

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; e-mail: a_kalach@mail.ru)

А. С. КРУТОЛАПОВ, д-р техн. наук, доцент, заместитель начальника Института развития по учебно-методической работе, Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России (Россия, 196105, г. Санкт-Петербург, Московский просп., 149)

Д. С. КОРОЛЕВ, преподаватель кафедры пожарной безопасности технологических процессов, Воронежский институт ГПС МЧС России (Россия, 394052, г. Воронеж, ул. Краснознаменная, 231)

Е. В. КАЛАЧ, канд. техн. наук, доцент кафедры физики, Воронежский институт ГПС МЧС России (Россия, 394052, г. Воронеж, ул. Краснознаменная, 231; e-mail: EVKalach@gmail.com)

УДК 614.849

РАСЧЕТ КАТЕГОРИИ ПОМЕЩЕНИЯ НА ОСНОВЕ МЕТОДИКИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОЖАРООПАСНЫХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

Проанализирована базовая методика расчета категории помещений по взрывопожарной и пожарной опасности. Установлено, что она является ограниченной ввиду отсутствия в ней достоверных справочных данных, в частности по максимальному давлению взрыва вещества, что влияет на конечный результат избыточного давления. Принято решение усовершенствовать ее путем внедрения методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей. В качестве верификации спрогнозировано максимальное давление взрыва для ряда кислородсодержащих производных углеводородов и проведен расчет категории с учетом полученных значений. Установлено, что вновь полученные значения избыточного давления ниже заявленных, а следовательно, финансовые затраты на разработку системы обеспечения пожарной безопасности также будут снижены.

Ключевые слова: прогнозирование; пожароопасные свойства; нефтепереработка; пожарная безопасность; легковоспламеняющиеся жидкости; нейронные сети.

DOI: 10.18322/PVB.2017.26.09.29-34

Введение

При проектировании новых промышленных предприятий, складских и лабораторных помещений объектов нефтегазовой отрасли, в которых применяются или хранятся легковоспламеняющиеся жидкости (ЛВЖ), должен проводиться расчет избыточного давления возможного взрыва. Значение данного показателя позволит определить категорию помещения по взрывопожарной и пожарной опасности.

Основной целью такой классификации является выбор системы обеспечения пожарной безопасности, т. е. определение требований, обеспечивающих предотвращение вероятности возникновения пожара, а также обеспечение противопожарной защиты людей и имущества в случае возникновения пожара в зданиях, сооружениях и помещениях нефтегазового сектора [1].

Для расчета избыточного давления ΔP (кПа) газо- и паровоздушных смесей в сводах правил [2] предлагается следующее выражение:

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

где $P_{\max}$ — максимальное давление, развиваемое при сгорании стехиометрической газо- или паровоздушной смеси в замкнутом объеме, определяемое экспериментально или по справочным данным в соответствии с требованиями; при отсутствии данных допускается принимать $P_{\max} = 900$ кПа; P_0 — начальное давление, кПа; допускается принимать $P_0 = 101$ кПа [2]; m — масса горючих паров ЛВЖ или горючих жидкостей (ГЖ), кг;

Z — коэффициент участия горючих газов и паров в горении; для ЛВЖ $Z = 0,3$ [2];

$V_{\text{св}}$ — свободный объем помещения, м^3 ;

$\rho_{\text{п}}$ — плотность пара ЛВЖ при расчетной рабочей температуре $t_{\text{р}}$ ($^{\circ}\text{C}$), $\text{кг}/\text{м}^3$;

$$\rho_{\text{п}} = \frac{M}{V_0 (1 + 0,00367 t_{\text{р}})};$$

V_0 — мольный объем, $\text{м}^3/\text{кмоль}$;

$V_0 = 22,413 \text{ м}^3/\text{кмоль}$ [2];

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

$K_{\text{н}}$ — безразмерный коэффициент, учитывающий негерметичность помещения и неадиабатичность процесса горения; $K_{\text{н}} = 3$ [2].

Отметим, что проведение расчетов по каждому случаю достаточно трудоемкая задача, которая была решена нами в работе [3]. К тому же данная методика может быть ограниченной в связи с отсутствием достоверных справочных данных по физико-химическим свойствам веществ, используемых при расчете категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности.

