



ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

Монография

Казань
2019

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ
ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ
ВЕЩЕСТВ**

Монография

Казань, 2019

УДК 004.83
ББК 31.353
Л 99

Рецензенты:

В.Д. Слабнов – профессор кафедры информационных технологий и безопасности Казанского инновационного университета им.В.Г.Тимирязева, д-р.техн.наук;

О.Т. Шипина – профессор кафедры химии и технологии высокомолекулярных соединений КНИТУ, д-р техн.наук

Ляшева С.А., Шлеймович М.П.

Л 99 Прогнозирование параметров высокоэнергетических индивидуальных веществ: монография. – Казань: РИЦ «Школа», 2019 – 227 с.

ISBN 978–5–00162–086–0

Данная монография посвящена вопросу прогнозирования параметров высокоэнергетических индивидуальных веществ – фугасности, детонации, энтальпии сгорания, теплоты образования индивидуальных веществ. В настоящее время прогнозирование параметров высокоэнергетических индивидуальных веществ одна из важнейших задач в теории детонации.

УДК 004.83
ББК 31.353

ISBN 978–5–00162–086–0

© Ляшева С.А., Шлеймович М.П., 2019

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	4
1. ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЕЩЕСТВА	9
2. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ. НЕЙРОСЕТЕВОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ	12
2.1. Нейронные сети	14
3. МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ	28
4. ФУГАСНОСТЬ. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФУГАСНОСТИ	36
4.1. РЕЗУЛЬТАТЫ НЕЙРОСЕТЕВОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ФУГАСНОСТИ	41
4.1.1. Пакет ExcelNeuralPackage.....	42
4.1.2. Пакет Deductor	51
4.1.3. Пакет STATISTICANeuralNetworks.....	63
4.2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ	75
5. ДЕТОНАЦИЯ	82
5.1. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИИ	82
5.1.1. Моделирование параметров быстропротекающих процессов.....	83
5.1.2. Реализации программы для моделирования скорости детонации взрывчатых веществ	88
5.1.3. Прогнозирование детонации - параметра быстропротекающих процессов	91
5.2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	92
6. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТЫ ОБРАЗОВАНИЯ И ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ	94
6.1. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ	100
6.1.1. Проектирование базы данных	101
6.1.2. Алгоритм расчёта энтальпии сгорания и теплотворной способности индивидуальных веществ	105
6.1.3. Руководство пользователя	109
6.2. НЕЙРОСЕТЕВОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ.....	112
6.3. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТЫ ОБРАЗОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ.....	114
6.4. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ	118
6.5. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ	126
7. МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА	129
7.1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА	129
7.2. РАСЧЁТНЫЕ МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА	130
7.2.1. Метод Г.А. Авакяна	130

7.2.2. Метод для любой плотности	134
7.2.3. Сравнение расчётных методов определения теплоты взрыва	138
7.3. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОСЕТИ	139
7.4. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ	151
7.5. РУКОВОДСТВО ПРОГРАММИСТА	153
7.6. РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ	155
<i>Руководство пользователя для расчёта теплоты взрыва по методу Авакяна</i>	<i>155</i>
<i>Руководство пользователя для расчёта теплоты взрыва по методу для любой плотности.....</i>	<i>157</i>
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	159
ЛИТЕРАТУРА.....	160
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	167

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время прогнозирование параметров высокоэнергетических индивидуальных веществ одна из важнейших задач в теории детонации. Данный показатель можно определить несколькими способами: проведением экспериментальных исследований, с помощью расчетных методов. С развитием информационных технологий и программных продуктов, использующих математический аппарат, стало возможным решение многих прикладных задач с помощью них. В данном случае можно говорить о программном обеспечении, имеющем в своём функционале возможность построения и дальнейшего обучения нейронной сети, дальнейшей работы с ней, а также визуализации данных и полученных результатов. В настоящее время искусственные нейронные сети используются для решения многих задач в различных сферах деятельности человека.

Актуальность данной монографии заключается в том, что прогнозирование свойств и параметров высокоэнергетических индивидуальных веществ позволит в некоторых случаях отказаться от проведения экспериментальных исследований, выполнение которых требует значительных материальных и ресурсных затрат, подготовка которых также занимает достаточное количество времени, выполнение экспериментов не является безопасным, к тому же возникает проблема проверки достоверности полученных результатов, ведь в каждом конкретном эксперименте результат может зависеть от множества факторов, часть из которых не всегда подвластна исследователю. Использование расчетных методов и соответствующего программного обеспечения позволит избежать этих затрат и явных минусов использования экспериментов как средства получения необходимой информации. Конечно в некоторых случаях отказа от проведения экспериментов недопустим, в таком случае результаты расчетных методов и нейросетевой модели могут быть использованы в качестве опорных и могут быть использованы в процессе подготовки к проведению эксперимента.

Анализируя вышедшие публикации и сопоставляя исследовательские воззрения с практикой, следует признать, что, несмотря на определенный задел, накопленный к настоящему времени в этой области, можно говорить о недостаточной разработанности проблемы прогнозирования энергетических параметров высокоэнергетических индивидуальных веществ. В частности, нет научных работ по прогнозированию такого параметра как теплота взрыва. Хотя прогнозирование именно этого параметра является одной из трёх основных задач теории детонации. Теплота взрыва – одна из важнейших характеристик высокоэнергетических веществ. Она характеризует высокоэнергетическое вещество как источник энергии, определяет его общую работоспособность (фугасное действие взрыва в воздухе и плотных средах), бризантность (местное действие взрыва) и многие детонационные свойства.

Наличие вышеизложенных проблем определило необходимость проведения текущего исследования, направленного на повышение эффективности прогнозирования теплоты взрыва высокоэнергетических индивидуальных веществ.

Практическая значимость работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы в дальнейшем при подготовке к проведению экспериментальных исследований, либо даже от отказа от их проведения. Искусственная нейронная сеть может быть использована в дальнейшем для решения ещё более сложной задачи по прогнозированию энергетических параметров смесей.

Эти рекомендации могут быть использованы в качестве методологического обоснования в выборе наиболее эффективного пути модернизации энергетических программ предприятий.

В научной среде представлены работы по моделированию следующих свойств высокоэнергетических индивидуальных веществ:

- фугасность [10];
- энтальпия образования [11];
- скорость детонации [12];

- метательная способность [13].

В результате проведенного исследования научной базы по рассматриваемому вопросу был сделан вывод, что при моделировании энергетических параметров высокоэнергетических веществ с использованием нейросетевого алгоритма точность прогнозирования выше, чем при использовании линейно-регрессионного метода анализа. В настоящее время нейронные сети являются мощным математическим инструментом при проведении фундаментальных и прикладных исследований.

Для решения поставленной задачи обычно используется следующий алгоритм [12, 13]:

- создание базы данных по свойствам и параметрам веществ, которые могут оказать влияние на конечный результат прогнозируемого параметра;
- обучение нейронной сети на созданной базе данных, т.е. нейронная сеть учится аппроксимировать конечное значение прогнозируемого параметра по исходным значениям входящих переменных (при этом исходная база делится на две части: обучающая выборка и выборка для проверки качества обучения нейронной сети);
- прогнозирование конечного параметра при помощи процедуры «что-если» после ввода всех значений входящих параметров для вещества, который не входит в исходную базу данных;

Качество обучения определяется средней ошибкой аппроксимации для проверочной выборки и графически представляется в виде диаграммы рассеяния.

Эффективное моделирование свойств компонентов смесей высокоэнергетических веществ по указанному алгоритму является фундаментом для исследований по прогнозу свойств самих смесей.

Высокоэнергетические вещества имеют широкую номенклатуру, свойства, методы изготовления и области применения. Их используют во многих областях хозяйственной деятельности человека, а также при создании образцов специальной техники. Существуют промышленные высокоэнергетические вещества, ракетные топлива, пороха, некоторые вещества используются при

синтезе других, для исследований космоса и небесных тел, к примеру такое вещество как гексанитродефенил был задействован при проведении на Луне экспериментов сейсмического характера. Определение физико-энергетических свойств высокоэнергетических веществ важно для процесса их дальнейшей эксплуатации, начиная с этапа создания, транспортировки, а также хранения. К тому же решение данной задачи позволит спрогнозировать аналогичные свойства и состав смесей веществ, полученных на основе исходных. Процесс получения и синтеза новых веществ довольно опасен, что подтверждает факт необходимости преждевременного моделирования свойств вновь получаемых бризантных высокоэнергетических веществ. К недостаткам проведения экспериментальных исследований можно отнести: значительные затраты материальных ресурсов на их проведение, длительную подготовку по времени, а также проблему анализа полученных результатов на достоверность [10, 11].

Одной из трёх основных задач теории детонации является определение теплоты взрыва [14].

Удельная теплота взрывчатого превращения (теплота взрыва) – одна из важнейших характеристик высокоэнергетических веществ, наряду со скоростью детонации и др. Она характеризует высокоэнергетическое вещество как источник энергии, определяет его общую работоспособность (фугасное действие взрыва в воздухе и плотных средах), бризантность (местное действие взрыва) и многие детонационные свойства [17, 12].

Широкий ассортимент типов высокоэнергетических веществ, применяемых во многих отраслях, можно объяснить многообразием задач и условий, использующих для своего решения энергию взрыва: дробление горных пород на карьерах и при подземной разработке месторождений полезных ископаемых, применение в качестве высокоэнергетических наполнителей (окислителей) твёрдых ракетных топлив, в процессе усовершенствования порохов различного назначения, как высокоэнергетические компоненты композитных веществ, в военной сфере и оборудовании, в космической сфере (применение гексанитростильбена (ГНС) в составе энергетической композиции для разделения

ракеты-носителя на космическом корабле «Апполон»), взрывные работы в нефтяных и газовых скважинах, резка и обработка металлов, синтез новых веществ и многое другое.

Взрыв – это довольно быстротечный процесс физического или химического превращения системы, который сопровождается переходом потенциальной энергии этой системы в механическую работу [19]. К одному из наиболее существенных признаков этого процесса можно отнести резкий скачок давления в среде, в непосредственной близости окружающего места взрыва, который и является причиной разрушающего воздействия.

Для определения свойств высокоэнергетических веществ существует несколько способов: эксперимент (практический) и теоретическое исследование (расчетный метод). Расчетные методы прогнозирования теплоты взрыва высокоэнергетических индивидуальных веществ представляют большой интерес с практической точки зрения, поскольку позволяют сэкономить средства и время, а также обезопасить людей. Кроме того, в случае новых или еще не синтезированных высокоэнергетических веществ расчет можно назвать единственным способом получения необходимой информации [16, 17].

К настоящему времени проведено большое количество экспериментальных исследований, что позволило накопить достаточно большой объем знаний и данных для установления неких закономерностей поведения веществ при процессе взрыва [115]. Однако это не может позволить игнорировать довольно очевидные недостатки проведения практических экспериментов как немалые материальные и ресурсные затраты, подготовка к проведению эксперимента, требующего достаточного количества времени, а также анализ и проверка достоверности полученных выходных результатов.

Описанное выше стало основанием и создало необходимость в разработке методов математического моделирования. Стремительное развитие информационных технологий и программных продуктов сделало ещё более возможным и актуальным применение с их помощью математических методов в различных научных и технических областях.

Таким образом, всё вышесказанное может служить основанием необходимости моделирования и прогнозирования параметров компонентов смесей высокоэнергетических веществ для дальнейшего прогноза создаваемых продуктов.

При использовании статистики для решения поставленной задачи могут быть выданы результаты, погрешность которых может быть весьма высока. Это связано с тем, что происходит усреднение результатов многочисленных экспериментальных исследований, а также игнорирование явных экстремумов.

1. ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЕЩЕСТВА

Химия высокоэнергетических веществ и материалов – одна из современных областей прикладной органической химии, которая является одной из стратегически важнейших направлений в мировой науке и технике, развитие которой весьма актуально уже достаточное долгое количество времени.

Высокоэнергетические вещества включают в себя большую группу химических соединений и смесей, способных под воздействием внешних факторов к быстрому само распространяющемуся химическому превращению (взрыву), при этом выделяя большое количество тепла и газообразных продуктов в комбинации с повышением давления и созданием сильного ударного фронта [22].

Высокоэнергетические вещества –(разлагаются по очень высоким нормам, и имеют свойство, названное бризантным действием, выражающее сокрушительную силу высокоэнергетического вещества. Бризантное действие - комбинация быстрого повышения давления и быстрого проектирования массы, вероятно эквивалентной созданию сильного ударного фронта) [23].

Существует большое количество определений понятия «взрыв». Взрыв:

- горение (процесс передачи энергии одного вещества другому путем теплопроводности);

- детонация (процесс, при котором передача энергии происходит мгновенно и сопровождается ударной волной, имеющей сверхзвуковую скорость 6-7 тыс.м/сек, в связи с этим быстрый рост давления, который действует с одинаковой силой во все стороны согласно физическим законам, приводит к разрушению всего того, что находится в ближайшем от места взрыва радиусе) [24].

Любое высокоэнергетическое вещество может быть охарактеризовано такими величинами как бризантность и фугасность.

- Бризантность - характеризует способность веществ к разрушающему воздействию (единица измерения - мм). Чем выше данный показатель, тем данное действие сильнее.

- Фугасность - работоспособность вещества, данный показатель, характеризует способность высокоэнергетического вещества к выбросу разрушенных им материалов (бетон, камни, грунт и т.д.) из области взрыва (единица измерения - куб.см.) [33].

Можно составить множество классификаций высокоэнергетических веществ. Если классифицировать их по таким параметрам как чувствительность к внешним воздействиям и типу взрыва высокоэнергетические индивидуальные вещества делятся на следующие группы [34]:

- Иницирующие
- Бризантные
- Метательные

Иницирующие высокоэнергетические вещества могут быть охарактеризованы высокой чувствительностью по отношению к внешним воздействиям, не смотря на то, что данные вещества не обладают достаточно высокой разрушающей энергией, они обладают таким ценным свойством, что взрыв иницирующего высокоэнергетического вещества может стать причиной взрыва веществ, относящихся к двум оставшимся группам (бризантные и

метательные), то есть оказать внешнее взрывное воздействие на них, поскольку эти группы веществ весьма малочувствительны к другим типам внешнего воздействия [26]. Тем самым инициирующие высокоэнергетические вещества являются основой для возбуждения взрыва бризантных и метательных высокоэнергетических веществ.

Примерами инициирующих высокоэнергетических веществ являются азид свинца, циануртриазид, гремучая ртуть и другие.

Бризантные - основные разрушающие высокоэнергетические вещества, которые являются основой для снаряжения всего разрывного оружия.

Бризантные высокоэнергетические вещества по своим взрывным характеристикам в свою очередь делятся на следующие три группы:

- пониженной мощности - аммиачная селитра и ее смеси;
- нормальной мощности - тротил, пикриновая кислота, пластит, динамит;
- повышенной мощности - гексоген, октоген, тетрил, ТЭН.

В связи с высокой степенью чувствительности по отношению к внешним воздействиям бризантные высокоэнергетические вещества повышенной мощности синтезируют с флегматизаторами. Это вещества, смешение с которыми приводит к понижению чувствительности, а в случае с высокоэнергетическими веществами нормальной мощности, наоборот, для повышения.

К бризантным высокоэнергетическим веществам относятся различные виды нитросоединений (нитрометан, нитронафталин, тротил), нитраты спиртов (нитроглицерин, нитроглицерин), N-нитраминами (гексоген, октоген, тетрил), нитраты целлюлозы и др. Обычно их используют совместно в качестве различных смесей, не только между собой, но и с другими продуктами.

Бризантные высокоэнергетические вещества нашли широкое применение во многих отраслях промышленности и деятельности человека. Они используются в составе смесей для снарядов ствольной и реактивной артиллерии, различных типов мин (инженерных, артиллерийских), торпед, ручных гранат, различных бомб (авиационных, глубинных), различных боевых ракет.

В ядерной промышленности их используют для того, чтобы перевести горючее из одного состояния в другое.

В авиационной сфере, в системах пироавтоматики их используют для взрывного отброса винтов вертолётот, аварийного отделения кабин и др.

В ракетно-космической отрасли бризантные высокоэнергетические вещества применяют для многих задач, таких как: отсечка тяги, разделение конструкционных элементов космических аппаратов и элементов ракет, подрыва двигателей и аварийного выключения, отсечки и выброса парашютов, аварийного вскрытия люков и др.

Большое количество бризантных высокоэнергетических веществ используется в строительстве (разрушение скальных пород, разрушение ликвидируемых строительных конструкций, подготовка котлованов), в горном деле (добыча полезных ископаемых, вскрышные работы), в промышленности (импульсная обработка металлов, сварка взрывом и др.).

В качестве примеров метательных высокоэнергетических веществ можно назвать различные виды порохов (бездымные, нитроглицериновые, пироксилиновые, черный дымный), пиротехнические смеси для осветительных ракет, мин, авиабомб, фейерверков и сигнальных ракет.

Таким образом, существует большое количество высокоэнергетических индивидуальных веществ, которые можно классифицировать по различным признакам, а также по сферам их применения.

2. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ. НЕЙРОСЕТЕВОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ

Прогноз — это научно обоснованное суждение о возможных состояниях объекта в будущем и (или) об альтернативных путях и сроках их осуществления, т.е. этап прогнозирования — часть процесса разработки прогнозов, характеризующаяся своими задачами, методами и результатами. Деление на этапы связано со спецификой построения систематизированного описания

объекта прогнозирования, сбора данных, с построением модели, верификацией прогноза.

Необходимость прогноза обусловлена желанием знать события будущего, что невозможно на 100 % в принципе, исходя из статистических, вероятностных, эмпирических, философских принципов. Точность любого прогноза обусловлена:

- объёмом истинных (верифицированных) исходных данных и периодом их сбора;
- объёмом не верифицированных исходных данных, периодом их сбора;
- свойствами системы, объекта, подвергающихся прогнозированию;
- методиками и подходами прогнозирования.

Объектом прогнозирования — является процесс, система, или явление, о состоянии которого даётся прогноз. Характеристика объекта прогнозирования – качественное или количественное отражение какого-либо свойства объекта прогнозирования. Переменная объекта прогнозирования – количественная характеристика объекта прогнозирования, которая является или принимается за изменяемую, в течение периода основания и (или) периода упреждения прогноза. Сложность объекта прогнозирования — характеристика объекта прогнозирования, определяющая разнообразие его элементов, свойств и отношений.

Модель прогнозирования — модель объекта прогнозирования, исследование которой позволяет получить информацию о возможных состояниях объекта прогнозирования в будущем и (или) путях и сроках их осуществления.

Метод прогнозирования — способ исследования объекта прогнозирования, направленный на разработку прогноза. Методы прогнозирования являются основанием для методик прогнозирования.

К основным методам прогнозирования относят:

- статистические методы;
- экспертные оценки (например, метод Дельфи);
- методы моделирования;

- интуитивные (то есть выполненные без применения технических средств, экспромтом, «в уме», специалистом, имеющим опыт ранее применяемых научных методов в данном типе прогнозов).

Методика прогнозирования — совокупность специальных правил и приемов (одного или нескольких методов) разработки прогнозов.

Прогнозирующая система — система методов и средств их реализации, функционирующая в соответствии с основными принципами прогнозирования. Средствами реализации являются экспертная группа, совокупность программ и т.д. Прогнозирующие системы могут быть автоматизированными и неавтоматизированными.

Период основания прогноза — промежуток времени, за который используют информацию для разработки прогноза. Этот промежуток времени называют также периодом предыстории.

Точность прогноза — оценка доверительного интервала прогноза для заданной вероятности его осуществления.

Достоверность прогноза — оценка вероятности осуществления прогноза для заданного доверительного интервала.

Ошибка прогноза — апостериорная величина отклонения прогноза от действительного состояния объекта.

2.1. Нейронные сети

Искусственные нейронные сети представляют собой математическую модель, построенную по принципу организации и функционирования нейронной структуры мозга, который, главным образом, учится на опыте. Интеллектуальные системы на основе искусственных нейронных сетей позволяют решать многие задачи[27]:

- распознавание образов (в настоящее время является одной из самых распространенных задач при использовании нейросети);
- прогнозирование (будущий объём продаж, рост или падение акций);

– классификация (к примеру, на основе входных данных нейронная сеть может решить является ли клиент банка надежным, чтобы выдавать ему кредит).

Нейросетевые технологии являются одним из направлений в развитии искусственного интеллекта.

Нейронные сети являются упрощенной моделью человеческого мозга. Структура нейрона (каждый из которых представляет собой биологическую клетку, которая обрабатывает информацию) включает в себя [28]:

- тело клетки (или сому);
- аксон;
- дендриты.

Аксон и дендриты являются двумя типами внешних ответвлений биологического нейрона.

В состав тела клетки входит ядро, в котором содержится информация о свойствах нейрона и плазма, которая выполняет роль производства материалов, необходимых для нейрона.

Сам нейрон получает сигналы (импульсы) от других нейронов непосредственно через дендриты (приемники). Сгенерированные телом клетки сигналы он передает дальше вдоль аксона, который на конце имеет разветвления в виде волокон, на окончаниях которых находятся синапсы. Связь нейронов между собой осуществляется благодаря синапсам (через них в нейрон поступают сигналы) и аксонам (через которые нейрон передают сигнал далее). Схема биологического нейрона представлена на рис 1.

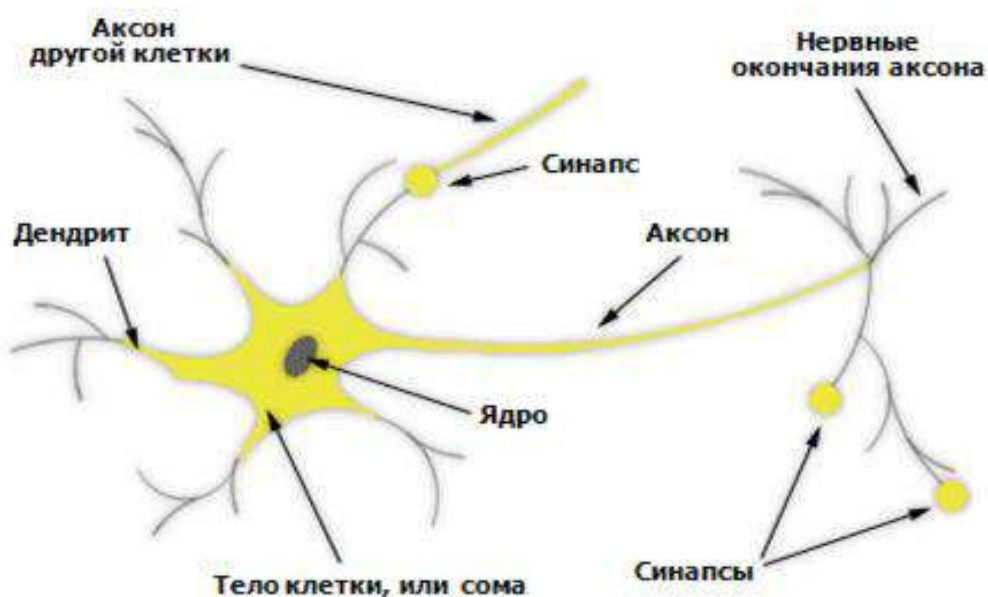


Рис. 1. Схема биологического нейрона

Синапс представляет собой функциональный узел, который связывает два нейрона между собой (окончание волокна одного нейрона и дендрит другого). Результативность синапса настраивается проходящими через него сигналами, поэтому синапсы обучаются в зависимости от активности процессов, в которых они принимают участие. Сообщение передается с помощью частотно-импульсной модуляции [29].

Искусственный нейрон представляет собой упрощенную модель биологического нейрона, который также включает в себя дендриты – откуда поступают входящие импульсы. С математической точки зрения искусственный нейрон суммирует все входные сигналы, а затем к полученной сумме применяется некоторая функция. Каждый из сигналов x_i умножают на вес w_i (параметр синапса). Затем преобразованные сигналы попадают в тело нейрона, где они суммируются между собой и обрабатываются активационной функцией. После этого сигналы идут к другим нейронам. Несмотря на то, что искусственные нейроны могут иметь различное положение в структуре нейронной сети, а также выполняемые функции, они имеют общую структуру и компоненты. Структура искусственного нейрона изображена на рис.2.

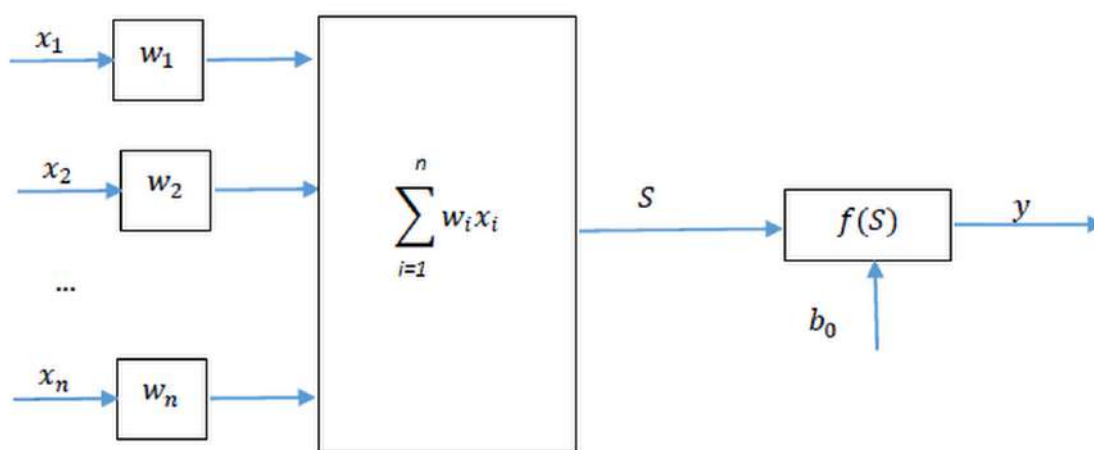


Рис. 2 Базовый искусственный нейрон

К основным свойствам нейронной сети можно отнести:

- нелинейность;
- обучение на примерах;
- параллельная обработка данных;
- адаптивность (сеть, настроенная на решение одной задачи может быть преобразована и являться основой для решения другой задачи);
- отказоустойчивость (при наличии большого количества связей между нейронами их потеря или искажение в отдельно взятых связях в целом не приведет к значительному ухудшению качества работоспособности нейронной сети).

К недостаткам нейронной сети можно отнести [28]:

- сложность определения оптимальной структуры нейронной сети (количества скрытых слоев, нейронов в них, количество эпох);
- довольно продолжительный по времени процесс обучения.

Рассмотрим основные компоненты структуры нейрона. К ним относятся:

- весовые коэффициенты;
- функция сумматора;
- активационная функция.

Весовые коэффициенты w_i - параметры синапса. У каждого входного сигнала есть свой синаптический вес. Весовой коэффициент определяет меру важности входного сигнала и влияет на поведение синапсов нейронов.

Функция сумматора – в результате которой мы получаем число, которое используется на следующем этапе активационной функцией. В начале вычисляется сумма входных сигналов с учетом синаптических весов. Каждый входной сигнал умножается на соответствующий ему вес: $вход_1 = x_{10} \cdot w_{10}$, $вход_2 = x_{20} \cdot w_{20}$, затем находится сумма этих произведений $вход_1 + вход_2 + \dots + вход_n$.

На следующем шаге полученный результат преобразуется в выходной сигнал y , проходя через функцию активации. Существует множество примеров активационных функций нейрона, к которым можно отнести:

1. Функцию единичного скачка;
2. Линейного порога (гистерезис);
3. Гиперболический тангенс;
4. Логистическую функцию;
5. Линейную функцию (применяется на практике довольно редко, только в случаях тестирования нейронной сети или при необходимости передачи значений без преобразований).

Графики некоторых из описанных функций представлены на рис.3.

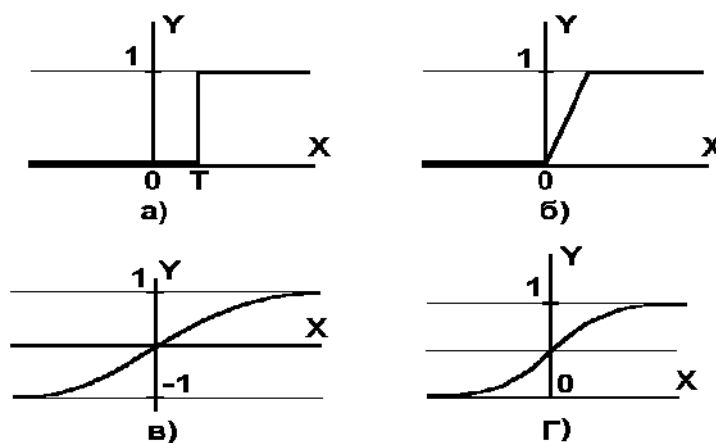


Рис. 3. а) функция единичного скачка; б) линейный порог; в) гиперболический тангенс; г) сигмоид

Выбор той или иной активационной функции зависит от характера преобразования данных (выходного значения), которое выполняет нейронная сеть, а также от метода обучения. В градиентных методах обучения используется логистическая функция или гиперболический тангенс, поскольку они непрерывны и дифференцируемы. В бинарных нейронных сетях, где выход нейрона принимает только два состояния, используется функция скачка.

Одной из наиболее применяемых на практике активационных функций является логистическая функция (сигмоид).

Одной из наиболее распространенных является нелинейная функция с насыщением, так называемая логистическая функция или сигмоид (т.е. функция S-образного вида):

$$y = \frac{1}{1 + e^{-\alpha s}} \quad (1)$$

В зависимости от значения параметра крутизны α график логистической функции будет меняться:

при $\alpha=0$ получаем график функции $y=0,5$

при увеличении значения α график функции по внешнему виду стремится к графику функции единичного скачка с порогом T при $x=0$

при уменьшении значения α график функции становится более пологим.

Выходные значения данной функции лежат в диапазоне $[0,1]$.

Сигмоидная функция дифференцируема на всей оси абсцисс, что используется в некоторых алгоритмах обучения. Кроме того, она обладает свойством усиливать слабые сигналы лучше, чем большие, и предотвращает насыщение от больших сигналов, так как они соответствуют областям аргументов, где сигмоид имеет пологий наклон.

Существует большое количество видов нейронных сетей: сеть Кохонена. Рассмотрим однослойный персептрон. В качестве примера простейшей нейронной сети рассмотрим однослойный персептрон, представленную на рис. , Данный вид нейронной сети представляет собой модель, где входные и выходные

нейроны соединены между собой напрямую синаптическими весами. Является частным случаем классического персептрона.

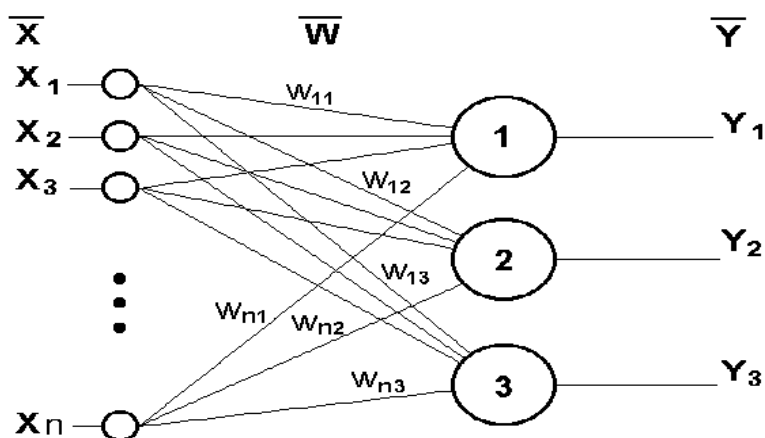


Рис.4 Однослойный персептрон

Очевидно, что все весовые коэффициенты синапсов одного слоя нейронов можно свести в матрицу W , в которой каждый элемент w_{ij} задает величину i -ой синаптической связи j -ого нейрона. Таким образом, процесс, происходящий в нейронной сети, может быть записан в матричной форме:

$$Y = F(XW) \quad (2)$$

где X и Y – соответственно входной и выходной сигнальные векторы, $F(V)$ – активационная функция, применяемая поэлементно к компонентам вектора V .

Теоретически число слоев и число нейронов в каждом слое может быть произвольным, однако фактически оно ограничено ресурсами компьютера или специализированной микросхемы, на которых обычно реализуется нейронная сеть. Чем сложнее нейронная сеть, тем масштабнее задачи, подвластные ей.

