

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2013.02.001

主成分分析法用于单质炸药爆轰性能评估的研究^{*}

汪 飞 何中其 陈网桦
南京理工大学化工学院(江苏南京,210094)

[摘 要] 炸药的爆轰性能是评价炸药综合毁伤能力的重要指标,是进行炸药装药设计、开发和优选工作的前提。为实现对炸药的综合爆轰性能进行合理评估,必须对炸药的 5 大爆轰参数(爆热、爆速、爆压、爆容、爆温)进行综合考虑和计算。尝试应用针对多元统计技术的主成分分析法,对 TNT、RDX、HMX 等常用单质炸药的所有爆轰参数开展了分析与评估。结果表明,炸药各爆轰参数的信息重叠度较大,主成分的贡献率可达到 90.1%,在爆轰性能综合评估中可以只参考爆热和爆速。最后利用第一和第二主成分的贡献率为权数,构造了炸药爆轰性能综合评估函数;对常用炸药的强弱排序也与各自威力经验值相符,评估有效。

[关键词] 爆轰性能评估 爆热 爆速 主成分分析法

[分类号] TJ55 O381

引言

炸药爆炸时,以快速放热的形式释放其化学能,并形成高温高压的气态产物。爆炸产物在周围介质膨胀时产生冲击波,并传递动能给周围的介质,从而完成对介质的粉碎、破坏、压缩和抛掷等机械功。可以说,炸药的 5 大爆轰参数(爆热、爆速、爆压、爆容、爆温)是其产生破坏、毁伤效能的决定因素。因此,无论在军事还是民用工业领域中,为了能达到预期的作用效果,需要预先科学、合理地评估炸药的爆轰性能。Muthurajan H. 等^[1-2]对高能材料的热力学参数进行计算模拟,并开发了可以获得爆速、爆压、爆容、氧平衡等参数的计算机代码,但没有涉及到爆轰的综合性能问题。吴雄^[3]等以炸药爆轰产物的比动能为基础,评估炸药的爆轰性能,胡庆贤^[4]提出用模糊数学方法,选用多种爆轰参数和与爆炸功有关的特征值评价炸药的能。近期相关研究中,何中其^[5]等建立了普遍适用的炸药爆轰性能的模糊综合评估方法,其中考虑了爆热、爆速和爆压 3 个因素。本文将统计分析中常用的主成分分析法用于炸药爆轰性能的评估。

主成分分析法(PCA)是一种多元统计技术^[6],它利用数理统计方法找出各因素之间的相互关系,把一些相关性较强的指标进行压缩,得到几个互不相关但却能反映原有指标绝大部分信息的主成分,反映信息量最大的综合指标为第一主成分,其次为

第二主成分。主成分的个数是由需反映的全部信息的百分比来决定,几个主成分之间是互不相关的。最后可按主成分的贡献率为权数构造一个综合评估函数,从而对各个体进行综合评估。在此过程中,没有进行主观判断,是一种具有较强客观性和科学性^[7]的评价方法。

本文首先介绍了主成分分析法的原理和步骤,然后利用主成分分析法对几种常见的单质炸药的爆轰性能进行了评估。

1 主成分分析法的原理和步骤

1.1 主成分分析法的原理

主成分分析法是一种降维的统计方法,它借助于一个正交变换,将其分量相关的原随机向量转化成为与其分量不相关的新随机向量,这在代数上表现为将原随机向量的协方差阵变换为对角阵,在几何上表现为将原坐标系变换成新的正交坐标系,使之指向样本点散布最开的 p 个正交方向,然后对多维变量系统进行降维处理,使之能以一个较高的精度转化成低维变量系统,再通过构造适当的价值函数,进一步把低维系统转化成一维系统。

1.2 主成分分析法的步骤

1)样本和指标的选取。

将样本和指标的数据写成矩阵的形式,行为样本,列为指标参数,元素 x_{ij} 表示第 $i(i = 1, 2, \cdots, n)$ 个样本第 $j(j = 1, 2, \cdots, p)$ 个指标的值,确定数据矩

^{*} 收稿日期:2012-10-15
基金项目:国防科技工业基础产品创新计划火炸药科研专项
作者简介:汪飞(1987~),男,硕士,主要从事爆炸与安全防护的研究。E-mail:wangfly_1987@126.com
通信作者:何中其(1978~),男,讲师,从事爆炸作用及其应用、安全技术及工程研究。E-mail:hzzq555@163.com

