

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2015.02.007

支持向量机法预测单质炸药爆速的研究^{*}

杨 惠 杨建钢 方学谦

西安近代化学研究所(陕西西安,710065)

[摘 要] 为了更好地预估新型含能材料的爆轰参数,应用支持向量机方法建立了单质炸药爆速的预测模型。利用炸药分子的相对分子质量(M)、装药密度(ρ)、氧平衡和碳、氢、氧、氮的质量分数(w_C 、 w_H 、 w_O 、 w_N) 7 种参数作为输入,构建了预测模型。模型预测结果表明,爆速预测值与实验值有较好的一致性,最大相对误差为 4.79%,最小相对误差为 0.04%,模型的预测精度较好,具有一定的外推性。该方法也可作为炸药其他爆轰参数的预测提供指导,具有一定的实用价值。

[关键词] 炸药;支持向量机;爆速;预测

[分类号] TD235.2⁺¹

引言

随着计算机技术的迅速发展,在结构与性能预测领域出现了一些如遗传算法、神经网络等^[1-3]新的计算机语言方法。这些方法虽然理论基础成熟,但在实际应用中由于自身的缺陷,导致其预测效果不太理想^[4]。支持向量机(support vector machine, SVM)是 Vapnik 等^[5-6]提出的一类新型机器学习方法,具有精度高、自适应能力强、速度快等优点,目前已成为各国研究者的研究重点。

本文应用支持向量机方法对单质炸药的爆速进行了理论预测,获得了令人满意的预测效果。

1 建模方法

1.1 参数的选择

影响炸药爆速的主要因素有炸药自身的物化性质、分子结构、组成元素的质量分数、修正氧平衡、装药密度等。根据爆炸理论和实践分析,综合考虑影响爆速的各种因素,最终选择了 7 个对爆速有重要影响的参数(表 1、表 2):相对分子质量(M)、装药密度(ρ)、氧平衡和碳、氢、氧、氮的质量分数(w_C 、 w_H 、 w_O 、 w_N)来作为模型的输入参数。共选取了 42 种单质炸药的爆速(表 3、表 4),来作为模型的输出参数。其中,随机抽取了 32 种作为训练集,用于建立模型;10 种作为测试集,用于检验模型的预测性能。

1.2 模型的建立

SVM 算法采用改进的 Libsvm 工具箱,结合

MATLAB 2009 运行,选择了应用最为广泛的 RBF 径向基函数作为核函数。输入参数和输出的爆速数据先经过 $[0,1]$ 范围的归一化处理,并采用格点搜索(GS)的方法来选择最佳的模型参数组合。建模中需要确定的参数有惩罚系数 C 、RBF 核函数的宽度 γ 和不敏感系数 ε 。根据模型特点, ε 取 0.1。 C 和 γ 的搜索范围为 $[2^{-8}, 2^8]$,步长为 2,对模型进行反复训练,并根据对训练集进行“留一法”交互验证所得的交互验证系数 Q_1^2 和均方根误差 E_R 的大小来确定最佳的 C 和 γ 。对应 Q_1^2 最大而 E_R 最小所选择的最优参数为:惩罚系数 $C=8$,核函数的宽度 $\gamma=0.7071$,不敏感损失系数 $\varepsilon=0.1$ 。

根据所确定的算法,利用训练集中的 32 个样本进行训练,经过网络的迭代训练后,程序输出结果参数,便建立了预测炸药爆速的支持向量机模型。

2 模型的精度及误差分析

利用建立好的模型,对训练集和测试集样本的爆速值进行了预测,并将模型的预测值与实验值进行比较,结果如表 3(训练集)和表 4(测试集)所示。从表中数据可以看出,模型的预测值与实验值非常接近。对测试集中 10 种炸药的爆速进行预测,结果表明,该模型的预测精度较高,相对误差都在 $\pm 5\%$ 以内。综合表 3、表 4,所有样本的爆速预测中,最大的相对误差为 -4.79% ,最小相对误差为 0.04% 。说明所建立的模型具有一定的外推性,可以用于单质炸药的爆速预测。在设计和预估新型含能材料的

* 收稿日期:2014-06-29

基金项目:2013 年度火炸药燃烧国防科技重点实验室基金项目(9140C350406130C35126)

