



АЛГОРИТМЫ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА УГЛЕРОДНОЙ ЦЕПИ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ВЗРЫВОПОЖАРООПАСНОСТИ ГОРЮЧИХ ВЕЩЕСТВ

С.Г. АЛЕКСЕЕВ

к.х.н., доцент, с.н.с. НИЦ «Нир БСМ» УрО РАН

Екатеринбург, 2026

В статьях 11, 14 и 15 123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» и в п. 5.1 ГОСТ 12.1.044 отмечается, что показатели взрывопожароопасности (далее ВПО) используются:

- для установления требований к безопасному применению горючих веществ и технологических сред и математическому моделированию пожаров и взрывов;**
- при расчете пожарных рисков и разработке систем противопожарной защиты;**
- для классификации опасных грузов и установления категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности;**
- для установления области применения горючих веществ и материалов и их отражения в технической и проектной документации.**

Промышленность



Органический синтез



База данных по экспериментальным показателям ВПО



**Ежедневный прирост
15 тысяч новых соединений**

**290 миллионов веществ
и композиций**

**чуть более 10 тысяч
веществ и материалов**

Расчетные методы

Дескрипторный

$$y = f(x)$$

где y – искомое свойство;
 x - дескриптор

Сравнительный

$$\begin{array}{ccc} R_1 - \Phi_1 & & R_2 - \Phi_1 \\ & \Delta_1 \approx \Delta_2 & \\ R_1 - \Phi_2 & & R_2 - \Phi_2 \\ & f_2 = af_1 + b & \end{array}$$

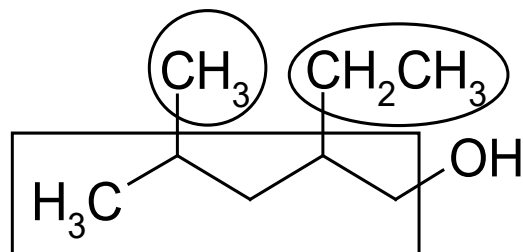
Метод углеродной цепи (МУЦ)



Основные положения МУЦ

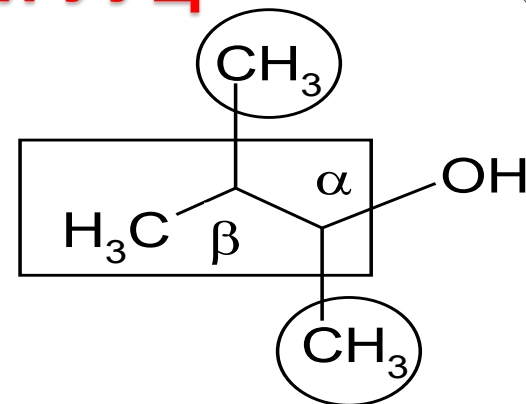
- 1. Свойства ближайших членов гомологического ряда изменяются по линейному закону;**
- 2. Свойства изомерных соединений можно предсказать по их линейным гомологам путем ввода поправочных коэффициентов;**
- 3. Каждая метильная группа в боковой углеродной цепи увеличивает основную углеродную цепь (ОУЦ) молекулы не на 1, а на 0,5;**
- 4. Перемещение алкильного заместителя или функциональной группы по ОУЦ горючего вещества не приводит к существенным изменениям взрывопожароопасных свойств.**