На сегодняшний день известно свыше 100 млн. индивидуальных органических веществ. Однако их пожароопасные свойства изучены частично и лишь для нескольких тысяч кислородсодержащих органических соединений. Это связано в первую очередь с тем, что затраты на экспериментальное определение полного перечня пожароопасных характеристик для каждого вещества существенны [2].

В настоящее время для решения задачи, связанной с достоверным определением категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности, применяются различные расчетные методы, позволяющие прогнозировать пожароопасные свойства веществ, и в первую очередь нефтепродуктов и продуктов нефтепереработки, что не противоречит требованиям законодательства Российской Федерации [1]. Расчетные методы могут рассматриваться как альтернатива экспериментальному подходу к накоплению данных по показателям пожарной опасности веществ и материалов. Федеральный закон № 123-ФЗ и ГОСТ 12.1.044, входящий в перечень национальных стандартов на подтверждение положений “Технического регламента о требованиях пожарной безопасности”, допускают такой путь решения этой проблемы.

Рассматривая современные расчетные методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки [4], установили, что все они связаны с техническими трудностями, сложностью решения аппроксимационных уравнений и работают только в пределах одного класса рассматриваемых органических соединений [5, 6]. В связи с этим необходимость создания нового конкуренто-

способного подхода для расчета пожаровзрывоопасных свойств кислородсодержащих органических соединений является актуальной.

В качестве альтернативы существующим методам было решено использовать методику прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов [7, 8] и искусственных нейронных сетей [9, 10].

Основной целью исследования является прогнозирование максимального давления взрыва продуктов нефтепереработки, а основной задачей — определение категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности с учетом спрогнозированных значений.

В качестве объектов исследования выбраны кислородсодержащие производные предельных углеводородов, обращающиеся в нефтегазовой отрасли. Так, кетоны применяются для депарафинизации нефтепродуктов и характеризуются особой пожарной опасностью.

Методология

Одним из перспективных направлений является методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки, основанная на использовании молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей.

Предлагаемая методика лишена таких проблем, как большие временные и ресурсные затраты, сложности при расчетах. Кроме того, она позволяет в режиме реального времени без прерывания процесса прогнозировать пожароопасные свойства продуктов нефтепереработки. Схематически данная методика представлена на рис. 1.

Условный сценарий реализации предлагаемой методики включает в себя четыре основных этапа:

- *этап 1:* анализ технической документации на объект защиты и технологический процесс, осуществляемый в помещении;
- *этап 2:* определение наиболее пожаровзрывоопасного вещества, используемого на объекте защиты, и установление его пожароопасных характеристик;
- *этап 3:* расчет избыточного давления и определение категории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности;
- *этап 4:* формирование полученных результатов.

С помощью программного комплекса CODESSA PRO для обучающей выборки рассчитано 38 типологических дескрипторов. На основе критического анализа полученных корреляционных зависимостей этих дескрипторов были рассчитаны значения максимального давления взрыва, представленные в табл. 1.