Многослойный персептрон представляет собой нейронную сеть, в структуре которой существуют дополнительные слои (рис.5). Также его можно охарактеризовать тем, что передача сигналов между нейронами идет в прямом направлении. Каждый нейрон сети продуцирует взвешенную сумму своих входов, пропускает эту величину через передаточную функцию и выдает выходное значение. Сеть может моделировать функцию практически любой сложности,

причем число слоев и число нейронов в каждом слое определяют сложность функции. Данный вид нейронной сети обычно используют при решении задач классификации и регрессии.

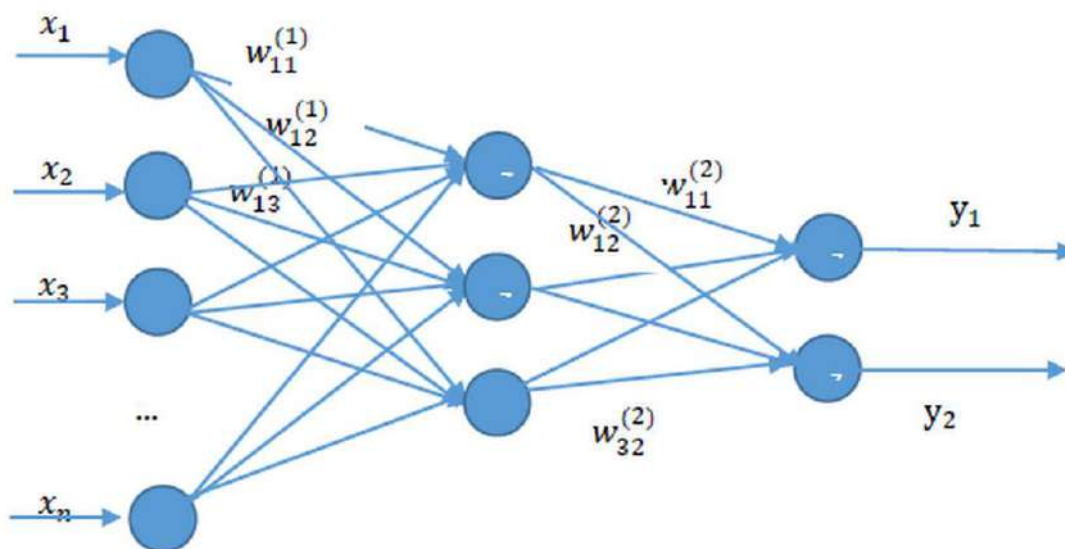


Рис. 5 Многослойный персептрон

В архитектуру нейронной сети входят следующие элементы: входные, выходные и скрытые нейроны. Число входных нейронов определяется числом входных переменных и равно ему. Входные нейроны являются компонентами входного вектора и распределяют его значения по другим нейронам сети. Преобразование же данных происходит в скрытых и выходных нейронах с помощью сумматора и активационной функции. При увеличении количества скрытых нейронов и соответственно связей между ними возрастают функциональные возможности нейронной сети. Однако чрезмерное усложнение общей архитектуры сети может привести к значительному росту вычислительных затрат, связанных с ее обучением. Поэтому при построении нейронной сети необходимо учитывать эти параметры.

Определение оптимальной архитектуры нейронной сети представляет собой довольно сложную задачу. Она определяется количеством скрытых слоев, количеством нейронов в каждом из них, типом активационной функции, а также способом их соединения между собой. Нет четкого алгоритма выбора каждого из этих параметров при построении искусственной нейронной сети. Построение и

обучение нейронной сети – искусство, ведь выбор этих параметров и общей конфигурации сети не всегда является однозначным и во многом может быть определен исходя из опыта и даже интуиции ученого.

При построении нейронной сети используются следующие эвристические правила [31]:

1. Для обеспечения качественного обучения нейронной сети общее количество связей в ней должно быть значительно (примерно на порядок) меньше количества элементов обучающего множества. Иначе может возникнуть эффект переобучения, когда нейронная сеть просто запоминает данные, а не обобщает их;

2. Как правило, на практике необходимые результаты можно получить с помощью нейронной сети с одним скрытым слоем, число нейронов которого определяет ее нелинейный характер;

3. Любые отображения входного сигнала в выходной могут быть получены посредством двухслойных нейронных сетей с сигмоидальными функциями активации;

4. Рекомендуется использовать порядок нелинейности нейронов, равный единице;

5. Не существует четкой методики для определения количества нейронов в скрытых слоях. Это означает, что количество нейронов в скрытом слое конкретной нейронной сети для конкретной задачи необходимо определять путем проведения экспериментов. Данный факт связан с тем, что количество нейронов зависит от количества обучающих примеров. Например, в случае малого числа обучающих примеров и большого числа нейронов возникает эффект переобучения (см. п. 1), а в случае большого числа обучающих примеров и малого числа нейронов сеть никогда не обучится.

Грамотное определение числа скрытых слоев и числа нейронов в них является важным при моделировании сети. Многие ученые при построении нейронной сети применяют общие рекомендации, такие как [31]:

1. Число нейронов входного и выходного слоев жестко определяется числом входных и выходных переменных модели соответственно. В свою очередь

количество скрытых слоев и нейронов в них может быть выбрано эмпирическим путем. Возможно использование следствия из теоремы Колмогорова-Арнольда - Хехт-Нильсена: $n_{\text{ск}} \leq 2 * n_{\text{вх}} + 1$, где $n_{\text{вх}}, n_{\text{ск}}$ - количество нейронов во входном и скрытых слоях соответственно.

2. Число нейронов в скрытых слоях и число скрытых слоев выбирают таким образом, чтобы количество образованных ими связей было меньше числа обучающих примеров как минимум в два раза, иначе произойдет переобучение нейронной сети, то есть нейронная сеть будет не обобщать данные, а запоминать их.

3. как правило для решения многих задач достаточно одного-двух скрытых слоев в нейронной сети

4. Если сложность в отношении между полученными и желаемыми данными на выходе увеличивается, количество нейронов скрытого слоя должна также увеличиться.

5. Не существует единого подхода к выбору количества скрытых нейронов, всё зависит от конкретной задачи и исходных данных. Например, если количество обучающих примеров небольшое, но при этом мы имеем большое число нейронов, то может возникнуть эффект переобучения, а в обратном случае сеть никогда не обучится.

После определения числа слоев и числа нейронов в любом из них, нужно найти значения для синаптических весов и порогов сети, способных минимизировать погрешность спродуцированного результата. Именно для этого существуют алгоритмы обучения, где происходит подгонка модели сети к имеющимся обучающим данным.

Наиболее общим способом оптимизации нейронной сети является итерационная процедура подбора весов, называемая обучением, в данном случае - обучением с учителем, поскольку опирается на обучающую выборку примеров $\{x^{\alpha}, d^{\alpha}\}$, например - примеров правильной классификации.

Ошибка сети (целевая функция) формулируется, как правило, в виде квадратичной суммы разностей между фактическими и ожидаемыми значениями

выходных сигналов. В случае единичной обучающей выборки (x, d) целевая функция определяется в виде

$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^M (y_k - d_k)^2 \quad (3)$$

Когда функция E , выражающая ошибку, задана, задача сводится к ее минимизации. Для этого можно предложить, например, следующую итерационную процедуру подбора матрицы весов w :

$$w^{t+1} = w^t - \eta^t \frac{\partial E}{\partial w} \quad (4)$$

или в скалярном виде:

$$w_{ij}^{t+1} = w_{ij}^t - \eta^t \frac{\partial E}{\partial w_{ij}} \quad (5)$$

Выражение (4) является основной расчетной формулой для модификации синаптических весов сети при обучении. Здесь $\eta^t \ll |w|$ - скорость обучения на шаге t .

Основная идея обратного распространения состоит в том, как получить оценку ошибки для нейронов скрытых слоев. Разберем этот метод несколько подробнее. Обозначим входы n -го слоя нейронов $x_j^{[n]}$. Нейроны этого слоя вычисляют соответствующие линейные комбинации:

$$a_j^{[n]} = \sum_j w_{ij}^{[n]} x_j^{[n]} \quad (6)$$

и передают их на следующий слой, пропуская через нелинейную передаточную функцию:

$$x_j^{[n+1]} = f(a_i^{[n]}) \quad (7)$$

Для построения алгоритма обучения нам надо знать производную ошибки по каждому из весов сети:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{[n]}} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{[n]}} \frac{\partial a_i^{[n]}}{\partial w_{ij}^{[n]}} \equiv \delta_i^{[n]} x_j^{[n]} \quad (8)$$

Здесь $\delta_i^{[n]} = \frac{\partial E}{\partial a_i^{[n]}}$ - невязка i -того нейрона n -ного слоя. Таким образом, вклад

в общую ошибку каждого веса вычисляется локально, простым умножением невязки нейрона $\delta_i^{[n]}$ на значение соответствующего входа.

Входы каждого слоя вычисляются последовательно, от первого слоя к последнему, во время прямого распространения сигнала:

$$x_i^{[n+1]} = f\left(\sum_j w_{ij}^{[n]} x_j^{[n]}\right) \quad (9)$$

а невязки $\delta_i^{[n]}$ каждого слоя вычисляются во время обратного распространения ошибки от последнего слоя (где они определяются по выходам сети) к первому:

$$\delta_i^{[n]} = f'(a_i^{[n]}) \left(\sum_k w_{ki}^{[n+1]} \delta_k^{[n+1]} \right) \quad (10)$$

Последняя формула получена применением цепного правила к производной

$$\frac{\partial E}{\partial a_i^{[n]}} = \sum_k \frac{\partial E}{\partial a_k^{[n+1]}} \frac{\partial a_k^{[n+1]}}{\partial x_i^{[n+1]}} \frac{\partial x_i^{[n+1]}}{\partial a_i^{[n]}} \quad (11)$$

и означает, что чем сильнее учитывается активация данного нейрона на следующем слое, тем больше его ответственность за общую ошибку. Конкретный вид формулы (12) зависит от вида функции активации $f(x)$. Если в качестве функции активации взять сигмоиду, как часто и случается:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (12)$$

то ее производная находится элементарно: $f'(x) = f(x)(1 - f(x))$. Если обозначить через y_k выход конкретного нейрона, то с учетом, что $y_k = f(x)$, опишем алгоритм обратного распространения ошибки.

1. Инициализировать синаптические веса всех нейронов всех слоев $\{w_{ij}\}$ маленькими случайными значениями.

2. Подать на вход сети очередной обучающий пример и подсчитать выходы y_i каждого узла всех слоев.

3. Для всех нейронов k последнего слоя подсчитать значения невязок по формуле:

$$\delta_k = y_k(1 - y_k)(d_k - y_k) \quad (13)$$

4. Для каждого уровня n , начиная с предпоследнего:

Для каждого узла i уровня n вычислить невязку:

$$\delta_i^{[n]} = y_i(1 - y_i) \left(\sum_k w_{ik}^{[n+1]} \delta_k^{[n+1]} \right) \quad (14)$$

5. Для каждого ребра сети $\{i, j\}$

$$\Delta w_{ij} = \eta \delta_j y_i \quad (15)$$

$$w_{ij} = w_{ij} + \Delta w_{ij} \quad (16)$$

6. Повторить пункты 2-5 для следующего обучающего примера.

7. Выдать окончательные значения w_{ij} .

Для адекватного расчета необходимо нормализовать исходные данные.

Нормализация производится приведением к диапазону $[0, 1]$. Для этого используется следующая формула:

$$x^* = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (17)$$

где x - текущее значение, x_{\min}, x_{\max} - минимальные и максимальные значения поля. Данный вид нормализации называется линейной нормализацией.

Этапы построения нейронных сетей:

На первом этапе следует определить тип сети, подобрать веса сети, а также определить какие нейроны мы хотим, каким образом следует соединить их между собой, что взять в качестве входов и выходов сети, количество входов.

Выбор активационной функции зависит от характера преобразования, которое выполняет нейронная сеть, а также от метода обучения.

На втором этапе нам следует «обучить» выбранную сеть – значит сообщить ей, чего мы от нее добиваемся. Схематично процесс обучения нейросети представлен на рис. 6:

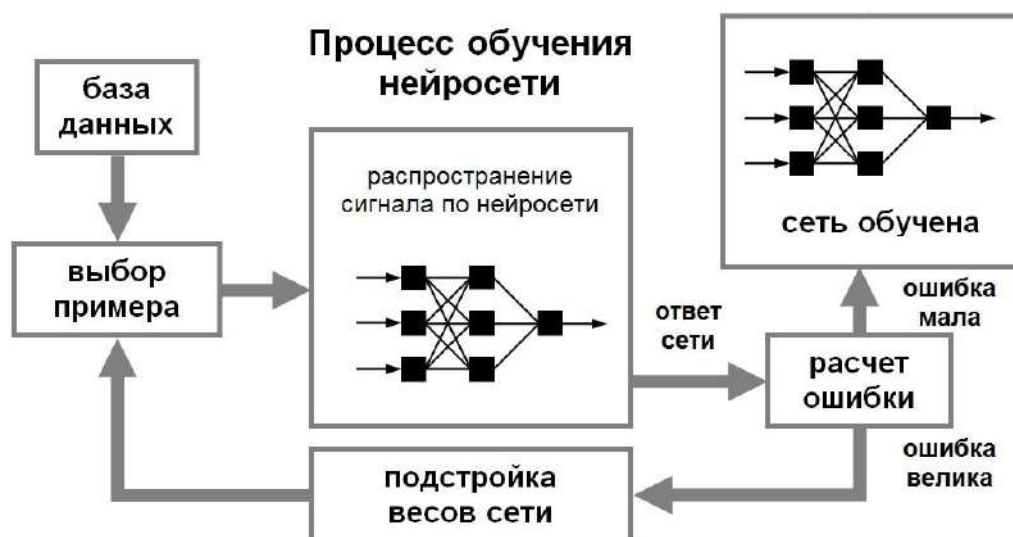


Рис. 6. Процесс обучения нейросети

Подавая любые числовые значения на входы сети, можно получать набор числовых значений на выходе сети. Работа нейросети заключается в преобразовании входного вектора в выходной вектор. Результат этого преобразования будет зависеть от параметров сети – весов взаимосвязей.

Практически любую задачу можно решить, используя алгоритм нейросети. Выбор типа сети – задача сложная, но на данный момент существует несколько десятков эффективных математически доказанных нейросетевых архитектур. Наиболее популярные и изученные архитектуры – многослойный персептрон, сеть каскадной корреляции Фальмана, сеть Вольтерри, сети с обратной связью между различными слоями нейронов – рекуррентные сети (сеть Хопфилда, сеть Хемминга, сеть ВАР, персептронная сеть с обратной связью, сеть Эльмана, сеть RTRN), сети с самоорганизацией на основе конкуренции (сеть Кохонена, сеть нейронного газа), сети с самоорганизацией корреляционного типа (сеть РСА, сеть

ICA), нечёткие нейронные сети (сеть TSK, сеть Ванга–Менделя). До выбора нейросетевой архитектуры необходимо определить, какие модели нейронов будут использоваться.

При выборе архитектуры сети обычно опробуется несколько конфигураций с различным количеством элементов. Исходя из того, что задача прогнозирования является частным случаем задачи регрессии, следует, что она может быть решена следующими типами нейронных сетей: многослойным персептроном (MLP), радиально-базисной сетью (RBF), обобщенно-регрессионной сетью (GRNN), сетью Вольтерри и сетью Эльмана.

В последние время мы наблюдаем высокий интерес к нейронным сетям, которые успешно применяются в самых различных областях - бизнесе, медицине, технике, геологии, физике, химии. Нейронные сети вошли в практику везде, где нужно решать задачи прогнозирования, классификации или управления.

3. МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ

Многие из базовых методов прогностики относятся скорее к отдельным приемам или процедурам прогнозирования, другие представляют набор отдельных приемов, отличающихся от базовых или друг от друга количеством частных приемов и последовательностью их применения.

По степени формализации все методы прогнозирования делятся на интуитивные и формализованные.

Интуитивное прогнозирование применяется тогда, когда объект прогнозирования либо слишком прост, либо настолько сложен, что аналитически учесть влияние многих факторов практически невозможно. В этих случаях прибегают к опросу экспертов. Полученные экспертные оценки используют как конечные прогнозы или в качестве исходных данных в комплексных системах прогнозирования.

Прогнозные экспертные оценки отражают индивидуальное суждение специалистов относительно перспектив развития объекта и основаны на мобилизации профессионального опыта и интуиции. Применяемые в прогнозировании методы экспертной оценки разделяют на индивидуальные и коллективные. Индивидуальные экспертные методы основаны на использовании мнений экспертов-специалистов соответствующего профиля независимо друг от друга. Наиболее часто применимыми являются следующие два метода формирования прогноза: интервью и аналитические экспертные оценки.

Основными преимуществами рассматриваемых методов является возможность максимального использования индивидуальных способностей эксперта и незначительность психологического давления, оказываемого на отдельного работника. Однако эти методы малопригодны для прогнозирования наиболее общих стратегий из-за ограниченности знаний одного специалиста-эксперта о развитии смежных областей науки.

Методы коллективных экспертных оценок основываются на принципах выявления коллективного мнения экспертов о перспективах развития объекта прогнозирования. В основе применения этих методов лежит гипотеза о наличии у экспертов умения с достаточной степенью достоверности оценить важность и значение исследуемой проблемы, перспективность развития определенного направления исследований, времени свершения того или иного события, целесообразности выбора одного из альтернативных путей развития объекта прогноза и т.д. В настоящее время широкое распространение получили экспертные методы, основанные на работе специальных комиссий,

Этот метод имеет недостаток, заключающийся в том, что группа экспертов в своих суждениях руководствуется в основном логикой компромисса.

В методе Дельфи вместо коллективного обсуждения той или иной проблемы проводится индивидуальный опрос экспертов обычно в форме анкет для выяснения относительной важности и сроков свершения гипотетических событий. Затем производится статистическая обработка анкет и формируется коллективное мнение группы, выявляются, обобщаются аргументы в пользу различных суждений. Вся информация сообщается экспертам. Участников экспертизы просят пересмотреть оценки и объяснить причины своего несогласия с коллективным суждением. Эта процедура повторяется 3–4 раза. В результате происходит сужение диапазона оценок.

Недостатком этого метода является невозможность учета влияния, оказываемого на экспертов организаторами опросов при составлении анкет.

Основными задачами при формировании прогноза с помощью коллектива экспертов являются:

- формирование репрезентативной экспертной группы;
- подготовка и проведение экспертизы;
- статистическая обработка полученных документов.

Для получения качественного прогноза к участникам экспертизы предъявляется ряд требований, основными из которых являются:

- высокий уровень общей эрудиции;
- глубокие специальные знания в оцениваемой области;
- способность к адекватному отображению тенденции развития исследуемого объекта;
- наличие психологической установки на будущее;
- наличие академического научного интереса к оцениваемому вопросу при отсутствии практической заинтересованности специалиста в этой области;
- наличие производственного и (или) исследовательского опыта в рассматриваемой области.

Обработка данных дает возможность получить количественную оценку компетентности потенциального эксперта по формуле.

$$K = 0,5 \left(\frac{\sum_{j=3}^m V_j}{\sum_{j=2}^m V_{j \max}} + \frac{\lambda}{P} \right) \quad (18)$$

где V_j – вес градации, перечеркнутой экспертом по j -й характеристике в анкете в баллах; $V_{j \max}$ – максимальный вес (предел шкалы) j -й характеристики в баллах; λ – вес ячейки, перечеркнутой экспертом шкале самооценки в баллах; P – предел шкалы самооценки эксперта в баллах.

Установить оптимальную численность группы экспертов довольно трудно. Однако в настоящее время разработан ряд формализованных подходов к этому вопросу.

Один из методов определения оптимальной численности группы экспертов основан на установлении максимальной и минимальной границ численности группы.

Исходя из условия, что группа экспертов считается избранной, если за нее подано $2/3$ голосов присутствующих. И максимальная численность экспертной группы устанавливается на основании неравенства:

$$n_{\max} \leq \frac{3 \sum_{i=1}^n K_i}{2k_{\max}}. \quad (19)$$

где C – константа; n_{\max} – максимально возможная компетентность по используемой шкале компетентности; K_i – компетентность i -го эксперта.

В литературе приводится правило расчета минимального числа экспертов в группе в зависимости от заданной (допустимой) величины изменения средней оценки ε

$$n_{\min} = 0,5 \left(\frac{3}{\varepsilon} + 5 \right). \quad (20)$$

где ε – заданная величина изменения средней ошибки при включении или исключении эксперта.

В выборе методов прогнозирования важным показателем является глубина упреждения прогноза. При этом необходимо не только знать абсолютную величину этого показателя, но и отнести его к длительности эволюционного цикла развития объекта прогнозирования. Для этого можно использовать безразмерный показатель глубины (дальности) прогнозирования (τ).

$$\tau = \frac{\Delta t}{t}, \quad (21)$$

где Δt – абсолютное время упреждения; t – величина эволюционного цикла объекта прогнозирования.

Формализованные методы прогнозирования являются действенными, если величина глубины упреждения укладывается в рамки эволюционного цикла ($\tau \ll 1$). При возникновении в рамках прогнозного периода «скачка» в развитии объекта прогнозирования ($\tau \approx 1$) необходимо использовать интуитивные методы, как для определения силы «скачка», так и для оценки времени его осуществления, либо теорию катастроф. В этом случае формализованные методы применяются для оценки эволюционных участков развития до и после скачка. Если же в прогножном периоде укладывается несколько эволюционных циклов развития объекта прогнозирования ($\tau \gg 1$), то при комплексировании систем прогнозирования большее значение имеют интуитивные методы.

Процедура проведения экспертизы может быть различной, однако здесь также можно выделить три основных этапа:

1. Эксперты привлекаются для уточнения формализованной модели объекта прогноза, формулировки вопросов в анкетах, уточнения состава группы.
2. Осуществляется непосредственная работа экспертов над вопросами в анкетах.
3. После предварительной обработки результатов прогноза эксперты привлекаются для консультаций по недостающей информации, необходимой для окончательного формирования прогноза.

При статистической обработке результатов экспертных оценок в виде количественных данных, содержащихся в анкетах, определяются статистические оценки прогнозируемых характеристик и их доверительные границы, статистические оценки согласованности мнений экспертов.

Среднее значение прогнозируемой величины определяется по формуле

$$B = \sum_{i=1}^n B_i / n, \quad (22)$$

где B_i - значение прогнозируемой величины, данное i -м экспертом; n – число экспертов в группе.

Кроме того, определяется дисперсия

$$D = \left[\sum_{i=1}^n (B_i - B)^2 / (n - 1) \right] \quad (23)$$

и приближенное значение доверительного интервала

$$j = t \sqrt{\frac{D}{n-1}}, \quad (24)$$

где t – критерий Стьюдента для заданного уровня доверительной вероятности и числа степеней свободы $k = (n - 2)$. Доверительные границы для значения прогнозируемой величины вычисляются по формулам: для верхней границы $AB = B + j$, для нижней границы $АН = B - j$. Коэффициент вариации оценок, данных экспертами, определяется по зависимости

$$v = \frac{\sigma}{B}, \quad (25)$$

где σ - среднеквадратическое отклонение.

Среднее значение суммы рангов оценок по всем направлениям равно

$$\bar{S} = \sum_{j=1}^m S_j / m. \quad (26)$$

Отклонение суммы рангов, полученных j -м направлением, от среднего значения суммы рангов определяется как

$$d_j = S_j - \bar{S}. \quad (27)$$

Тогда коэффициент конкордации, вычисленный по совокупности всех направлений, составляет

$$W = \frac{12 \sum_{j=1}^m d_j^2}{n^2(m^3 - m) - n \sum_{i=1}^n T_i}. \quad (28)$$

Величина

$$T_i = \sum t_i^3 - t_q, \quad (29)$$

рассчитывается при наличии равных рангов (n – количество групп равных рангов, t_q – количество равных рангов в группе).

Коэффициент конкордации принимает значение в пределах от 0 до 1. $W=1$ означает полную согласованность мнений экспертов, при $W=0$ – полную несогласованность. Коэффициент конкордации показывает степень согласованности всей экспертной группы. Низкое значение этого коэффициента может быть получено как при отсутствии общности мнений всех экспертов, так и из-за наличия противоположных мнений между подгруппами экспертов, хотя внутри подгруппы согласованность может быть высокой. Для выявления степени согласованности мнений экспертов используется коэффициент парной ранговой корреляции

$$\rho_{i,i+1} = \frac{\sum_{j=1}^m \psi_j^2}{\frac{1}{\sigma}(m^3 - m) - \frac{1}{12}(\pi - T_j - 1)}, \quad (30)$$

где ψ_j – разность (по модулю) величин рангов оценок j -го направления, назначенных экспертами i и $i+1$,

$$\psi_j = |R_i - R_{i+1}|. \quad (31)$$

Коэффициент парной ранговой корреляции может принимать значения от +1 до -1. Значение $\rho=1$ соответствует полной согласованности мнений двух

экспертов. Значение $\rho = -1$ показывает, что мнение одного эксперта противоположно мнению другого.

Для определения уровня значимости значений коэффициентов W и $\rho_i, i+1$ можно использовать критерий χ^2 . Для этого вычисляется величина

$$\chi^2 = \frac{12 \sum_{j=1}^m \alpha_j^2}{m \cdot n(m+1) - \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^n T_i}, \quad (32)$$

(число степеней свободы $k=t-1$) и по соответствующим таблицам определяется уровень значимости полученных значений.

Адаптивные методы прогнозирования.

Считается, что характерной чертой адаптивных методов прогнозирования является их способность непрерывно учитывать эволюцию динамических характеристик изучаемых процессов, «подстраиваться» под эту эволюцию, придавая, в частности, тем больший вес и тем более высокую информационную ценность имеющимся наблюдениям, чем ближе они к текущему моменту прогнозирования. Однако деление методов и моделей на «адаптивные» и «неадаптивные» достаточно условно. В известном смысле любой метод прогнозирования адаптивный, т.к. все они учитывают вновь поступающую информацию, в том числе наблюдения, сделанные с момента последнего прогноза. Общее значение термина заключается, по видимому, в том, что «адаптивное» прогнозирование позволяет обновлять прогнозы с минимальной задержкой и с помощью относительно несложных математических процедур. Однако это не означает, что в любой ситуации адаптивные методы эффективнее тех, которые традиционно не относятся к таковым. Постановка задачи прогнозирования с использованием простейшего варианта метода экспоненциального сглаживания формулируется следующим образом.

Пусть анализируемый временной ряд $x_\tau, \tau = 1, 2, \dots, t$ представлен в виде

$$x_\tau = a_0 + \varepsilon_\tau, \quad (33)$$

где a_0 – неизвестный параметр, не зависящий от времени, а ε_t – случайный остаток со средним значением, равным нулю, и конечной дисперсией.

К адаптивным методам прогнозирования относятся: Метод Хольта, Метод Хольта-Уинтерса, модель сезонности Тейла–Вейджа.

В настоящее время, наряду с выше перечисленными методами прогнозирования широко стало применяться прогнозирование с помощью нейронных сетей.

4. ФУГАСНОСТЬ. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФУГАСНОСТИ

Рассмотрим один из основных видов внешней работы взрыва – фугасное действие.

Фугасное действие представляет собой работу взрыва в форме:

- 1) раскалывания и отбрасывания среды, в которой происходит взрыв;
- 2) выброса грунта с образованием воронки (при глубоком залегании разрывного заряда может образоваться лишь полость в грунте).

Фугасное действие обусловлено расширением продуктов детонации до сравнительно невысоких давлений и прохождением ударной волны в окружающей среде. За пределами зоны фугасного действия лежит ее значительно более глубокая область распространения сравнительно слабых ударных волн.

Теоретическое исследование полной работы взрыва было впервые проведено русским ученым И.М. Чельцовым, а затем получило дальнейшее развитие в работах А.Ф. Беляева.

Чельцов рассматривал работу взрыва как работу адиабатного расширения продуктов взрыва.

Согласно первому закону термодинамики

$$-dU = dQ + dA \quad (34)$$

где dU – уменьшение внутренней энергии системы;

dQ – уменьшение выделенной при взрыве теплоты за счет теплопотерь;

dA - произведенная работа.

При $dQ = 0$ (при адиабатном процессе) имеем $dA = -dU = -c_v dT$.

Отсюда

$$A = \int_{T_2}^{T_1} c_v dT = \bar{c}_v (T_1 - T_2) \quad (35)$$

где A – полная работа взрыва, выраженная в тепловых единицах;

T_1 - начальная температура взрыва;

T_2 – конечная температура после расширения продуктов взрыва;

\bar{c}_v – средняя теплоемкость продуктов взрыва в интервале от T_1 до T_2 .

Очевидно, что максимальная работа была бы, если бы продукты взрыва охладились до абсолютного нуля, т.е. до $T_2 = 0$, что практически не осуществимо.

Работа адиабатного расширения n молекул газа может быть выражена формулой:

$$A = n\bar{c}_v(T_1 - T_2) = n\bar{c}_v T_1 \left(1 - \frac{T_2}{T_1}\right) = Q_v \left(1 - \frac{T_2}{T_1}\right) \quad (36)$$

где Q_v – теплота взрыва.

Исходя из уравнения адиабаты $pV^k = const$ и уравнения состояния идеального газа, находим

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{k-1} = \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^{\frac{k-1}{k}} \quad (37)$$

где V_1 и V_2 – начальный и конечный объем газов;

p_1 и p_2 - начальное и конечное давление газов.

Следовательно,

$$A = Q_v \left[1 - \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{k-1}\right] = Q_v \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^{\frac{k-1}{k}}\right] \quad (38)$$

Уравнение, выражающее зависимость полной работы взрыва A от отношения объемов газа, выведено Чельцовым. Оно удобно для теоретического рассмотрения влияния различных факторов на величину A . Уравнение Чельцова позволяем сделать приближенные выводы:

1) при $V_2 \gg V_1$, $A \cong Q_v$, т.е. работоспособность взрывчатых веществ приближается к величине потенциала Q_v ;

2) так как $k - 1 = \frac{R}{c_v}$, то чем меньше теплоемкость продуктов взрыва, тем больше $k - 1$ и тем меньше $\left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{k-1}$, а, следовательно, тем больше работа взрыва A .

3) так как теплоемкость растет с увеличением числа атомов в молекуле, то выгоднее иметь в составе продуктов взрыва больше двухатомных газов, вместе с тем, чем больше двухатомных газов, тем больше объем продуктов взрыва, что тоже приводит к увеличению A .

4) чем больше в продуктах взрыва твердых веществ, обладающих большей теплоемкостью, тем больше общая теплоемкость продуктов взрыва и меньше работоспособность A .

Пользуясь уравнением (4.38), выражающим зависимость полной работы взрыва от отношения давлений, и предполагая, что взрыв происходит в воздухе и расширение идет до атмосферного давления, т.е. до $p_2 = 9.8 \cdot 10^4 \text{ Н/м}^2$, найдем

$$A = Q \left[1 - \left(\frac{1}{p_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right] = Q - q \quad (39)$$

Разность $Q - a = q$ определяет потерянную теплоту, представляющую собой то тепло, которое остается в продуктах взрыва по достижении ими атмосферного давления.

Практическое определение работоспособности (фугасности) взрывчатых веществ.

По А.Ф. Беляеву, величина практической работоспособности пропорциональна работе адиабатного расширения продуктов взрыва при определенной степени этого расширения, зависящей от условий взрыва и характера производимой работы. Определить работоспособность по этому принципу можно с помощью баллистического маятника.

Для той цели применяют баллистические маятники разных конструкций. Схема часто применяемых конструкций дана на Рис. 7.

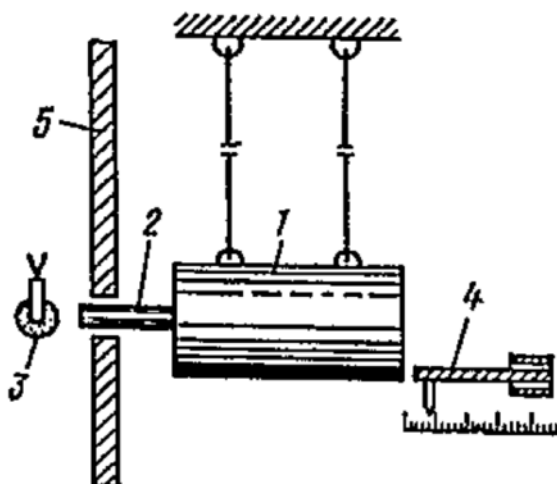


Рис. 7

Схема баллистического маятника для определения импульса продуктов взрыва или ударной волны.