阵为

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}_{n \times p}$$

2) 对原始数据进行标准化^[8]。

为了消除由于数量级或量纲上的不同可能带来的一些不良影响,对原始数据标准化。

$$X' = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{\sigma_j}$$

其中, $\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij}; \sigma_j = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)^2}$

3) 对标准化后的数据矩阵计算协方差和相关系数矩阵^[9]。

协差阵:

$$\Sigma = [C_{ij}]_{p \times p};$$

相关阵:

$$R = [r_{ij}]_{p \times p}; r_{ij} = \frac{C_{ij}}{\sqrt{C_{ii}} \sqrt{C_{jj}}} (i = 1, 2, \cdots, p)。$$

因为 R 是实对称矩阵(即 $r_{ij} = r_{ji}$),所以只需计算上三角元素或下三角元素即可。

4) 计算 R 的特征值 λ_i 及相应的特征向量 u_i ,并按 λ_i 的大小排序($i = 1, 2, \cdots, p$)。

5) 计算主成分贡献率及累积贡献率^[10]。

$$\text{贡献率} = \lambda_k / \sum_{i=1}^p \lambda_i;$$

$$\text{累积贡献率} = \sum_{i=1}^q \lambda_i / \sum_{i=1}^p \lambda_i。$$

6) 确定主成分个数。

一般取累积贡献率 $\geq 80\%$ 的前 q 个主成分,或选用特征值 ≥ 1 的前 q 个主成分。

7) 求出各样本的综合得分值,并按先后顺序排列。

前 q 个主成分的特征向量组成的矩阵为 $U_{p \times q}$,则缩减后 q 个主成分得分为 $Y_{n \times q} = X'_{n \times p} U_{p \times q}$ 。

$$\text{综合得分为: } Y = \sum_{j=1}^q Y_{n \times j} \cdot \omega_j,$$

其中, $\omega_j = \frac{\lambda_j}{\sum_{j=1}^q \lambda_j} (j = 1, 2, \cdots, q)。$

2 爆轰性能的主成分分析

选取 6 种常见炸药的爆轰参数和密度,如表 1,用 MATLAB 根据上述步骤进行计算,结果如下:

1) 对原始数据矩阵进行标准化后所得的新矩阵为 $X'_{6 \times 6}$ 。

2) 求出 X' 的相关系数矩阵,如表 2 所示,由此可见爆轰各指标间具有一定的相关性。其中爆速和爆压、爆压和爆容、爆速和爆容的相关系数分别为

表 1 几种常见炸药的爆轰参数^[11-13]

Tab. 1 Detonation parameters of several common explosives

炸药	爆热/ ($\text{mJ} \cdot \text{kg}^{-1}$)	爆速/ ($\text{m} \cdot \text{ms}^{-1}$)	爆压/ GPa	爆容/ ($\text{L} \cdot \text{kg}^{-1}$)	爆温/ K	密度* / ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)
TNT	5.066	6.932	20.94	620	2589	1.68
RDX	5.820	8.380	29.39	908	3700	1.70
HMX	5.677	9.124	31.35	782	3038	1.84
PETN	5.895	8.300	28.74	790	3816	1.70
特屈儿	4.731	7.400	24.31	672	3248	1.63
硝化甘油	6.699	7.700	25.30	715	4000	1.60

注: * 密度为相应爆速时的密度。

表 2 相关系数矩阵

Tab. 2 Correlation coefficient matrix

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
X_1	1.0000	0.3800	0.3906	0.4231	0.7506	-0.0881
X_2	0.3800	1.0000	0.9847	0.7603	0.2895	0.7646
X_3	0.3906	0.9847	1.0000	0.8383	0.4047	0.6717
X_4	0.4231	0.7603	0.8383	1.0000	0.5457	0.3771
X_5	0.7506	0.2895	0.4047	0.5457	1.0000	-0.3772
X_6	-0.0881	0.7646	0.6717	0.3771	-0.3772	1.0000

0.9847、0.8383、0.7603,爆热和爆温的相关系数为 0.7506,对此可以认为运用主成分分析法筛选出主成分以代替这 6 个具有较大重叠信息的爆轰指标。

一般在评估炸药爆轰性能时,爆热是首要考虑的指标,爆热的大小直接影响了爆轰的效果和其他参数^[14],爆速对爆轰性能影响也大,爆速值也易查易测,爆热、爆速与其他爆轰参数又有较大的相关系数。因此,在以后评估炸药综合性能而需考虑爆轰参数时可以只考虑爆热、爆速。