Примеры определения УУЦ



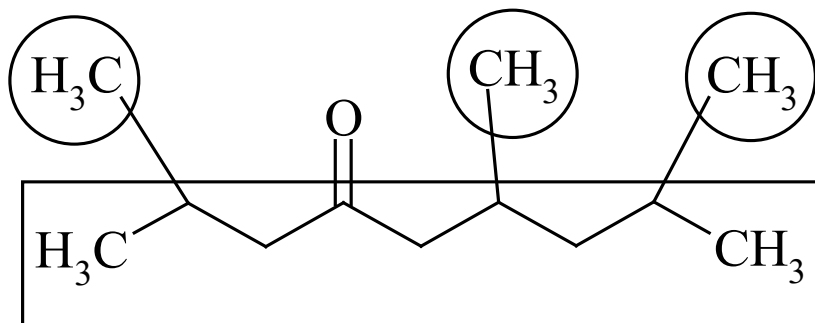
1

$$\text{УУЦ} = 5 + 0,5 + (1 + 0,5) = 7$$



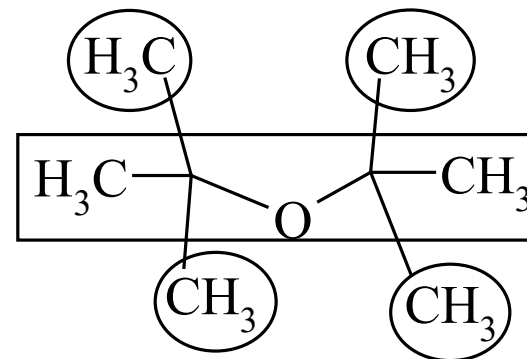
2

$$\text{УУЦ} = 3 + 0,5 + 0 = 3,5$$



3

$$\text{УУЦ} = 9 + 3 \times 0,5 = 10,5$$

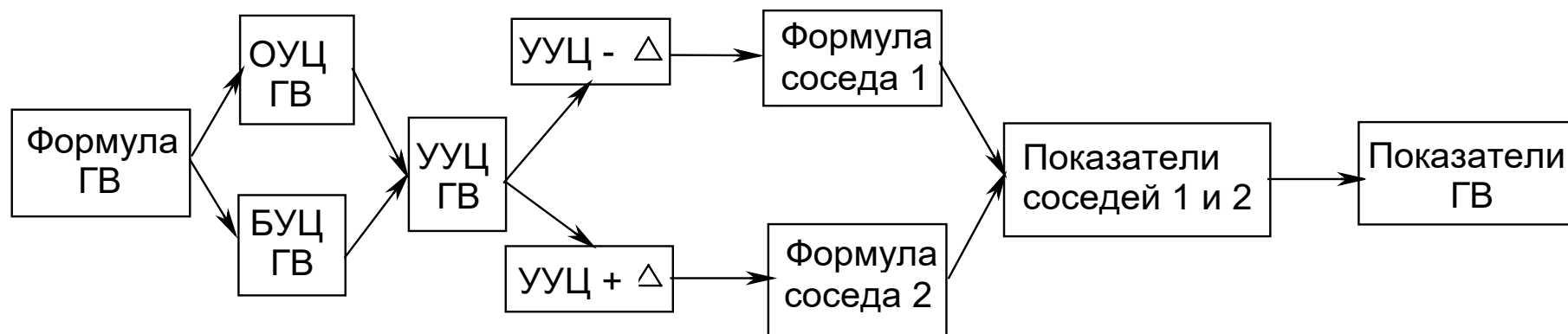


4

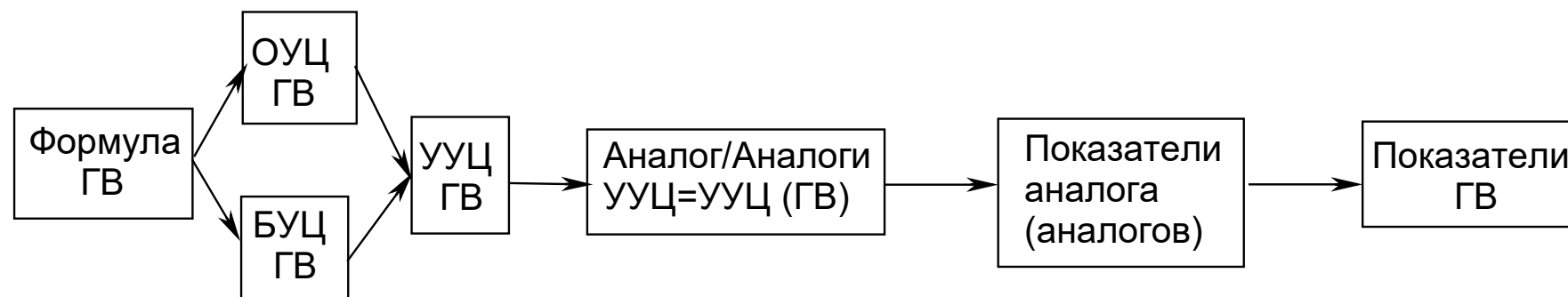
$$\text{УУЦ} = 4 + 4 \times 0,5 = 6$$

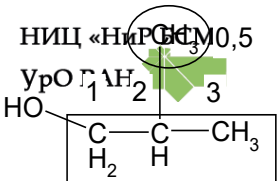
Алгоритмы применения МУЦ

Вариант А

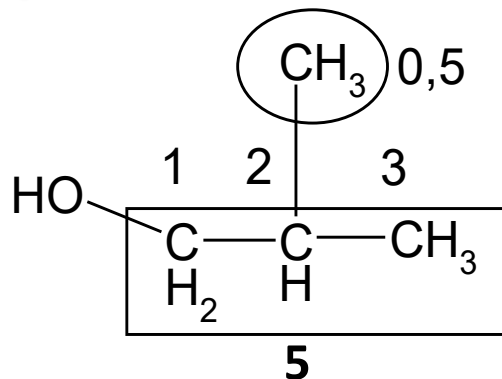


Вариант Б





Пример применения алгоритма А МУЦ



$$\text{ОУЦ} = 3; \text{БУЦ} = 0,5 \Rightarrow \text{УУЦ} = 3 + 0,5 = 3,5.$$

УУЦ (сосед 1) = $3,5 - 0,5 = 3 \Rightarrow$ сосед 1 – это пропанол (C₃H₇OH). УУЦ (сосед 2) = $3,5 + 0,5 = 4 \Rightarrow$ сосед 2 – это бутанол (C₄H₉OH).

