid esters

Дескрипторы структурной формулы вещества Descriptors of the structural formula of substance	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Число атомов Number of atoms	10	9	11	15	10	9	8	6
Число атомов С Number of C atoms	8	7	9	13	8	7	6	4
Относительное число атомов С Relative number of C atoms	0,8	0,7778	0,8182	0,8667	0,8	0,7778	0,75	0,6667
Число атомов О Number of O atoms	2	0	2	2	0	2	2	2
Относительное число атомов О Relative number of O atoms	0,2	0	0,1818	0,1333	0	0,2222	0,25	0,3333
Количество связей Number of bonds	9	2	10	14	2	8	7	5
Количество одиночных связей Number of single bonds	8	0,2222	9	13	0,2	7	6	4
Относительное число одиночных связей Relative number of single bonds	0,8889	8	0,9	0,9286	9	0,875	0,8571	0,8
Число двойных связей Number of double bonds	1	7	1	1	8	1	1	1
Относительное число двойных связей Relative number of double bonds	0,1111	0,875	0,1	0,0714	0,8889	0,125	0,1429	0,2
Молекулярный вес Molecular weight	128,086	1	140,09	188,14	1	116,07	104,06	80,042
Относительный молекулярный вес Relative molecular weight	12,8086	0,125	12,736	12,542	0,1111	12,897	13,008	13,340
Гравитационный индекс связей Gravitation index (all bonds)	835,311	116,07	897,55	1220,7	128,08	733,57	651,69	527,61
Гравитационный индекс пар Gravitation index (all pairs)	1428,9	12,897	1528,7	2071,5	12,808	1317,6	1176,8	876,98
Индекс Винера Wiener index	153	733,60	206	538	814,78	104	71	31
Индекс Рандича (0-го порядка) Randic index (order 0)	7,82	1269,9	8,5271	11,355	1438,7	7,276	6,5689	4,9916
Индекс Рандича (1-го порядка) Randic index (order 1)	4,8081	110	5,3081	7,3081	146	4,1639	3,6639	2,8081
Индекс Рандича (2-го порядка) Randic index (order 2)	3,3628	7,1129	3,7163	5,1305	7,9831	3,4846	3,143	1,9217
Индекс Рандича (3-го порядка) Randic index (order 3)	2,2474	4,3081	2,4974	3,4974	4,6639	1,9337	1,5707	1,3938
Индекс Киер-Хола (0-го порядка) Kier & Hall index (order 0)	4,8165	3,0092	5,3165	7,3165	3,8382	4,3165	3,8165	2,8165
Индекс Киер-Хола (1-го порядка) Kier & Hall index (order 1)	2,1124	1,9974	2,3624	3,3624	2,1753	1,8624	1,6124	1,1124
Индекс Киер-Хола (2-го порядка) Kier & Hall index (order 2)	0,9916	4,3165	1,1166	1,6166	4,8165	0,9916	0,8436	0,5145
Индекс Киер-Хола (3-го порядка) Kier & Hall index (order 3)	0,4218	1,8624	0,4843	0,7343	2,1124	0,3479	0,2968	0,1948
Индекс формы Киера (1-го порядка) Kier shape index (order 1)	9,63	0,8666	10,63	14,63	1,1166	8,63	7,63	5,63