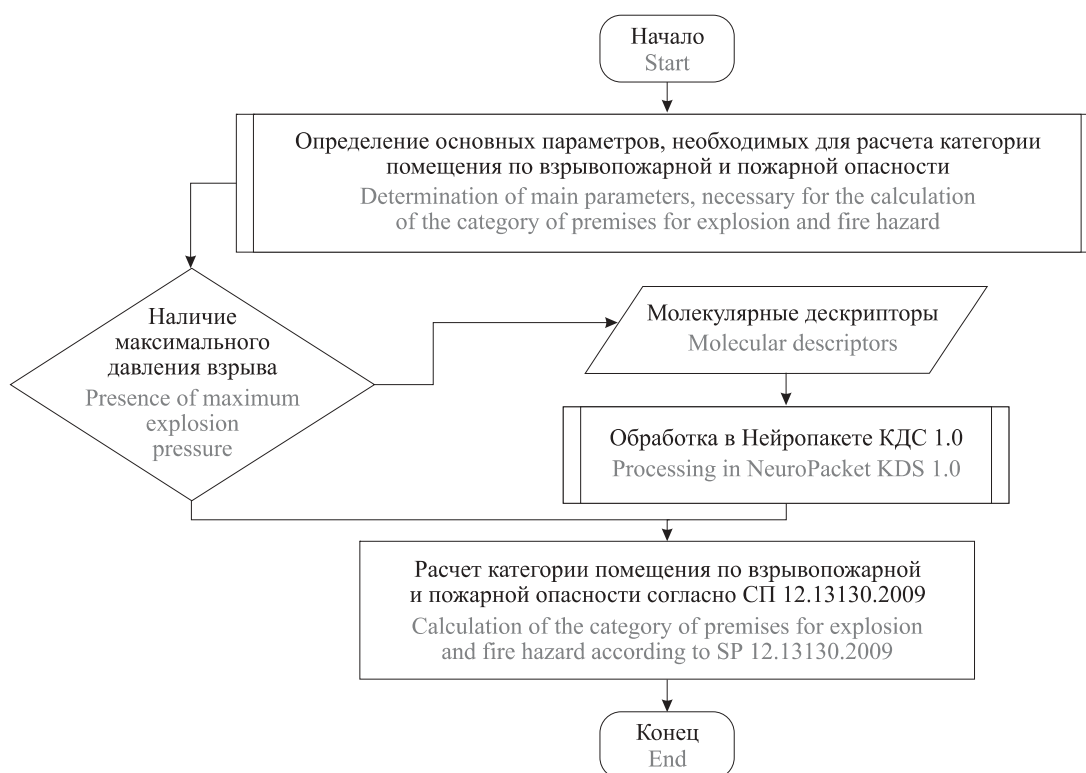


Рис. 1. Методика расчета категории помещения на основе данных о дескрипторах

Fig. 1. The procedure for calculating the category of the room on the basis of data on descriptors

Таблица 1. Результаты прогнозирования максимального давления взрыва предельных кетонов

Table 1. Results of forecasting the maximum burst pressure of limiting ketones

Номер вещества Substance number	Кислородсодержащие производные предельных углеводородов Oxygen-containing derivatives of saturated hydrocarbons	Прогнозируемые значения P_{max} , кПа Projected values P_{max} , kPa
1	2-Пентанон / 2-Pentanone	748
2	2-Октанон / 2-Octanone	879
3	2-Деканон / 2-Decanone	689
4	4-Гептанон / 4-Heptanone	870
5	2-Додеканон / 2-Dodecanone	753

* Справочные данные для этих производных отсутствуют [11, 12].
Reference data for these derivatives are absent [11, 12].

В табл. 2 приведены результаты расчета категории помещения при всех равных условиях.

Результаты сравнительного анализа избыточного давления, определенного по СП 12.13130.2009 и предлагаемой методике, приведены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что предлагаемая и действующая методики позволяют получать сопоставимые значения избыточного давления для кислородсодержащих производных предельных углеводородов.

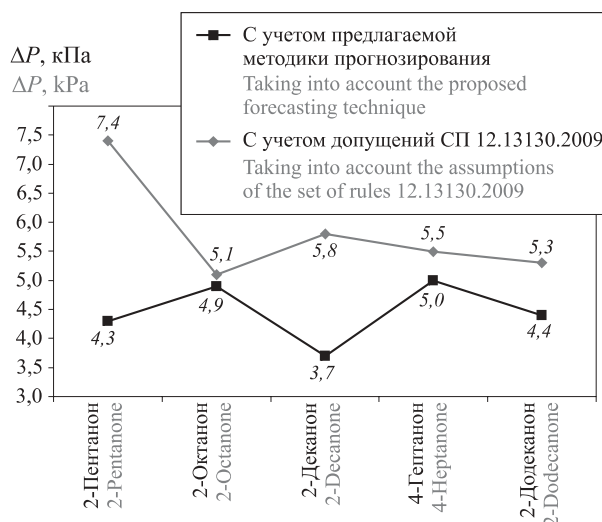


Рис. 2. Результаты сравнительного анализа расчетного избыточного давления

Fig. 2. Results of the comparative analysis of the calculated excess pressure

Выводы

Анализируя значения, полученные в результате расчета избыточного давления взрыва, из представленного на рис. 2 графика видим, что методика прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки на основе молекулярных дескрипторов и искусственных нейронных сетей не исключает существующей методики по определению ка-