Показатели ВПО соседа 1: $T_{всн} = 296 \text{ К}$, $T_{вос} = 303 \text{ К}$, $T_H = 294 \text{ К}$, $T_\theta = 328 \text{ К}$, $T_{свс} = 644 \text{ К}$.

Показатели ВПО соседа 2: $T_{всн} = 308 \text{ К}$, $T_{вос} = 316 \text{ К}$, $T_H = 307 \text{ К}$, $T_\theta = 340 \text{ К}$, $T_{свс} = 613 \text{ К}$,
 $C_H = 1,4 \%$, $C_B = 11,3 \%$.

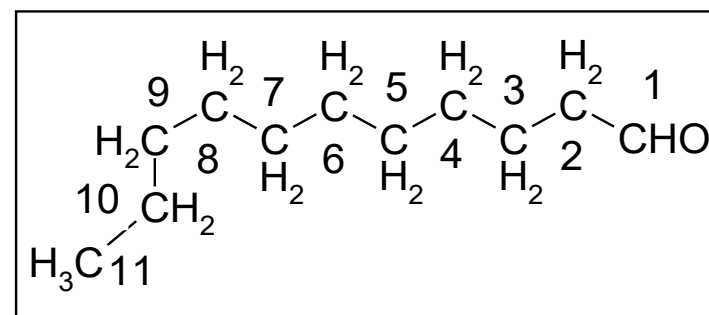
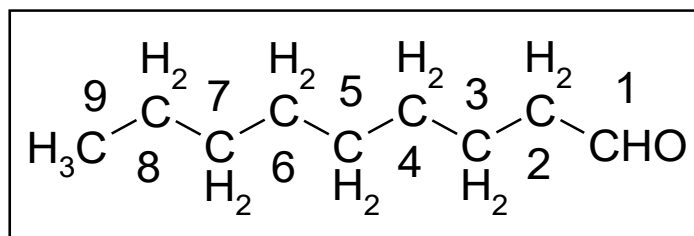
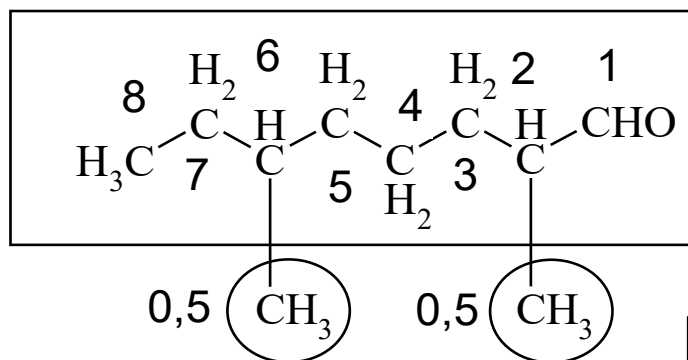
Показатели ВПО соединения **5**: $T_{всн} = (296 + 308)/2 = 302 \text{ К}$ (абс. ошибка 1 К),

$T_{вос} = (303 + 316)/2 \approx 310 \text{ К}$ (абс.ошибка 2 К), $T_H = (294 + 307)/2 \approx 301 \text{ К}$ (абс. ошибка 2 К),

$T_B = (294 + 307)/2 \approx 301 \text{ К}$ (абс.ошибка 2 К), $T_{свс} = (644 + 613)/2 \approx 629 \text{ К}$ (абс.ошибка 34 К),

$C_H = 1,4 \%$ (абс. ошибка 0,0 %), $C_B = 11,3 \%$ (абс. ошибка 0,3 %).

