

казатель термической стойкости для рассматриваемой ЭКС на основе азолового связующего с высокой вероятностью показывает возможность применения в перспективных изделиях данной ЭКС. Однако для более объективного заключения о возможности длительного хранения и эксплуатации ЭКС необходимо учитывать и другие характеристики, такие как физико-химические, механические и баллистические свойства, изменяющиеся в процессе хранения и эксплуатации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1 Исследована кинетика газовыделения ЭКС на основе азолового связующего при различных температурах ТФС.

2 Получены кинетические параметры термораспада в ЭКС для расчета скорости газовыделения, из которых следует заключение о возможности длительного хранения и

эксплуатации данной ЭКС на основе азолового связующего.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зяблицкий С.А., Игонин Г.С., Вдовина Н.П. // Материалы II-ой Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Полимеры, композиционные материалы и наполнители для них». – Бийск, 2008. – С. 66-70.
2. Зяблицкий С.А., Певченко Б.В., Игонин Г.С., Старикова А.В., Вдовина Н.П. // Материалов докладов Всероссийской научно-технической и методической конференции «Современные проблемы технической химии». – Казань, 2009. – С. 5-8.
3. Volk F, Bohn A, Wunsch G. // Propellant, Explosive, Pyrotechnics. – 1987. – Vol. 12, №3. – P. 81-87
4. Bohn A, Volk F. // Propellant, Explosive, Pyrotechnics. – 1992. – Vol. 17, №4. – P. 171-178
5. Bohn A // Propellant, Explosive, Pyrotechnics. – 1994. – Vol. 19, №5. – P. 266-269.

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОНЕНТОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ – БРИЗАНТНЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

Ю.В. Передерин, Н.И. Попок

Учреждение Российской академии наук Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения РАН

Проведен анализ свойств ряда бризантных взрывчатых веществ с помощью линейно-регрессионного анализа и нейронных сетей с созданием прогностической математической модели, способной к аппроксимации изучаемых свойств.

Ключевые слова: математическое моделирование, нейронные сети, высокоэнергетические составы, взрывчатые вещества, прогнозирование свойств.

ВВЕДЕНИЕ

Моделирование свойств вновь получаемых бризантных взрывчатых веществ является важной частью синтеза таких соединений в связи с повышенной их опасностью.

Для решения поставленной задачи был использован нейросетевой механизм аппроксимации [1–6], позволяющий учитывать при создании математической модели до 256 факторов, влияющих на конечное значение прогнозируемого параметра. Алгоритм не отличается от предыдущих случаев моделирования и заключается в следующем: создается электронная база данных по свойствам и параметрам различных веществ, которые положительно оказывают влияние на значе-

ние прогнозируемого параметра. Далее нейронная сеть обучается на созданной базе данных, т.е. практически учится аппроксимировать конечное значение прогнозируемого параметра по исходным значениям входящих переменных, при этом исходная база делится на две части: выборка для обучения и выборка для проверки качества аппроксимации. Качество обучения определяется средней ошибкой аппроксимации для проверочной выборки и графически представляется в виде диаграммы рассеяния. После создания математической модели используется процедура «что–если», т.е. отсутствие уравнения математической модели компенсируется возможностью практически мгновенного расчета прогнозируемого параметра после ввода всех значений входящих параметров для веществ-

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОНЕНТОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ – БРИЗАНТНЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

ва, не являющегося частью исходной электронной базы данных.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для проведения исследования по [7] была создана база данных по свойствам различных бризантных взрывчатых веществ, часть которой приведена в таблице 1.

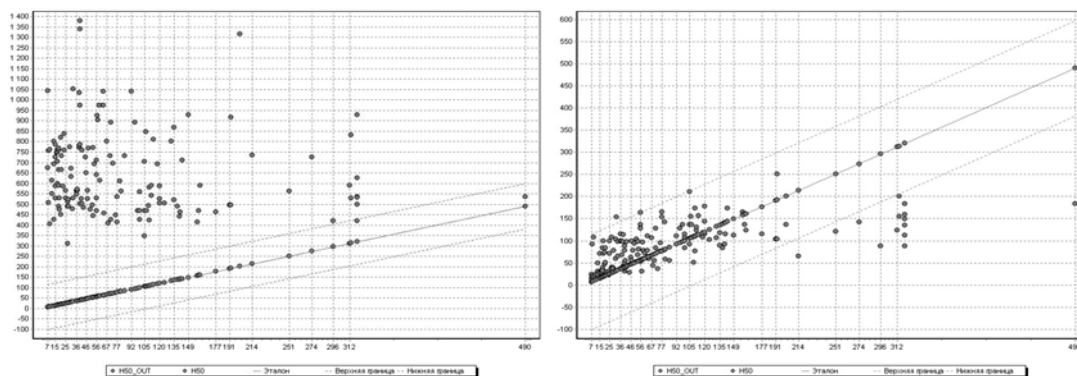
Основанием для выбора значащих факторов при анализе послужил ряд методик по