Таблица 2. Результаты расчета категории помещения

Table 2. Results of calculating the category of premises

Кислородсодержащие производные предельных углеводородов Oxygen-containing derivatives of saturated hydrocarbons	M , кг/кмоль M , kg/kmol	$P_{\text{нас}}$, кПа (38 °C) $P_{\text{нас}}$, kPa (38 °C)	$C_{\text{ст}}$, % $C_{\text{ст}}$, %	$P_{\text{max1}}/P_{\text{max2}}$, кПа $P_{\text{max1}}/P_{\text{max2}}$, kPa	$\rho_{\text{п}}$, кг/м ³ $\rho_{\text{п}}$, kg/m ³	m , кг m , kg	ΔP_1 , кПа ΔP_1 , kPa	ΔP_2 , кПа ΔP_2 , kPa
2-Пентанон / 2-Pentanone	88,15	1,58	1,93	768/900	4,157	10	4,3	7,4
2-Октанон / 2-Octanone	128,2	0,5	6,44	879/900	1,804	10	4,9	5,1
2-Деканон / 2-Decanone	88,104	9,351	3,97	689/900	3,450	10	3,7	5,8
4-Гептанон / 4-Heptanone	114,3	1,442	3,33	870/900	2,902	10	5,0	5,5
2-Додеканон / 2-Dodecanone	98,3	1,78	3,47	753/900	3,305	10	4,4	5,3

теории помещения по взрывопожарной и пожарной опасности, представленной в СП 12.13130.2009 [2], а дополняет ее. Отметим, что совместное применение двух методик позволит дополнить и проверить существующие базы данных по показателям

пожаровзрывоопасности органических соединений, а также разработать более обоснованный перечень мероприятий, направленных на обеспечение пожарной безопасности предприятий нефтегазового сектора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности : Федер. закон Рос. Федерации от 22.07.2008 № 123-ФЗ (в ред. от 03.07.2016). URL: <http://docs.cntd.ru/document/902111644> (дата обращения: 15.06.2017).
2. СП 12.13130.2009. Определение категории помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (с изм. № 1 от 01.02.2011). URL: <http://docs.cntd.ru/document/1200071156> (дата обращения: 15.06.2017).
3. Королев Д. С. Определение безопасных объемов помещений с пылевоздушными смесями // Вестник БГТУ им. В. Г. Шухова. — 2016. — № 4. — С. 111–113.
4. Королев Д. С. Современные методы определения пожароопасных свойств веществ (обзор) // Вестник БГТУ им. В. Г. Шухова. — 2016. — № 6. — С. 202–210.
5. 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.
6. 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.
7. Алексеев С. Г., Авдеев А. С., Барбин Н. М., Гурьев Е. С. Методы оценки взрывопожароопасности топливоздушных смесей на примере керосина марки РТ. VIII. Сравнение методов Дорофеева, РД 03-409-01 и BST2 // Пожаровзрывобезопасность. — 2015. — Т. 24, № 3. — С. 6–12.
8. Алексеев С. Г., Гурьев Е. С., Барбин Н. М. Еще раз о сравнении методик прогнозирования последствий взрывов топливно-воздушных смесей // Проблемы анализа риска. — 2015. — Т. 12, № 2. — С. 56–70.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. 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.

Материал поступил в редакцию 28 июня 2017 г.

Для цитирования: Калач А. В., Крутолапов А. С., Королев Д. С., Калач Е. В. Расчет категории помещения на основе методики прогнозирования пожароопасных свойств продуктов нефтепереработки // Пожаровзрывобезопасность / Fire and Explosion Safety. — 2017. — Т. 26, № 9. — С. 29–34. DOI: 10.18322/PVB.2017.26.09.29-34.

English

CALCULATION OF CATEGORY OF PREMISES ON THE BASIS OF THE METHOD OF FORECASTING FIRE-PROOF PROPERTIES OF OIL-REFINING PRODUCTS

KALACH A. V., Doctor of Chemical Sciences, Professor, Vice-Rector on Scientific Work, Voronezh Institute of State Fire Service of Emercom of Russia (Krasnoznamennaya St., 231, Voronezh, 394052, Russian Federation; e-mail: a_kalach@mail.ru)

KRUTOLOPOV A. S., Doctor of Technical Sciences, Docent, Deputy Head of Development Institute for Educational and Methodological Work, Saint Petersburg University of State Fire Service of Emercom of Russia (Moskovskiy Avenue, 149, Russia, 196105, St. Petersburg, Russian Federation)