Пример применения алгоритма Б МУЦ



6

7

8

Соединение **6**: ОУЦ = 8; БУЦ = 0,5 + 0,5 = 1 => УУЦ = 8 + 1 = 9.

Аналоги – соединение **7** (УУЦ = ОУЦ = 9) и **8** (УУЦ = ОУЦ = 11).

Показатели ВПО соединения **7**: $T_{всн} = 337$ К, $T_H = 341$ К, $T_\theta = 380$ К, $T_{свс} = 469$ К.

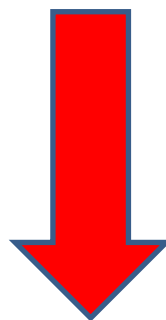
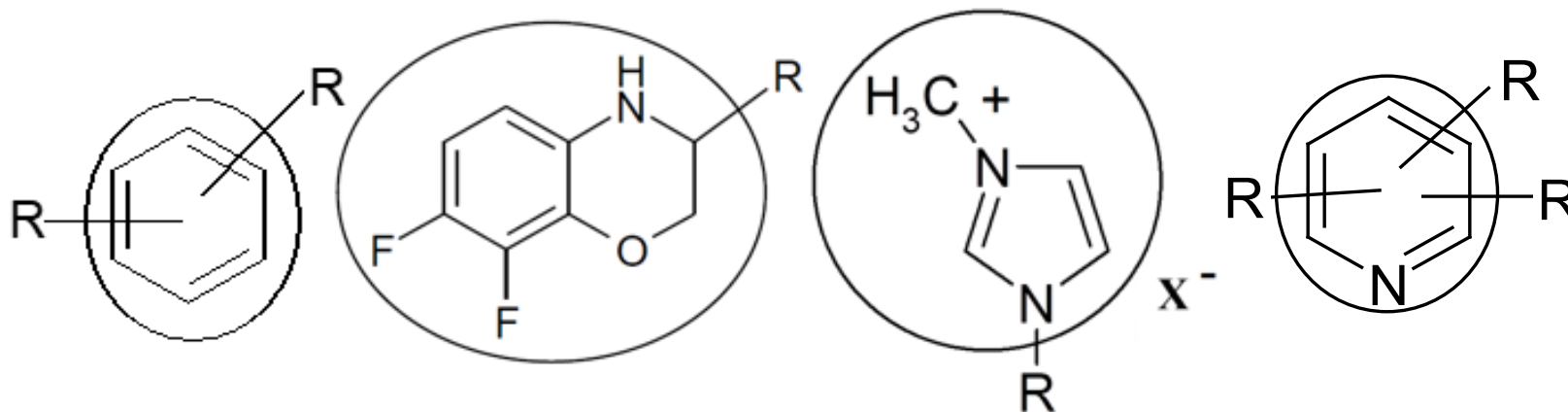
Показатели ВПО соединения **8**: $C_H = 0,7$ %, $C_B = 5,2$ %.

Показатели ВПО соединения **6**: $T_{всн} = 337$ К, $T_H = 341$ К, $T_\theta = 380$ К, $T_{свс} = 469$ К (абс. ошибка 21 К), $C_H = 0,7$ % (абс. ошибка 0,06 %), $C_B = 5,2$ %.

Апробация МУЦ

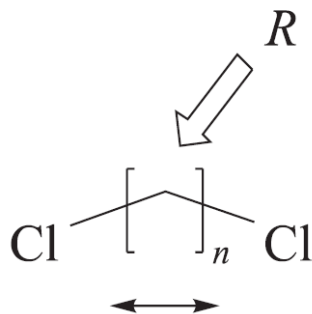
$R-\Phi$	$R^1-\Phi-R^2$
Спирты, Альдегиды, Карбоновые кислоты, Фторалканы, Хлоралканы, Бромалканы, Иодалканы, Нитроалканы, Моноалкиламины, Алкилнитрилы Тиоспирты	Кетоны, Простые эфиры, Сложные эфиры, Тиоэфиры, Диалкилкарбонаты Диалкиламины

