

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАБОТОСПОСОБНОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ, ЯВЛЯЮЩИХСЯ ВЗРЫВЧАТЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ

Ю.В. Передерин

Проведен анализ свойств ряда энергетических конденсированных систем 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

Создание энергетических конденсированных систем (ЭКС) с заданными свойствами или достижение максимальных значений этих свойств, а также условий, в том числе и технологических, необходимых для выполнения поставленных задач, является одной из основных целей исследований в области специальной химии. Моделирование свойств таких ЭКС зачастую связано с выбором значащих факторов, коррелирующих с целевым параметром, что чаще всего сопряжено с некорректным их выбором в связи с малым объемом экспериментальных данных или, наоборот, большим объемом экспериментальных данных, не поддающихся удовлетворительному математическому анализу. Перспективным выходом в таких ситуациях могут служить эффективные системы многофакторного анализа, с помощью которых можно учесть все факторы, как значимые, так и незначительные.

Для решения поставленных задач был использован нейросетевой механизм аппроксимации [1–6], позволяющий учитывать при создании математической модели до 256 факторов, в той или иной степени влияющих на конечное значение прогнозируемого параметра. Для проведения исследований по экспериментальным данным была составлена база данных, часть которой приведена в таблице 2, по ЭКС, включающая в себя следующие параметры: состав (вещество, %), плотность, скорость детонации ЭКС; плотность,

молекулярную массу, скорость детонации взрывчатых компонентов ЭКС. Численные значения аналогичных параметров невзрывчатых компонентов имеют однозначное влияние на параметры работоспособности (снижение полезных характеристик с увеличением содержания в ЭКС). По этой причине свойства невзрывчатых компонентов в созданную базу данных не были внесены.

При составлении базы данных были использованы свойства ЭКС, в составе которых содержались взрывчатые вещества, их характеристики приведены в таблице 1.

При выборе дескрипторов при попытке максимально информативно описать тот или иной ВЭК были приняты во внимание некоторые соображения. Логически обосновано, что численное значение скорости детонации формируется за счет энтальпий образования компонентов ВЭК, плотности ЭКС в целом, а также за счет влияния химической природы взрывчатых компонентов. При создании базы данных влияние энтальпий образования компонентов ВЭК выразилось через скорость их детонации (вещества, обладающие высокой скоростью детонации, имеют высокие значения энтальпии образования), а влияние химической природы послужило основой для принятия в качестве дескрипторов молекулярных масс индивидуальных соединений. Влияние процентного содержания каждого компонента в составе на свойства ВЭК в целом очевидно.

Таблица 1

Свойства взрывчатых компонентов смесевых ЭКС

Взрывчатый компонент	Плотность компонента, г/см ³	Молекулярная масса компонента, г/моль	Скорость детонации компонента, м/с
Тротил	1,64	227,13	7000
Гексоген	1,77	222,12	8360
Октоген	1,84	296,1	9100
ТЭН	1,77	316	8350
НТО (нитротриазолон)	1,88	129	8200
CL-20	2,04	438,19	9650
ТАТБ	1,80	258,18	7350
Тетрил	1,73	287,09	7570

Таблица 2

Свойства ЭКС и их компонентов (часть базы данных)

№ п/п	φ ₁ , %	ρ ₁ , г/см ³	D ₁ , м/с	M ₁ , г/моль	φ ₂ , %	ρ ₂ , г/см ³	D ₂ , м/с	M ₂ , г/моль	φ ₃ , %	ρ ₃ , г/см ³	D ₃ , м/с	M ₃ , г/моль	ρ _{см} , г/см ³	D _{см} , м/с
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	60	1,64	7000	227,13	40	1,77	8360	222,12	0	0	0	0	1,72	7840
2	50	1,88	8200	129	50	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,71	7370
3	60	1,88	8200	129	40	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,78	7840
4	50	1,88	8200	129	12	1,77	8360	222,12	38	1,64	7000	227,1	1,79	7660
5	40	1,88	8200	129	20	1,77	8360	222,12	40	1,64	7000	227,1	1,78	7700
6	82,2	1,84	9100	296,1	0	0	0	0	0	0	0	0	1,77	8420
7	77	1,84	9100	296,1	0	0	0	0	0	0	0	0	1,73	7930
8	77	1,84	9100	296,1	0	0	0	0	0	0	0	0	1,76	7990
9	77	1,84	9100	296,1	0	0	0	0	0	0	0	0	1,77	8260
10	91	1,77	8360	222,12	0	0	0	0	0	0	0	0	1,59	8100
11	59,5	1,77	8360	222,12	39,5	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,67	7860
12	65	1,77	8360	222,12	35	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,72	8036
13	75	1,77	8360	222,12	25	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,62	7950
14	60	1,84	9100	296,1	40	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,80	8160
15	75	1,84	9100	296,1	25	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,84	7930
16	24	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	0	0	0	0	2,61	4925
17	44,15	1,77	8360	222,12	29,31	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,76	7367
18	67	1,77	8360	222,12	0	0	0	0	0	0	0	0	1,68	7600
19	64	1,77	8360	222,12	36	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,71	8030
20	50	1,773	8350	316	50	1,64	7000	227,13	0	0	0	0	1,65	7470

После сбора данных по свойствам и параметрам ВЭК и перенесения ее в требуемый формат (.xls) были проведены следующие ниже исследования.