Дескрипторы структурной формулы вещества Descriptors of the structural formula of substance	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Форма Киера (2-го порядка) Kier shape index (order 2)	6,7459	0,3593	7,7338	11,703	0,4218	4,5033	3,6098	2,846
Форма Киера (3-го порядка) Kier shape index (order 3)	6,63	8,63	7,5276	11,557	9,63	5,5019	4,63	2,63
Индекс гибкости Киера Kier flexibility index	6,4963	5,7611	7,4737	11,414	5,4176	4,3182	3,4428	2,6705
Среднее информационное содержание (0-го порядка) Average information content (order 0)	1,961	5,5019	1,8676	1,5589	6,63	2,1972	2,1556	2,2516
Информационное содержание (0-го порядка) Information content (order 0)	19,6096	5,5242	20,544	23,384	5,2172	19,774	17,245	13,509
Среднее структурное информационное содержание (0-го порядка) Average complementary information content (order 0)	0,5903	2,0588	0,5399	0,399	2,171	0,6931	0,7185	0,871
Структурное информационное содержание (0-го порядка) Complementary information content (order 0)	5,9031	18,529	5,9385	5,9853	21,709	6,2381	5,7484	5,2263
Среднее дополнительное информационное содержание (0-го порядка) Average bonding information content (order 0)	1,361	0,6495	1,5918	2,348	0,6535	0,9728	0,8444	0,3333
Дополнительное информационное содержание (0-го порядка) Bonding information content (order 0)	13,6096	5,8454	17,509	35,219	6,5352	8,7549	6,7549	2
Среднее содержание информации о соеди- нении (0-го порядка) Bonding information content (order 0)	0,6186	1,1111	0,5622	0,4095	1,151	0,7324	0,7679	0,9697
Соединение информационного содержания (0-го порядка) Bonding information content (order 0)	6,1862	10	6,1844	6,1418	11,509	6,5915	6,1428	5,8183
Среднее информационное содержание (1-го порядка) Average information content (order 1)	2,9219	0,6863	2,8454	2,4635	0,6849	2,9477	2,75	2,585
Информационное содержание (1-го порядка) Information content (order 1)	29,2193	6,1764	31,298	36,951	6,8486	26,529	22	15,509
Среднее структурное информационное содержание (1-го порядка) Average structural information content (order 1)	0,8796	2,9477	0,8225	0,6305	3,1219	0,9299	0,9167	1
Структурное информационное содержание (1-го порядка) Structural information content (order 1)	8,80	26,53	9,05	9,46	31,22	8,37	7,33	6,00
Среднее дополнительное информационное содержание (1-го порядка) Average complementary information content (order 1)	0,40	0,93	0,61	1,44	0,94	0,22	0,25	0,00
Дополнительное информационное содержание (1-го порядка) Complementary information content (order 1)	4,00	8,37	6,75	21,65	9,40	2,00	2,00	0,00
Среднее содержание информации о соеди- нении (1-го порядка) Average bonding information content (order 1)	0,92	0,22	0,86	0,65	0,20	0,98	0,98	1,11

Дескрипторы структурной формулы вещества Descriptors of the structural formula of substance	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Соединение информационного содержания (1-го порядка) Bonding information content (order 1)	9,22	2,00	9,42	9,71	2,00	8,84	7,84	6,68
Среднее информационное содержание (2-го порядка) Average information content (order 2)	3,32	0,98	3,46	3,13	0,98	2,95	2,75	2,59
Информационное содержание (2-го порядка) Information content (order 2)	33,22	8,84	38,05	46,99	9,85	26,53	22,00	15,51
Среднее структурное информационное содержание (2-го порядка) Average structural information content (order 2)	1,00	3,17	1,00	0,80	3,12	0,93	0,92	1,00
Структурное информационное содержание (2-го порядка) Structural information content (order 2)	10,00	28,53	11,00	12,03	31,22	8,37	7,33	6,00
Момент инерции А Moment of inertia A	0,59	9,51	0,41	0,36	9,85	0,30	0,33	0,72
Момент инерции В Moment of inertia B	0,02	2,97	0,01	0,00	3,12	0,03	0,05	0,10
Момент инерции С Moment of inertia C	0,02	0,63	0,01	0,00	0,29	0,03	0,04	0,09

П р и м е ч а н и е. I — амилпропионат; II — бутилпропионат; III — гексилпропионат; IV — децилпропионат; V — изоамилпропионат; VI — третбутилпропионат; VII — пропилпропионат; VIII — метилпропионат.

N o t e . I — amyl propionate; II — butyl propionate; III — hexyl propionate; IV — decyl propionate; V — isoamyl propionate; VI — tert-butyl propionate; VII — propyl propionate; VIII — methyl propionate.



Рис. 3. Классификация основных молекулярных дескрипторов

Fig. 3. Classification of basic molecular descriptors



**Таблица 2.** Результаты прогнозирования температуры самовоспламенения**Table 2.** Results of predicting the autoignition temperature