Другие классы органических соединений



R-Ф или R-Ф-R

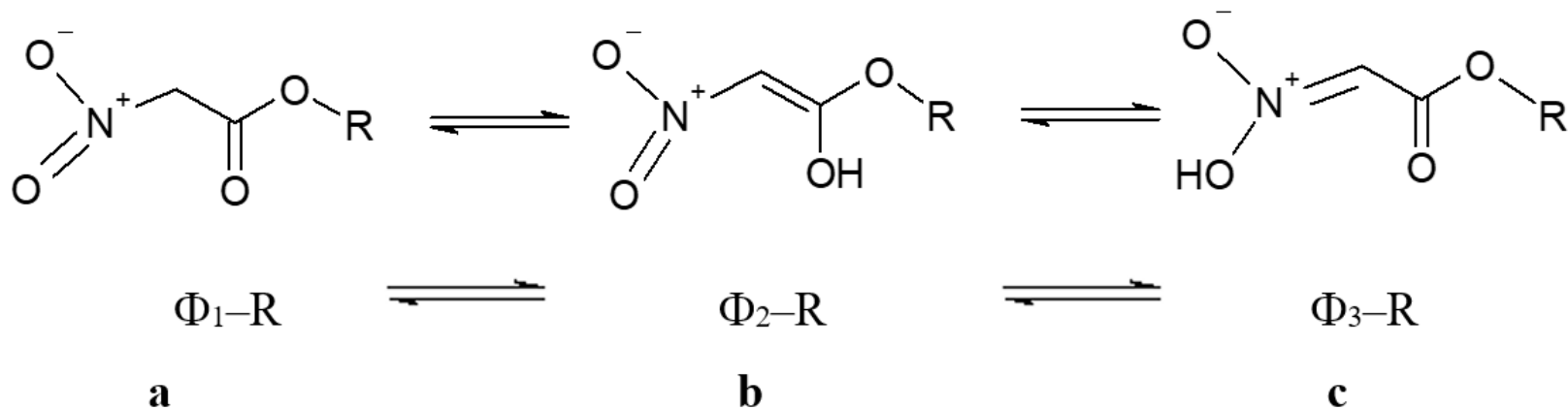
Другие классы органических соединений



Введение поправок:

2-ой атом Cl – 0,25, CH₃ – 0,25, CH₂ – 0,75

Учет таутомерии



Частные уравнения для применения МУЦ

Спирты ($1 \leq N_c < 11$)

$$t_{\text{всп}} = 11,42N_c - 8,2198 \quad (r = 0,998)$$

$$t_{\text{всн}} = 11,599N_c - 1,6538 \quad (r = 0,998)$$

$$t_{\text{свс}} = 457,08N_c^{-0,247} \quad (r = 0,981)$$

$$HTPP = 10,373N_c - 4,5259 \quad (r = 0,999)$$

$$BTPP = 12,115N_c + 20,267 \quad (r = 0,997)$$

$$HKPP = 7,0163C_x^{-0,989} \quad (r = 1,000)$$

$$BKPB = 33,279C_x^{-0,8194} \quad (r = 0,997)$$

Сложные эфиры

	r^2	
$t_{\text{всп}} = -0,3107N_c^2 + 17,475N_c - 66,8, \text{ } ^\circ\text{C}$	0,9853	$2 \leq N_c \leq 16$
$t_H = 13,54N_c - 58, \text{ } ^\circ\text{C}$	0,9919	$2 \leq N_c \leq 12$
$t_H = 154,09\ln(N_c) - 302,6, \text{ } ^\circ\text{C}$	0,9956	$13 \leq N_c \leq 17$
$t_B = 16N_c - 37, \text{ } ^\circ\text{C}$	0,9839	$2 \leq N_c \leq 12$
$C_H = 10,472 C_x^{-1,1297}, \text{ } \% (\text{об.})$	0,9925	$2 \leq N_c \leq 17$
$C_B = 1,16 + 43,051/C_x, \text{ } \% (\text{об.})$	0,9670	$2 \leq N_c \leq 17$



Заключение

На основе синтеза идей сравнительного и дескрипторного подходов создан новый подход – МУЦ, который на основе теории подобия и применения дескриптора УУЦ позволяет прогнозировать взрывопожароопасные свойства веществ линейного строения и изостроения.

Предложено два алгоритма применения ручного способа МУЦ

Разработан набор частных уравнений для зависимостей показателя ВПО от УУЦ.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