1 – груз маятника, 2 – носок маятника, 3 – испытуемый заряд взрывчатого вещества, 4 – устройство для измерений отклонений, 5 – щит.

При взрыве испытуемого заряда взрывчатого вещества поток продуктов взрыва или ударной волны, действуя на торец носка маятника, сообщает маятнику импульс и отклоняет его на некоторый угол, определяемый по горизонтальному отклонению маятника. Щит служит для защиты основной массы маятника от непосредственного воздействия продуктов взрыва и ударной волны.

Обозначим: M – масса маятника;
 l – длина подвеса;
 g – ускорение силы тяжести;
 h – высота поднятия центра тяжести маятника;
 φ – угол отклонения маятника.

Импульс, воспринимаемый маятником при взрыве,

$$I = M\sqrt{2gl(1 - \cos\varphi)} \quad (40)$$

так как $h = l(1 - \cos\varphi)$. Эта формула справедлива для углов отклонения φ не более $15 - 20^\circ$.

Пользуясь непосредственно величиной X горизонтального отклонения маятника, можно определить импульс для малых углов из соотношения

$$I = M \frac{2\pi}{T} X \quad (41)$$

где T – период колебания маятника. Учитывая зависимость между энергией движения и величиной импульса, сообщенного маятнику, $E = Mgh \frac{l^2}{2M}$, можно вычислит суммарную энергию ударной волны. Однако, как указывает К.К. Андреев, практическое использование метода баллистического маятника для определения работоспособности взрывчатого вещества требует преодоления многих трудностей.

Поэтому в промышленности для оценки работоспособности наибольшее распространение имеет метод, при котором изменяется расширение, образуемое взрывом в свинцовой бомбе.

Для этой цепи применяют свинцовую бомбу (Рис. 8 а) с цилиндрическим гнездом. В бумажную гильзу помещают 10 г. взрывчатого вещества и прессуют в специальной матрице в виде патрона с гнездом для капсюля – детонатора или электродетонатора. Патрон с капсюлем вводят в гнездо бомбы (Рис. 8 б). Свободный объем гнезда засыпают кварцевым песком. При взрыве гнездо бомбы расширяется и приобретает грушевидную форму (Рис. 8 в). Разность между объемом гнезда до и после взрыва является практической мерой работоспособности испытуемого взрывчатого вещества (ГОСТ 4546-48).

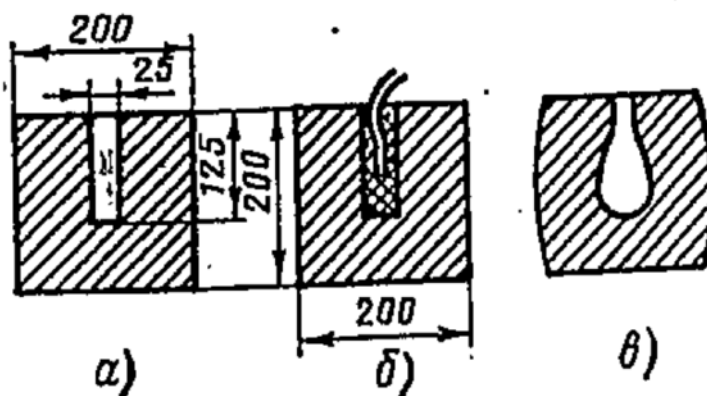


Рис. 8.

Свинцовая бомба для определения работоспособности взрывчатых веществ.

Эта величина характеризует только относительную работоспособность взрывчатых веществ, а не абсолютное ее значение.

4.1. РЕЗУЛЬТАТЫ НЕЙРОСЕТЕВОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ФУГАСНОСТИ

Для проведения прогнозирования параметра фугасности была создана электронная база данных. Изначально база данных состояла из 54 веществ. В этой базе данных исходными параметрами являлись: количество С, количество Н, количество О, количество N, молярная масса, кислородный баланс, плотность, фугасность, объем продуктов взрыва. После дальнейшего изучения предметной области было выявлено, что на фугасность оказывает влияние параметр объем продуктов взрыва. В связи с этим, в состав данных вошли 48 веществ, так как в остальных веществах был не полный набор требуемых характеристик. Все данные для исследований были взяты из справочной литературы [1]. Исследования проводились с использованием пакетов: ExcelNeuralPackage, Deductor, STATISTICANeuralNetworks

4.1.1. Пакет ExcelNeuralPackage

Возможны два варианта работы с пакетом, во-первых, данные вводятся впервые, во-вторых, обученная ранее нейронная сеть используется для работы с новыми данными.

В первом варианте необходимо обучить нейронную сеть на заданном наборе данных. Сеть построит аппроксимацию многомерных данных, автоматически подбирая веса нейронов. Для этого необходимо сделать следующее:


- загрузить данные из книги Excel в систему;
- определить, что является входной информацией, а что – выходной;
- предобработать данные, т. е. осуществить их нормировку;
- оценить значимость входов для выходной информации и, если необходимо, изменить (удалить/добавить) входы;
- создать нейронную сеть;
- обучить нейронную сеть на заданном множестве примеров и оценить работу на тестовом множестве;
- сохранить предсказанные (обработанные) данные в книге Excel;
- сохранить обученную нейронную сеть для дальнейшей работы.

Разберем эти действия по шагам.

Для работы с данными выделите область на листе книги Excel. Данные на листе располагаются следующим образом: входы и выходы - столбцы, строки - обучающие примеры. Например, требуется построить нейронную сеть, вычисляющую выброс свинца в атмосферу в зависимости от количества и вида проезжающего транспорта. База данных взрывчатых веществ представлена в виде таблицы Excel на Рис.9.

Microsoft Excel - DataBase											
Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно ?											
Calibri 14 Ж К Ч % , 0,00 0,00											
O27 =											
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
		Количество С	Количество Н	Количество О	Количество N	Количество S	Молярная масса г/моль	Кислородный баланс	Плотность, г/см3	Объем продуктов взрыва, л/кг	Фугасность, л/кг
1	ВВ										
2	Оксоген(α)	4	8	8	8	0	296,1	0,8849946	1,87	782	450
3	Оксоген(β)	4	8	8	8	0	296,1	0,8849946	1,905	782	450
4	Оксоген(γ)	4	8	8	8	0	296,1	0,8849946	1,82	782	450
5	Оксоген(δ)	4	8	8	8	0	296,1	0,8849946	1,76	782	450
6	Оксоген(ε)	4	8	8	8	0	296,1	0,8849946	1,919	782	450
7	Тетрап	7	5	8	5	0	287,15	0,8198756	1,73	765	350
8	Гексоген	3	6	6	6	0	222,12	0,8849946	1,86	908	500
9	ЭДНА	2	6	4	4	0	151,04	0,8528514	1,75	908	440
10	Нитрогуанидин	1	4	2	4	0	104,07	0,825953	1,932	1077	300
11	Нитрокарбамид	1	3	3	3	0	105,05282	0,9400161	1,73	853	310
12	ДИНА	4	8	8	4	0	240,13	0,8849946	1,675	924	480
13	ДНЕ	6	4	4	2	0	164,077	0,722148	1,567	670	260
14	ТНЕ	6	3	6	3	0	213,0825	0,802932	1,688	711	330
15	тропат	7	5	6	3	0	227,13	0,765178	1,663	730	285
16	тропат(при 82°С)	7	5	6	3	0	227,13	0,765178	1,467	730	285
17	2,4,6- Тринитроксиол	8	7	6	3	0	241,2	0,735107	1,604	700	270
18	2,4,6- Тринитроксиол	7	5	7	3	0	243,1305	0,794017	1,708	740	300
19	ТНФ	6	3	7	3	0	229,1	0,833194	1,763	730	315
20	Пиврат аммония	6	6	7	4	0	240	0,812389	1,717	680	330
21	Динитрофтален	10	6	2	4	0	218	0,542794	1,5	488	100
22	гексол	12	5	12	7	0	439	0,806542	1,653	675	325
23	Гексанитроксибен	14	6	12	7	0	464,1937	0,776746	1,75	700	300
24	ТЭН(гекс)	5	8	12	4	0	316,0746	0,940016	1,77	768	500
25	ТЭН(вода)	5	8	12	4	0	316,0746	0,940016	1,77	768	560
26	нитроманит	6	8	18	6	0	452,0954	1,003412	1,8	723	490
27	нитроманит(под водой)	6	8	18	6	0	452,0954	1,003412	1,8	723	560
28	нитроглицерин (в гекс)	3	5	9	3	0	227,0477	0,988918	1,735	713	390
29	нитроглицерин(в воде)	3	5	9	3	0	227,0477	0,988918	1,735	713	590
30	Динитроэтиленгликоль	2	4	5	2	0	136,0324	0,933682	1,489	737	640
31	Динитроэтиленгликоль	6	8	7	2	0	220,0752	0,799903	1,38	919	425
32	Триэтиленгликольдинитрат	6	12	8	2	0	240,0746	0,802932	1,335	851	320
33	Нитроксибутилглицериндинитрат	4	6	11	4	0	286,0642	0,975444	1,64	705	540
34	Нитрометан	1	3	2	1	0	61,0165	0,852851	1,137	1059	470
35	динитроэтиленкарбамид	5	6	13	8	0	386,1008	0,975444	1,792	687	528
36	динитроэтиленкарбамид (вещество "Б")(α)	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496
37	динитроэтиленкарбамид (вещество "Б")(β)	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,96	693	496
38	Бензолтрифуроксан	6	0	6	6	0	252,1026	0,825953	1,901	655	450
39	Фульминат ртути(II)	2	0	2	2	0	284,63	7,828831	4,3	315	110
40	Нитроглицоль	2	4	6	2	0	152,063	9,400161	1,49	738	620
41	Пироксилин	6	7	11	3	0	297,132	8,7258478	1,7	994	375
42	Тетранитроамин	7	5	8	5	0	287,144	8,0293191	1,867	827	430
43	Динитрофтален	10	6	4	2	0	218,168	8,4791118	1	488	100
44	тетрап	7	5	8	5	0	287,15	8,0293191	1,63	765	390
45	гексоген	3	6	6	6	0	222,12	8,849946	1,82	908	520
46	Двухгексогендинитрат	4	8	8	4	0	240,13	8,849946	1,675	924	480
Исходная БД / test1 / test2 / test3 / test4 / test5 / test6 / test7 / test8 / test9 / test10 / проверка /											
Готово											

Рис.9

Щелкните мышью по кнопке с изображением нейрона на панели инструментов  **NeuralAnalysis**. Появится диалоговое окно **Selectdatasource**, предлагающее уточнить параметры области данных для работы.

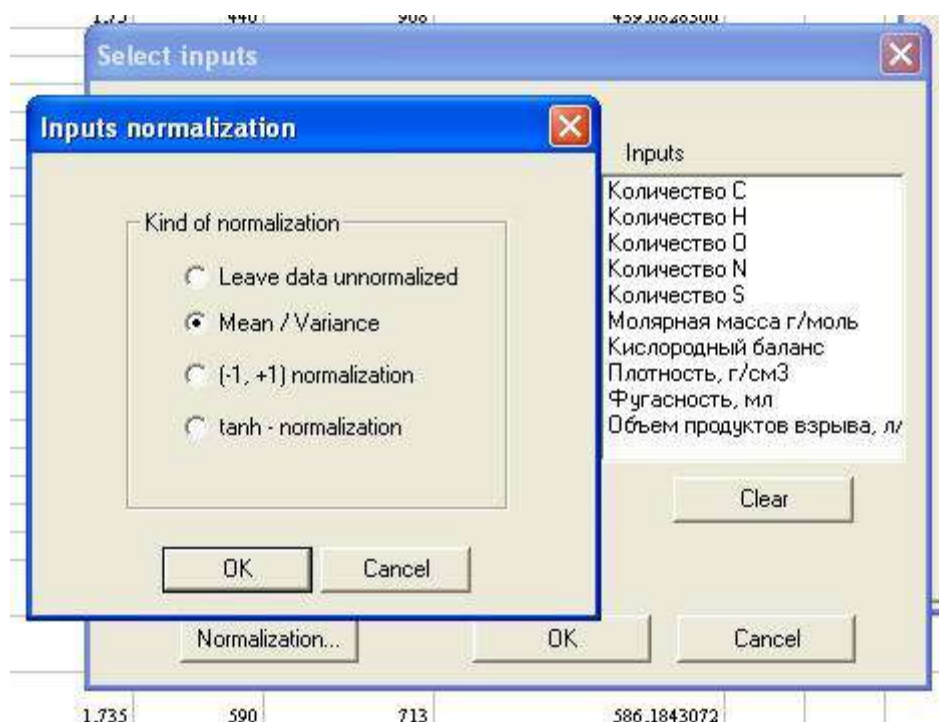


Рис. 10

В открывшемся диалоговом окне **SelectInputs/AllData** выберете необходимые входы и с помощью кнопки **>>** переведите их в окно списка **Inputs**. Корректировку выбранных входов можно произвести кнопкой (Рис. 10).

Так как конкретные значения входов могут быть любыми, то рекомендуется их нормализовать. Для большинства случаев подходит нормировка входных значений **Mean/Variance**. При этом данные переводятся в безразмерную форму вычитанием среднего и нормированием на их дисперсию. Нажмите кнопку **Normalization...** и выберите в открывшемся окне **Inputsnormalization** соответствующую позицию переключателя. Подтвердите выбор нажатием кнопки **OK**. Вернувшись в окно **SelectInputs** также подтвердите выбор нажатием кнопки **OK**.

Следующий этап - создание нейронной сети (многослойного персептрона). Перейдите на закладку **Network** и нажмите на кнопку **CreateNet....** (Рис. 11)

В открывшемся окне **NetworkConstruction** можно полностью определить структуру и топологию нейронной сети:

- количество слоев;
- тип активационной функции нейронов данного слоя;

- число нейронов в слое;

порядок нелинейности нейронов данного слоя.

При определении структуры и топологии сети будем руководствоваться следующими соображениями:

1. Для хорошей гладкой аппроксимации данных общее число связей сети должно быть в несколько раз (лучше на порядок) меньше числа обучающих примеров. В противном случае нейронная сеть просто запомнит данные, потеряв возможность делать статистически значимые предсказания на новых данных (явление переобучения).

2. В большинстве задач нет смысла использовать архитектуру нейронной сети с количеством скрытых слоев более одного. Нелинейный же характер нейронной сети определяется количеством нейронов в этом скрытом слое.

3. Доказано, что двухслойные нейронные сети с сигмоидальными передаточными функциями могут реализовать любые отображения входного сигнала в выходной.

4. Использование порядка нелинейности нейрона более 1 не рекомендуется.

5. Согласно исследованиям, количество нейронов в скрытых слоях сильно зависит от размера обучающей выборки. Например, если обучающая выборка мала, а количество нейронов велико, то сеть начинает запоминать факты, тогда как в задачах прогнозирования требуется обобщение. Обратная ситуация может привести к тому, что сеть никогда не обучится. Однако в настоящий момент не разработано исчерпывающей и однозначной методики для определения количества нейронов в скрытых слоях. Поэтому определение количества нейронов в скрытом слое для каждой задачи необходимо проводить опытным путем.

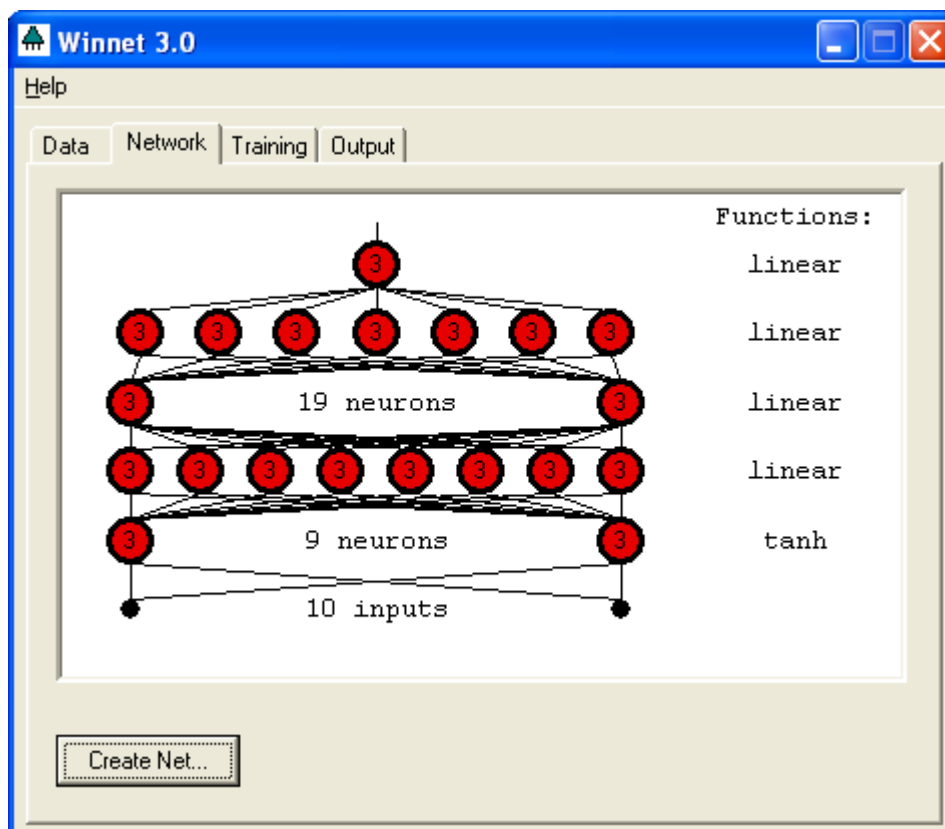


Рис. 11

Теперь можно начинать обучение. Нажав кнопку **Starttraining** (Рис. 12), можно наблюдать за ходом обучения нейронной сети по изменению информации в области **TrainingInfo** или в графическом виде в соответствующих окнах, вызываемых нажатием клавиш в области **Graphs**. Желательно остановить процесс обучения в момент, когда ошибки обучения и обобщения начнут сильно расходиться. Рост ошибки обобщения сигнализирует о начале переобучения.

По завершении процесса обучения его результаты можно визуальнo оценить на графике **Networkanswers...** (Рис. 13), вызываемом по нажатию соответствующей кнопки.

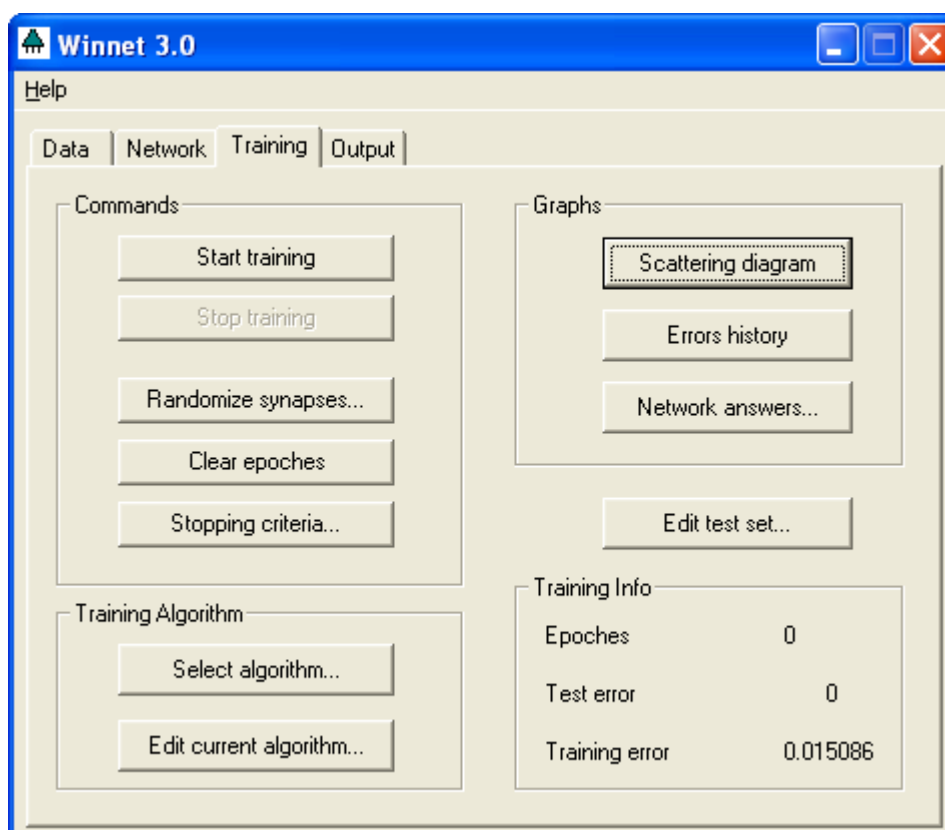


Рис. 12

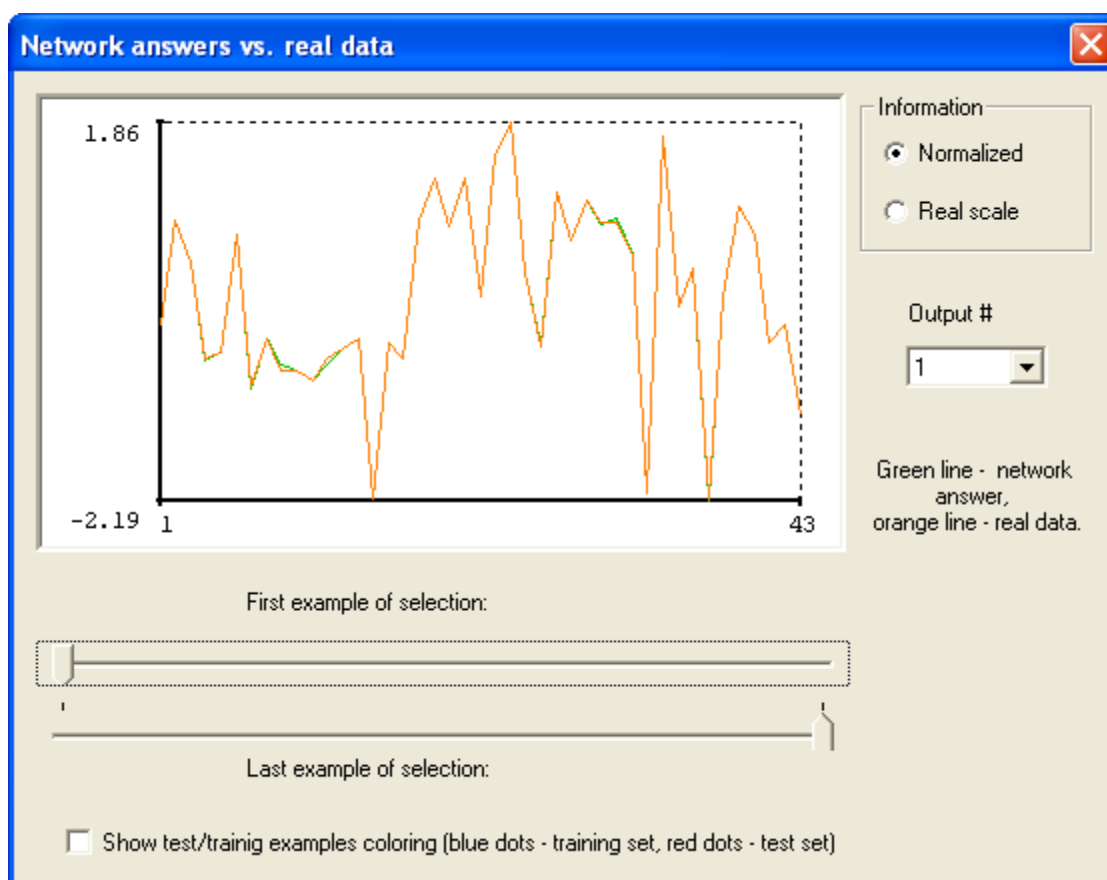


Рис. 13

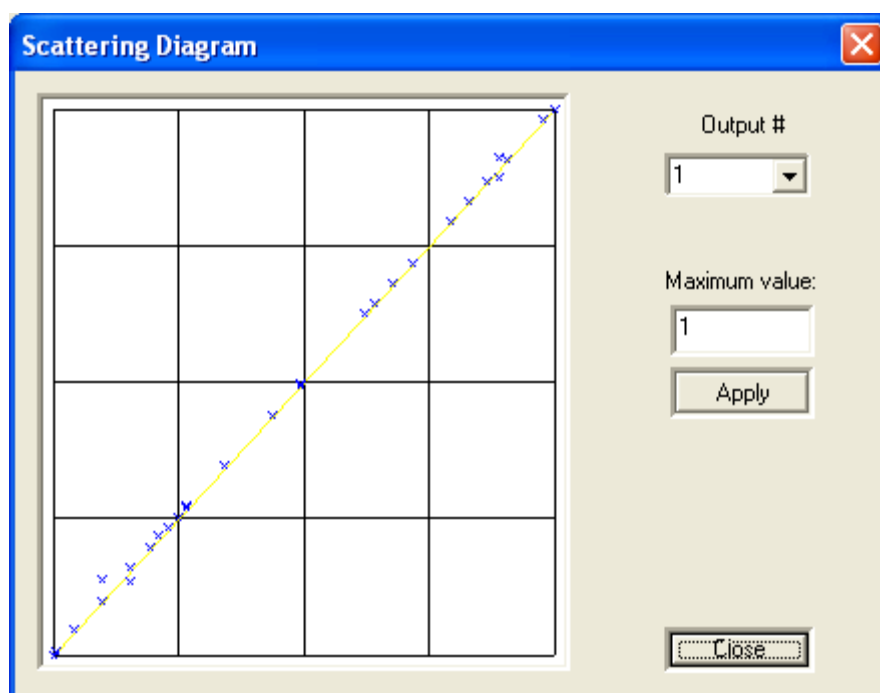


Рис. 14

Теперь осталось сохранить проект (**SaveProject...**) и экспортировать результаты назад в книгу Excel. Для экспорта результатов перейдите на закладку **Output** (рис. 14), задайте необходимые параметры и сохраните результаты нажатием кнопки **ОК**.

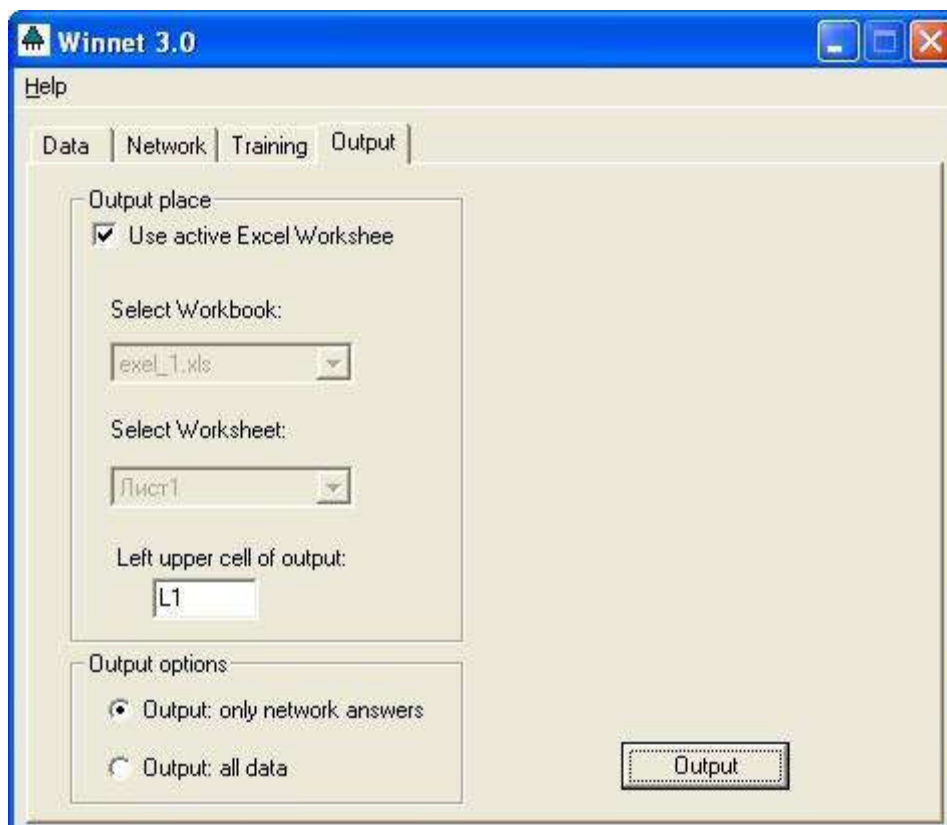


Рис. 15

Вид листа Excel после вставки результатов (рис.16).

Microsoft Excel - DataBase													
Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно ?													
Calibri 11 Ж К Ч													
P7 =													
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
		Количество	Количество	Количество	Количество	Количество	Молярная	Кислородный	Плотность,	Объем	Фугасность	Фугасность, мл (Predicted)	Погрешность
		C	H	O	N	S	масса	ый баланс	г/см3	продуктов	мл		
							г/моль			взрыва, л/кг			
1	ВВ												
2	Тетрия	7	5	8	5	0	287,15	0,8198756	1,73	765	350	350,722933	0,722933012
3	Гексоген	3	6	6	6	0	222,12	0,8849946	1,86	908	500	500,20487	0,204868954
4	ЭДНА	2	6	4	4	0	151,04	0,8528514	1,75	908	440	439,9088568	0,091143182
5	Нитрогуанидин	1	4	2	4	0	104,07	0,825953	1,932	1077	300	299,8579941	0,142005871
6	Нитрокарбамид	1	3	3	3	0	105,05282	0,9400161	1,73	853	310	309,9956129	0,004387068
7	ДИНА	4	8	8	4	4	240,13	0,8849946	1,675	924	480	479,8773686	0,122631435
8	ДНБ	6	4	4	2	0	164,077	0,722148	1,567	670	260	259,1401969	0,859803142
9	ТНБ	6	3	6	3	0	213,0825	0,802932	1,688	711	330	330,2706033	0,2706033
10	тропия	7	5	6	3	0	227,13	0,765178	1,663	730	285	294,1143979	9,114397872
11	тропия(при 82°С)	7	5	6	3	0	227,13	0,765178	1,467	730	285	283,3199111	1,880088858
12	2,4,6- Тринитроксипол	8	7	6	3	0	241,2	0,735107	1,604	700	270	289,6478483	0,352151705
13	2,4,6-Тринитроанилол	7	5	7	3	0	243,1305	0,794017	1,708	740	300	293,3668587	6,633141306
14	ТНФ	6	3	7	3	0	229,1	0,833194	1,763	730	315	315,7660299	0,766029948
15	Пикрат аммония	6	6	7	4	0	240	0,812389	1,717	680	330	329,6635346	0,336485352
16	Динитронафталин	10	6	2	4	0	218	0,542794	1,5	488	100	98,83321003	0,166789973
17	гексин	12	5	12	7	0	439	0,806542	1,653	675	325	324,653617	0,346382962
18	Гексанитростильбен	14	6	12	7	0	464,1937	0,776746	1,75	700	300	300,1073904	0,10739043
19	ТЭН(песок)	5	8	12	4	0	316,0746	0,940016	1,77	768	500	500,0987502	0,098750158
20	ТЭН(вода)	5	8	12	4	0	316,0746	0,940016	1,77	768	560	559,8660237	0,133976263
21	нитроманнит	6	8	18	6	0	452,0954	1,003412	1,8	723	490	490,0188662	0,018866223
22	нитроманнит(под водой)	6	8	18	6	0	452,0954	1,003412	1,8	723	560	559,4686742	0,530325767
23	нитропидерин(в песке)	3	5	9	3	0	227,0477	0,988918	1,735	713	390	389,7093411	0,290658879
24	нитропидерин(в воде)	3	5	9	3	0	227,0477	0,988918	1,735	713	590	590,206467	0,206467015
25	Динитроэтиленгликоль	2	4	5	2	0	136,0324	0,933682	1,489	737	640	640,3750188	0,375018831
26	Динитроэтиленгликоль	6	8	7	2	0	220,0752	0,799903	1,38	919	425	424,9327073	0,067292673
27	Тринитроэтиленгликоль,динитрат	6	12	8	2	0	240,0746	0,802932	1,335	851	320	320,2735301	0,273530052
28	Нитроэнобутилатдинитри	4	6	11	4	0	286,0642	0,975444	1,64	705	540	540,2570933	0,257093338
29	Нитрометан	1	3	2	1	0	61,0165	0,852851	1,137	1059	470	470,1116882	0,111688188
30	динитроэтиленкарбамид	5	6	13	8	0	386,1008	0,975444	1,792	687	528	528,1942991	0,194299148
31	динитроэтиленкарбамин (вещество "Е")х(а)	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
32	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
33	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
34	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
35	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
36	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
37	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
38	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
39	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
40	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
41	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
42	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
43	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
44	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
45	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
46	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
47	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
48	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
49	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
50	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
51	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
52	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
53	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
54	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
55	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
56	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
57	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
58	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
59	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
60	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
61	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
62	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
63	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
64	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
65	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
66	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
67	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
68	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
69	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
70	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
71	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
72	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
73	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
74	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
75	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
76	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
77	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
78	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
79	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158
80	динитроэтиленкарбамин	4	4	14	8	0	388,0892	1,057483	1,92	693	496	491,9793998	4,020600158

опыт, в котором мы исключили данный параметр. Опыт проводился на ранее построенной нейронной сети.