Исследуемое вещество The test substance	Температура самовоспламенения, °C Autoignition temperature		$\Delta$ , °C	Относительная погрешность, % Relative error, %	Температурный класс [1] Temperature class [1]
	[5, 6]	прогнозируемая projected			
Амилпропионат / Amyl propionate	300	305	5	1,6	T1, T2
Бутилпропионат / Butyl propionate	385	391	6	1,5	T1, T2
Гексилпропионат / Hexyl propionate	260	270	10	3,8	T1–T3
Децилпропионат / Decyl propionate	–	300	–	–	T3
Изоамилпропионат / Isoamyl propionate	395	387	8	2	T1, T2
Изобутилпропионат / Isobutyl propionate	435	435	–	–	T1, T2
Изопропилпропионат / Isopropyl propionate	425	417	8	1,8	T1, T2
Метилпропионат / Methyl propionate	455	438	17	3,7	T1, T2
Октилпропионат / Octyl propionate	230	247	17	7,3	T1–T3
Пропилпропионат / Propyl propionate	–	248	–	–	T1–T3
Третбутилпропионат / Tert-butyl propionate	–	257	–	–	T1–T3
Этилпропионат / Ethyl propionate	440	444	4	0,9	T1

сопоставления закономерностей изменения температуры вспышки в зависимости от строения молекул вещества [13].

Выбор данных веществ для анализа обусловлен широким спектром применения их во всех отраслях промышленности, а также их высокой пожарной опасностью.

Как видно из данных, приведенных в табл. 1, с увеличением длины углеводородного радикала соединения наблюдается возрастание гравитационных индексов, индексов Винера и Рандича.

### Результаты и их обсуждение

В ходе процесса прогнозирования пожароопасных свойств сложных эфиров пропионовой кислоты определяли их температуру самовоспламенения. В табл. 2 представлены полученные результаты и возможный температурный класс взрывозащищенного электрооборудования.

Из данных табл. 2 видно, что с уменьшением числа атомов углерода в структурной формуле исследуемого вещества температура самовоспламенения возрастает.

Кроме того, анализируя полученные данные, можно сделать вывод, что средняя абсолютная погрешность прогноза составляет 6,25 °C, а относительная погрешность не превышает 2 %, что является хорошим показателем.

### Выводы

Таким образом, в результате исследования показана работоспособность методики, позволяющей прогнозировать пожароопасные свойства продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей, сведения о которых отсутствуют в справочной и нормативной литературе. По сравнению с другими существующими общеизвестными моделями прогнозирования свойств веществ данная методика состоит из большого набора данных и позволяет предсказывать с приемлемой точностью значения параметров, которые выдерживают сравнение с экспериментальными данными.

На основании полученных значений температуры самовоспламенения определяли минимальный температурный класс взрывозащищенного электрооборудования, обеспечивающий его надежную работу в определенной зоне.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ngoc Lan Mai, Yoon-Mo Koo. Quantitative prediction of lipase reaction in ionic liquids by QSAR using COSMO-RS molecular descriptors // *Biochemical Engineering Journal*. — 2014. — Vol. 87. — P. 33–40. DOI: 10.1016/j.bej.2014.03.010.
2. Правила устройства электроустановок (ПУЭ). — 6-е изд. — СПб.: Изд-во ДЕАН, 2003. — 928 с.
3. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V. P. Substructural fragments: an universal language to encode reactions, molecular and supramolecular structures // *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. — 2005. — Vol. 19, No. 9-10. — P. 693–703. DOI: 10.1007/s10822-005-9008-0.

4. Королев Д. С., Калач А. В., Каргашилов Д. В. Прогнозирование температуры вспышки с помощью нейропакета КДС 1.0 на примере сложных эфиров масляной кислоты // Пожаровзрывобезопасность. — 2016. — Т. 25, № 3. — С. 21–26. DOI: 10.18322/PVB.2016.25.03.21-26.
5. Королев Д. С., Калач А. В., Сорокина Ю. Н. Сравнительный анализ способов прогнозирования физико-химических свойств веществ // Вестник Командно-инженерного института МЧС Республики Беларусь. — 2016. — № 1(23). — С. 78–84.
6. Королев Д. С., Калач А. В. Категорирование помещений на основе дескрипторов и метода нейронных сетей // Вестник Белгородского государственного технологического университета им. В. Г. Шухова. — 2015. — № 5. — С. 210–213.
7. 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. 70–73.
8. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016614070. Нейропакет КДС 1.0 / Королев Д. С., Калач А. В., Каргашилов Д. В., Жучков А. В.; правообладатель ФГБОУ ВО Воронежский институт ГПС МЧС России. — № 2016611455; заявл. 24.02.2016; опубл. 20.05.2016.
9. Корольченко А. Я., Корольченко Д. А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения : справочник. — В 2 ч. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Пожнаука, 2004. — Ч. I. — 713 с.
10. Корольченко А. Я., Корольченко Д. А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения : справочник. — В 2 ч. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Пожнаука, 2004. — Ч. II. — 774 с.
11. Алексеев С. Г., Смирнов В. В., Алексеев К. С., Барбин Н. М. Температура вспышки. Часть III. Методы расчета через температуру кипения // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 3. — С. 30–43.
12. Baskin I., Varnek A. Building a chemical space based on fragment descriptors // Combinatorial Chemistry and High Throughput Screening. — 2008. — Vol. 11, No. 8. — P. 661–668. DOI: 10.2174/138620708785739907.
13. Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Смирнов В. В., Барбин Н. М. Температура вспышки. Часть IV. Дескрипторный метод расчета // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 5. — С. 18–37.