Факторный анализ показал (встроенная опция программного пакета Deductor), что факторами, влияющими на такой параметр работоспособности ВЭК как скорость детонации влияют (в порядке убывания значимости): скорость детонации преобладающего (по содержанию и(или) по параметрам работоспособности) взрывчатого компонента, его скорость детонации, плотность, молекулярная масса, общая плотность ВЭК, свойства других компонентов ВЭК.

При попытке обработать базу данных при помощи линейной регрессии были получены весьма противоречивые результаты. Для ЭКС, состоящих из трех взрывчатых компонентов, скорость детонации превысила порог 50000 м/с, а для шести ЭКС аппроксимированная скорость детонации оказалась отрицательной величиной, что противоречит здравому смыслу.

Одной из причин невозможности корректного моделирования при помощи линейной регрессии является наличие в базе данных полей, т.е. отсутствия некоторых данных в силу особенностей рецептур ЭКС (разное количество взрывчатых компонентов в составе).

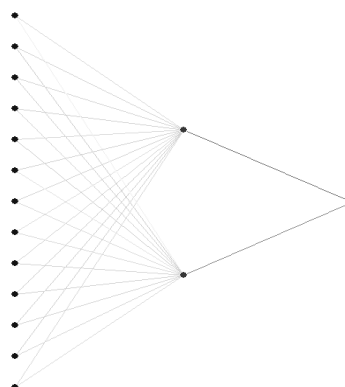


Рисунок 1. Нейронная сеть формата 13_2_1

В связи с отсутствием результативного математического моделирования классическими методами при аппроксимации параметров работоспособности, связанной с анализом и обработкой созданной базы данных, было проведено исследование табличных значений при помощи нейронных сетей. Архитектура сети была настроена в соответствии с ранее обоснованными соображениями [7-9] и соответствовала формату 13_2_1 (13 регистрируемых параметров обрабатываются на скрытом слое в двух нейронах с целью аппроксимации одного параметра, здесь и далее база данных хаотично делится на 70 % обучающей выборки и 30 % тестовой, рисунок 1). Учитывая возможность переобучения сети, и с учетом предыдущего опыта работ с нейросетями, количество эпох обучения было

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАБОТОСПОСОБНОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

принято 350. Визуально результаты моделирования представлены на рисунке 2.

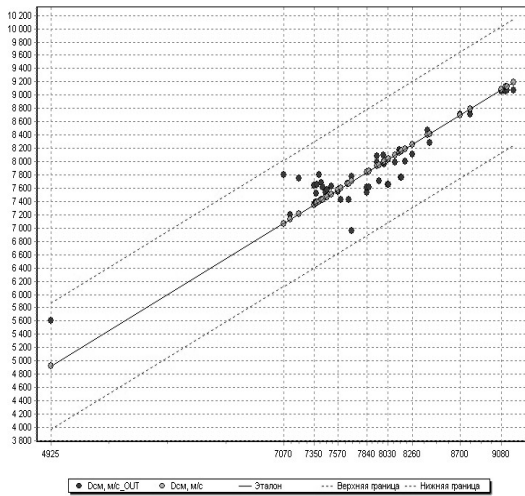


Рисунок 2. Диаграмма рассеяния после обработки базы данных при помощи нейронных сетей

Спрогнозированные значения оказались внутри доверительного интервала в 18 % (пунктирная линия), более того, преимущественно аппроксимированные значения вплотную приближены к эталонной прямой.

ЭКС со скоростью детонации 4925 м/с является самой низкодетонирующей в созданной базе данных. Указанная ЭКС (строка 16 базы данных) является относительно высокоплотным, но с низким содержанием взрывчатого компонента (24 %), а также является экспериментальным и малоперспективным в плане использования в качестве ВЭК. По этой причине для создания более корректной прогностической модели строку 16 созданной базы данных решено сделать неиспользуемой ни в качестве обучающего примера, ни в качестве проверочной выборки.

В соответствии с выбранным алгоритмом с помощью процедуры кластерного анализа разделим базу данных на две части для аппроксимации внутри кластеров с целью увеличения точности. Рассмотрим подробнее состав каждого кластера.

Несмотря на отсутствие моделирования свойств ЭКС при помощи линейной регрессии, обработка кластерным анализом разделила базу данных на два кластера:

- в первый кластер вошли ЭКС, скомпонованные из двух (или более – строки 4 и 5) взрывчатых веществ;

- во второй кластер вошли ЭКС, состоящие из взрывчатого вещества и инертной добавки.

Следует отметить, что ни одна ЭКС, со-

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2010

стоящая из двух взрывчатых веществ, не была отнесена ко второму кластеру. В свою очередь, ни одна ЭКС, в составе которой только одно взрывчатое соединение не оказался в первом кластере.