Таблица 1.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Тетрил	350	350,7639703	0,763970282
Гексоген	500	501,9367979	1,936797878
ЭДНА	440	437,1347001	2,865299886
Нитрогуанидин	300	307,3062802	7,306280244
Нитрокарбамид	310	302,5437246	7,456275444
ДИНА	480	479,3630825	0,636917462
ДНБ	260	261,85097	1,85096997
ТНБ	330	343,3349363	13,3349363
тротил	285	286,234949	1,234949031
тротил(при 82°С)	285	287,4424127	2,442412681
2,4,6- Тринитроксолол	270	267,1203298	2,879670237
2,4,6-Тринитроанизол	300	299,2655592	0,734440835
ТНФ	315	303,8568468	11,14315315
Пикрат аммония	330	328,9755816	1,024418436
Динитронафталин	100	100,9828652	0,982865206
гексил	325	324,5636722	0,436327816
Гексанитростильбен	300	300,3896189	0,389618879
ТЭН(песок)	500	502,1290922	2,12909217
ТЭН(вода)	560	556,4280085	3,571991475
нитроманнит	490	491,1972594	1,197259431
нитроманнит(под водой)	560	560,619845	0,619845038
нитроглицерин (в песке)	390	393,0640672	3,064067157
нитроглицерин(в воде)	590	591,8126887	1,8126887
Динитроэтиленгликоль	640	640,0940376	0,094037561
Динитродиэтиленгликоль	425	427,3145629	2,314562942
Триэтиленгликольдинитрат	320	319,4471921	0,552807874
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	542,2573592	2,25735921
Нитрометан	470	471,2540225	1,254022465
дитринитроэтилкарбамид	528	529,3079672	1,307967165
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	499,7099234	3,709923422
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	493,6833174	2,316682634
Бензотрифуроксан	450	448,1678492	1,832150794
Фульминат ртути(II)	110	109,4648809	0,535119053
Нитрогликоль	620	619,1537798	0,846220221
Пироксилин	375	376,1054136	1,105413618

Тетранитроанилин	430	429,9997946	0,00020538
Динитронафталин	100	102,3398115	2,339811494
тетрил	390	390,7573735	0,757373469
гексоген	520	520,6486351	0,648635098
Диэтанолнитраминдинитрат	480	478,6235686	1,376431401
Нитрат метиламина	325	324,7402935	0,259706478
Триаминогуанидиннитрат	350	351,9719241	1,971924057
Перхлорат аммония	220	221,2746949	1,274694942


Сравнивая данную таблицу с таблицей из приложения 2, можно сказать, что сеть, обученная с параметром объем продуктов взрыва дала лучшие результаты, нежели результаты без этого параметра.

В пятнадцати веществах параметр фугасности был вычислен близко к исходным значениям, в остальных случаях отличие превышает 1.

4.1.2. Пакет Deductor

Рассмотрим решение той же задачи в аналитическом пакете Deductor.

В качестве обучающего набора данных выступает база данных deductor.xls, содержащая информацию о взрывчатых веществах. На основе этих данных необходимо построить модель, которая сможет рассчитать значение фугасности.

Данные для анализа находятся в файле deductor.xls. Импортируем данные из файла при помощи мастера импорта . В открывшемся окне выбираем тип файла – Excel.

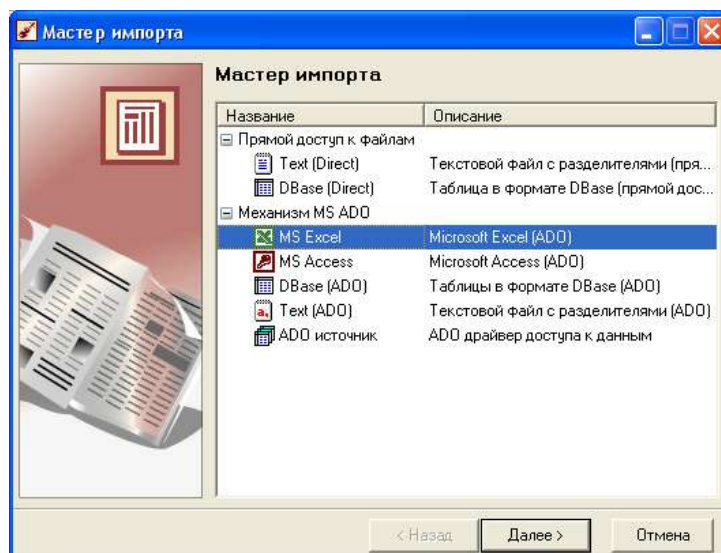


Рис. 17

Затем выбираем наш файл в разделе «База данных», и указываем нужный лист с данными в разделе «Таблица в базе данных».

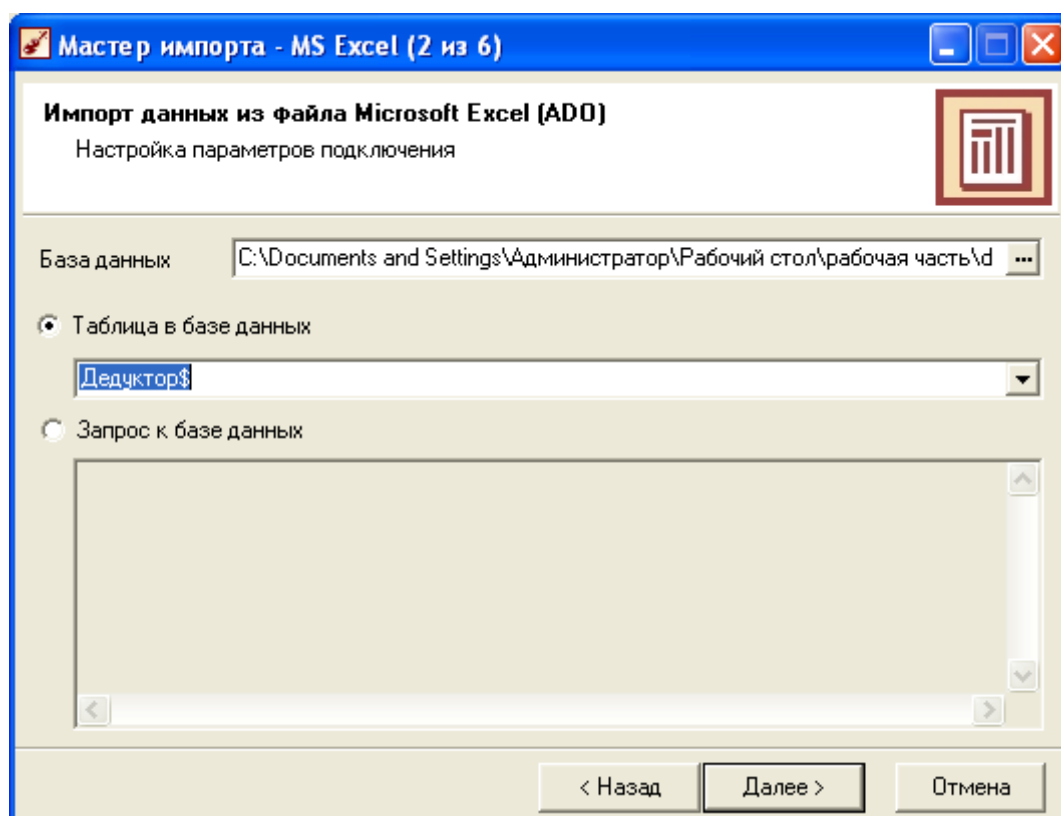


Рис. 18

На следующей странице запускаем импорт нажатием кнопки «Пуск».

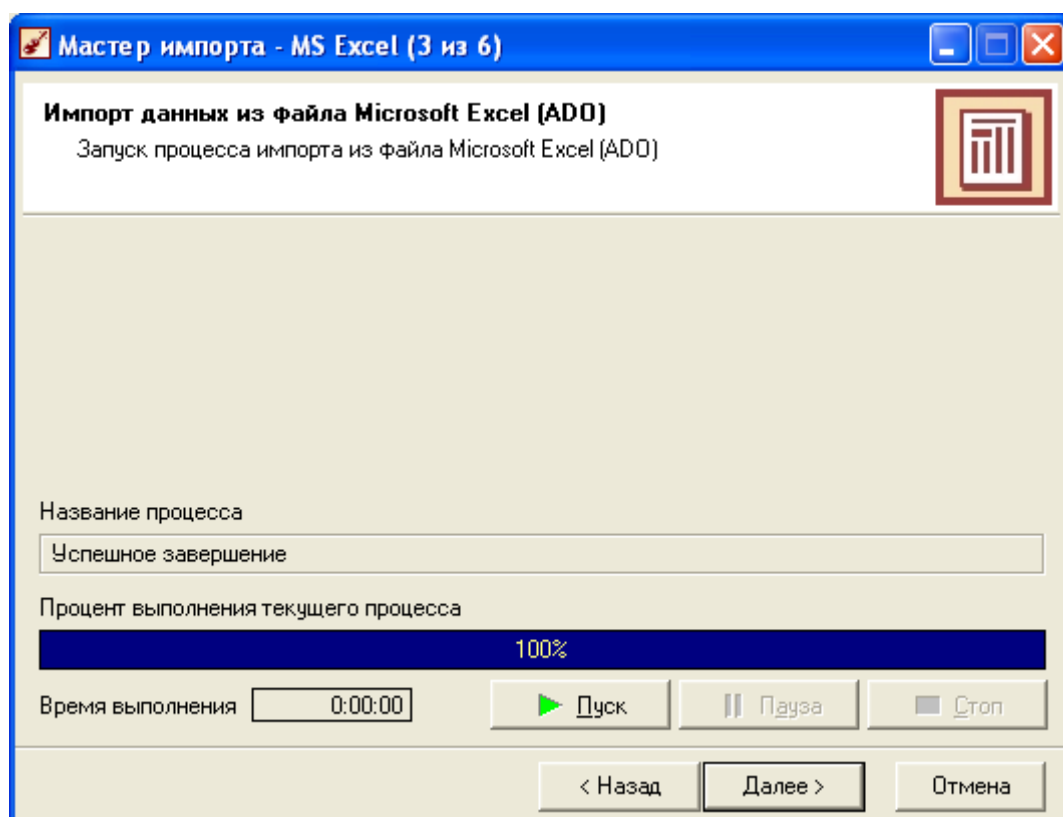


Рис. 19

Представление исходных данных в файле:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	
1	4	8	8	8	296,1	0,88499	1,87	782	450	
2	4	8	8	8	296,1	0,88499	1,905	782	450	
3	4	8	8	8	296,1	0,88499	1,82	782	450	
4	4	8	8	8	296,1	0,88499	1,76	782	450	
5	4	8	8	8	296,1	0,88499	1,919	782	450	
6	7	5	8	5	287,15	0,81988	1,73	765	350	
7	3	6	6	6	222,12	0,88499	1,86	908	500	
8	2	6	4	4	151,04	0,85285	1,75	908	440	
9	1	4	2	4	104,07	0,82595	1,932	1077	300	
10	1	3	3	3	105,053	0,94002	1,73	853	310	
11	4	8	8	4	240,13	0,88499	1,675	924	480	
12	6	4	4	2	164,077	0,72215	1,567	670	260	
13	6	3	6	3	213,083	0,80293	1,688	711	330	
14	7	5	6	3	227,13	0,76518	1,663	730	285	
15	7	5	6	3	227,13	0,76518	1,467	730	285	
16	8	7	6	3	241,2	0,73511	1,604	700	270	
17	7	5	7	3	243,131	0,79402	1,708	740	300	
18	6	3	7	3	229,1	0,83319	1,763	730	315	
19	6	6	7	4	240	0,81239	1,717	680	330	
20	10	6	2	4	218	0,54279	1,5	488	100	
21	12	5	12	7	439	0,80654	1,653	675	325	
22	14	6	12	7	464,194	0,77675	1,75	700	300	
23	5	8	12	4	316,075	0,94002	1,77	768	500	
24	5	8	12	4	316,075	0,94002	1,77	768	560	
25	6	8	18	6	452,095	1,00341	1,8	723	490	
26	6	8	18	6	452,095	1,00341	1,8	723	560	
27	3	5	9	3	227,048	0,98892	1,735	713	390	
28	3	5	9	3	227,048	0,98892	1,735	713	590	
Исходная БД \ Дедуктор /										

Рис. 20

Далее, для каждого импортированного столбца можно скорректировать имя и тип данных. В нашем случае первые 8 столбцов будут являться входными, а последний, 9-ый – выходным столбцом.

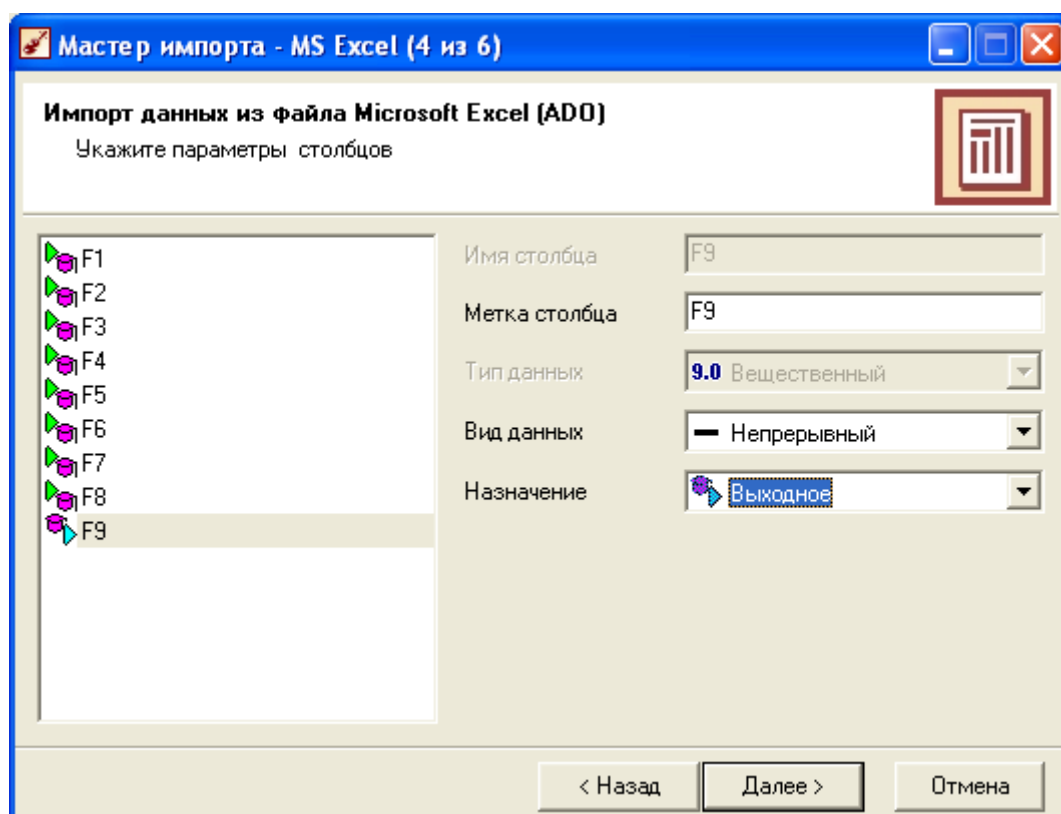


Рис. 21

В качестве способа отображения выбираем таблицу и диаграмму:

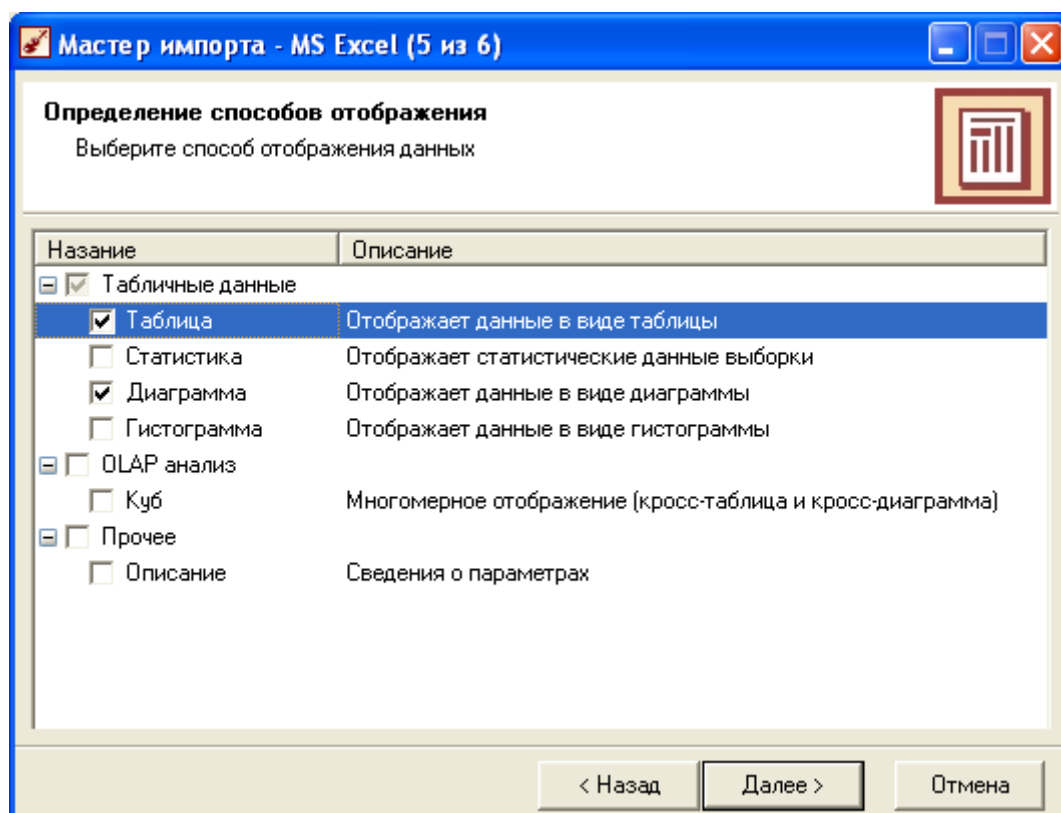



Рис. 22

В рабочем окне получаем таблицу с импортированными данными:

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9
4	8	8	8	286,1	0,8849946	1,905	752	450	
4	8	8	8	286,1	0,8849946	1,82	752	450	
4	8	8	8	286,1	0,8849946	1,76	752	450	
4	8	8	8	286,1	0,8849946	1,919	752	450	
7	5	8	5	287,15	0,8180759	1,73	756	252	
3	6	6	6	232,12	0,8849946	1,66	808	590	
2	6	4	4	151,04	0,853514	1,75	808	440	
1	4	2	4	104,07	0,825952	1,822	1877	390	
1	3	3	3	105,05262	0,9402161	1,73	853	310	
4	8	8	4	240,13	0,8849946	1,675	824	480	
5	4	4	2	164,077	0,722149	1,567	676	250	
8	3	6	3	213,625	0,602932	1,589	711	330	
7	5	6	3	227,13	0,769176	1,563	736	295	
7	5	6	3	227,13	0,769176	1,467	736	285	
8	7	6	3	241,2	0,739107	1,504	706	270	
7	5	7	3	243,135	0,734017	1,708	740	300	
6	3	7	3	228,1	0,633154	1,763	736	315	
6	6	7	4	240	0,612385	1,717	800	330	
10	6	2	4	218	0,542754	1,5	488	100	
12	5	12	7	438	0,693542	1,583	675	325	
14	6	12	7	464,1837	0,776746	1,75	706	390	
5	8	12	4	315,6746	0,940316	1,77	768	590	
5	8	12	4	315,6746	0,940316	1,77	768	560	
6	8	18	6	462,6954	1,003412	1,8	723	480	
6	8	18	6	462,6954	1,003412	1,8	723	560	
3	5	9	3	227,6477	0,598916	1,255	713	390	
3	5	9	3	227,6477	0,598916	1,255	713	590	
2	4	5	2	158,624	0,573652	1,489	737	640	
6	8	7	2	220,6752	0,799602	1,58	915	425	
6	12	8	2	240,6746	0,602932	1,255	851	320	
4	6	11	4	285,6542	0,575444	1,64	705	540	
1	3	2	1	61,6165	0,652651	1,137	1059	470	
5	6	13	8	386,1008	0,575444	1,762	697	520	
4	4	14	8	388,0892	1,057482	1,62	803	496	
4	4	14	8	388,0892	1,057482	1,55	803	496	
8	0	6	8	262,1036	0,625952	1,961	855	450	
2	0	2	2	264,63	0,625952	1,43	915	110	
2	4	6	2	152,693	0,402161	1,49	736	620	
6	7	11	3	237,132	0,2259478	1,7	934	375	

Рис. 23

Далее для решения задачи запускаем мастер обработки  и выбираем метод обработки данных - нейронная сеть.

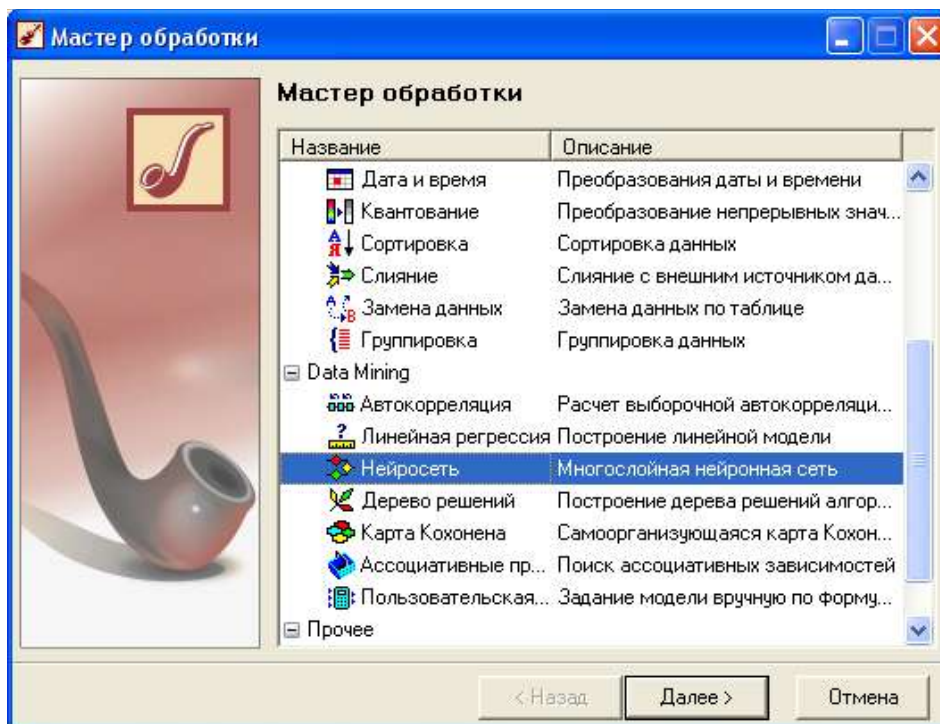


Рис. 24

Задаем назначения исходных столбцов данных. Выходной столбец в нашей задаче - "F9", все остальные - входные. Эти установки уже были нами проделаны при импорте, поэтому здесь достаточно просто нажать кнопку «Далее».

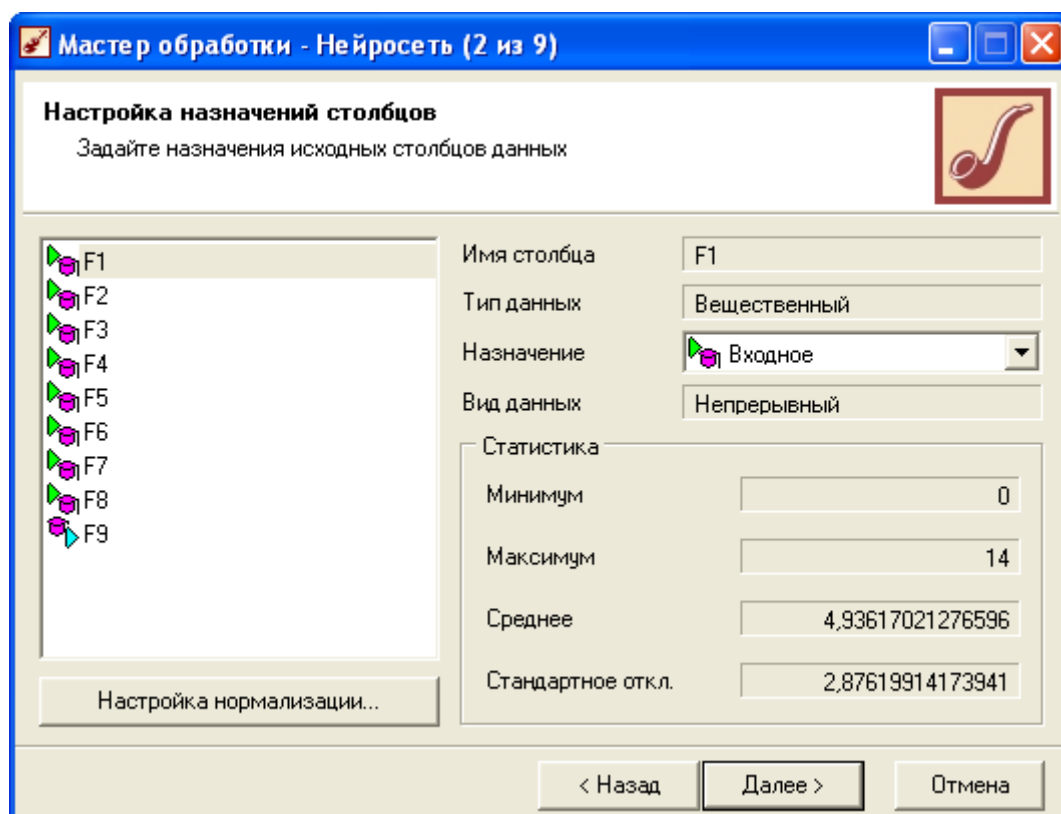


Рис. 25

На следующем шаге мастер предлагает разбить исходное множество данных на обучающее и тестовое. Способ разбиения исходного множества данных по умолчанию задан "Случайно".

Мастер обработки - Нейросеть (3 из 9)

Разбиение исходного набора данных на подмножества
Настройте разбиение исходного множества данных на обучающее, тестовое и валидационное множества

Способ разделения исходного множества данных: Случайно

Множество	Размер		Порядок сортировки
	В процентах	В строках	
<input checked="" type="checkbox"/> Обучающее	95,00	45	По возрастанию
<input checked="" type="checkbox"/> Тестовое	5,00	2	По возрастанию
<input type="checkbox"/> Валидационное	0,00	0	По возрастанию
ИТОГО:	100,00	47	

Количество строк (всего) 47

< Назад Далее > Отмена

Рис. 26

На следующем шаге необходимо определить структуру нейронной сети, т.е. указать количество нейронов в входном слое - 8 (количество входных переменных), количество скрытых слоев -1, количество нейронов в скрытом слое - 2, в выходном слое - 1 (количество выходных переменных). Активационная функция - Линейная, и ее крутизна равна единице. Этот шаг проиллюстрирован на (Рис. 27).

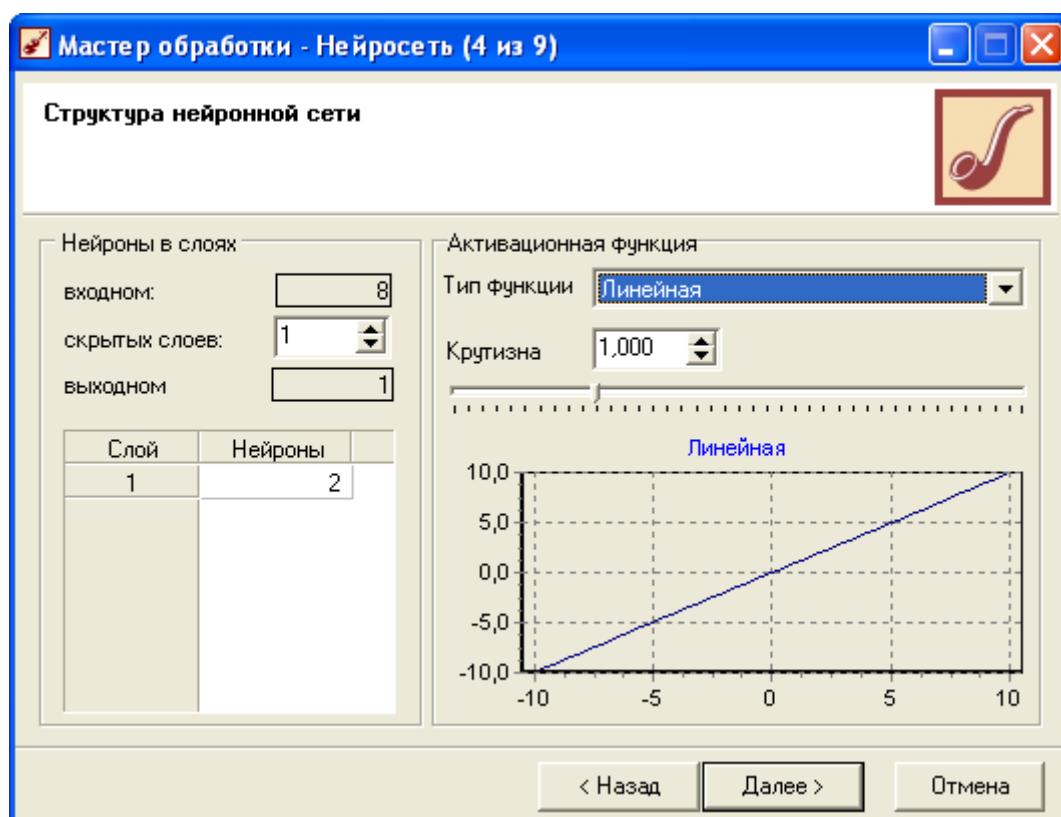


Рис. 27

Далее выбираем алгоритм и параметры обучения нейронной сети. Этот шаг имеет название "Настройка процесса обучения нейронной сети".

На следующем шаге настраиваем условия остановки обучения. Будем считать пример распознанным, если ошибка меньше 0,005, и укажем условие остановки обучения при достижении эпохи 300.

На следующем шаге запускаем процесс обучения и наблюдаем за изменением величины ошибки и процентом распознанных примеров в обучающем и тестовом множествах.