прогнозированию свойств высокоэнергетических компонентов различных композитов, подробно описанных в [7], в соответствии с которыми рассчитываются либо топологические индексы, являющиеся интегральной характеристикой выбранных «входных» параметров, либо различные комбинации их соотношений (например, количество связей N–NO₂ в прямой зависимости от количества атомов N и O в молекуле).

Таблица 1

Атомарный состав, общий молекулярный вес и чувствительность к удару некоторых взрывчатых веществ

№ п/п	Вещество	C	H	N	O	M	H ₅₀ , см
1	Hexanitrobenzene	6	0	6	12	348	11
2	Pentanitrobenzene	6	1	5	10	303	11
3	1,2,3,5-Tetranitrobenzene	6	2	4	8	258	28
4	1,3,5-Trinitrobenzene	6	3	3	6	213	71
5	2,4,6-Trinitrophenol	6	3	3	7	229	64
6	Pentanitroaniline	6	2	6	10	318	22
7	2,3,4,6-Tetranitroaniline	6	3	5	8	273	47
8	2,4,6-Trinitroaniline	6	4	4	6	228	141
9	1,3-Diamino-2,4,6-trinitrobenzene	6	5	5	6	243	320
10	1,3,5-Triamino-2,4,6-trimtrobenzene	6	6	6	6	258	490



а

б

Рисунок 1. Диаграммы распределения после обработки базы данных при помощи линейной регрессии (а) и нейронных сетей (б)

Очевидно, что при прогнозе с помощью линейной регрессии только два спрогнозированных значения оказались внутри доверительного интервала в 20 %, в то время как при обработке с помощью нейронных сетей порядка 88 % спрогнозированных значений не вышли за рамки указанной ошибки прогноза. Спрогнозированные значения по чувствительности ВВ к удару, не попавшие в доверительный интервал, образуют некоторый кластер, для которого явно определены не все значащие факторы. Этим фактором является

наличие в молекуле ВВ атомов галогенов. Удаление из обучающей таблицы этих веществ может привести к значительному улучшению прогностической способности нейросети для отдельных групп ВВ, но может стать причиной снижения эффективности аппроксимации сети в целом.

Созданная математическая модель прогнозирования чувствительности к удару взрывчатых веществ имеет значительный недостаток. Этим недостатком является отсутствие наглядных форм и уравнений, по

которым можно было бы определить вклад (спрогнозированное) значение того или иного показателя на конечном

Таблица 2

База данных по атомарному составу, плотности, молекулярной массе и скорости детонации ВВ

№ п/п	ВВ	Содержание в молекуле				Плотность, г/см ³	Молярная масса	Скорость детонации, м/с
		углерода	водорода	азота	кислорода			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Бис-(2,2,2-тринитроэтил)формаль	5	6	6	14	1,700	374,06	8100
2	Бис-(2,2,2-тринитроэтил)нитрамин	4	4	8	14	1,950	388,04	8800
3	Бис-(2,2,2-тринитроэтил)этилендинитродиамин	6	8	10	16	1,850	476,07	9100
4	Октоген	4	8	8	8	1,904	296,04	9300
5	Гексоген	3	6	6	6	1,806	222,03	8930
6	ADNBF	6	3	5	6	1,901	241,07	8220
7	CL-14	6	4	5	6	1,942	242,07	8340
8	DINGU	4	4	6	6	1,970	232,04	8790
9	2,4-динитротолуол	3	2	4	4	1,763	158,03	8130
10	NTO	2	2	4	3	1,930	130,02	8560
11	NG	1	4	4	2	1,775	104,01	8350
12	TATB	6	6	6	6	1,938	258,07	8100
13	Тротил	7	5	3	6	1,654	227,08	6870
14	Гексанитробензол	6	6	0	12	2,000	270,07	9500
15	CL-20	6	6	12	12	2,040	438,07	9650
16	Гексанитродифенил	12	4	6	12	1,610	424,13	7100