作者简介:杨惠(1986~),女,硕士,从事火炸药性能测试与评估。E-mail: goodluck7788@qq.com

表 1 训练集所选炸药及结构参数

Tab. 1 Explosives and structure parameters selected for train set

炸药名称	M	$w_c/\%$	$w_H/\%$	$w_O/\%$	$w_N/\%$	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	氧平衡
二甘醇二硝酸酯	196	24.49	4.08	57.14	14.29	1.38	-0.408
环三亚甲基三亚硝胺	174	20.69	3.45	27.59	48.28	1.49	-0.552
特屈儿	287	29.27	1.74	44.60	24.39	1.71	-0.474
六亚甲基三过氧化二胺	208	34.62	5.77	46.15	13.46	1.10	-0.923
硝酸胍	95	0	5.26	50.53	44.21	1.66	0.084
二硝基苯氧基硝酸乙酯	273	35.16	2.56	46.89	15.38	1.58	-0.674
一缩二季戊四醇六硝酸酯	524	22.90	3.05	58.02	16.03	1.60	-0.275
三羟甲基乙基甲烷三硝酸酯	269	26.77	4.09	53.53	15.61	1.48	-0.506
N,N-二硝基乙二胺	150	16.00	4.00	42.67	37.33	1.65	-0.320
乙基苦味酸	257	37.35	2.72	43.58	16.34	1.55	-0.778
六硝基二苯胺	439	32.80	1.14	43.74	22.32	1.60	-0.528
二硝基重氮酚	210	34.29	0.95	38.10	26.67	1.63	-0.610
四羟甲基环戊酮四硝酸酯	384	28.13	3.13	54.17	14.58	1.57	-0.458
三硝基茴香醚	243	34.57	2.06	46.09	17.28	1.57	-0.626
吉纳	240	20.00	3.33	53.33	23.33	1.60	-0.267
2,4,6-三硝基苯胺	224	32.14	1.79	28.57	37.50	1.72	-0.714
1,3,5-三硝基苯	213	33.80	1.41	45.07	19.72	1.69	-0.563
梯恩梯	227	37.00	2.20	42.29	18.50	1.61	-0.740
苦味酸	229	31.44	1.31	48.91	18.34	1.76	-0.454
2,4,6-三硝基间-甲酚	243	34.57	2.06	46.09	17.28	1.68	-0.626
黑索今	222	16.22	2.70	43.24	37.84	1.77	-0.216
硝化甘露糖醇	452	15.93	1.77	63.72	18.58	1.73	0.071
2,3,4,6-四硝基苯胺	273	26.37	1.10	46.89	25.64	1.60	-0.322
太安	300	20.00	2.67	21.33	56.00	1.76	-0.533
三硝基苯胺	228	31.58	1.75	42.11	24.56	1.72	-0.561
四硝基甲烷	196	6.12	0	65.31	28.57	1.64	0.490
三羟甲基丙烷三硝酸酯	269	26.77	4.09	53.53	15.61	1.50	-0.506
二氨基三硝基苯	241	29.88	2.07	33.20	34.85	1.79	-0.631
2,4,6-三硝基苯甲醚	243	34.57	2.06	46.09	17.28	1.59	-0.626
硝化聚乙烯醇	89	26.97	3.37	53.93	15.73	1.50	-0.449
六硝基芪	438	38.36	1.37	21.92	38.36	1.70	-0.913
间-二硝基苯	168	42.86	2.38	38.10	16.67	1.57	-0.952

表 2 测试集所选炸药及结构参数

Tab. 2 Explosives and structure parameters selected for test set

炸药名称	M	$w_c/\%$	$w_H/\%$	$w_O/\%$	$w_N/\%$	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	氧平衡
硝化乙二醇	152	15.79	2.63	63.16	18.42	1.48	0
硝化二乙二醇	106	22.64	3.77	60.38	13.21	1.38	-0.302
三硝基氯苯	247	29.15	0.81	38.87	17.00	1.74	-0.453
二硝基二甲基草酰胺	206	23.30	2.91	46.60	27.18	1.48	-0.388
硝基甲烷	61	19.67	4.92	52.46	22.95	1.14	-0.393
奥克托今	296	16.22	2.70	43.24	37.84	1.89	-0.216
三硝基苯氧基硝酸乙酯	318	30.19	1.89	50.31	17.61	1.68	-0.453
三羟甲基硝基甲烷三硝酸酯	286	16.78	2.10	61.54	19.58	1.64	0
硝化甘油	228	31.58	1.75	63.16	18.42	1.60	-0.351
六硝基二苯乙烯	450	37.33	1.33	42.67	18.67	1.70	-0.676