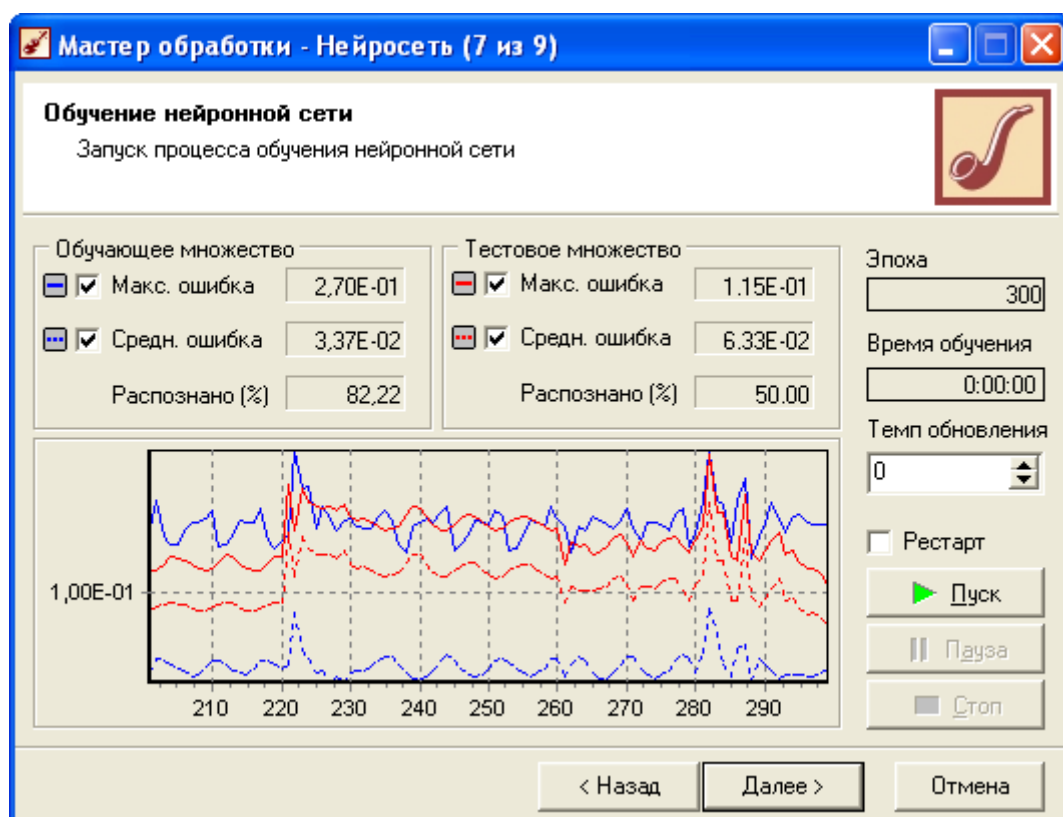


Рис. 28

После окончания процесса обучения для интерпретации полученных результатов мы имеем возможность выбрать визуализаторы из списка предложенных. Выберем такие: граф нейросети, анализ "что, если", диаграмма рассеивания, таблица и диаграмма.

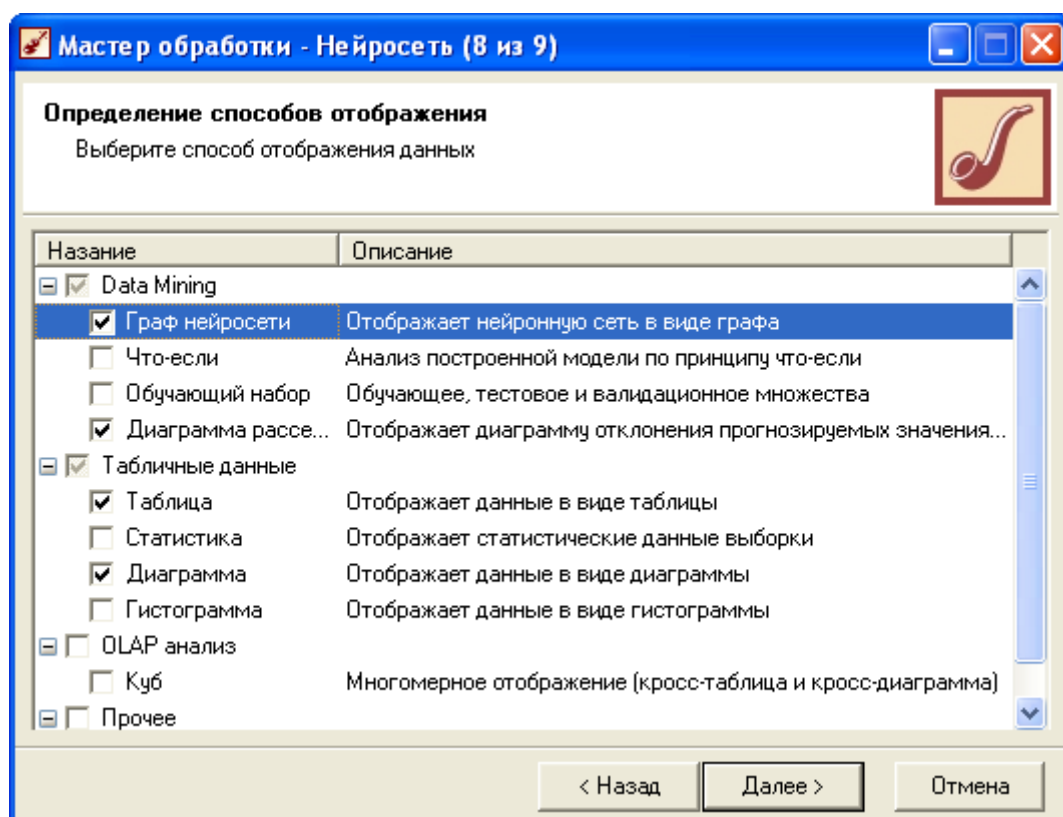


Рис. 29

На Рис. 30 отображено изображение построенной сети, а на Рис. 3.1.2.15 – Визуализатор «что-если».

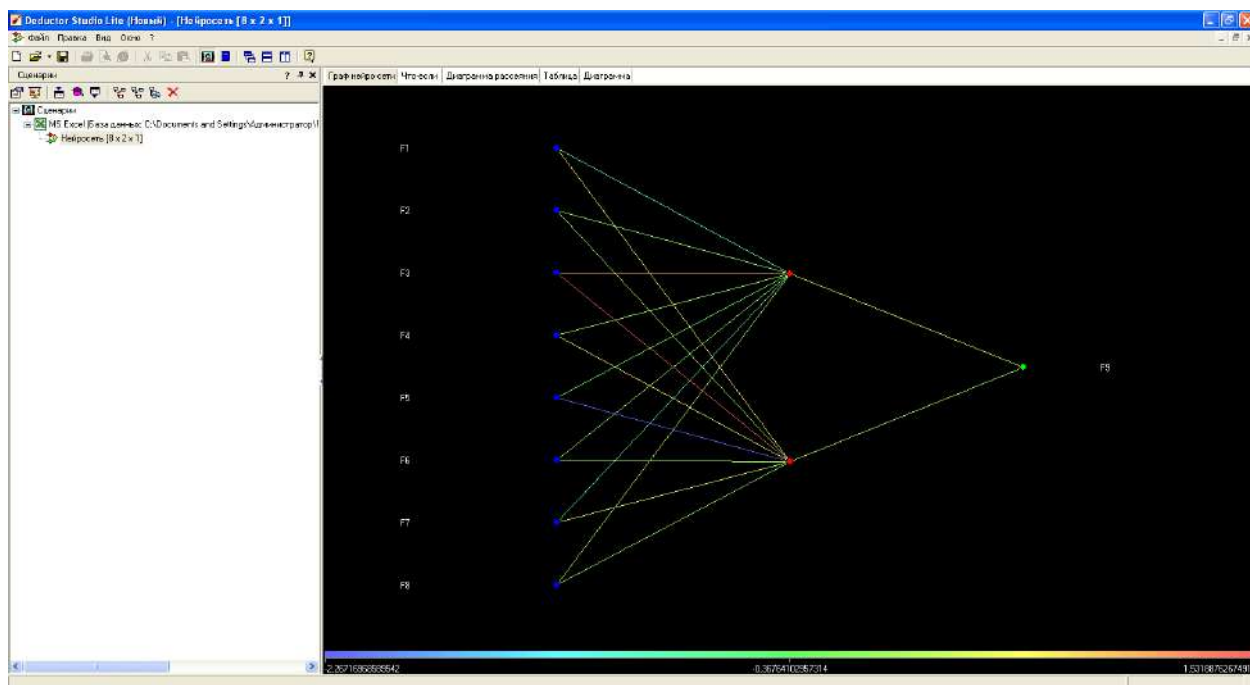


Рис. 30

Визуализатор "что-если" позволяет использовать готовую нейронную сеть для прогнозов. Построенная модель рассчитает значение поля "F9", т.е. решит поставленную задачу.













Граф нейро-сети		Что-если	Диаграмма рассеяния	Таблица	Диаграмма
 		1 из 47		 	  
Поле		Значение			
  Входные					
9.0 F1		4			
9.0 F2		8			
9.0 F3		8			
9.0 F4		8			
9.0 F5		296,1			
9.0 F6		0,8849946			
9.0 F7		1,905			
9.0 F8		782			
  Выходные					
9.0 F9		417,53086893019			

Рис. 31

Диаграмма рассеивания показывает нам, какие точки вышли за границы доверительного интервала (рис. 32).

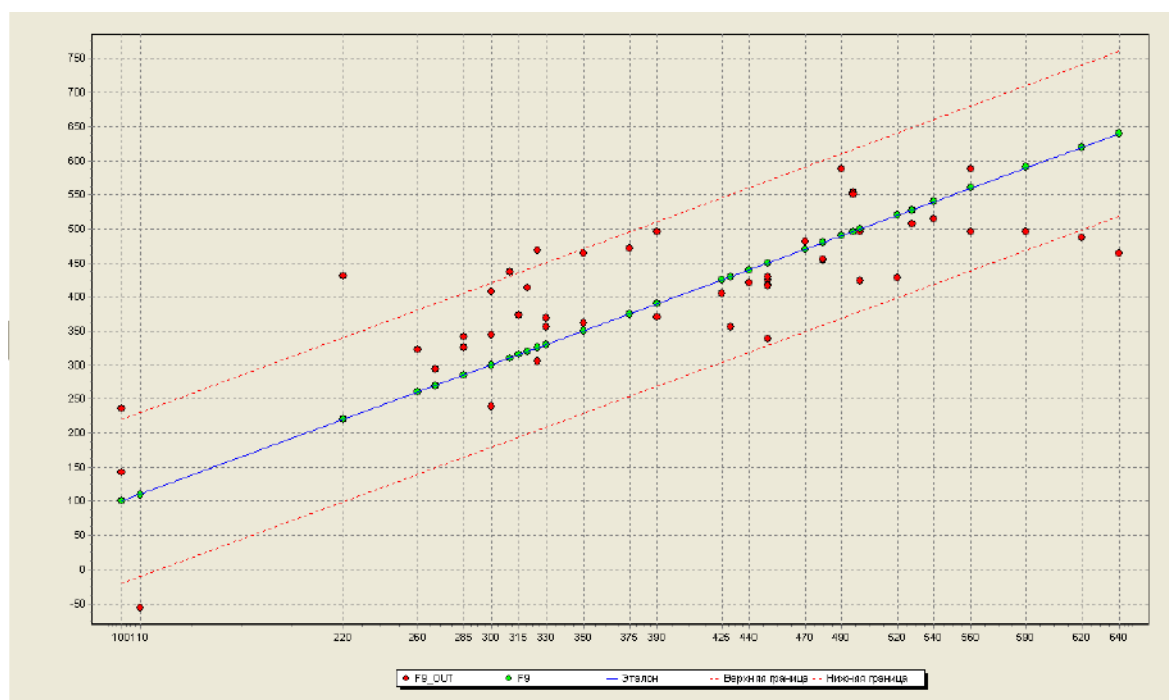


Рис. 32

Результаты прогнозирования параметра представлены в приложении 12 – 20. Для подтверждения результатов было проведено 9 опытов, так как в программе по умолчанию заложено количество обучающего множества и тестового.

4.1.3. Пакет STATISTICANeuralNetworks

В пакете STATISTICA задача непрерывного прогнозирования представляется как задача регрессии. В контексте этой задачи нейронная сеть рассматривается как нелинейная функция, сложность которой контролируется "полупараметрически" - число элементов в сети влияет на сложность решения, но, конечно, аналитик не может видеть явный вид регрессионной функции.

Требуется построить нейронную сеть, прогнозирующую заданный параметр. Данные хранятся в файле statistica.xls.

	1 Количество С	2 Количество Н	3 Количество О	4 Количество N	5 Молярная масса г/моль	6 Кислородный баланс	7 Плотность, г/смЗ	8 Объем продуктов взрыва, л/кг	9 Фугасность, мл
Октоген(4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,87	782	450
Октоген(4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,905	782	450
Октоген(4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,82	782	450
Октоген(4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,76	782	450
Октоген(4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,919	782	450
Тетрил	7	5	8	5	287,15	0,8198756	1,73	765	350
Гексоген	3	6	6	6	222,12	0,8849946	1,86	908	500
ЭДНА	2	6	4	4	151,04	0,8528514	1,75	908	440
Нитрогул	1	4	2	4	104,07	0,825953	1,932	1077	300
Нитрокар	1	3	3	3	105,05282	0,9400161	1,73	853	310
ДПНА	4	8	8	4	240,13	0,8849946	1,675	924	480
ДНВ	6	4	4	2	164,077	0,722148	1,567	670	260
ТНВ	6	3	6	3	213,0825	0,802932	1,688	711	330
тротил	7	5	6	3	227,13	0,765178	1,663	730	285
тротил(п	7	5	6	3	227,13	0,765178	1,467	730	285
2,4,6- Трл	8	7	6	3	241,2	0,735107	1,604	700	270
2,4,6-Трл	7	5	7	3	243,1305	0,794017	1,708	740	300
ТНФ	6	3	7	3	229,1	0,833194	1,763	730	315
Пикрат а	6	6	7	4	240	0,812389	1,717	680	330
Динитро	10	6	2	4	218	0,542794	1,5	488	100
гексил	12	5	12	7	439	0,806542	1,653	675	325
Гексанит	14	6	12	7	464,1937	0,776746	1,75	700	300
ТЭН(пес	5	8	12	4	316,0746	0,940016	1,77	768	500
ТЭН(вод	5	8	12	4	316,0746	0,940016	1,77	768	560
нитромаг	6	8	18	6	452,0954	1,003412	1,8	723	490
нитромаг	6	8	18	6	452,0954	1,003412	1,8	723	560
нитрогг	3	5	9	3	227,0477	0,988918	1,735	713	390
нитрогг	3	5	9	3	227,0477	0,988918	1,735	713	590
Динитро	7	4	5	7	136,0324	0,933687	1,489	737	640

Рис. 33

Далее запускаем пакет анализа при помощи нейронных сетей.

Переходя в режим выбора выходных (зависимых) и входных (независимых) переменных мы выбираем в качестве зависимой переменной – фугасность, а в

качестве независимых количество С, количество Н, количество О, количество N, молярная масса, кислородный баланс, плотность, объем продуктов взрыва (рис.34) .

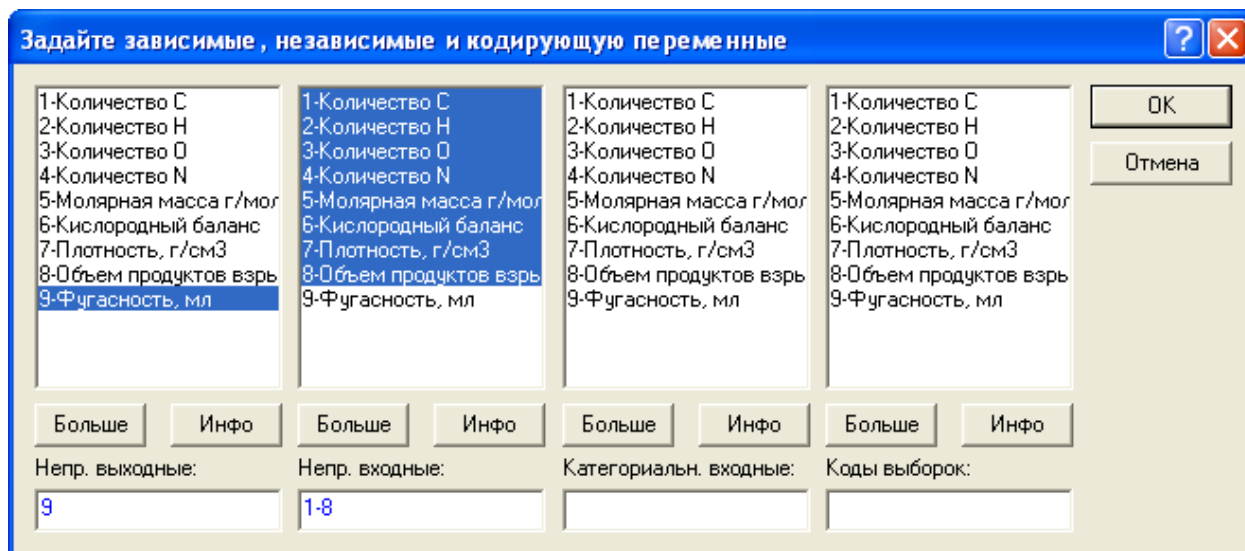


Рис. 34

Затем мы перемещаемся в окно формирования нейросети и выбираем тип сети многослойный персептрон, так же указываем необходимое количество слоев, количество нейронов в каждом и вид функции активации (Рис.35, Рис.36).

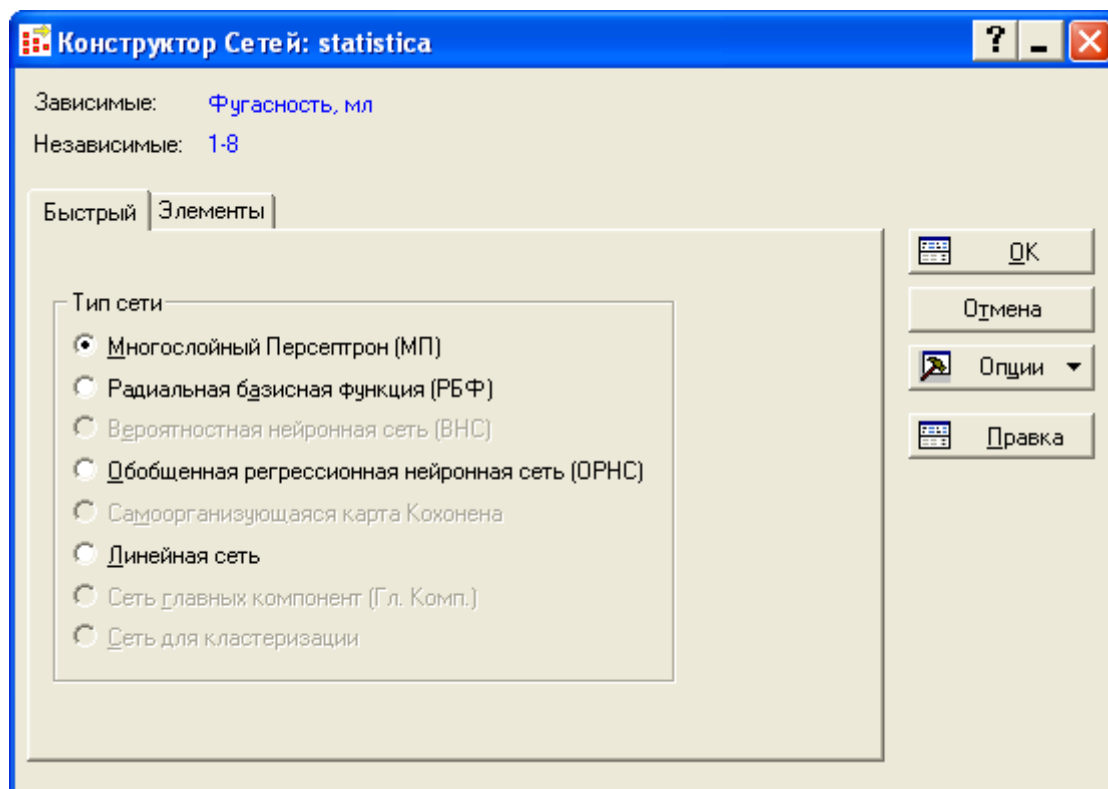


Рис. 35.

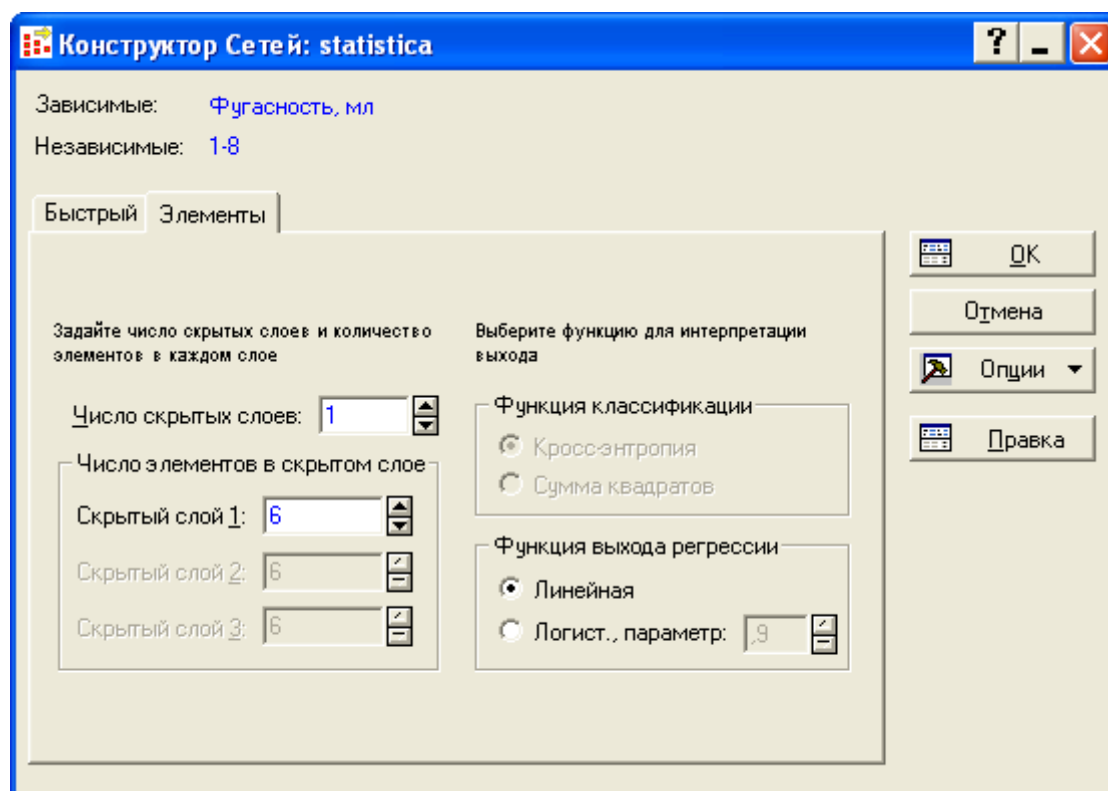


Рис.36

После этого мы задаем количество обучающих, контрольных и тестовых примеров. Если задать число тестовых и контрольных примеров равными нулю, то сеть будет обучаться по всем примерам.

Для того чтобы вывести график обучения необходимо во вкладке «Интерактивный», отметить, что бы процесс обучения отражался в виде графика (рис.37).

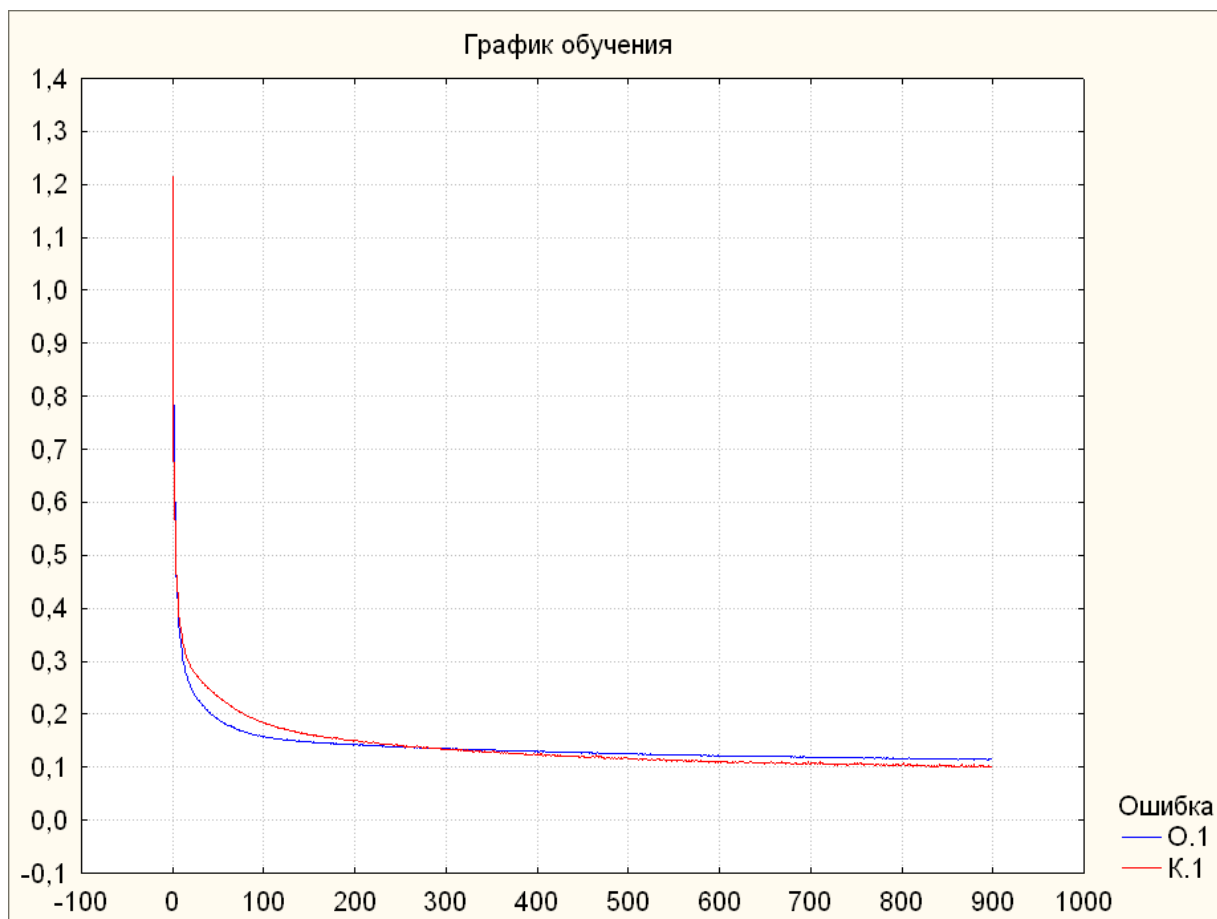


Рис.37

Вывод таблицы с результатом предсказания:

Таблица 2.

ВВ	Исходные данные:	Предсказанные данные:
Октоген(α)	450,0000	472,2433
Октоген(β)	450,0000	469,1237
Октоген(γ)	450,0000	476,7774
Октоген(δ)	450,0000	482,3397
Октоген(ϵ)	450,0000	467,8882

Тетрил	350,0000	351,1461
Гексоген	500,0000	438,0098
ЭДНА	440,0000	395,8935
Нитрогуанидин	300,0000	431,1665
Нитрокарбамид	310,0000	467,0682
ДИНА	480,0000	430,4382
ДНБ	260,0000	311,7469
ТНБ	330,0000	333,0875
тротил	285,0000	282,6483
тротил(при 82°С)	285,0000	308,3634
2,4,6- Тринитроксолол	270,0000	240,0461
2,4,6-Тринитроанизол	300,0000	302,2311
ТНФ	315,0000	347,3280
Пикрат аммония	330,0000	330,6546
Динитронафталин	100,0000	137,5866
гексил	325,0000	375,6038
Гексанитростильбен	300,0000	330,1496
ТЭН(песок)	500,0000	486,5270
ТЭН(вода)	560,0000	486,5270
нитроманнит	490,0000	481,7105
нитроманнит(под водой)	560,0000	481,7105
нитроглицерин (в песке)	390,0000	484,7067
нитроглицерин(в воде)	590,0000	484,7067
Динитроэтиленгликоль	640,0000	450,1810
Динитродиэтиленгликоль	425,0000	383,2144
Триэтиленгликольдинитрат	320,0000	372,3201
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0000	518,7535
Нитрометан	470,0000	529,9610
дитринитроэтилкарбамид	528,0000	508,1827

дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0000	558,8883
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0000	554,4428
Бензотрифуроксан	450,0000	445,9953
Фульминат ртути(II)	110,0000	108,3246
Нитроглицерин	620,0000	410,5625
Пироксилин	375,0000	448,2577
Тетранитроанилин	430,0000	335,4701
Динитронафталин	100,0000	179,5863
тетрил	390,0000	354,9217
гексоген	520,0000	393,7785
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0000	392,1945
Нитрат метиламина	325,0000	366,9808
Триаминогуанидиннитрат	350,0000	374,4165
Перхлорат аммония	220,0000	290,4790

Так же мы можем вывести топологию сети:

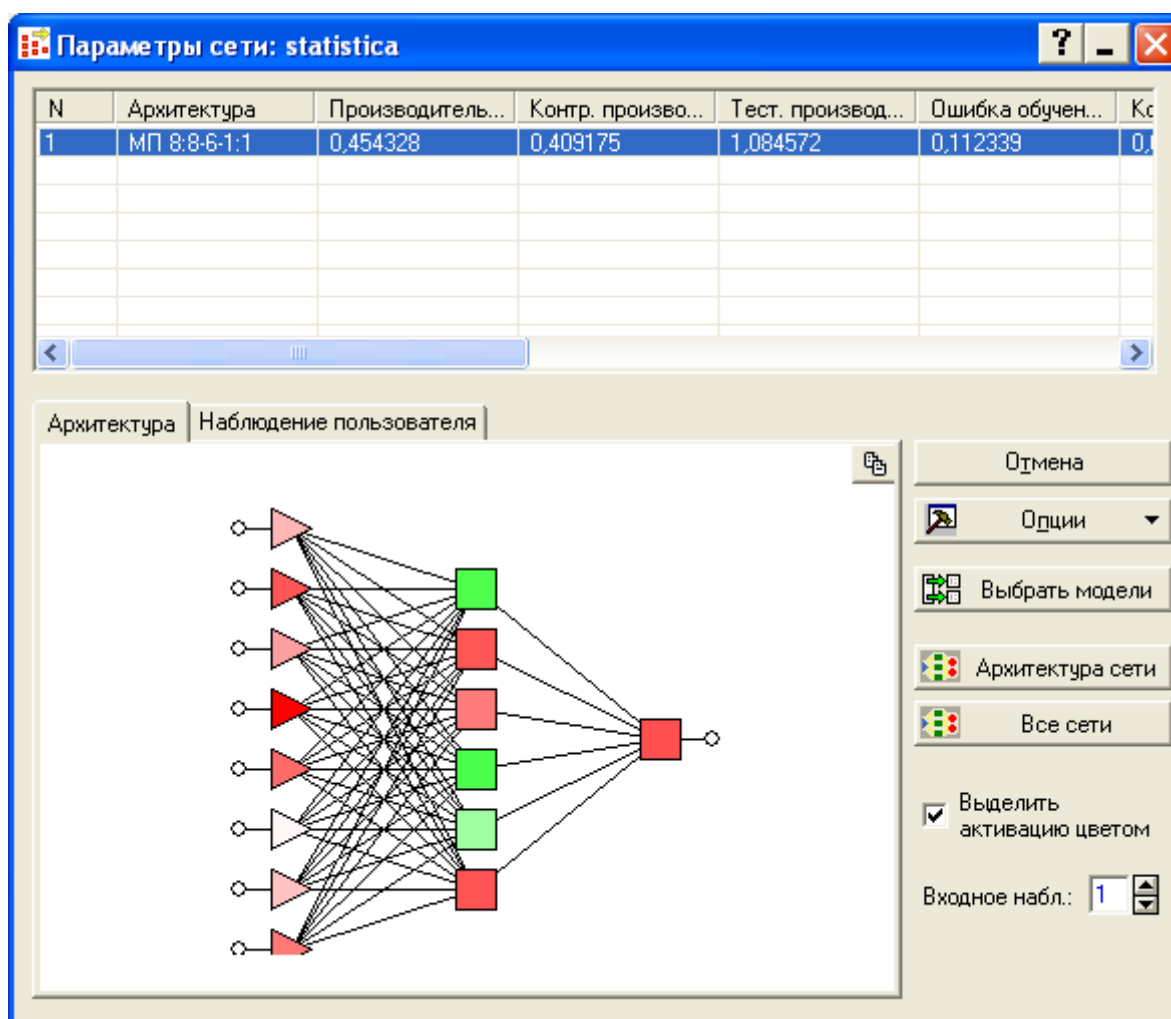


Рис.38

График зависимости предсказанной фугасности от исходной:

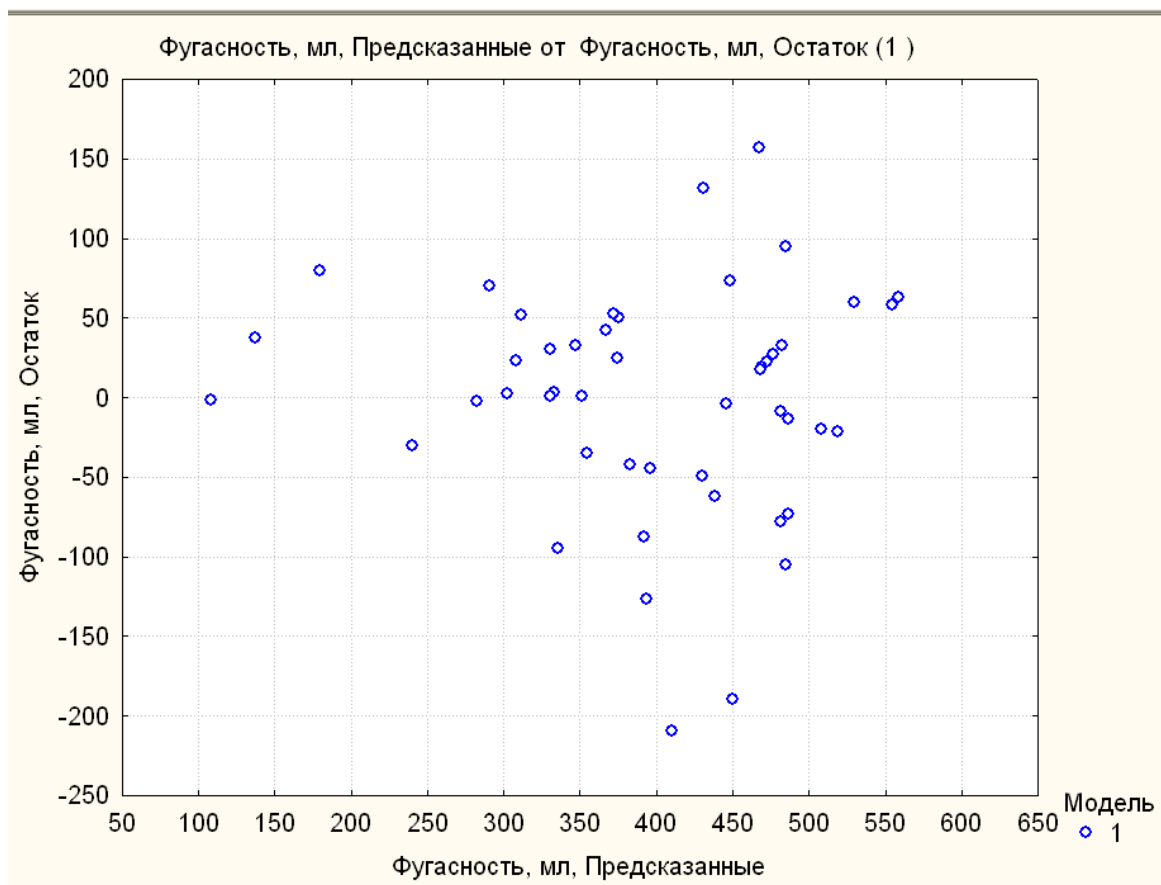


Рис.39

Результаты прогнозирования параметра фугасности и его отличие от исходных значений представлены в приложении 22 – 30. Так же как в предыдущем пункте, была выполнена «скользящая» проверка, для подтверждения результатов прогнозирования.

