

Ю. В. Передерин

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ DATA
MINING ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК
ЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Созданы ряды чувствительности, позволяющие с уверенностью говорить, что октоген более чувствителен к удару, чем гексоген, а гексоген, в свою очередь, более чувствителен к удару, чем тротил.

Накопленное за многие годы исследований большое количество информации в области химии энергетических материалов зачастую не может быть систематизировано в связи с ограниченной работоспособностью выявляемых зависимостей и математических моделей. Классическая статистика дает удовлетворительные результаты при обработке аналогичных объектов, отобранных по какому-либо признаку (кластер), и совершенно неприменима при появлении результатов, не «попадающих» в выбранную математическую модель. Очень часто исследователи игнорируют такие данные, считая их «выбросами», хотя самая интересная информация может быть заключена именно в них.

Чувствительность энергетических материалов не является универсальным показателем безопасности или опасности в связи с различной природой каждой отдельно взятой субстанции, то есть одно и то же вещество или состав может иметь очень высокую чувствительность к удару и, одновременно, низкую чувствительность к трению. Подходя практически, нельзя сказать во сколько раз, к примеру, октоген чувствительнее к удару, чем тротил или гексоген. Для решения данной проблемы созданы ряды чувствительности, позволяющие с уверенностью говорить, что октоген более чувствителен к удару, чем гексоген, а гексоген, в свою очередь, более чувствителен к удару, чем тротил. Полученная таким образом информация полезна для технологических нужд различных производств и лабораторий, поскольку позволяет выявить фактическую опасность энергетических материалов при работе с ними и абсолютно неприемлема, когда для научных исследований необходимы конкретные значения выбранных параметров, а наиболее достоверная информация по чувствительности энергетических материалов может быть получена только путем проведения эксперимента. В этом случае следует учесть, что испытания по определению чувствительности энергетических материалов не относятся к разряду самых дешевых и безопасных.

Технологии DATA MINING («извлечение данных»—англ.) предназначены для выявления какой-либо полезной информации из баз данных, в которых, на первый взгляд, нет никаких зависимостей, а если и есть, то особенности человеческого мозга не в состоянии получить более или менее значимую информацию из набора каких-либо значений в связи с многомерностью зависимостей, зачастую не поддающиеся визуализации при помощи обычных средств наглядной демонстрации выявленных математических моделей (графики, гистограммы, 3D-плоскости) [1-4].

При проведении настоящей работы была создана база данных по свойствам циклических соединений с описанием ряда их параметров и показателей в качестве дескрипторов. За основу было взято влияние выбранных дескрипторов на теплоту образования с по-

пыткой моделирования при помощи нейронных сетей в программе Deductor Studio.

В ходе исследований выяснено, что обработка зависимостей такого типа, когда аргументом является не один параметр, а более трех, с использованием линейной регрессии, не дает приемлемых результатов, а именно: из полученных значений нельзя извлечь какую-либо полезную информацию.

На основании исследований можно сделать вывод о том, что использование искусственных нейронных сетей является перспективным прикладным методом при обработке многомерных массивов данных в арсенале современных ученых и исследователей.

Предлагаемый подход позволяет получать конкретные значения выбранных параметров, основываясь на аппроксимации уже имеющихся данных в выбранной области с достоверностью, удовлетворяющей современным требованиям (1...4%).

Заключение

На основании проведенных исследований можно с уверенностью говорить о том, что искусственные нейронные сети являются мощным инструментом в руках ученых и исследователей при обработке многомерных массивов экспериментальных данных и позволяют получать весьма ценную информацию там, где классические методы дают неудовлетворительные результаты.

Литература

1. *Передерин Ю. В., Попок Н. И.* Использование информационных технологий для прогнозирования параметров безопасности пожаро- и взрывоопасных материалов // Доклады II Всерос. научно-практ. конф. молодых ученых «Материалы и технологии XXI века». 2005. С. 93.
2. *Передерин Ю. В., Попок Н. И.* Использование информационных технологий применительно к прогнозированию параметров безопасности взрывчатых веществ // Межвуз. сб. «Измерения, автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях». 2005. С. 54.
3. *Кинг Р.* Химические приложения топологии и теории графов. Москва: «МИР», 1987. 822 с.
4. *Mohammad Hossein Keshavarz, Mohammad Jaafari.* Investigation of the Various Structure Parameters for Predicting Impact Sensitivity of Energetic Molecules via Artificial Neural Network. Propellants, Explosives, Pyrotechnics 31. №3 (2006). P.p.216-225.

© **Ю. В. Передерин** – ин-тут проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск Алтайского края.