表 3 训练集爆速预测结果

Tab. 3 Predicted results of detonation velocity for train set

炸药名称	实验值/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	预测值/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	残差/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	相对误差/%
二甘醇二硝酸酯	6 600	6 579.2	-20.8	-0.32
环三亚甲基三亚硝酸胺	7 300	7 279.2	-20.8	-0.29
特屈儿	7 850	7 620.2	-229.8	-2.93
六亚甲基三过氧化二胺	5 100	5 121.2	21.2	0.42
硝酸胍	8 500	8 479.1	-20.9	-0.25
二硝基苯氧基硝酸乙酯	6 800	6 702.3	-97.7	-1.44
一缩二季戊四醇六硝酸酯	7 400	7 420.1	20.1	0.27
三羟甲基乙基甲烷三硝酸酯	6 440	6 514.7	74.7	1.16
N,N-二硝基乙二胺	7 570	7 821.5	251.5	3.32
乙基苦味酸	6 500	6 433.8	-66.2	-1.02
六硝基二苯胺	7 200	7 221.2	21.2	0.29
二硝基重氮酚	7 000	7 020.7	20.7	0.30
四羟甲基环戊酮四硝酸酯	7 292	7 050.3	-241.7	-3.31
三硝基茴香醚	6 800	6 830.8	30.8	0.45
吉纳	7 730	7 710.2	-19.8	-0.26
2,4,6-三硝基苯胺	7 300	7 279.7	-20.3	-0.28
1,3,5-三硝基苯	7 350	7 078.6	-271.4	-3.69
梯恩梯	6 890	6 627.9	-262.1	-3.80
苦味酸	7 350	7 369.6	19.6	0.27
2,4,6-三硝基间-甲酚	6 850	6 969.0	119.0	1.74
黑索今	8 720	8 699.1	-20.9	-0.24
硝化甘露糖醇	8 260	8 239.9	-20.1	-0.24
2,3,4,6-四硝基苯胺	7 630	7 633.1	3.1	0.04
太安	8 260	8 240.1	-19.9	-0.24
三硝基苯胺	7 300	7 315.9	15.9	0.22
四硝基甲烷	6 360	6 379.6	19.6	0.31
三羟甲基丙烷三硝酸酯	6 440	6 560.0	120.0	1.86
二氨基三硝基苯	7 520	7 540.7	20.7	0.28
2,4,6-三硝基苯甲醚	6 660	6 857.5	197.5	2.97
硝化聚乙烯醇	7 000	6 979.7	-20.3	-0.29
六硝基芪	7 000	7 020.4	20.4	0.29
间-二硝基苯	6 100	6 120.4	20.4	0.33

表 4 测试集爆速预测结果

Tab. 4 Predicted results of detonation velocity for test set

炸药名称	实验值/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	预测值/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	残差/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	相对误差/%
硝化乙二醇	7 300	7 494.8	194.8	2.67
硝化二乙二醇	6 760	6 978.0	218.0	3.23
三硝基氯苯	7 200	7 242.1	42.1	0.59
二硝基二甲基草酰胺	7 100	7 277.3	177.3	2.50
硝基甲烷	6 290	6 307.1	17.1	0.27
奥克托今	9 110	9 055.4	-54.6	-0.60
三硝基苯氧基硝酸乙酯	7 600	7 453.9	-146.1	-1.92
三羟甲基硝基甲烷三硝酸酯	7 860	7 991.7	131.7	1.68
硝化甘油	7 700	7 331.3	-368.7	-4.79
六硝基二苯乙烯	7 000	7 005.5	5.5	0.08

爆速时,可以通过经验或半经验公式获得炸药的装药密度,将其代入本文的预测程序,从而对其性能进行初步筛选,以指导新型含能材料的合成和设计。

图 1、图 2 分别为训练集和测试集样本中爆速预测值与实验值的比较,可以看出,预测值均与实验值有较好的一致性,预测效果良好。

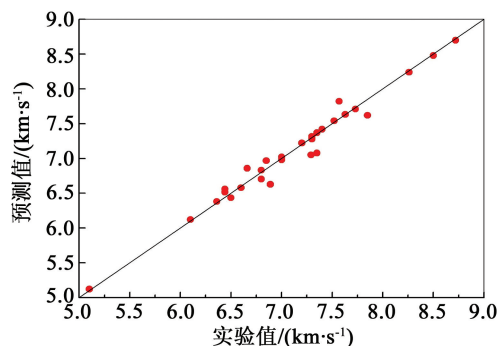


图 1 训练集中爆速预测值与实验值的比较

Fig. 1 Comparison of the detonating velocity between the predicted and experimental values for train set