4.1.4. Множественная регрессия.

Для начала мы выбираем параметры: выходные (зависимые) и входные (независимые) переменные. В качестве зависимой переменной мы выбираем фугасность, а в качестве независимых количество С, количество Н, количество О, количество N, молярная масса, кислородный баланс, плотность, объем продуктов взрыва.

Статистика вывела следующие результаты:

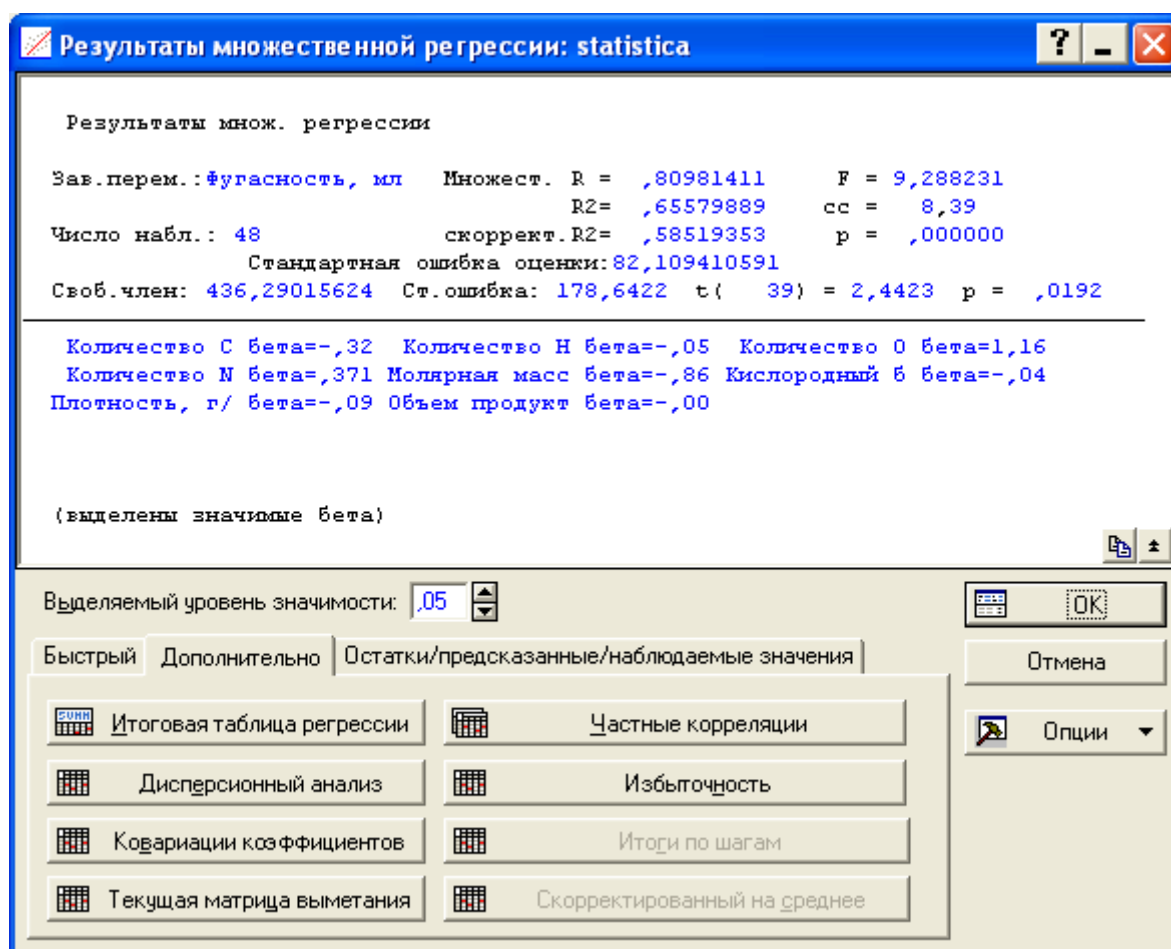


Рис. 40

Вывод итоговой таблицы регрессии:

Итоги регрессии для зависимой переменной: Фугасность, мл (statistica)						
R= ,80981411 R²= ,65579889 Скорректир. R²= ,58519353						
F(8,39)=9,2882 p<,000000 Станд. ошибка оценки: 82,109						
N=48	БЕТА	Стд. Ош. БЕТА	B	Стд. Ош. B	t(39)	p-уров.
Св.член			436,2902	178,6422	2,442257	0,019231
Количество С	-0,321689	0,424469	-14,2432	18,7940	-0,757861	0,453089
Количество Н	-0,054105	0,131581	-3,1323	7,6177	-0,411192	0,683183
Количество О	1,162129	0,673922	38,3091	22,2156	1,724425	0,092550
Количество N	0,371460	0,286332	21,8062	16,8089	1,297304	0,202149
Молярная масса г/моль	-0,855805	1,093220	-1,1423	1,4592	-0,782830	0,438455
Кислородный баланс	-0,041115	0,111641	-1,5375	4,1748	-0,368279	0,714657
Плотность, г/см³	-0,086115	0,323638	-25,6740	96,4884	-0,266083	0,791577
Объем продуктов взрыва, л/кг	-0,001349	0,150771	-0,0011	0,1263	-0,008945	0,992908

Рис. 41

Дисперсионный анализ:

Эффект	Дисперсионный анализ; ЗП: Фугасность, мП (statistica)						
	Сумма квадрат	сс	Средн. квадрат	F	p-уров.		
Регресс.	500966,7	8	62620,84	9,288231	0,000000		
Остатки	262936,3	39	6741,96				
Итого	763903,0						

Рис. 42

Ковариации коэффициентов:

Переменная	Ковариации B-коэффициентов регрессии ; ЗП: Фугасность, мП (statistica)							
	Количество С	Количество Н	Количество О	Количество N	Молярная масса г/моль	Кислородный баланс	Плотность, г/см3	Объем продукто: взрыва, л/кг
Количество С	353,214	58,8556	388,677	268,230	-26,138	26,15577	1684,022	-0,40247
Количество Н	58,856	58,0296	68,850	49,557	-5,165	5,07906	366,121	-0,37711
Количество О	388,677	68,8500	493,532	321,826	-31,877	32,89957	1933,883	-0,90985
Количество N	268,230	49,5574	321,826	282,538	-22,305	28,51950	1271,507	-0,84759
Молярная масса г/моль	-26,138	-5,1646	-31,877	-22,305	2,129	-2,13209	-129,300	0,06511
Кислородный баланс	26,156	5,0791	32,900	28,519	-2,132	17,42858	93,288	-0,17065
Плотность, г/см3	1684,022	366,1209	1933,883	1271,507	-129,300	93,28841	9310,015	-1,58434
Объем продуктов взрыва, л/кг	-0,402	-0,3771	-0,910	-0,848	0,065	-0,17065	-1,584	0,01595

Рис. 43

Таблица предсказанных значений и остатков:

Набл. No.	Предсказанные значения и остатки (statistica)									
	Зависимая перемен.: Фугасность, мп									
	Наблюд. Значение	Предск. Значение	Остатки	Станд. предск.	Станд. Остатки	Стд. Ош. предск.	Махалан. расст.	Удален. остатки	Кука расст.	
Октог	450,0000	446,6964	3,304	0,47147	0,04023	30,14246	5,35471	3,818	0,00003	
Октог	450,0000	445,7979	4,202	0,46277	0,05118	30,43893	5,47991	4,872	0,00005	
Октог	450,0000	447,9801	2,020	0,48391	0,02460	30,37231	5,45167	2,340	0,00001	
Октог	450,0000	449,5206	0,479	0,49883	0,00584	31,63250	5,99639	0,563	0,00000	
Октог	450,0000	445,4384	4,562	0,45929	0,05555	30,66104	5,57452	5,301	0,00006	
Тетри	350,0000	361,8822	-11,882	-0,35004	-0,14471	18,20393	1,33099	-12,496	0,00013	
Гексо	500,0000	431,5943	68,406	0,32519	0,83310	23,76414	2,95775	74,660	0,00769	
ЭДНА	440,0000	409,6740	30,326	0,11287	0,36934	24,33072	3,14771	33,245	0,00160	
Нитро	300,0000	402,3945	-102,394	0,04236	-1,24705	42,55135	11,64314	-139,990	0,08674	
Нитро	310,0000	426,1709	-116,171	0,27266	-1,41483	29,28656	5,00011	-133,104	0,03715	
ДИНА	480,0000	428,2512	51,749	0,29281	0,63024	23,80474	2,97121	56,497	0,00442	
ДНБ	260,0000	305,6294	-45,629	-0,89490	-0,55571	28,19851	4,56408	-51,731	0,00520	
ТНБ	330,0000	347,9309	-17,931	-0,48517	-0,21838	23,89458	3,00109	-19,590	0,00054	
троти	285,0000	312,0552	-27,055	-0,83266	-0,32950	21,71951	2,30944	-29,091	0,00098	
троти	285,0000	317,0873	-32,087	-0,78392	-0,39079	21,97493	2,38724	-34,563	0,00141	
2,4,6	270,0000	277,0703	-7,070	-1,17153	-0,08611	26,34402	3,85894	-7,882	0,00011	
2,4,6	300,0000	330,8763	-30,876	-0,65036	-0,37604	22,94628	2,69143	-33,492	0,00144	
ТНФ	315,0000	365,9500	-50,950	-0,31064	-0,62051	26,37045	3,86866	-56,810	0,00549	
Пикра	330,0000	367,1777	-37,178	-0,29875	-0,45278	25,85635	3,68148	-41,270	0,00278	
Динит	100,0000	149,9921	-49,992	-2,40241	-0,60885	44,12818	12,59596	-70,296	0,02352	
гекси	325,0000	316,1581	8,842	-0,79292	0,10768	40,81239	10,63254	11,743	0,00056	
Гекса	300,0000	253,2881	46,712	-1,40188	0,56890	47,11233	14,49407	69,638	0,02631	
ТЭН(п	500,0000	478,1467	21,853	0,77610	0,26615	26,34748	3,86022	24,362	0,00101	
ТЭН(в	560,0000	478,1467	81,853	0,77610	0,99688	26,34748	3,86022	91,249	0,01413	
нитро	490,0000	581,1793	-91,179	1,77407	-1,11046	36,89577	8,51081	-114,248	0,04343	
нитро	560,0000	581,1793	-21,179	1,77407	-0,25794	36,89577	8,51081	-26,538	0,00234	

Рис. 44

Нормальный вероятностный график остатков:

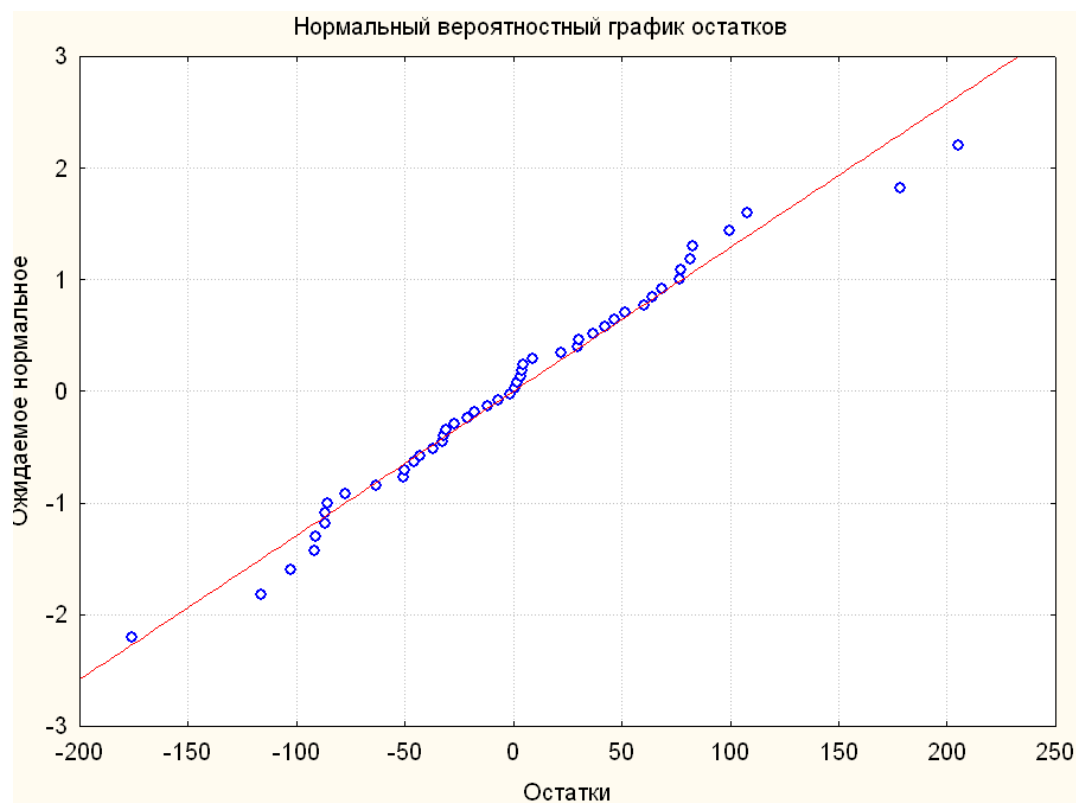


Рис. 45

График предсказанных и наблюдаемых значений:

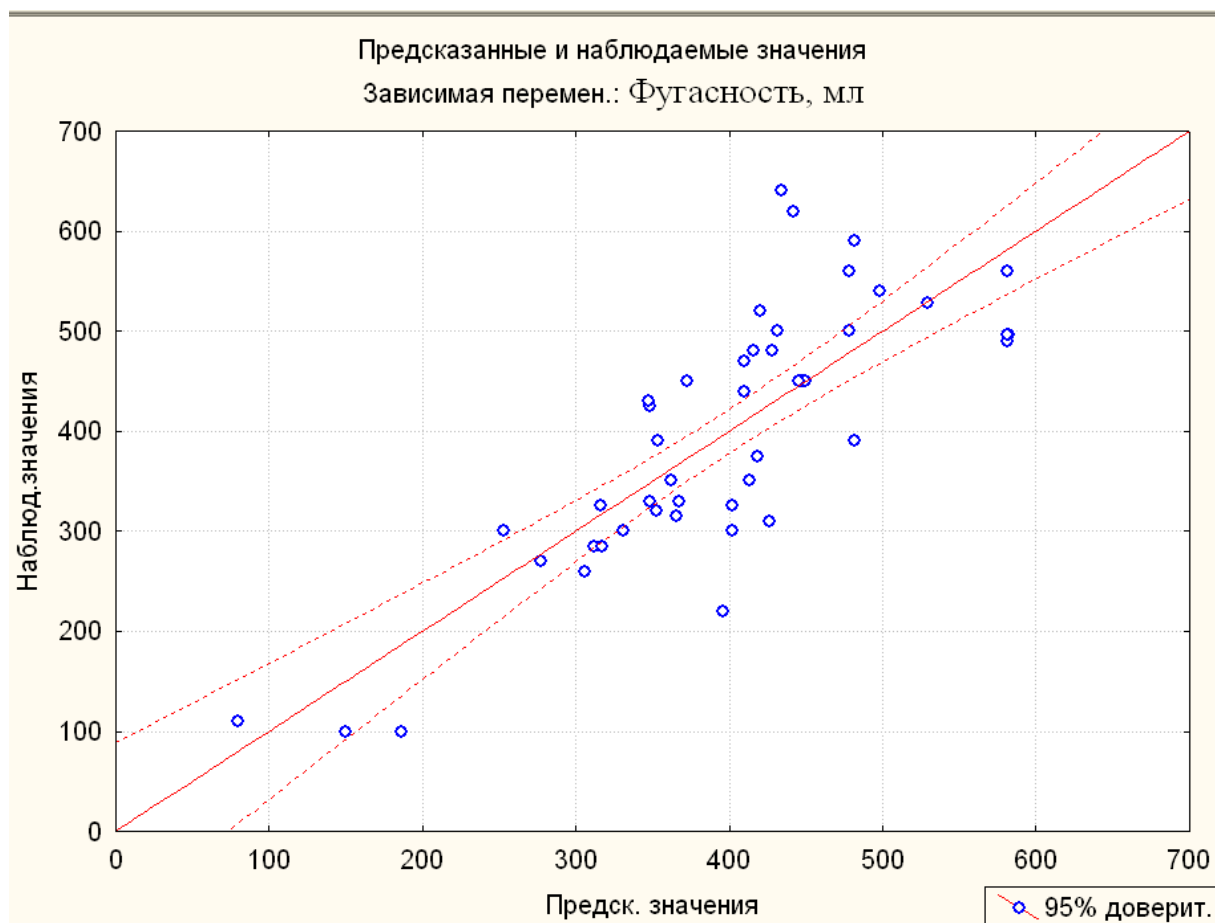


Рис. 46.

Результат множественной регрессии представлен в приложении 20.

4.2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

В данных таблицах приведены отличия выполнения прогнозирования параметра фугасности с помощью различных программных обеспечений. Для наглядности в таблице выведены исходные данные, прогнозируемая фугасность и отличие спрогнозированного значения фугасности.

Таблица 3

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие спрогнозированного значения фугасности, полученная в пакете ExcelNeuralPackage
Октоген(α)	450	450,3886031	0,388603118
Октоген(β)	450	449,9792522	0,020747786
Октоген(γ)	450	450,471328	0,471328017
Октоген(δ)	450	449,5706341	0,429365901
Тетрил	450	449,7469122	0,029870436
Гексоген	350	350,0298704	0,011769983
ЭДНА	500	500,01177	0,0335898
Нитрогуанидин	440	440,0335898	0,032391947
Нитрокарбамид	300	299,9676081	0,068244921
ДИНА	310	309,9317551	0,004593095
ДНБ	480	479,9954069	0,052247216
ТНБ	260	259,9477528	0,222586539
тротил	330	329,7774135	0,545900731
тротил(при 82°C)	285	284,4540993	0,104698607
2,4,6-Тринитроксолол	285	285,1046986	0,088090419
2,4,6-Тринитроанизол	270	269,9119096	0,091548742
ТНФ	300	300,0915487	0,018241151
Пикрат аммония	315	315,0182412	0,375152338
Динитронафталин	330	330,3751523	0,033547532
гексил	100	100,0335475	0,024398965
Гексанитростильбен	325	324,975601	0,037276279
ТЭН(песок)	300	300,0372763	0,128710029
ТЭН(вода)	500	499,87129	0,024622764
нитроманнит	560	559,9753772	0,052557143
нитроманнит(под	490	489,9474429	0,036709737

водой)			
нитроглицерин (в песке)	560	559,9632903	0,050948387
нитроглицерин(в воде)	390	389,9490516	0,016663143
Динитроэтиленгликоль	590	589,9833369	0,057208915
Динитродиэтиленгликоль	640	639,9427911	0,006801969
Триэтиленгликольдинитрат	425	425,006802	0,008509742
Нитроизобутилглицеринтринитрат	320	319,9914903	0,012871724
Нитрометан	540	540,0128717	0,030847245
дитринитроэтилкарбамид	470	469,9691528	0,036996779
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	528	528,0369968	0,544398217
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	495,4556018	0,488234052
Бензотрифуроксан	496	496,4882341	0,023357521
Фульминат ртути(II)	450	449,9766425	0,000388933
Нитроглицоль	110	110,0003889	0,011260003
Пироксилин	620	620,01126	0,002780506
Тетранитроанилин	375	375,0027805	0,021944861
Динитронафталин	430	429,9780551	0,111449573
тетрил	100	100,1114496	0,050262702
гексоген	390	389,9497373	0,005717979
Диэтанолнитраминдинитрат	520	520,005718	0,05405458
Нитрат метиламина	480	480,0540546	0,055433779
Триаминогуанидиннитрат	325	324,9445662	0,026815511
Перхлорат аммония	350	349,9731845	0,041555755

В таблице 3 представлены результаты прогнозирования фугасности в пакете ExcelNeuralPackage.

Таблица 4

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие спрогнозированн ого значения фугасности, полученная в пакете STATISTICA NeuralNetworks
Октоген(α)	450	365,9599	84,0401
Октоген(β)	450	370,7181	79,2819
Октоген(γ)	450	360,1776	89,8224
Октоген(δ)	450	354,636	95,364
Тетрил	450	408,7459	58,7459
Гексоген	350	382,364	117,636
ЭДНА	500	363,7812	76,2188
Нитрогуанидин	440	428,5192	128,5192
Нитрокарбамид	300	433,0196	123,0196
ДИНА	310	348,6553	131,3447
ДНБ	480	347,4451	87,4451
ТНБ	260	441,9854	111,9854
тротил	330	375,2133	90,2133
тротил(при 82°C)	285	352,8395	67,8395
2,4,6- Тринитроксолол	285	332,0408	62,0408
2,4,6- Тринитроанизол	270	393,795	93,795
ТНФ	300	463,9869	148,9869
Пикрат аммония	315	383,4052	53,4052
Динитронафталин	330	295,6851	195,6851
гексил	100	422,522	97,522
Гексанитростильбен	325	412,8489	112,8489
ТЭН(песок)	300	382,7299	117,2701
ТЭН(вода)	500	382,7299	177,2701
нитроманнит	560	434,5492	55,4508
нитроманнит(под водой)	490	434,5492	125,4508
нитроглицерин (в песке)	560	438,1756	48,1756
нитроглицерин(в воде)	390	438,1756	151,8244
Динитроэтиленглико ль	590	375,1409	264,8591

Динитродиэтиленгликоль	640	348,8857	76,1143
Триэтиленгликольдинитрат	425	349,7288	29,7288
Нитроизобутилглицеринтринитрат	320	406,4516	133,5484
Нитрометан	540	650,3014	180,3014
дитринитроэтилкарбамид	470	441,7812	86,2188
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	528	506,1528	10,1528
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	509,3821	13,3821
Бензотрифуроксан	496	526,6721	76,6721
Фульминат ртути(II)	450	116,7266	6,7266
Нитрогликоль	110	314,6046	305,3954
Пироксилин	620	386,7376	11,7376
Тетранитроанилин	375	456,4582	26,4582
Динитронафталин	430	344,2633	244,2633
тетрил	100	428,2454	38,2454
гексоген	390	447,1879	72,8121
Диэтанолнитраминдинитрат	520	338,098	141,902
Нитрат метиламина	480	549,9405	224,9405
Триаминогуанидининитрат	325	484,3605	134,3605
Перхлорат аммония	350	164,8291	55,1709

В таблице 4 представлены результаты прогнозирования фугасности в пакете STATISTICA NeuralNetworks.

Таблица 5

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие спрогнозированного значения фугасности, полученная в пакете Deductor
Октоген(α)	450	417,5308689302	32,46913
Октоген(β)	450	424,5828978292	25,4171
Октоген(γ)	450	429,5608005814	20,4392
Октоген(δ)	450	416,369358288	33,63064
Тетрил	450	361,723910472	11,72391
Гексоген	350	423,9162821979	76,08372
ЭДНА	500	420,5059286931	19,49407
Нитрогуанидин	440	407,8931680793	107,8932
Нитрокарбамид	300	436,8914135777	126,8914
ДИНА	310	453,8296224108	26,17038
ДНБ	480	323,0226489945	63,02265
ТНБ	260	356,2005105736	26,20051
тротил	330	325,3637213503	40,36372
тротил(при 82°С)	285	341,6248703409	56,62487
2,4,6- Тринитроксолол	285	294,1270281882	24,12703
2,4,6-Тринитроанизол	270	344,1049713987	44,10497
ТНФ	300	373,022844361	58,02284
Пикрат аммония	315	368,8156430439	38,81564
Динитронафталин	330	142,597041725	42,59704
гексил	100	305,3574315733	19,64257
Гексанитростильбен	325	239,5927698208	60,40723
ТЭН(песок)	300	495,0427097688	4,95729
ТЭН(вода)	500	495,0427097688	64,95729
нитроманнит	560	588,4657451345	98,46575
нитроманнит(под водой)	490	588,4657451345	28,46575
нитроглицерин (в песке)	560	496,1043881617	106,1044
нитроглицерин(в воде)	390	496,1043881617	93,89561
Динитроэтиленгликоль	590	463,8880654079	176,1119
Динитродиэтиленгликоль	640	404,0670617612	20,93294
Триэтиленгликольдинитрат	425	413,1150840148	93,11508
Нитроизобутилглицеринтри нитрат	320	514,0088817001	25,99112
Нитрометан	540	481,7346157492	11,73462
дитринитроэтилкарбамид	470	507,7812230444	20,21878
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	528	553,4912515691	57,49125

дитринитроэтилнитрамин(в ещество "Б")(β)	496	550,1726497343	54,17265
Бензотрифуроксан	496	337,9215374955	112,0785
Фульминат ртути(II)	450	-56,3999133208	166,3999
Нитрогликоль	110	486,4275426939	133,5725
Пироксилин	620	471,3762981094	96,3763
Тетранитроанилин	375	355,0652997955	74,9347
Динитронафталин	430	236,1978806517	136,1979
тетрил	100	370,6751019039	19,3249
гексоген	390	427,9581782651	92,04182
Диэтанолнитраминдинитрат	520	454,5529166432	25,44708
Нитрат метиламина	480	467,4961330992	142,4961
Триаминогуанидиннитрат	325	463,676761308	113,6768
Перхлорат аммония	350	430,9588332222	210,9588

В таблице 5 представлены результаты прогнозирования фугасности в пакете Deductor.

Таблица 6

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие прогнозируемого значения фугасности, полученная при расчетном множественной регрессией
Октоген(α)	450	446,6964	3,3036
Октоген(β)	450	445,7979	4,2021
Октоген(γ)	450	447,9801	2,0199
Октоген(δ)	450	449,5206	0,4794
Тетрил	350	361,8822	11,8822
Гексоген	500	431,5943	68,4057
ЭДНА	440	409,674	30,326
Нитрогуанидин	300	402,3945	102,3945
Нитрокарбамид	310	426,1709	116,1709
ДИНА	480	428,2512	51,7488
ДНБ	260	305,6294	45,6294
ТНБ	330	347,9309	17,9309
тротил	285	312,0552	27,0552
тротил(при 82°С)	285	317,0873	32,0873
2,4,6- Тринитроксил	270	277,0703	7,0703
2,4,6-Тринитроанизол	300	330,8763	30,8763
ТНФ	315	365,95	50,95
Пикрат аммония	330	367,1777	37,1777

Динитронафталин	100	149,9921	49,9921
гексил	325	316,1581	8,8419
Гексанитростильбен	300	253,2881	46,7119
ТЭН(песок)	500	478,1467	21,8533
ТЭН(вода)	560	478,1467	81,8533
нитроманнит	490	581,1793	91,1793
нитроманнит(под водой)	560	581,1793	21,1793
нитроглицерин (в песке)	390	481,8762	91,8762
нитроглицерин(в воде)	590	481,8762	108,1238
Динитроэтиленгликоль	640	434,548	205,452
Динитродиэтиленгликоль	425	348,4617	76,5383
Триэтиленгликольдинитрат	320	352,624	32,624
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	497,9802	42,0198
Нитрометан	470	409,6773	60,3227
дитринитроэтилкарбамид	528	529,4278	1,4278
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	582,5543	86,5543
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	581,5273	85,5273
Бензотрифуроксан	450	372,7339	77,2661
Фульминат ртути(II)	110	80,1154	29,8846
Нитрогликоль	620	441,5019	178,4981
Пироксилин	375	418,1297	43,1297
Тетранитроанилин	430	347,2173	82,7827
Динитронафталин	100	186,5161	86,5161
тетрил	390	353,3653	36,6347
гексоген	520	420,3753	99,6247
Диэтанолнитраминдинитрат	480	416,0053	63,9947
Нитрат метиламина	325	402,2169	77,2169
Триаминогуанидиннитрат	350	413,1471	63,1471
Перхлорат аммония	220	395,8549	175,8549

В таблице 6 представлены результаты прогнозирования фугасности при расчете множественной регрессией.

Множественная регрессия - численный метод, а другие пакеты используют нейронные сети. В связи с этим, важно сравнить полученные результаты с этой точки зрения. Явно видно, что отличие спрогнозированного значения фугасности, полученного при расчете множественной регрессией, больше, по сравнению с пакетом ExcelNeuralPackage, но меньше, чем в других пакетах.

Нейронная сеть, построенная в ExcelNeuralPackage, прогнозирует значение фугасности точнее численного метода (множественной регрессии).

Следовательно, самые точные значения фугасности спрогнозированы в пакете ExcelNeuralPackage.

5. ДЕТОНАЦИЯ

Прогнозирование детонационных характеристик вещества по его химическому составу является одной из трех основных задач теории детонации.

Приближенное численное решение задач по определению параметров детонационных процессов невозможно без помощи ЭВМ. В настоящее время разработаны пакеты прикладных программ, позволяющие с достаточно высокой точностью определять параметры детонации. В то же время для повышения уровня корректности машинных расчетов требуется более точное знание характеристик процесса детонации, единственным путем получения которых остается эксперимент [1].