*Материал поступил в редакцию 2 мая 2017 г.*

**Для цитирования:** Королев Д. С., Калач А. В., Щербаков О. В. Применение методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов для обоснования температурного класса взрывозащищенного электрооборудования // Пожаровзрывобезопасность / Fire and Explosion Safety. — 2017. — Т. 26, № 6. — С. 21–30. DOI: 10.18322/PVB.2017.26.06.21-30.

English

## APPLICATION OF METHODS OF FORECASTING FIRE HAZARD PROPERTIES OF REFINED PETROLEUM PRODUCTS ON THE BASIS OF MOLECULAR DESCRIPTORS FOR THE JUSTIFICATION OF TEMPERATURE CLASS OF EXPLOSION-PROOF ELECTRICAL EQUIPMENT

**KOROLEV D. S.**, Lecturer of Fire Safety Technological Processes  
Department, Voronezh Institute of State Firefighting Service  
of Emercom of Russia (Krasnoznamennaya St., 231, Voronezh, 394052,  
Russian Federation; e-mail: otrid@rambler.ru)

**KALACH A. V.**, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Deputy Head  
of Institute for Research, Voronezh Institute of State Firefighting Service  
of Emercom of Russia (Krasnoznamennaya St., 231, Voronezh, 394052,  
Russian Federation)

**SHCHERBAKOV O. V.**, Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor  
of Department of Applied Mathematics and Information Technologies,  
Saint Petersburg University of State Fire Service of Emercom of Russia  
(Moskovskiy Avenue, 149, Saint Petersburg, 196105, Russian Federation)



## ABSTRACT

The article raises the topical issue — the lack of physical and chemical properties of new synthesized substances. These properties will allow supervisors to develop fire safety systems at security facilities. The efficiency of such systems is achieved by eliminating the combustible environment or the ignition source.

Using the example of esters of butyric acid, which are used practically in all areas of industry and produced according to reference data in the amount of more than several tens of millions of tons per year, it was possible to predict one of the most important fire hazard properties of a substance — the self-ignition temperature, using the technique for predicting the fire hazard properties of refined products based on molecular descriptors and artificial neural networks. The proposed methodology is implemented with the help of the author's computer program "NeuroPacket KDS 1.0".

The program "NeuroPacket KDS 1.0" allows you to: download and view databases containing chemical compound structures and their properties; to correlate the input data; statistically evaluate the resulting models; use the obtained neuronet models to predict the properties of substances without conducting a complex experiment.

This approach to predicting the fire hazard property of oil refining products describes the structure of the molecule with the help of molecular descriptors and establishes quantitative correlations between the values found using artificial neural networks.

Based on some reference data, data was verified. Analysis of the results obtained showed that the average relative error does not exceed 3 %, which is a good indicator.

In addition, the autoignition temperature of esters of butyric acid was predicted, information on which is absent in the reference and regulatory literature. This makes it possible to build on the values obtained in the development of fire safety systems.

Based on the obtained results on the self-ignition temperature of the substance, there were determined the temperature classes of the explosion-proof electrical equipment, which, on the whole, ensures fulfillment of item 4, article 50 of the "Technical Regulations on Fire Safety Requirements" (Federal Law No. 123).

It is also worth noting that the methodology for predicting the fire-hazardous properties of oil refining products based on the use of molecular descriptors and artificial neural networks allows us to conclude that this technique can be used to predict other fire-hazardous properties of organic substances.