另外,密度和爆速、爆压的相关系数为 0.7646、0.6717,这与实际经验密度对爆速、爆压的大小有一定影响是吻合的。

3)求相关系数矩阵的的特征值、贡献率及累积贡献率,如表 3 所示,可见前两个主成分的累积贡献率已达到 90.1%,大于 80%,即可以描述原变量信息达到 90.1%。

4)计算主成分的特征向量,如表 4。即得评估指标:

$$Y_1 = 0.3019X_1 + 0.5025X_2 + 0.5149X_3 + 0.4703X_4 + 0.2815X_5 + 0.3014X_6$$

$$Y_2 = -0.4823X_1 + 0.2025X_2 + 0.1290X_3 - 0.0611X_4 - 0.6038X_5 + 0.5843X_6$$

表 3 相关系数阵的特征值、贡献率及累积贡献率
Tab.3 Eigenvalue, contribution ratio and cumulative contribution ratio of correlation coefficient matrix

序号	特征值	贡献率/%	累积贡献率/%
1	3.56997	0.5950	0.5950
2	1.83619	0.3060	0.9010
3	0.43221	0.0720	0.9730
4	0.15318	0.0255	0.9985
5	0.00846	0.0014	0.9999
6	0.00000	0.0000	1.0000

表 4 主成分特征向量
Tab.4 Eigenvector of principal component

	Y_1	Y_2
X_1	0.3019	-0.4823
X_2	0.5025	0.2025
X_3	0.5149	0.1290
X_4	0.4703	-0.0611
X_5	0.2815	-0.6038
X_6	0.3014	0.5843

5)计算各炸药主成分得分、综合评分及排序,见表 5、表 6。将原始数据标准化后的矩阵数据代入上一步评估指标,可得主成分得分 Y_1 和 Y_2 ;综合评

分 Y 为 Y_1 、 Y_2 乘以各自特征值所占主成分总特征值分数的和,即 $Y = Y_1 \times 0.6604 + Y_2 \times 0.3396$ 。

表 5 主成分得分
Tab.5 Principal component score

炸药	Y_1	Y_2
TNT	-2.7472	0.8536
RDX	1.6291	-0.3015
HMX	1.8829	1.8630
PETN	1.0392	-0.4563
特屈儿	-1.7378	0.1960
硝化甘油	-0.0663	-2.1549

表 6 综合评分及排序
Tab.6 Composite score and sorting

炸药	Y	排名
TNT	-1.5243	6
RDX	0.9735	2
HMX	1.8762	1
PETN	0.5314	3
特屈儿	-1.0811	5
硝化甘油	-0.7756	4

弹道臼炮值能较好地表示炸药能量,它是爆热和爆容的综合度量,在文献[15]中,其实测值的大小排序为 HMX(150% TNT) = RDX(150%) > PETN(145%) > 硝化甘油(140%) > 特屈儿(130%) > TNT(100%),验证了爆速和爆容具有较高相关度的正确性及排序结果与实际经验的相符性。

3 结论

1)爆热、爆速、爆压、爆容和爆温的信息重叠度较大,在后续的炸药毁伤效能综合评估时,爆轰参数可以只考虑爆热和爆速的作用。

2)爆速和爆压的大小受密度的影响,要获得较大爆速和爆压,可以适当增加密度。

3)主成分分析法可以定量分析、计算简明。通过计算,6 种常见炸药爆轰性能高低排序为:

$$HMX > RDX > PETN > \text{硝化甘油} > \text{特屈儿} > \text{TNT}.$$

这一结果,与实际经验相符,可信度较高。

致谢:本文资料搜集工作得到南京理工大学的刘荣海老师的帮助,在此表示感谢!

参 考 文 献

[1] Muthurajan H, Sivabalan R, Talawar M B, et al. Computer simulation for prediction of performance and thermodynamic parameters of high energy materials[J]. Journal of Hazardous Materials,2004,112(1-2):17-33.