KOROLEV D. S., Lecturer of Fire Safety Department of Technological Processes, Voronezh Institute of State Fire Service of Emercom of Russia (Krasnoznamennaya St., 231, Voronezh, 394052, Russian Federation)

KALACH E. V., Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of Physics Department, Voronezh Institute of State Fire Service of Emercom of Russia (Krasnoznamennaya St., 231, Voronezh, 394052, Russian Federation; e-mail: EVKalach@gmail.com)

ABSTRACT

The article raises the urgent issue — the lack of physicochemical properties of the new synthesized substances. These properties will allow employees of supervisory activities 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 oxygen-containing hydrocarbons, which are used practically in all areas of industry and are produced according to reference data in the amount of more than several tens of millions of tons per year, it was possible to predict the maximum explosion pressure, i. e. one of the most important fire hazard properties of a substance, with the help of a technique for predicting the fire hazard properties of oil refining products based on molecular descriptors and artificial neural networks. The proposed methodology is implemented using the author's computer program "NeuroPacket KDS 1.0".

The program "NeuroPacket KDS 1.0" allows you to: download and view databases containing the structures of chemical compounds and their properties; to correlate the input data; to evaluate the received models statistically; 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 refined 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. In addition, the maximum explosion pressure was predicted for substances that are not known 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 results obtained, the category of premises for explosion and fire hazard was calculated. It was found that the estimated value of excess pressure was less than the claimed value, and therefore the financial costs of developing a fire safety system would also be reduced.

It should be noted 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: forecasting; fire hazard properties; oil refining; fire safety; flammable liquids; neural networks.

REFERENCES

1. *Technical regulations for fire safety requirements*. Federal Law on 22.07.2008 No. 123 (ed. 03.07.2016) (in Russian). Available at: <http://docs.cntd.ru/document/902111644> (Accessed 15 June 2017).
2. Set of rules 12.13130.2009. *Determination of categories of rooms, buildings and external installations on explosion and fire hazard* (ed. 01.02.2011) (in Russian). Available at: <http://docs.cntd.ru/document/1200071156> (Accessed 15 June 2017).
3. Korolev D. S. Determination of safe volumes of rooms with dust-air mixes. *Vestnik BGTU im. V. G. Shukhova / Bulletin of BSTU named after V. G. Shukhov*, 2016, no. 4, pp. 111–113 (in Russian).
4. Korolev D. S. Modern methods for determining fire-hazardous properties of substances (review). *Vestnik BGTU im. V. G. Shukhova / Bulletin of BSTU named after V. G. Shukhov*, 2016, no. 6, pp. 202–210 (in Russian).
5. 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.
6. 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.
7. Alexeev S. G., Avdeev A. S., Barbin N. M., Guryev E. S. Analysis methods of explosion fire hazard of mixtures of fuel and air on an example for jet fuel RT. VIII. Comparison of methods of Dorofeev, RD 03-409-01 and BST2. *Pozharovzryvbezopasnost / Fire and Explosion Safety*, 2015, vol. 24, no. 3, pp. 6–12 (in Russian).
8. Alexeev S. G., Gur'ev E. S., Burbin N. M. About comparison of methods of forecasting of consequences of vapor cloud explosions again. *Problemy analiza riska / Issues of Risk Analysis*, 2015, vol. 12, no. 2, pp. 56–70 (in Russian).
9. Korolev D. S., Kalach A. V., Kargashilov D. V., Zhuchkov A. V. *Neuropacket KDS 1.0*. Certificate of state registration of the computer program, no. 2016614070, publ. date 20.05.2016 (in Russian).
10. 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.
11. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvopasnost veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya: spravochnik*. 2-e izd. [Fire and explosion hazard of substances and materials and their extinguishing agents. Reference book. 2nd ed.]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004. Part I, 713 p. (in Russian).
12. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvopasnost veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya: spravochnik*. 2-e izd. [Fire and explosion hazard of substances and materials and their extinguishing agents. Reference book. 2nd ed.]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004. Part II, 774 p. (in Russian).

For citation: Kalach A. V., Krutolapov A. S., Korolev D. S., Kalach E. V. Calculation of category of premises on the basis of the method of forecasting fire-proof properties of oil-refining products. *Pozharovzryvbezopasnost / Fire and Explosion Safety*, 2017, vol. 26, no. 9, pp. 29–34 (in Russian). DOI: 10.18322/PVB.2017.26.09.29-34.