**Keywords:** prediction; molecular descriptors; artificial neural network; ethers; equipment.

## REFERENCES

1. Ngoc Lan Mai, Yoon-Mo Koo. Quantitative prediction of lipase reaction in ionic liquids by QSAR using COSMO-RS molecular descriptors. *Biochemical Engineering Journal*, 2014, vol. 87, pp. 33–40. DOI: 10.1016/j.bej.2014.03.010.
2. *Electrical Installation Regulations*. Saint Petersburg, DEAN Publ., 2003. 928 p. (in Russian).
3. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V. P. Substructural fragments: an universal language to encode reactions, molecular and supramolecular structures. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 2005, vol. 19, no. 9-10, pp. 693–703. DOI: 10.1007/s10822-005-9008-0.
4. Korolev D. S., Kalach A. V., Kargashilov D. V. Forecasting of flash point by means of KDS 1.0 neuro-package on the example of esters of oleic acid. *Pozharovzryvobezopasnost / Fire and Explosion Safety*, 2016, vol. 25, no. 3, pp. 21–26 (in Russian). DOI: 10.18322/PVB.2016.25.03.21-26.
5. Korolev D. S., Kalach A. V., Sorokina Yu. N. Comparative analysis of methods of forecasting of physical and chemical properties of substances. *Vestnik Komandno-inzhenerenogo instituta MChS Respubliki Belarus / Herald of Command and Engineering Institute of MES of Belarus*, 2016, no. 1(23), pp. 78–84 (in Russian).
6. Korolev D. S., Kalach A. V. Categorization of premises on the basis descriptors and neural network method. *Vestnik Belgorodskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta im. V. G. Shukhova / Bulletin of Belgorod State Technological University named after V. G. Shukhov*, 2015, no. 5, pp. 210–213 (in Russian).
7. Kalach A. V., Kartashova T. V., Sorokina Yu. N., Oblienko M. V. Prediction of fire hazardous properties of organic compounds using descriptors. *Pozharnaya bezopasnost / Fire Safety*, 2013, no. 1, pp. 70–73 (in Russian).

8. Korolev D. S., Kalach A. V., Kargashilov D. V., Zhuchkov A. V. *KDS 1.0 neuropackage*. Proof of the computer program of state registration, no. 201614070, publ. date 20.05.2016 (in Russian).
9. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvoopasnost veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya: spravochnik*. 2-e izd. [Fire and explosion hazard of substances and materials and their means of extinguishing. Reference book. 2<sup>nd</sup> ed.]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004. Part I. 713 p. (in Russian).
10. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvoopasnost veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya: spravochnik*. 2-e izd. [Fire and explosion hazard of substances and materials and their means of extinguishing. Reference book. 2<sup>nd</sup> ed.]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004. Part II. 774 p. (in Russian).
11. Alexeev S. G., Smirnov V. V., Alexeev K. S., Barbin N. M. Flash point. Part III. Calculation via a boiling temperature. *Pozharovzryvobezopasnost / Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 3, pp. 30–43 (in Russian).
12. Baskin I., Varnek A. Building a chemical space based on fragment descriptors. *Combinatorial Chemistry and High Throughput Screening*, 2008, vol. 11, no. 8, pp. 661–668. DOI: 10.2174/138620708785739907.
13. Alexeev S. G., Alexeev K. S., Smirnov V. V., Barbin N. M. Flash point. Part IV. The descriptors method. *Pozharovzryvobezopasnost / Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 5, pp. 18–37 (in Russian).

**For citation:** Korolev D. S., Kalach A. V., Shcherbakov O. V. Application of methods of forecasting fire hazard properties of refined petroleum products on the basis of molecular descriptors for the justification of temperature class of explosion-proof electrical equipment. *Pozharovzryvobezopasnost / Fire and Explosion Safety*, 2017, vol. 26, no. 6, pp. 21–30 (in Russian). DOI: 10.18322/PVB.2017.26.06.21-30.



## Издательство «ПОЖНАУКА»

Представляет книгу



### Д. Г. Пронин, Д. А. Корольченко ДЕЛЕНИЕ ЗДАНИЙ НА ПОЖАРНЫЕ ОТСЕКИ : учебное пособие.

— М. : Издательство "ПОЖНАУКА", 2014. — 40 с. : ил.

В учебном пособии изложены базовые основы, действующие требования и современные представления о целях, задачах и способах ограничения распространения пожара по зданиям и сооружениям путем их разделения на пожарные отсеки.

Пособие предназначено для студентов Московского государственного строительного университета. Оно может быть использовано также другими образовательными учреждениями и практическими работниками, занимающимися вопросами обеспечения пожарной безопасности.

121352, г. Москва, а/я 43; тел./факс: (495) 228-09-03; e-mail: info@fire-smi.ru