Таблица 3

Прогноз скорости детонации по созданным математическим моделям

Соединение	Прогноз скорости детонации по модели группы 1, D1, м/с	Прогноз скорости детонации по модели группы 2, D2, м/с	(D1+D2)/2, м/с	Экспериментальное значение скорости детонации D, м/с	Ошибка прогноза, м/с
Пикрат аммония	6933	7489	7211	7120	91
Динитродиметилосамид	6830	7590	7210	7100	110
Диоксиэтилнитраминдинитрат	7319	7543	7431	7580	149

Математическая модель, полученная в результате исследований, фактически является электронным алгоритмом расчета, сохраненным в цифровом виде (файл) определенного формата.

Сравнительные исследования при прогнозировании чувствительности к удару при помощи линейной регрессии и при помощи нейронных сетей показали значительные преимущества последних, что является нейронные сети мощным математическим инструментом в руках экспериментаторов при проведении фундаментальных и прикладных исследований.

С учетом эффективности нейросетей применительно к прогнозированию чувствительности ВВ к удару, а также, приняв во внимание наличие явной зависимости скорости детонации от плотности ВВ, на основе литературных данных [7] была создана база данных, часть которой приведена в таблице 2, включающая название, атомарный состав,

общую молекулярную массу, плотность и скорость детонации ВВ. При этом необходимо учесть, что при прогнозе не используются такие свойства и характеристики как энтальпия образования, энергия взрывчатого превращения, кислородный баланс, поэтому они не вошли в указанную базу данных. Основанием для этого является тот факт, что скорость детонации ВВ является интегральной функцией от названных выше параметров. По причине перспективности использования в настоящее время высокодетонирующих (со скоростью детонации 6500 м/с и более) ВВ в базе отсутствуют соединения с низкими показателями по данной характеристике. Далее была проведена проверка гипотезы о влиянии различных факторов на такой важный параметр работоспособности ВВ, как скорость детонации.

Первичный анализ полученной математической модели показывает, что наряду с практически полным совпадением аппрокси-

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОНЕНТОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ – БРИЗАНТНЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

мированных значений и экспериментальных, все же есть значения, относительно значительно удаленные от эталонной прямой. Это может означать лишь то, что при формировании базы данных и архитектуры нейросети возможно не были учтены какие-то факторы, очевидно, влияющие на прогнозируемые значения. Для проверки этой гипотезы, а также для снижения ошибки аппроксимации, предлагается разделить базу данных на две части. В первую группу войдут ВВ, спрогнозированные значения, скорости детонации которых больше экспериментальных, соответ-

ственно во вторую, – меньше экспериментальных.

Результаты первичной обработки представлены на рисунке 2.

Обработка нейросетями обеих групп графически представлена на рисунках 3 и 4.

В обоих случаях ошибка аппроксимации составила менее 15 %, в ряде случаев – даже менее 5 %, что в реальных единицах составляет 200 м/с и 100 м/с, соответственно. При современном подходе к анализу данных такая точность прогноза скорости детонации является вполне приемлемой.

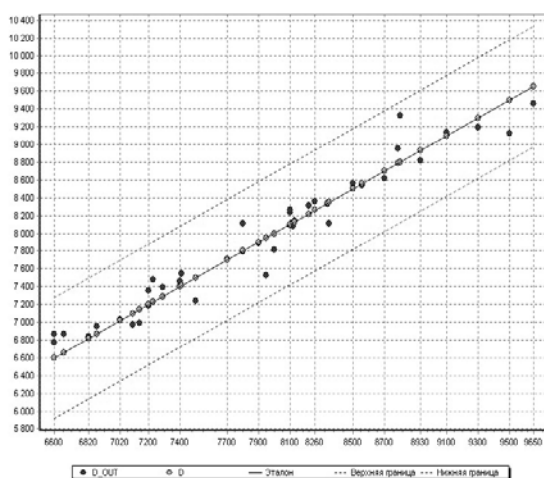


Рисунок 2. Первичная обработка базы данных по прогнозу скорости детонации индивидуальных ВВ