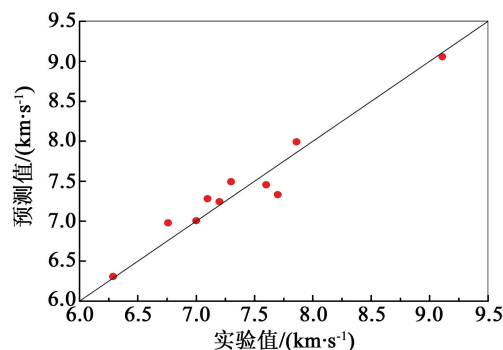


图 2 测试集中爆速预测值与实验值的比较

Fig. 2 Comparison of the detonating velocity between the predicted and experimental values for test set

对模型的结果进行计算分析,主要性能参数见表 5,其中, R^2 为复相关系数, Q_1^2 、 Q_e^2 为“留一法”交互验证系数^[7], E_R 为均方根误差, E_M 为平均绝对误差, n 为模型的样本数。可以看出,模型的复相关系数和交互验证系数均在 0.9 以上,说明模型不仅具有较强的预测精度,而且具有很好的稳定性。训练集

表 5 模型的主要性能参数

Tab. 5 Main performance parameters of the model

性能参数	训练集	测试集
R^2	0.975 6	0.944 5
Q_1^2	0.974 6	—
Q_e^2	—	0.944 9
$E_R/(m \cdot s^{-1})$	114	172
$E_M/\%$	1.03	1.83
n	32	10

和测试集的均方根误差分别为 114 m/s 和 172 m/s,炸药的爆速大多数在 7 000 ~ 8 000 m/s,100 m/s 左右的误差也在可接受范围内。

3 结论

本文选取 7 种参数作为炸药的分子结构描述符,构建了单质炸药爆速的支持向量机预测模型。该模型预测结果表明,爆速预测值与实验值有较好的一致性,最大相对误差为 4.79%,最小相对误差为 0.04%,模型的预测精度较好,具有一定的外推性。该方法为炸药爆速的预测提供了一种新方法,也为炸药其他爆轰参数的预测提供了指导,具有一定的实用价值。

参 考 文 献

- [1] 蔡星会,白少峰,孙新利,等. 基于人工神经网络的炸药爆炸参数预测[J]. 四川兵工学报,2010,31(1):1-3.
- [2] 马忠亮,徐方亮,刘海燕,等. 基于人工神经网络和混合遗传算法的炸药爆速预测[J]. 含能材料,2007,15(6):637-640.
Ma Zhongliang, Xu Fangliang, Liu Haiyan, et al. Predicting the detonating velocity of explosives based on artificial neural network and hybrid genetic algorithm[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2007, 15(6): 637-640.
- [3] 黄俊,周申范. 人工神经网络法预测炸药爆速的研究[J]. 火炸药学报,2000(1):34-37.
Huang Jun, Zhou Shenfan. Predicting the detonating velocity of explosives by artificial neural network[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2000(1): 34-37.
- [4] 丁凯,方向,陆凡东,等. 基于支持向量机的振动加速度峰值预测模型[J]. 探测与控制学报,2010,32(4):38-41.
Ding Kai, Fang Xiang, Lu Fandong, et al. Forecasting model of blasting vibration acceleration peak-value based on SVM[J]. Journal of Detection & Control, 2010, 32(4): 38-41.
- [5] Vapnik V N. Statistical learning theory[M]. New York: Wiley, 1998.
- [6] Cortes C, Vapnik V N. Support-Vector networks[J]. Machine Learning, 1995, 20(3): 273-297.
- [7] Tropsha A, Gramatica P, Gombar V K. The importance of being earnest: Validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models[J]. QSAR & Combinatorial Science, 2003, 22(1): 69-77.