5.1. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИИ

В течение длительного времени единственным аналитическим подходом к изучению процесса взрыва являлся построение точных или приближенных аналитических решений уравнений, описывающих физические модели явлений. Данный подход требует существенное упрощение постановки задачи, что приводит к увеличению погрешности. Это делает необходимым проведения экспериментов для получения наиболее точных данных. К экспериментальным методам измерения параметров быстропротекающих процессов сопровождающих явление взрыва относятся: высокоскоростная оптическая регистрация, импульсная рентгенография, электрические методы измерений и т.д.

В настоящее время накоплен обширный объем экспериментальных данных, что позволило установить многие закономерности поведения материалов в

условиях взрыва. Но стоит отметить очевидные минусы экспериментальных исследований, во-первых они требуют немалых материальных затрат, во-вторых необходима достаточно длительная подготовка к проведению конкретного эксперимента, а в-третьих встает проблема проверки достоверности полученных данных.

Поэтому возникла необходимость в разработке методов математического моделирования. Появление вычислительной техники и бурный рост её производительности, сделало как никогда актуальным применение численных методов в различных областях науки и техники.

Формально методы математического моделирования можно разделить на две группы: расчетные и расчетно-экспериментальные.

К расчетным относятся методы, используемые для осуществления моделирования процессов, экспериментальное изучение которых либо существенно затруднено, либо невозможно, либо не имеет практического смысла, так как математическое моделирование обеспечивает получение результатов, достаточных для решения поставленной задачи.

К расчетно-экспериментальным относятся методы, применяемые для проведения физического эксперимента и математического моделирования параллельно и совместно [5].

В настоящее время известно большое количество экспресс методов расчета параметров детонации. Экспресс методы основываются на экспериментальных данных. Основным достоинством таких методов является то, что они относительно просты и не требуют большого количества входных параметров.

5.1.1. Моделирование параметров быстропротекающих процессов

Один из таких методов предложил И.Н. Айзенштадт[8]. Он предложил рассчитывать скорость детонации на основе следующих факторов: абсолютное значение величины кислородного баланса ($|K_B|$), удельная изохорическая

теплота образования ВВ(Q_v), исходное число грамм-атомов в исходном ВВ (фактор В). В свою очередь эти факторы вычисляются по следующим формулам:

$$B = \frac{1000(a + b + c + d)}{M_{\text{ВВ}}}, \text{ г} * \frac{\text{атом}}{\text{кг}}$$

$$|\text{КБ}| = \left| \frac{1600 \left(c - 2a - \frac{b}{2} \right)}{M_{\text{ВВ}}} \right|, \%$$

$$Q_v = - \frac{1000(\Delta H + 0.3(b + c + d))}{M_{\text{ВВ}}}, \frac{\text{ккал}}{\text{кг}}$$

где а, b, с, d это количество атомов С, Н, О, N вещества соответственно; $M_{\text{ВВ}}$ - молекулярная масса вещества; ΔH - стандартная энтальпия образования ВВ при $T=298.15\text{K}$

Схема расчета скорости детонации состоит из двух этапов. Целью первого этапа является вычисление величины идеальной скорости детонации при эталонно для всех ВВ начальной плотности $1,60\text{г/см}^3$ ($D_{1,60}$).

$$D_{1,60} = \sqrt{\alpha B - \beta |\text{КБ}| - \gamma Q_v}$$

где $\alpha = 0.73$, $\beta = 0.24$, $\gamma = 0.0073$

Второй этап заключается в переходе от $D_{1,60}$ к D_ρ . Для этого Айзештадт предложил ввести величину М, которая зависит от элементного состава вещества:

$$1) M = 4 \text{ если } c \geq a + \frac{b}{2}$$

$$2) M = 3,5 \text{ если } a + \frac{b}{2} < c < 2a + \frac{b}{2}$$

$$3) M = 3 \text{ если } c \leq a + \frac{b}{2}$$

Конечная формула расчета скорости детонации выглядит следующим образом:

$$D_\rho = D_{1,60} + M(\rho - 1,60)$$

Главными плюсами данного метода являются простота вычислений не большое количество входных параметров.

Камлетом и Джекобсом был разработан следующий экспресс метод расчета параметров детонации. В качестве основных факторов были введены: N - количество молей газообразных продуктов детонации на 1г ВВ, $M_{\text{ср}}$ - средняя молекулярная масса газообразных продуктов детонации. Q_{max} - максимальная удельная теплота взрыва.

$$N = \frac{b + 2c + 2d}{48a + 4b + 56c + 64d}, \text{ моль/г}$$

В зависимости от кислородного баланса Q_{max} и $M_{\text{ср}}$ рассчитываются по различным формулам:

в случае отрицательного КБ:

$$Q_{\text{max}} = \frac{28,9b + 47(d - \frac{b}{2} - \Delta H)}{M_{\text{ВВ}}} * 1000, \text{ ккал/моль}$$
$$M_{\text{ср}} = \frac{56c + 88d - 8b}{b + 2c + 2d}, \text{ г/моль}$$

в случае положительного КБ:

$$Q_{\text{max}} = \frac{28,9b + 94a - \Delta H}{M_{\text{ВВ}}} * 1000, \text{ ккал/моль}$$
$$M_{\text{ср}} = \frac{56c + 88d + 4b}{b + 2c + 2d}, \text{ г/моль}$$

Затем вычисляется величина φ , исходя из зависимости:

$$\varphi = N \sqrt{M_{\text{ср}} Q_{\text{max}}}$$

Зная значение величины φ можно определить скорость детонации по формуле:

$$D_p = A(1 + B\rho)\sqrt{\varphi}, \text{ км/с}$$

где A и B эмпирические коэффициенты, равные 1,01 и 1,30 соответственно.

Анализ шести экспресс методов, в число которых входят описанные выше методы, проведенный Трубниковым и Козыревым [9] показал, что наиболее эффективным для расчетов скорости детонации является метод, предложенный Айзенштадтом для всех ВВ. Методы ВуКсионга и Камлета имеют примерно одинаковые погрешности вычислений и наиболее применимы к ВВ с

отрицательным кислородным балансом. Метод Кривченко также дает относительно невысокую погрешность для этих же ВВ, но он осложнен тем, что для расчета необходимо знание величины скорости звука в ВВ. Метод Пепекина целесообразно применять для расчета скорости детонации со строго отрицательным КБ. Самым сложным методом расчета, дающим наибольшую погрешность вычислений для всех ВВ, является экспресс метод Ротстейна, что делает его наименее эффективным из всех вышеперечисленных методов.

Проведем моделирование скорости детонации ВВ методами Айзенштадта и Камлета. Имеется база из 40 ВВ (Приложение 31), известны следующие параметры каждого вещества:

- название ВВ
- Количество атомов С
- Количество атомов Н
- Количество атомов О
- Количество атомов N
- Молярная масса, г/моль
- Кислородный коэффициент
- Кислородный баланс
- Плотность, г/см³
- Скорость детонации (экспериментальное значение), м/с
- Энтальпия образования, ккал/кг

Вычислим доверительный интервал скорости детонации с помощью встроенной в Excel функции ДОВЕРИТ. Для этого сначала необходимо рассчитать стандартное отклонение, так же встроенной функцией.

Получаем следующие значения: стандартное отклонение: 1014,777; доверительный интервал: 314,4769. Моделирование скорости детонации производилось в программе на языке Python. В табл. 7 и 8 приведены результаты полученные с помощью методов Айзенштадта и Камлета соответственно для 10 первых веществ из выборки.

Таблица 7

Название	Экспериментальная скорость	По методу Айзенштадта	Отличие от экспериментальной	Ошибка
Октоген	9110	8893	217	2,381998
Тетрил	7500	7352	148	1,973333
Тетрил_2	7620	7562	58	0,761155
Гексоген	5900	5934	34	0,576271
Гексоген_3	8640	8544	96	1,111111
ЭДНА	7750	8324	574	7,406452
Нитрогуанидин	6775	7072	297	4,383764
Нитрокарбамид	4700	5462	762	16,21277
НК-55	9110	8181	929	10,19759
ДИНА	7730	7642	88	1,138422

Таблица 8

Название	Экспериментальная скорость	По методу Камлета	Отличие от экспериментальной	Ошибка
Октоген	9110	6230	2880	31,61361
Тетрил	7500	4522	2978	39,70667
Тетрил_2	7620	4654	2966	38,92388
Гексоген	5900	3891	2009	34,05085
Гексоген_3	8640	5919	2721	31,49306

ЭДНА	7750	5308	2442	31,50968
Нитрогуанидин	6775	5447	1328	19,60148
Нитрокарбамид	4700	5168	468	9,957447
НК-55	9110	5645	3465	38,03513
ДИНА	7730	5990	1740	22,5097

5.1.2. Реализации программы для моделирования скорости детонации взрывчатых веществ

Программная реализация моделирования скорости детонации высокоэнергетических веществ выполнена на языке Python 2.7. Программа состоит из двух модулей: `modeling.py` и `methods.py`.

В модуле `methods.py` реализованы методы моделирования скорости детонации, а именно метод Айзенштадта и метод Камлета в функциях `aizenshi` и `camlet_jackson` соответственно. Помимо этого, модуль `methods.py` содержит две функции `delta` и `error`, которые вычисляют модуль разницы двух чисел и разницу в процентах между двумя числами соответственно.

Модуль `modeling.py` содержит в себе инструкции для начала вычислений. Он импортирует в себя все функции, реализованные в модуле `methods.py` и работает с ними. Также модуль импортирует внешние библиотеки `xlrd` и `xlwt`, которые должны быть установлены в системе, предназначенные для чтения и записи данных в файлы форматов `MSEXcel`.

В `modeling.py` описан класс `Substance`, который представляет собой описание сущности "Вещество". `Substance` содержит следующие поля:

`name` - название вещества

c - количество атомов углерода

h - количество атомов водорода

n - количество атомов азота

o - количество атомов кислорода

mass - молекулярная масса вещества

p - плотность

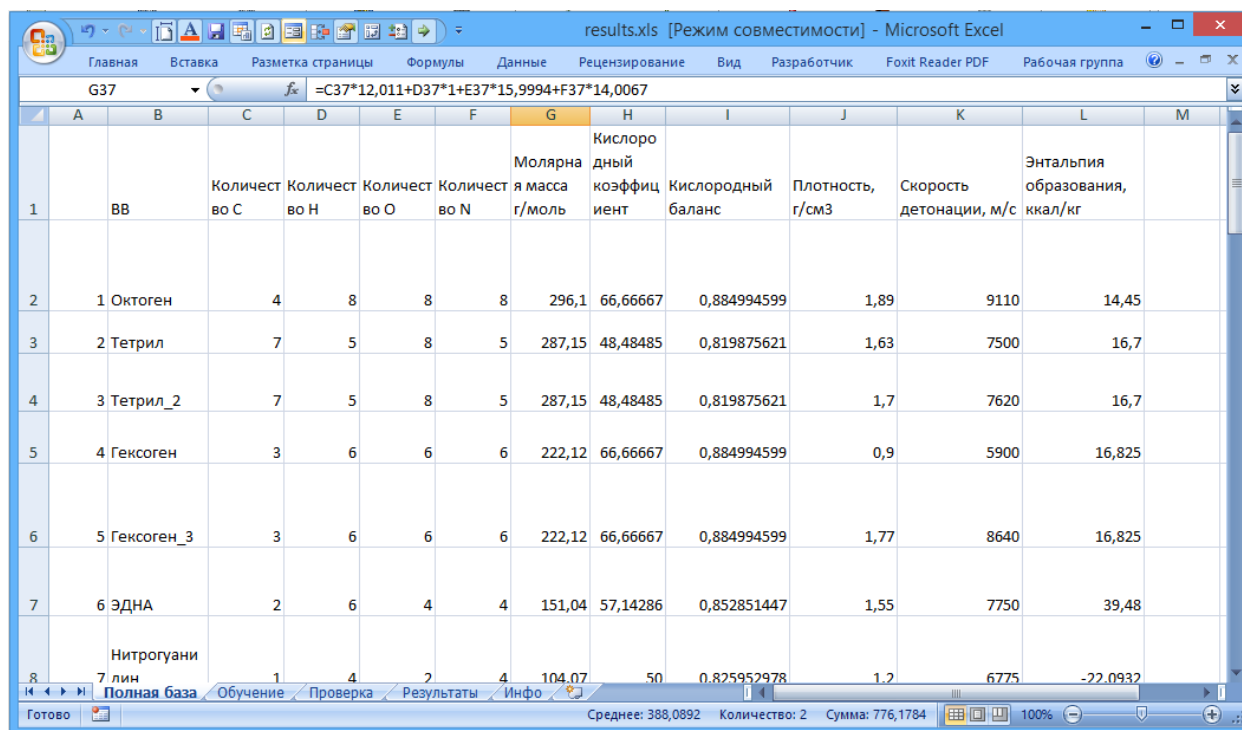
detonation - экспериментальная скорость детонации

delta_h - энтальпия образования

Функция `read_from_xls` считывает данные о веществах из .xls базы построчно, представляя каждую строку объектом типа `Substance`. Функция возвращает список типа `Substance`.

Функция `write_to_xls` принимает произвольное количество параметров и записывает полученные данные результатов моделирования в .xls файл.

Программа имеет консольный интерфейс, на работы с ней нужно запустить командную строку Windows (или Linux) и перейти в директорию, в которой находятся файлы `modeling.py` и `methods.py`. Затем запустить скрипт `modeling.py` командой `"python modeling.py"`. База веществ должна находиться в формате, отображенном на Рис. 47



results.xls [Режим совместимости] - Microsoft Excel

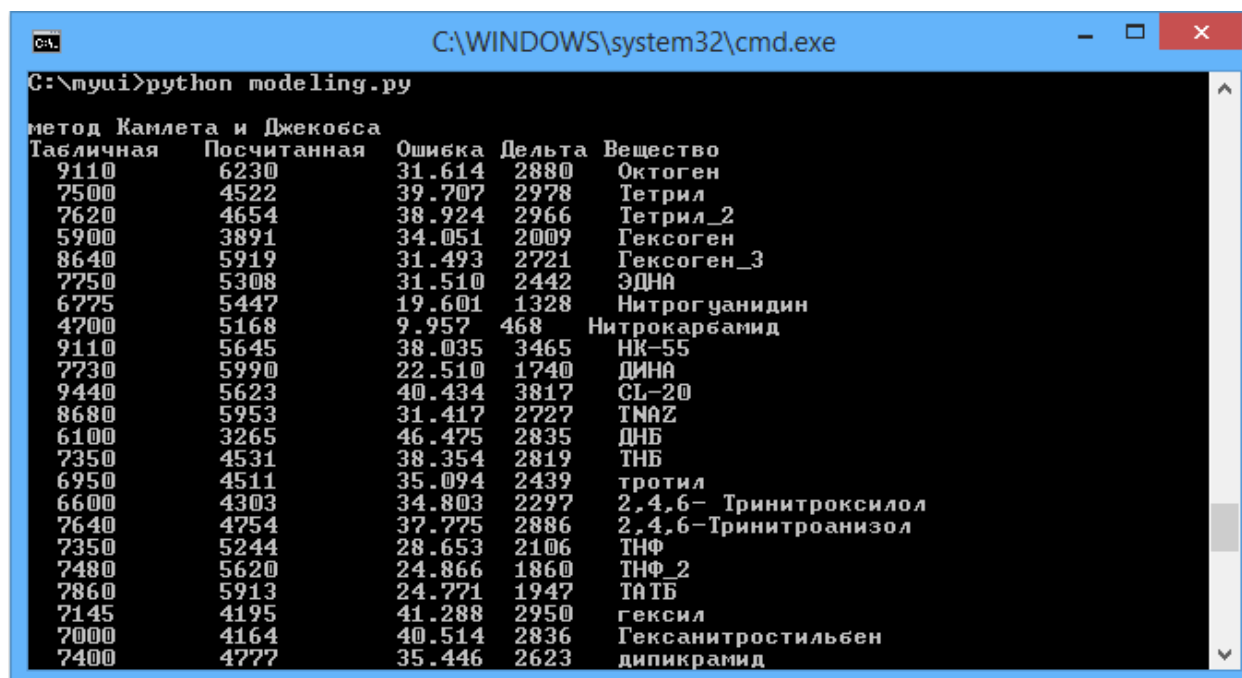
Г37 fx =C37*12,011+D37*1+E37*15,9994+F37*14,0067

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
			Количество во C	Количество во H	Количество во O	Количество во N	Молярная масса г/моль	Кислородный коэффициент	Кислородный баланс	Плотность, г/см3	Скорость детонации, м/с	Энтальпия образования, ккал/кг	
1		ВВ											
2		1 Октаген	4	8	8	8	296,1	66,6667	0,884994599	1,89	9110	14,45	
3		2 Тетрил	7	5	8	5	287,15	48,48485	0,819875621	1,63	7500	16,7	
4		3 Тетрил_2	7	5	8	5	287,15	48,48485	0,819875621	1,7	7620	16,7	
5		4 Гексоген	3	6	6	6	222,12	66,6667	0,884994599	0,9	5900	16,825	
6		5 Гексоген_3	3	6	6	6	222,12	66,6667	0,884994599	1,77	8640	16,825	
7		6 ЭДНА	2	6	4	4	151,04	57,14286	0,852851447	1,55	7750	39,48	
8		Нитрогуанидин	1	4	2	4	104,07	50	0,825952978	1,2	6775	-22,0932	

Готово Среднее: 388,0892 Количество: 2 Сумма: 776,1784 100%

Рис. 47

Во время выполнения программа выводит в командную строку результаты (Рис. 48), также для удобства анализа результатов они экспортируются в Excel-файл, который создается в той же директории, в которой находится скрипт (Рис. 49).

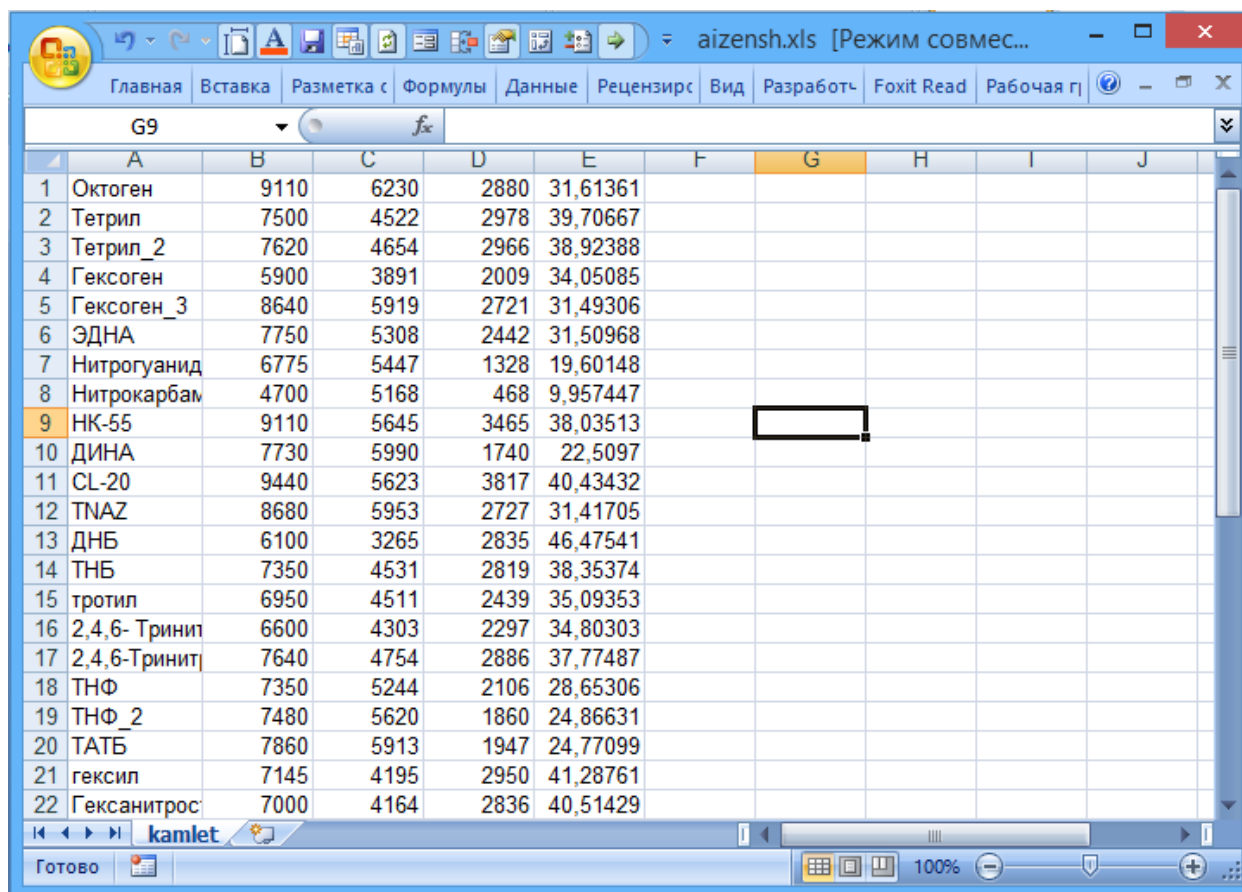


C:\WINDOWS\system32\cmd.exe

```
C:\myui>python modeling.py
```

метод Камлета и Джекобса	Табличная	Посчитанная	Ошибка	Дельта	Вещество
	9110	6230	31.614	2880	Октаген
	7500	4522	39.707	2978	Тетрил
	7620	4654	38.924	2966	Тетрил_2
	5900	3891	34.051	2009	Гексоген
	8640	5919	31.493	2721	Гексоген_3
	7750	5308	31.510	2442	ЭДНА
	6775	5447	19.601	1328	Нитрогуанидин
	4700	5168	9.957	468	Нитрокарбанид
	9110	5645	38.035	3465	НК-55
	7730	5990	22.510	1740	ДИНА
	9440	5623	40.434	3817	CL-20
	8680	5953	31.417	2727	TNAZ
	6100	3265	46.475	2835	ДНБ
	7350	4531	38.354	2819	ТНБ
	6950	4511	35.094	2439	тротил
	6600	4303	34.803	2297	2,4,6-Тринитроксил
	7640	4754	37.775	2886	2,4,6-Тринитроанизол
	7350	5244	28.653	2106	ТНФ
	7480	5620	24.866	1860	ТНФ_2
	7860	5913	24.771	1947	ТАТБ
	7145	4195	41.288	2950	гексил
	7000	4164	40.514	2836	Гексанитростильбен
	7400	4777	35.446	2623	дипикранид

Рис. 48



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Октоген	9110	6230	2880	31,61361					
2	Тетрил	7500	4522	2978	39,70667					
3	Тетрил_2	7620	4654	2966	38,92388					
4	Гексоген	5900	3891	2009	34,05085					
5	Гексоген_3	8640	5919	2721	31,49306					
6	ЭДНА	7750	5308	2442	31,50968					
7	Нитрогуанид	6775	5447	1328	19,60148					
8	Нитрокарбам	4700	5168	468	9,957447					
9	НК-55	9110	5645	3465	38,03513					
10	ДИНА	7730	5990	1740	22,5097					
11	CL-20	9440	5623	3817	40,43432					
12	TNAZ	8680	5953	2727	31,41705					
13	ДНБ	6100	3265	2835	46,47541					
14	ТНБ	7350	4531	2819	38,35374					
15	тротил	6950	4511	2439	35,09353					
16	2,4,6-Тринит	6600	4303	2297	34,80303					
17	2,4,6-Тринит	7640	4754	2886	37,77487					
18	ТНФ	7350	5244	2106	28,65306					
19	ТНФ_2	7480	5620	1860	24,86631					
20	ТАТБ	7860	5913	1947	24,77099					
21	гексил	7145	4195	2950	41,28761					
22	Гексанитрос	7000	4164	2836	40,51429					

Рис. 49

5.1.3. Прогнозирование детонации - параметра быстропротекающих процессов

Произведем прогнозирование скорости детонации ВВ в пакете ExcelNeuralPackage. Имея в базу из 40 веществ, разделим ее на обучающую выборку из 37 примеров и на тестовую выборку из 3 примеров.

Нейронная сеть представляет из себя однослойный персептрон с 8 нейронами во входном слое, 6 нейронами в скрытом слое и одним нейроном в выходном слое. На вход сети подается вектор следующих данных о веществе: кол-во С, кол-во Н, кол-во N, кол-во О, молярная масса, кислородный баланс, кислородный коэффициент, плотность.

Обучив нейронную сеть сохраняем ее проект, чтобы можно было провести прогнозирование скорости детонации тестовых примеров с помощью обученной сети.

После проведения ряда испытаний типа "обучение-тестирование" с данными параметрами сети, с различным количеством обучающих эпох были получены неудовлетворительные результаты прогнозирования. Средняя ошибка по всем экспериментам составила $\approx 8,87\%$.

Для повышения результативности добавим в скрытый слой дополнительный нейрон. Добавив во входной вектор значение энтальпии образования увеличим его размер до 9. В данном случае ошибка прогнозирования была заметно уменьшена.

Результаты прогнозирования скорости детонации 5 веществ приведены в Таблице 9.

Таблица 9

Название	Плотность	Экспериментальная скорость детонации	Спрогнозированная скорость детонации	Отличие от экспериментальной	Ошибка прогнозирования
2,4,6-Тринитроанизол	1,6	7640	7360,146	279,8542	3,663013
ТНФ	1,6	7350	7283,037	66,96264	0,911056
ТНФ_2	1,77	7480	7194,479	285,5214	3,817131
ТАТБ	1,8	7860	7634,03	225,9702	2,874939
Гексил	1,6	7145	7309,161	164,1611	2,297566

Прогнозирование для всех 40 веществ проведено методом скользящей выборки, результаты подробно отражены в Приложении 3. Средняя ошибка прогнозирования = 4,31520751.

5.2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЯ

Выше было описаны моделирование с помощью экспресс методов и прогнозирование с помощью искусственной нейронной сети скорости детонации

сорока взрывчатых веществ. Чтобы сделать вывод о результативности этих двух подходов сделаем сравнительный анализ результатов.

В Табл.10 отражены результаты для пяти из сорока веществ.

Таблица 10

Название	Экспериментальная скорость детонации	Спрогнозированная скорость детонации	Отличие от экспериментальной	Скорость детонации по методу Айзенштадта	Отличие от экспериментальной
2,4,6-Тринитроанизол	7640	7360,146	279,8542	6831	809
ТНФ	7350	7283,037	66,96264	6442	908
ТНФ_2	7480	7194,479	285,5214	6952	528
ТАТБ	7860	7634,03	225,9702	7741	119
Гексил	7145	7309,161	164,1611	6904	241

Ранее было показано, что метод Камлета значительно менее точный по сравнению с методом Айзенштадта, что подтверждает его большую пригодность для веществ с отрицательным кислородным балансом(все представленные вТабл. 10 вещества имеют положительный кислородный баланс). Поэтому сравнивать результаты прогнозирования будем с моделированием по методу Айзенштадта.

Посчитаем среднее значение модулей разности между экспериментальными данными и полученными с помощью метода Айзенштадта для всей выборки, она равна: 485,925. Для результатов прогнозирования: 291,97515.

Также посчитаем среднюю ошибку результатов: ошибка моделирования = 6,9427%, ошибка прогнозирования = 4,3152%.

75% результатов полученных прогнозированием с помощью искусственной нейронной сети входят в доверительный интервал, в то время как лишь 47,5% результатов моделирования методом Айзенштадта не вышли за доверительный интервал. Это свидетельствует о состоятельности нейросетевого подхода в прогнозировании параметров быстропротекающих процессов.

Сравнительная таблица результатов моделирования и прогнозирования скорости детонации для ВВ из всей базы представлены в Приложении 31. Следует отметить, что для обучения нейронной сети была использована относительно маленькая обучающая выборка, при увеличении выборки до нескольких сотен ошибка прогнозирования может существенно уменьшиться.

6. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТЫ ОБРАЗОВАНИЯ И ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

Явления горения и взрыва широко распространены в природе и активно используются людьми в различных сферах жизнедеятельности.

Благодаря этим явлениям человечество получает большую часть тепловой, электрической и механической энергии, необходимой для работы промышленных предприятий, поддержания благоприятных условий в жилых и рабочих помещениях.

Однако неуправляемые процессы горения и взрыва могут представлять серьезную угрозу жизни и здоровью людей. Поэтому необходимо детальное изучение этих явлений.

Горение — сложный физико-химический процесс, протекающий с выделением теплоты и света.

Взрыв — физический или химический быстропротекающий процесс с выделением значительной энергии в небольшом объёме, приводящий к ударным, вибрационным и тепловым воздействиям на окружающую среду и высокоскоростному расширению газов.

Энергия при взрыве выделяется при протекании реакций окисления водорода в воду, углерода в оксиды CO и CO₂ кислородом, входящим в состав молекул взрывчатого вещества (при взрыве 1 л нитроглицерина выделяется $\approx 10^4$ кДж, что значительно меньше энергии, выделяемой при сгорании такого же

количества спирта или бензина). Однако, при взрыве энергия выделяется в течение доли секунды, что обеспечивает большую мощность взрыва.

Высокоэнергетические вещества (ВВ)– химическисоединения или смеси, способные под действием внешнего импульса к быстрому самораспространяющемуся экзотермическому процессу.

По составу ВВ подразделяют на:

1. Индивидуальные химические соединения.

Большинство таких соединений представляют собой кислородосодержащие вещества, обладающие свойством полностью или частично окисляться внутри молекулы без доступа воздуха. Существуют соединения, не содержащие кислород, но обладающие свойством взрываться (разлагаться) (азиды, ацетилениды, диазосоединения и др.). Они, как правило, обладают неустойчивой молекулярной структурой, повышенной чувствительностью к внешним воздействиям (трению, удару, нагреву, огню, искре, переходу между фазовыми состояниями, другим химическим веществам) и относятся к веществам с повышенной взрывоопасностью.

2. Взрывчатые смеси-компози́ты.

Состоят из двух и более химически не связанных между собой веществ. Многие взрывчатые смеси состоят из индивидуальных веществ, не имеющих взрывчатых свойств (горючих, окислителей и регулирующих добавок).

В рамках данной выпускной квалификационной работы рассматриваются твердые индивидуальные вещества, однако в связи с недостатком исходных данных, с целью лучшего прогнозирования было решено использовать для разработки нейронной сети не только ВВ, но и горючие твердые индивидуальные вещества, которые состоят из атомов углерода – C , водорода – H , азота – N , и кислорода – O .

Для каждого вещества определены:

- 1) Состав вещества
- 2) Структурная формула вещества
- 3) Молярная масса

4) Плотность

5) Термодинамические характеристики (стандартная энтальпия образования, энтальпия сгорания, температура плавления и т.д.).

Прогнозирование и вычисление характеристик индивидуальных веществ проводится на основании построенных химических реакций горения в кислороде (O_2) и воздухе ($O_2 + 3.75N_2$) и относится к разделу термохимии.

Термохимия – раздел термодинамики, посвященный исследованиям теплоты, поглощенной или выделенной в ходе химической реакции, при фазовых превращениях или при разбавлении растворов.

Тепловой эффект реакции. Закон Гесса.

Наибольшее количество тепла, которое выделяется (поглощается) при необратимо протекающей реакции, называют тепловым эффектом реакции.

При определении теплового эффекта полагается, что:

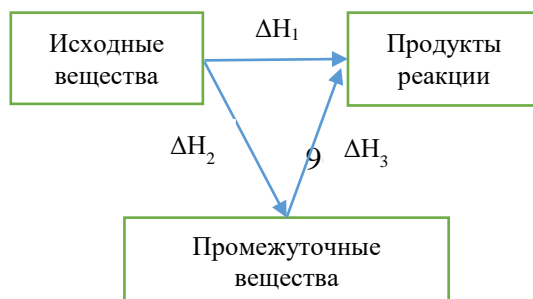
- 1) реакция проходит до конца;
- 2) реакция осуществляется при постоянном давлении или объеме;
- 3) реагенты и продукты реакции находятся при одной и той же температуре.

Если химические реакции протекают при постоянном давлении, тепловой эффект определяется как изменение энтальпии (тепловой функции). В случае же постоянного объема – тепловой эффект химической реакции определяется как изменение внутренней энергии.