Такая точная классификация свидетельствует о наличии неучтенных факторов внутри каждого кластера и является основанием предположить существование выраженных зависимостей скоростей детонации ЭКС от плотности и свойств компонентов, входящих в их состав внутри каждого кластера. Для выявления математических зависимостей внутри каждого кластера проведем анализ каждого из них с помощью нейронных сетей. Результаты моделирования представлены на диаграммах (рисунки 3 и 4).

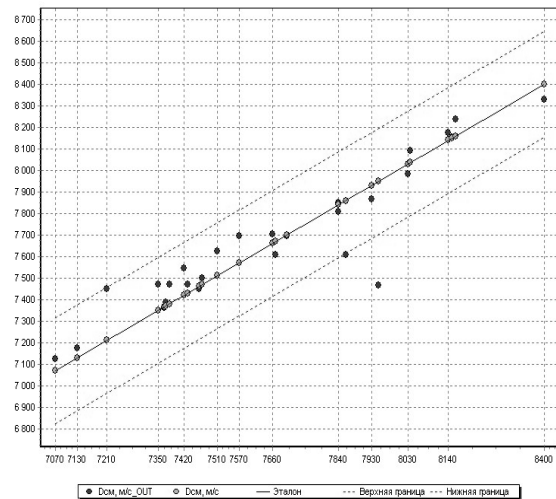


Рисунок 3 – Диаграмма рассеяния при моделировании скорости детонации ЭКС после анализа кластера 1с помощью нейронных сетей

Максимальная ошибка аппроксимации составила порядка 18,5 % (250 м/с) для первого кластера и 9 % (150 м/с) для второго (ошибка, отнесенная к диапазону аппроксимации; значение ошибки, отнесенное ко всему диапазону значений скорости детонации 1500...9800 м/с составит, соответственно, 3 % и 2 %).

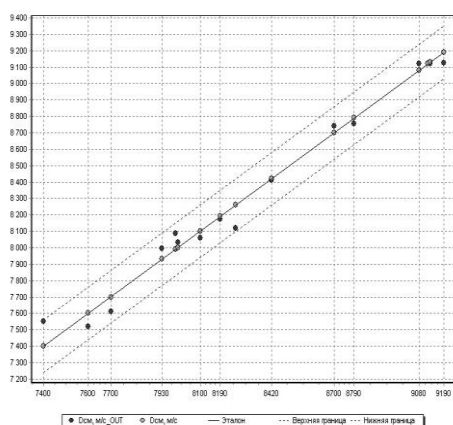


Рисунок 4 – Диаграмма рассеяния при моделировании скорости детонации ЭКС после анализа кластера 1 с помощью нейронных сетей

В соответствии с проведенными исследованиями откорректируем алгоритм прогноза скорости детонации ЭКС:

- создание электронных баз данных по свойствам компонентов ЭКС;

- 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, превращающих дальнейший поиск математических зависимостей бессмысленными);

- предварительная кластеризация базы данных с целью объединения веществ по группам в соответствии с вошедшими и не вошедшими в базу данных признаками;

- нейросетевая аппроксимация внутри кластеров с созданием электронной математической модели аппроксимации;

- внесение входных параметров ЭКС, для которого осуществляется аппроксимация в существующую базу данных;

- выявление кластера, к которому была отнесена целевая ЭКС;

- прогнозирование целевого параметра в предварительно созданных моделях аппроксимации при помощи процедуры «что-если» целевого параметра ЭКС, для которой осуществляется аппроксимация.

Для проверки возьмем гипотетическую ЭКС: монокристалл CL-20 с плотностью $\rho=2,04$ г/см³ и скоростью детонации $D=9650$ м/с (расчетная), причем скорость детонации CL-20 выходит за границы интервала аппроксимации.

В соответствии с уже имеющимися электронными моделями прогноза линейно-регрессионный анализ уже проведен. Внесем эту ЭКС в базу данных и проведем кластеризацию. Как и следовало ожидать, монокристалл CL-20 был отнесен ко второму кластеру. Нейросетевые математические модели аппроксимации для обоих кластеров уже также имеются. Прогнозирование скорости детонации для монокристалла CL-20 дало значение 9150 м/с, что близко к значениям реальных экспериментов по измерению скорости детонации компактированного порошка CL-20.

ВЫВОДЫ

Моделирование свойств ЭКС по указанному алгоритму оказалось эффективнее других методов математического анализа. На основе проведенных исследований возможна аппроксимация свойств ЭКС без проведения эксперимента, либо формирование ЭКС с заданными свойствами на основе математической модели с последующим экспериментальным подтверждением.

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. Передерин Ю.В. // IV Международная конференция студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: труды конференции, Томск. – 2007. – С. 102-104.
8. Передерин Ю.В. // IV Всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем»: материалы конференции, Томск. – 2008. – С. 234–237.
9. Ю.В. Передерин, А.Г. Суханова. // Доклады конф. молодых ученых «Перспективы создания и применения конденсированных энергетических материалов». – Бийск. – 2008. – С. 155-156.