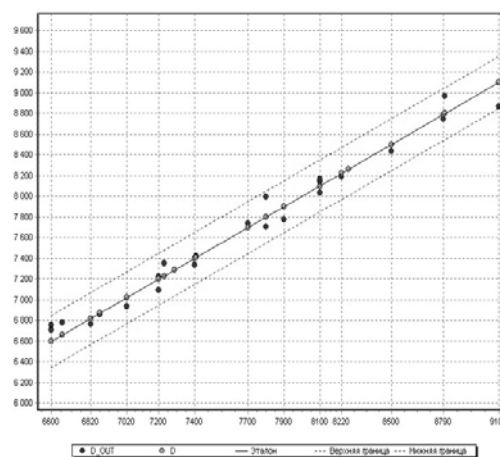


Рисунок 3. Диаграмма рассеяния для группы 1 по прогнозу скорости детонации

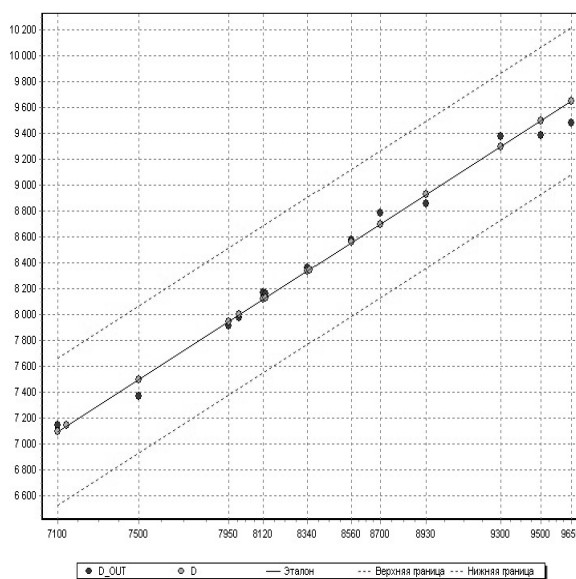


Рисунок 4. Диаграмма рассеяния для группы 2 по прогнозу скорости детонации

При прогнозе скорости детонации индивидуальных ВВ (с помощью процедуры «что-если») после прогноза созданными математическими моделями (по группам 1 и 2) среднее арифметическое значение аппроксимируемого параметра и будет являться конечным значением моделируемого значения. Для примера и проверки работоспособности электронных моделей прогноза возьмем три соединения, не входящие ни в одну из созданных баз данных (таблица 3).

При систематической ошибке измерения скорости детонации в 50 м/с, ошибка аппроксимации в 91...149 м/с является вполне приемлемой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании проведенных исследований и созданных математических моделей логически сложился алгоритм прогноза свойств компонентов высокоэнергетических составов и композитов, основными положениями которого являются:

- создание электронных баз данных по свойствам компонентов композитов;
- экспертная оценка корректности и адекватности созданной базы данных;
- предварительная обработка методом линейно-регрессионного анализа с целью выявления возможных зависимостей целевого параметра от других свойств (в ряде случаев на данном этапе возможно выявление характерных корреляций, делающих дальнейший поиск математических зависимостей бессмысленными);
- предварительная кластеризация базы данных с целью объединения веществ по

группам с не вошедшими в базу данных признаками;

- нейросетевая аппроксимация внутри кластеров;
- прогнозирование целевого параметра при помощи процедуры «что-если» целевого параметра в каждом кластере для субстанции, не вошедшей в базу данных;
- усреднение (среднее арифметическое) целевого параметра по результатам прогноза внутри кластеров.

Эффективное моделирование свойств компонентов высокоэнергетических композитов по указанному алгоритму логически является фундаментом для исследований по прогнозу свойств самих композитов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Горбань А. // Открытые системы. – 1998. – № 4, 5. – С. 36-41.
- 2 Роберт Хехт-Нильсен. // Открытые системы. – 1998. – № 4-5. – С. 23-28.
- 3 Розенблатт Ф. Принципы нейродинамики. Перцептроны и теория механизмов мозга. – М.: Мир, 1965. – 292 С.
- 4 Гордиенко Е.К., Лукьяница А.А. // Изв. РАН. Техническая кибернетика. – 1994 – № 5. – С. 79-92.
- 5 Короткий С.Г. // ВУТЕ-Россия. – 2000. – № 5. – С. 26-29.
- 6 Свешников С.В., Шквар А.М. Нейротехнические системы обработки информации. – Киев: Наукова думка, 1983. – 222 С.
- 7 Keshavarz M.H., Jaafari M. // Propellants, Explosives, Pyrotechnics 31 – 2006. – №.3 – P.216.