- [2] Muthurajan H, Sivabalan R, Talawar M B, et al. Prediction of heat of formation and related parameters of high energy materials [J]. Journal of Hazardous Materials, 2006, 133(1-3): 30-45.
- [3] 吴雄, 林如山. 炸药爆轰性能的评价[J]. 火炸药, 1980(5): 30-33.
Wu Xiong, Lin Rushan. Detonation performance evaluation of explosives [J]. Explosives & Propellants, 1980(5): 30-33.
- [4] 胡庆贤. 关于炸药能量的讨论[J]. 火炸药学报, 2000(2): 42-44.
Hu Qingxian. Discussion about Explosive Energy [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2000(2): 42-44.
- [5] 何中其, 黄磊, 董艳丽, 等. 炸药爆轰性能的系统综合评估技术[C]. 第十届全国爆炸与安全技术学术会议论文集. 昆明: 2011.
He Zhongqi, Huang Lei, Dong Yanli, et al. Study on fuzzy comprehensive evaluation of detonation performance [C]. Tenth national explosions and security technology conference. Kunming: 2011.
- [6] Shu Xiaozhou, Qiu Yin, Kuang Dingbo. Principal component analysis of TM images for monitoring inland water quality [M]. Proceedings of SPIE, 1999: 460-464.
- [7] 何晓群. 多元统计分析[M]. 3 版. 北京: 中国人民大学出版社, 2012.
- [8] 王鹏华, 李源, 汪文革. 基于主成分分析的自行火炮作战效能评估[J]. 兵工自动化, 2009(5): 24-25.
Wang Penghua, Li Yuan, Wang Wen' ge. Combat effectiveness evaluation of self-propelled artillery based on principal component analysis [J]. Ordnance Industry Automation, 2009(5): 24-25.
- [9] 肖志成, 刘小方, 刘靖洁. 基于主成分分析和因子分析的导弹状态评估参数的优化[J]. 战术导弹技术, 2011(4): 23-29.
Xiao Zhicheng, Liu Xiaofang, Liu Qingjie. Optimization of missile health assessment parameters based on principle component analysis and factor analysis [J]. Tactical Missile Technology, 2011(4): 23-29.
- [10] 夏禹杰, 邱彤, 陈丙珍. 主成分分析法在估算石脑油裂解参数中的应用[J]. 计算机与应用化学, 2006(1): 25-28.
Xia Yujie, Qiu Tong, Chen Bingzhen. The application of principal component analysis (PCA) on computing of the parameters in naphtha pyrolysis [J]. Computers and Applied Chemistry, 2006(1): 25-28.
- [11] 钟一鹏, 胡雅达, 江宏志. 国外炸药性能手册[M], 北京: 兵器工业出版社, 1990.
- [12] 郑孟菊, 俞统昌, 张银亮. 炸药的性能及测试技术 [M]. 北京: 兵器工业出版社, 1990.
- [13] 《兵器工业科学技术辞典》编辑委员会. 兵器工业科学技术辞典 火药与炸药 [M], 北京: 国防工业出版社, 1991.
- [14] 董艳丽. 炸药爆轰性能的模糊综合评估技术研究 [D]. 南京: 南京理工大学, 2010.
Dong Yanli. Study on fuzzy comprehensive evaluation of detonation performance [D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2010.
- [15] 《炸药理论》编写组. 炸药理论 [M]. 北京: 国防工业出版社. 1982.

Evaluation of Explosive Detonation Performance by Principal Component Analysis (PCA)

WANG Fei, HE Zhongqi, CHEN Wanhua

School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology (Jiangsu Nanjing, 210094)

[ABSTRACT] The detonation performance is not only an important indicator of the comprehensive evaluation for explosive damage ability, but also the premise for the explosive design, development and optimization work. To achieve a reasonable assessment of the explosive detonation performance, five detonation parameters, such as the heat of explosion, velocity of detonation, pressure of detonation, volume of explosion, temperature of explosion, require comprehensive consideration and calculation. Principal component analysis based on multivariate statistical techniques is attempted to apply to analyzing and evaluating detonation parameters of TNT, RDX, HMX and other ordinary explosives. The results showed that the overlap ratio of the detonation parameters is high with the contribution rate of the main ingredients to be up to 90.1%. The explosion heat and the detonation velocity can only be referred in the comprehensive assessment of the detonation performance. Finally a comprehensive evaluation function with the contribution rate of the first and second principal components is constructed. It can be seen that the sorting of detonation performance of common explosives is consistent with their empirical power value, therefore, the assessment is valid, and worthy of promotion.

[KEY WORDS] detonation performance evaluation, the heat of explosion, the velocity of detonation, principal component analysis method