- Tang Shuangling, Liu Zuliang, Zhu Guangjun, et al. Effect of additives on detonation safety and heat stability of ammonium nitrate[J]. Journal of the Chemical Fertilizer Industry, 2003, 30 (4): 28-29, 32.
- [5] 唐双凌, 刘祖亮, 周新利, 等. 改性硝酸铵爆轰安全性研究 I. CaCO_3 和 MgSO_4 对硝酸铵爆轰安全性的影响[J]. 应用化学, 2004, 21(1): 64-69.
- Tang Shuangling, Liu Zuliang, Zhou Xinli, et al. Detonation safety of modified ammonium nitrate I. the influences of calcium carbonate and magnesium sulfate[J]. Chinese Journal of Applied Chemistry, 2004, 21(1): 64-69.
- [6] 唐双凌, 吕春绪, 周新利, 等. 改性硝酸铵爆炸安全性研究 II. 无机化学肥料对硝酸铵爆炸安全性的影响[J]. 应用化学, 2004, 21(4): 400-404.
- Tang Shuangling, Lv Chunxu, Zhou Xinli, et al. Studies on the detonation safety of modified ammonium nitrate II. the influence of inorganic chemical fertilizer[J]. Chinese Journal of Applied Chemistry, 2004, 21(4): 400-404.
- [7] Oxley J C, Smith J L, Rogers E, et al. Ammonium nitrate: thermal stability and explosivity modifiers [J]. Thermochimica Acta, 2002, 384(1): 23-45.
- [8] Tan Liu, Wu Qiuji, Chen Xiang, et al. The effects of sodium chloride on the explosive performance of ammonium nitrate[J]. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2014, 115(2): 1759-1766.
- [9] 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.
- [10] United Nations. Recommendations on the transport of dangerous goods: model regulations[M]. 16th ed. New York and Geneva: United Nations Publications, 2009.

Effects of Particle Size on the Explosibility of Ammonium Nitrate

XIA Lianghong^①, TAN Liu^①, XU Sen^{①②}, CHEN Xiang^③, LIU Dabin^①

①School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology (Jiangsu Nanjing, 210094)

②National Quality Supervision and Inspection Center for Industrial Explosive Materials (Jiangsu Nanjing, 210094)

③Shanghai Entry-Exit Inspection and Quarantine Bureau (Shanghai, 200135)

[ABSTRACT] To study the effect of particle size on the explosibility of ammonium nitrate, the partition test device of United Nations was used to test the tendency of explosive velocity of ammonium nitrate with different particle sizes. The results show that ammonium nitrate with particle sizes of 149-841 μm can overall detonate, while the detonation velocity and damaging effects of witness plate will be different with the changes of particle sizes. When particle sizes of the samples were in the ranges of 420-841 μm , 250-420 μm , 177-250 μm and 149-177 μm , the detonation velocity were 1166, 1336, 1607 m/s and 1543 m/s. The damages of witness plate exhibit 5.4 cm-deep dents, and 3.05 cm, 7.95 cm and 7.10 cm-diameter perforated. From the results of destructive effect of witness plate and detonation velocity, it could be found that with the same charge density, the smaller the ammonium nitrate particle size, the higher the detonation velocity and the severer damage effects. Comparison of samples shows that when particle size is 149-177 μm , the charge density of ammonium nitrate is lower, and the detonation velocity and destruction effects reduced accordingly, indicating that the charge density have significant effect on explosive properties of ammonium nitrate.

[KEY WORDS] properties of explosive; particle size; detonation velocity; destructive effect; scanning electron microscope; charge density

(上接第 31 页)

Prediction the Detonating Velocity of Elemental Explosives by Support Vector Machine

YANG Hui, YANG Jian'gang, FANG Xueqian

Xi'an Modern Chemistry Research Institute (Shaanxi Xi'an, 710065)

[ABSTRACT] Aiming at the better explosive performance prediction for new energetic materials, the support vector machine (SVM) method was applied to establish a predictive model for the detonation velocity of elemental explosive. The relative molecular mass of explosives (M), loading density (ρ), and oxygen balance the percentage composition of carbon, hydrogen, oxygen, nitrogen (w_C, w_H, w_O, w_N), were selected as inputs of the support vector machine models. The results of the model indicate that, the prediction results are in good agreement with the experimental values. The most relative error is 4.79% and the least is 0.04%. The prediction accuracy of the model is good, enabling a certain extrapolation. This method can also provide guidance to predict other detonation parameters of explosives, and has practical applications.

[KEY WORDS] explosive; support vector machine; detonation velocity; predication