Величина теплового эффекта рассчитывается по закону Гесса: *«Тепловой эффект реакции зависит только от вида и состояния исходных и конечных веществ, но не зависит от пути процесса и от промежуточных стадий»*(рис. 50), т.е.:

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

Закон Гесса рассматривают в качестве основного закона термохимии. Он



является следствием из первого начала термодинамики.

Рис. 50. Иллюстрация закона Гесса

Стандартные теплоты образования и сгорания. Методы расчета тепловых эффектов.

Стандартное состояние для твердого тела – это характерное для данного вещества кристаллическое состояние при 1 атм ($1,013 \cdot 10^5$ Па). Особое внимание при задании стандартного состояния необходимо уделить температуре. Как правило стандартной является температура 25 °С (298 К).

Тепловой эффект при стандартных условиях рассчитывают по стандартным теплотам образования и сгорания.

Стандартной теплотой (энтальпией) образования ($\Delta H_{\text{обр}, 298}^0$, Дж/моль) называют тепловой эффект реакции образования 1 моля данного вещества из простых веществ при условии, что все участники реакции находятся в стандартном состоянии [20].

Энтальпии образования простых веществ в устойчивых агрегатных состояниях равны нулю.

Стандартной теплотой (энтальпией) сгорания называют тепловой эффект реакции сгорания 1 моля вещества до простейших окислов в атмосфере кислорода при стандартных условиях.

Расчет теплового эффекта реакции при стандартных условиях на основе закона Гесса

Первое следствие закона Гесса:

Тепловой эффект реакции при стандартных условиях равен разности между суммой теплот образования продуктов реакции и суммой теплот образования исходных веществ, умноженных на соответствующие стехиометрические коэффициенты.

$$\Delta H_r^0 = \sum \nu_i \Delta H_{f_i}^0 (\text{продуктов}) - \sum \nu_i \Delta H_{f_i}^0 (\text{реагентов}).$$

Второе следствие закона Гесса:

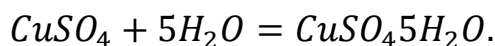
Тепловой эффект реакции при стандартных условиях равен разности между суммой теплот сгорания исходных веществ и суммой теплот сгорания продуктов реакции, умноженных на соответствующие коэффициенты [5].

$$\Delta H_r^0 = \sum \nu_i \Delta H_{c_i}^0 (\text{реагентов}) - \sum \nu_i \Delta H_{c_i}^0 (\text{продуктов})$$

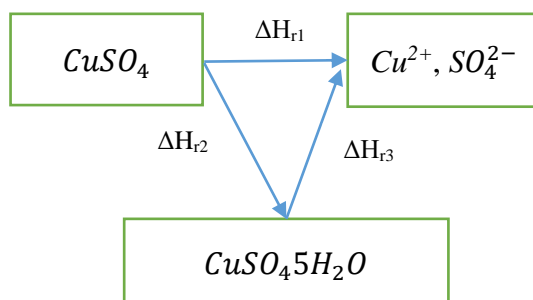
Закон Гесса используется для определения энтальпии реакций, экспериментальное определение которых затруднительно.

Пример: Расчет теплоты гидратообразования сульфата меди $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.

Составим уравнение реакции:



Экспериментально определить тепловые эффекты этой реакции трудно, потому что образуются кристаллогидраты различного состава. В этом случае



необходимо построить следующую цепочку реакций: за исходное состояние взять

Рис. 51. Схема образования ионов Cu^{2+} , SO_4^{2-} из безводной соли CuSO_4

безводную соль CuSO_4 и получить гидратированные ионы Cu^{2+} и SO_4^{2-} через непосредственное растворение соли, либо через образование кристаллогидрата (рис. 60).

По закону Гесса:

$$\Delta H_{r1} = \Delta H_{r2} + \Delta H_{r3}$$

где ΔH_{r1} - интегральная теплота растворения безводной соли (интегральной теплотой растворения называют изменение энтальпии при растворении 1 моля

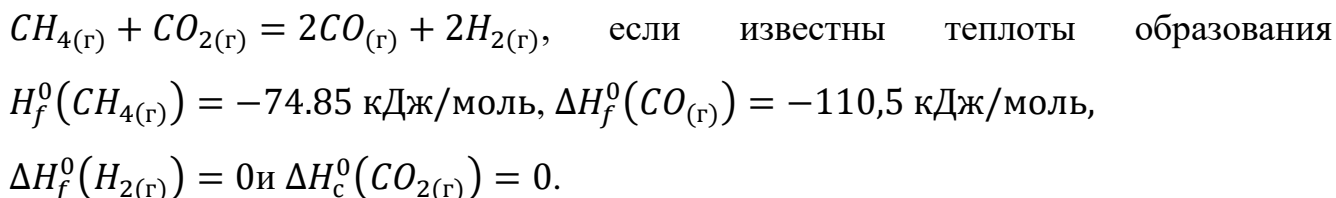
вещества в некотором количестве растворителя: она зависит от числа молей растворителя, и приводится в справочниках).

Интегральные теплоты растворения $\Delta H_{r1}, \Delta H_{r2}$ могут быть определены экспериментально или взяты из справочников.

Перевод стандартной энтальпии сгорания в стандартную энтальпию образования и наоборот

Зачастую на практике встречаются задачи, в которых для одних веществ известны только энтальпии сгорания, а для других – энтальпии образования. В таких случаях также используют следствия из закона Гесса.

Пример: рассчитать тепловой эффект для следующей реакции:

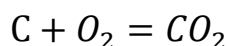


Решение:

По первому следствию закона Гесса имеем:

$\Delta H_r^0 = \sum \nu_i \Delta H_{f,i}^0(\text{продуктов}) - \sum \nu_i \Delta H_{f,i}^0(\text{реагентов})$, однако здесь неизвестна энтальпия образования $CO_{2(g)}$.

Запишем реакцию образования $CO_{2(g)}$:



Тепловой эффект этой реакции при стандартных условиях и будет искомой теплотой образования. Вычислим его, используя второе следствие из закона Гесса:

$$\Delta H_r^0 = \sum \nu_i \Delta H_{c,i}^0(\text{реагентов}) - \sum \nu_i \Delta H_{c,i}^0(\text{продуктов})$$

Энтальпию сгорания $\Delta H_c^0(C) = -393,51$ кДж/моль находим в справочнике.

Тогда:

$$\Delta H_f^0(CO_2) = \Delta H_c^0(C) - \Delta H_c^0(CO_2) = -393,51 \text{ кДж/моль.}$$

Возвращаемся к первому следствию и вычисляем тепловой эффект исходной реакции:

$$\begin{aligned}\Delta H_r^0 &= \sum \nu_i \Delta H_{f_i}^0(\text{продуктов}) - \sum \nu_i \Delta H_{f_i}^0(\text{реагентов}) \\ &= 2 * (-110.5) + 0 - (-74.85) - 393.51 = 247.39 \text{ кДж/моль.}\end{aligned}$$

По положительному значению результата, делаем вывод, что тепло поглощается, реакция эндотермическая.

6.1. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

Программное обеспечение для расчета энтальпии сгорания индивидуальных веществ представляет собой комплекс, который направлен на хранение, обработку и вычисление основных термодинамических характеристик химических соединений.

В основе вычислительных методов системы лежит закон Гесса. Для проведения расчетов термодинамических характеристик создана база данных химических соединений, которая содержит необходимые характеристики веществ:

- 1) состав вещества;
- 2) молярную массу;
- 3) плотность;
- 4) термодинамические свойства (энтальпии образования/сгорания, температуру плавления и т.п.).

Основной процесс системы отвечает за расчет термодинамических характеристик, а именно – энтальпии сгорания индивидуальных веществ (см. рис. 3).

В качестве входных параметров используются табличные данные о составе вещества, его молекулярной массе, плотности, а также экспериментально измеренные значения энтальпии образования и энтальпии сгорания. Для некоторых индивидуальных веществ известны только стандартные энтальпии образования. Основываясь на этих данных и используя следствия из закона Гесса система позволяет определить значение энтальпии сгорания.

Выходными данными являются рассчитанные термодинамические характеристики (энтальпия сгорания, теплотворная способность, теоретический объем воздуха). Кроме того, система позволяет формировать документы в формате .xls, которые содержат всю информацию по индивидуальным веществам, хранящимся в базе данных.

6.1.1. Проектирование базы данных

Проектирование базы данных (БД) – одна из наиболее сложных и ответственных задач, связанных с созданием информационной системы (ИС). В результате её решения должны быть определены содержание БД, эффективный для всех её будущих пользователей способ организации данных и инструментальные средства управления данными.

Концептуальное проектирование базы данных

Целью концептуального проектирования является построение описания базы данных (БД) на едином языке концептуальной модели. Описание модели БД на данном этапе осуществляется с помощью модели «сущность-связь».

Для вычисления термодинамических характеристик составляем соответствующие таблицы:

1. Для каждой сущности определяется совокупность атрибутов. Для каждого атрибута устанавливается наименование и определяется домен. Результат представлен в таблице 11.

2. Для доменов определяются типы значений. Результат представлен в таблице 12.

Комплексная ER-диаграмма представлена на рис.52.



Рис. 52. Комплексная ER-диаграмма

Таблица 11. Сущности и их атрибуты

Наименование сущности	Наименование атрибута	Наименование домена	Обязательное заполнение в БД
Индивидуальное вещество	*Код вещества	Код	+
	Наименование вещества	Наименование вещества	+
	Рациональная формула	Рациональная формула	+
	Молярная масса	Молярная масса	+
	Плотность	Плотность	+
	Стандартная энтальпия образования (табл)	Энтальпия	
	Стандартная энтальпия образования (прогн)	Энтальпия	
	Энтальпия сгорания (табл)	Энтальпия	
	Энтальпия сгорания (расч)	Энтальпия	
	Энтальпия сгорания (прогн)	Энтальпия	
Состав индивидуального вещества	*Код вещества	Код	+
	Количество углерода	Количество	+
	Количество водорода	Количество	+
	Количество азота	Количество	+
	Количество кислорода	Количество	+

Таблица 12. Типы доменов

№	Наименование домена	Тип данных (максимальное количество знаков)	Примеры значений
1	Код	Числовой	235
2	Наименование вещества	Текстовый (150)	Ацетамид
3	Рациональная формула	Текстовый (50)	CH ₃ CONH ₂
4	Молярная масса	Числовой	75,032
5	Плотность	Числовой	0,935
6	Энтальпия	Числовой	-1710,35
7	Количество	Числовой	5

Логическое проектирование базы данных

Спроектировать логическую структуру базы данных означает определить все информационные единицы и связи между ними, задать их имена; если для информационных единиц возможно использование разных типов, то определить их тип. Следует также задать некоторые количественные характеристики, например, длину поля.

При логическом проектировании базы данных используется методика, ориентированная на реляционную модель данных.

Базовыми понятиями в реляционной модели данных являются: отношение, схема отношения, атрибуты, домены, а также нормализация отношений.

Отношения, приведенные к третьей нормальной форме, представлены в таблице 13.

Логическая модель базы данных представлена на рис.53.

Таблица 13. Отношения в 3-ей нормальной форме

Наименование сущности	Наименование атрибута	Функциональные зависимости
Индивидуальное вещество	*Код вещества	*
	Наименование вещества	←
	Рациональная формула	←
	Молярная масса	←
	Плотность	←
	Стандартная энтальпия образования (табл)	←

Наименование сущности	Наименование атрибута	Функциональные зависимости
	Стандартная энтальпия образования (прогн)	←
	Энтальпия сгорания (табл)	←
	Энтальпия сгорания (расч)	←
	Энтальпия сгорания (прогн)	←
Состав индивидуального вещества	*Код вещества	*
	Количество углерода	←
	Количество водорода	←
	Количество азота	←
	Количество кислорода	←

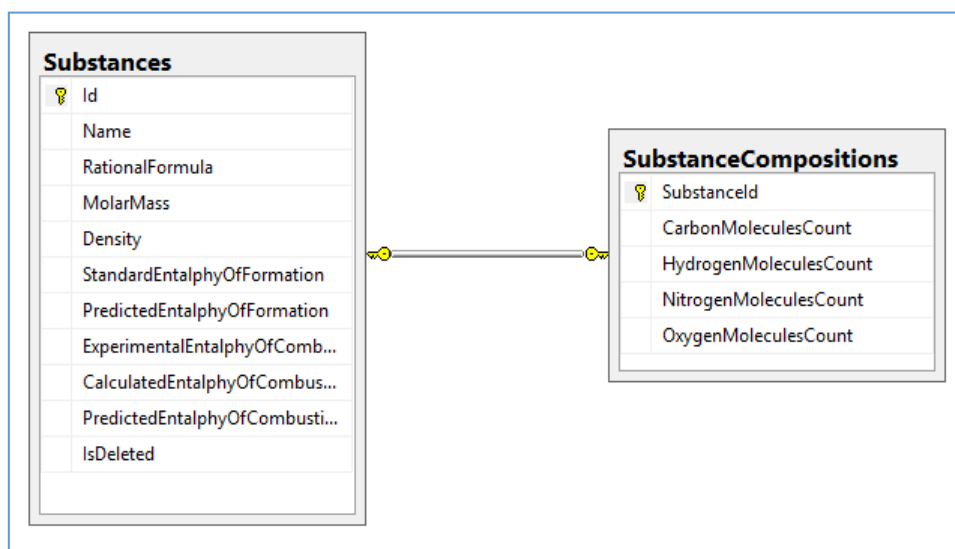


Рис. 53. Логическая модель базы данных

6.1.2. Алгоритм расчёта энтальпии сгорания и теплотворной способности индивидуальных веществ

Теплота сгорания вещества (Q) – это тепловой эффект реакции окисления кислородом элементов, входящих в состав этого вещества до образования высших оксидов ($\text{CO}_{2(\text{г})}$, $\text{H}_2\text{O}_{(\text{ж})}$).

Теплоту сгорания обычно относят к стандартному состоянию ($p = 101,3$ кПа; $T = 298$ К), одному молю топлива, и называют стандартной теплотой сгорания $Q_{298, \text{сгор}}^0$ (кДж/моль). Для углеводородов и спиртов продуктами сгорания являются $\text{CO}_{2(\text{газ})}$ и $\text{H}_2\text{O}_{(\text{ж})}$.

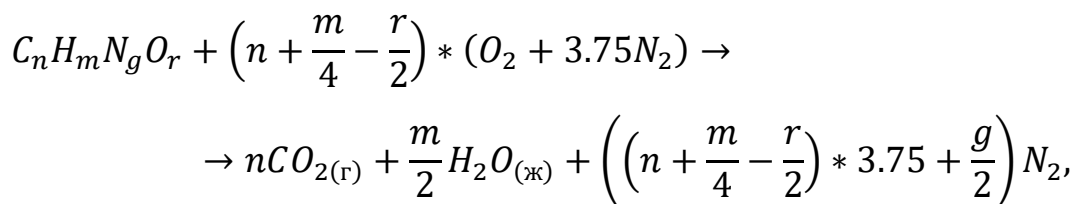
Различают высшую и низшую теплоту сгорания.

Высшая теплота сгорания топлива – количество теплоты, которое выделяется при полном сгорании топлива, включая теплоту конденсации водяных паров при охлаждении продуктов сгорания.

Низшая теплота сгорания топлива – количество теплоты, которое выделяется при полном сгорании топлива, но без учета теплоты конденсации водяного пара.

В двигателях внутреннего сгорания температура выходящих газов выше температуры конденсации водяных паров, поэтому при расчетах пользуются значением низшей теплоты сгорания [35].

Теплота сгорания топлива – это тепловой эффект химической реакции сгорания топлива в воздухе. При составлении уравнения этой реакции необходимо учитывать не только кислород, принимающий участие в реакции окисления, но и азот, входящий в состав воздуха. Так как на 1 моль кислорода в воздухе приходится 3,75 моля азота, реакция сгорания топлива может быть выражена следующим уравнением:



где $C_n H_m N_g O_r$ – индивидуальное горючее вещество, в котором n, m, g, r – количество атомов водорода, углерода, азота и кислорода соответственно.

Согласно первому началу термодинамики, высшая теплота сгорания топлива:

$$\Delta Q_v^0 = -\Delta H_{\text{сгор.топлива}}^0,$$

где $\Delta H_{\text{сгор.топлива}}^0$ – высшая энтальпия сгорания топлива при стандартных условиях.

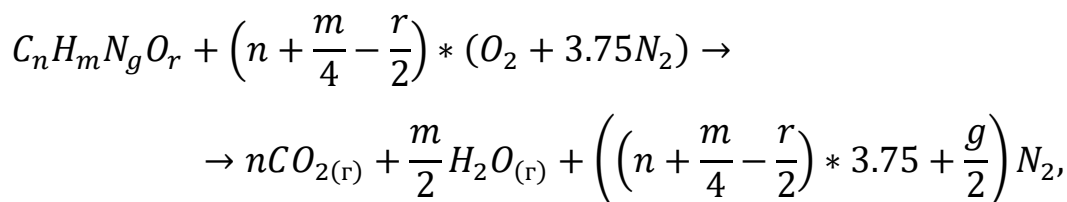
$$\Delta H_{\text{сгор.топлива}}^0 = -\left(\sum \Delta H_{298}^0 \text{ кон. прод} - \sum \Delta H_{298}^0 \text{ исх. вещ-в}\right).$$

Высшая удельная теплота сгорания топлива (теплотворная способность топлива) Q_v (кДж/кг топлива) рассчитывается по уравнению:

$$Q_v = -\frac{\Delta H_v^0}{M * 10^{-3}},$$

где M – молярная масса топлива, г/моль.

Низшая энтальпия сгорания топлива ΔH_n^0 (кДж/моль топлива) рассчитывается по уравнению реакции:



где $\Delta H_n^0 = -\left(\sum \Delta H_{298}^0 \text{ кон. прод} - \sum \Delta H_{298}^0 \text{ исх. вещ-в}\right).$

Низшая энтальпия сгорания топлива отличается от высшей на величину энтальпии конденсации водяного пара ($\Delta H_{\text{конд.}H_2O_{(\text{пар})}}^0 = -44,01$ кДж/моль):

$$\Delta H_n^0 = \Delta H_v^0 - \Delta H_{\text{конд.}H_2O_{(\text{пар})}}^0.$$

Низшая удельная теплота сгорания топлива Q_n (кДж/кг топлива) составит:

$$Q_n = -\frac{\Delta H_n^0}{M * 10^{-3}},$$

где M – молярная масса топлива, г/моль.

Для полного сгорания массовой или объемной единицы топлива необходимо вполне определенное количество воздуха.

Теоретически необходимое количество воздуха для полного сгорания 1 кг топлива (кг воздуха/кг топлива) для реакции рассчитывается по уравнению:

$$L_{\text{воздуха}}^0 = \left(n + \frac{m}{4} - \frac{r}{2} \right) * \left(\frac{M_{O_2} + 3.75M_{N_2}}{M_{\text{топлива}}} \right),$$

где $M_{O_2}, M_{N_2}, M_{\text{топлива}}$ – молярная масса кислорода, азота и топлива соответственно, г/моль.

Количество топливовоздушной смеси (M_1 , моль) для реакции равно:

$$M_1 = 1 \text{ моль}_{\text{топлива}} + \left(n + \frac{m}{4} - \frac{r}{2} \right) * (O_2 + 3.75N_2).$$

Низшая теплота сгорания топливовоздушной смеси (калорийность стехиометрической смеси топлива с воздухом, q_n , кДж/м³) рассчитывается как отношение низшей теплоты сгорания единицы топлива к общему количеству горючей смеси [4]:

$$q_n = - \frac{\Delta H_n^0}{M_1 * 22.4 * 10^{-3}}.$$

Описанный выше алгоритм представлен в виде схемы на рисунке 54.

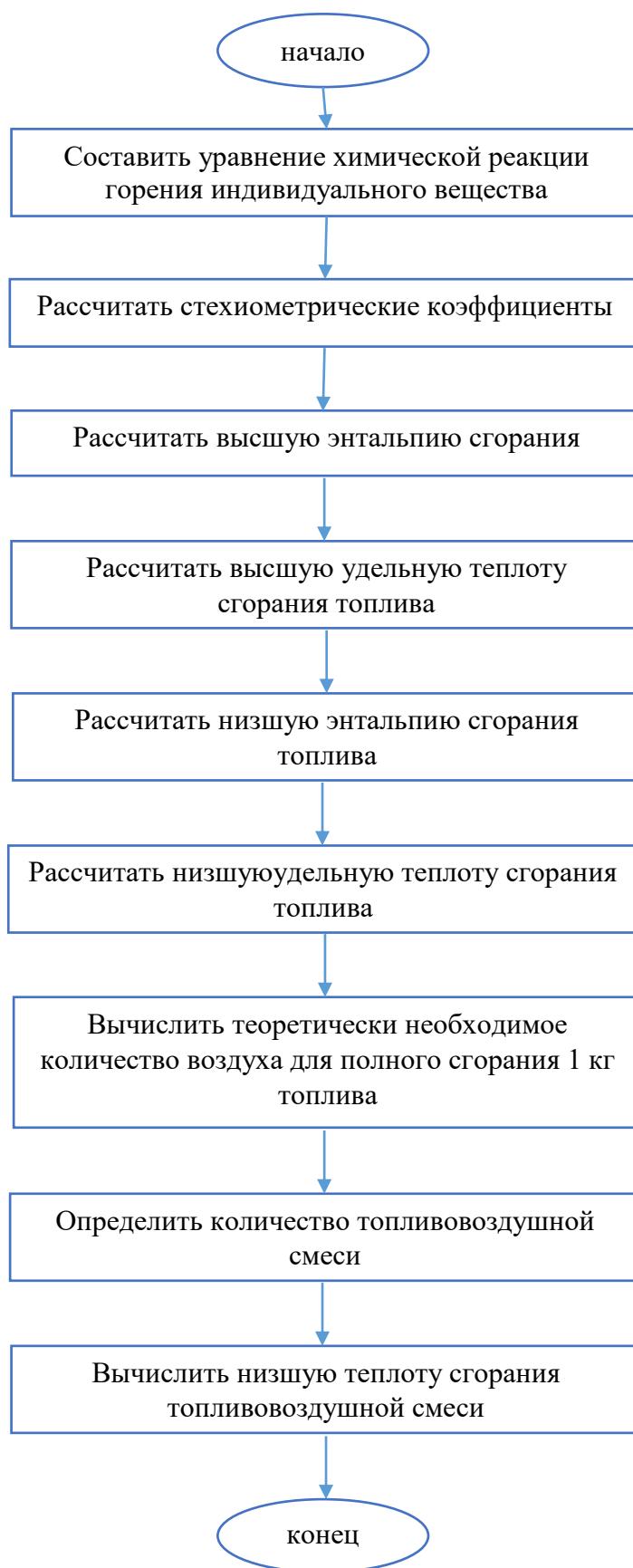


Рис. 54. Алгоритм расчета энтальпии сгорания и теплотворной способности топлива

6.1.3. Руководство пользователя

Программный комплекс ChemCalc.exe представляет собой приложение для операционной системы Windows версии 7/8/10 и позволяет хранить, обрабатывать и вычислять термодинамические свойства твердых индивидуальных веществ.

Для корректной работы приложения необходимо установить Microsoft .NET Framework версии не ниже 4.5 и настроить подключение к базе данных химических соединений.

Для подключения существующей базы данных, нужно создать на своем компьютере (или компьютере, находящемся в локальной сети с компьютером клиента) новую базу данных и в файле App.config прописать строку подключения к базе данных по следующей схеме:

connectionString="Server=ip; DataBase=имяБД; Uid=логин; Pwd=пароль;"

Далее запускаем файл программы ChemCalc.exe, и программа будет готова к использованию. При запуске приложения открывается главное меню программы (рис. 55).

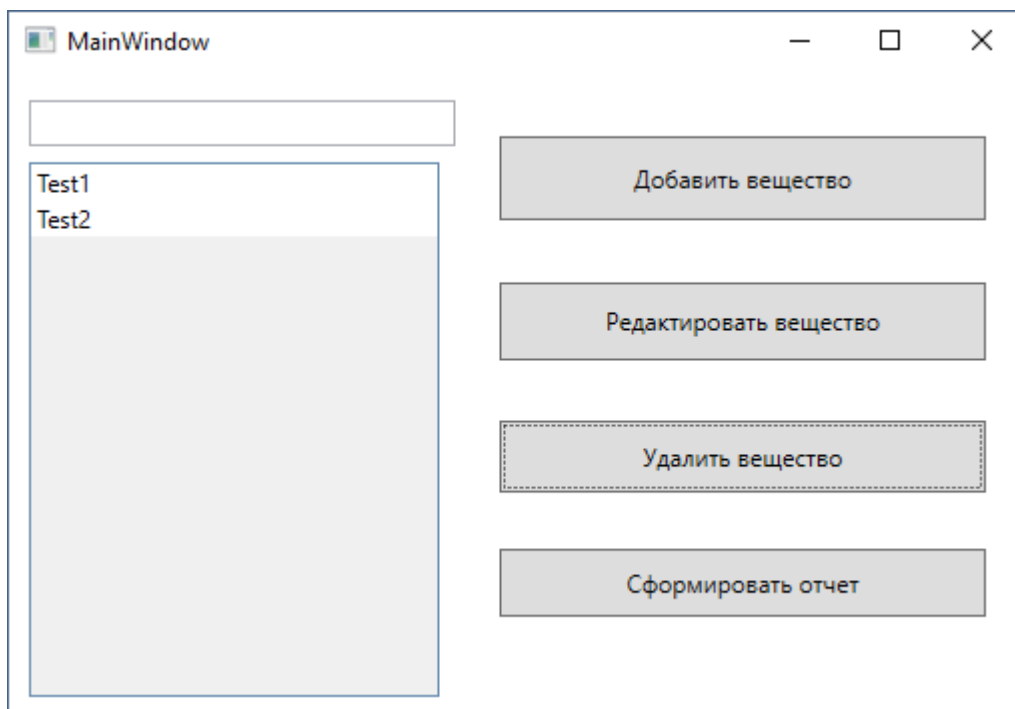


Рис. 55. Главное меню программы

В главном окне программы (рис. 55) располагается список химических соединений и основные кнопки управления. Согласно названиям кнопок, можно выполнить следующие функции:

- 1) Добавить новое вещество
- 2) Редактировать выбранное вещество
- 3) Удалить выбранное вещество
- 4) Сформировать отчет (вывести список всех элементов с их свойствами в файл .xls)

Добавление нового вещества

Для добавления в базу данных нового химического соединения необходимо в главном меню (рис. 55) нажать кнопку «Добавить вещество».

Откроется второе окно – карточка химического соединения (рис. 56).

EditWindow

Название:

Молярная масса: С

Плотность: Н

Энтальпия образования, табл.: N

Энтальпия образования, прогноз: O

Энтальпия сгорания, табл.:

Энтальпия сгорания, расч.:

Энтальпия сгорания, прогноз:

Рациональная формула:

Сохранить

$C_3H_7N_1O_1 + 4,25 * (O_2 + 3,75N_2) \rightarrow 3CO_2(r) + (3,5/2)H_2O(ж) + 16,4375) N_2$

$\Delta H_b = -1862,135$

$\Delta H_n = -1708,1$

$Q_b = 25477,2882747298$

$Q_n = 23369,8180325626$

$L_0 \text{ воздуха} = 7,9690581816938$

$M_1 = 21,1875$

$q_n = -3599,03076274758$

Рис. 56. Карточка индивидуального вещества

Слева указаны поля, которые необходимо заполнить. После заполнения всех необходимых полей справа начинают отображаться:

- 1) Химическая реакция горения в воздухе для указанного вещества
- 2) Расчетное значение высшей энтальпии сгорания, *кДж/моль*
- 3) Расчетное значение низшей энтальпии сгорания, *кДж/моль*
- 4) Высшая теплотворная способность топлива, *кДж/кг*
- 5) Низшая теплотворная способность топлива, *кДж/кг*

- 6) Теоретически необходимое количество воздуха для полного сгорания
1 кг топлива (кг воздуха/кг топлива)
- 7) Количество топливовоздушной смеси, *моль*
- 8) Низшая теплота сгорания топливовоздушной смеси, *кДж/м³*

Значение низшей энтальпии сгорания автоматически записывается в поле «Энтальпия сгорания, расч.» и сохраняется в базе данных при нажатии кнопки «Сохранить».

После нажатия кнопки «Сохранить» введенные данные сохраняются в базе данных и окно с свойствами индивидуального вещества закрывается.

Изменение свойств вещества

Для изменения свойств индивидуального вещества, хранящегося в базе данных, необходимо выбрать это вещество из общего списка веществ и нажать кнопку «Редактировать вещество». В результате откроется окно EditWindow (рис. 9), где можно редактировать необходимые свойства. Работа с этим окном описана выше в разделе «Добавление нового вещества».

Удаление вещества из базы данных

Для удаления некоторого вещества, нужно в главном окне программы (рис. 8) выбрать наименование удаляемого химического соединения и нажать кнопку «Удалить вещество».

Сформировать отчет

При нажатии кнопки «Сформировать отчет» будет создан документ в формате .xls, который будет содержать все вещества и их свойства, которые хранятся в базе данных.

Для того чтобы выйти из приложения достаточно нажать красную кнопку в правом верхнем углу.

Поиск веществ

В приложении предусмотрен поиск веществ по названию. Чтобы найти необходимое вещество достаточно в поле, располагающемся над списком веществ в главном окне программы, ввести название или часть названия искомого вещества. Список подходящих веществ отобразится в главном окне.

6.2. НЕЙРОСЕТЕВОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

Построение любой информационной системы всегда начинается с постановки цели и задач, которые необходимо решить с ее помощью. Целью данной автоматизированной системы является хранение, обработка данных различных химических соединений и прогнозирование / вычисление энтальпии сгорания индивидуальных веществ.

При решении научных и технических проблем значительную роль играют вопросы исследования быстропротекающих процессов. Экспериментальные способы исследования процессов такого рода, как правило, дороги, а зачастую вообще не осуществимы. В этих условиях особое значение приобретает выполняемый с использованием компьютера вычислительный эксперимент, который позволяет анализировать состояния и процессы исследуемых объектов на основании расчетно-теоретических представлений.

Искусственные нейросети являются моделями нейронной структуры мозга, который, главным образом, учится на опыте. Базовый модуль нейронных сетей - искусственный нейрон - моделирует основные функции естественного нейрона (рис. 10).

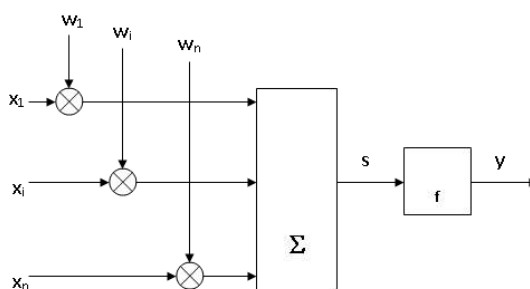


Рис. 57. Базовый искусственный нейрон

При функционировании нейрон получает множество входных сигналов одновременно. Каждый вход имеет свой собственный синаптический вес, который влияет на него и необходим для функции сумматора. Вес является мерой

важности входных связей и моделирует поведение синапсов биологических нейронов. Веса могут изменяться в соответствии с обучающими примерами, архитектурой сети и правилами обучения.

В настоящее время для прогнозирования с помощью нейронных сетей можно использовать различные инструментальные средства: NeuralBase, DeductorStudio, STATISTICA, ExcelNeuralPackage [36].

В данном исследовании использовалась аналитическая платформа DeductorStudio компании BaseGroupLabs. Основным преимуществом данного программного обеспечения является визуальное проектирование логики без написания кода, а также документация и техническая поддержка на русском языке.

6.3. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТЫ ОБРАЗОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

С помощью пакета DeductorStudio осуществлена попытка прогнозирования энтальпии образования ВВ. Энтальпией образования называется однозначная функция H состояния термодинамической системы при независимых параметрах энтропии S и давлении p , которая связана с внутренней энергией U соотношением

Энтальпия системы (от греч. enthalpo нагреваю) – это однозначная функция H состояния термодинамической системы при независимых параметрах энтропии S и давлении p , которая связана с внутренней энергией U соотношением

$$H = U + pV$$

где V – объем системы. [37]

В химии рассматривают изобарические процессы ($p = \text{const}$), и тепловой эффект в этом случае называют изменением энтальпии системы или энтальпией процесса:

$$Q_p = \Delta H$$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V$$

Стандартная энтальпия образования $\Delta H^{\circ}_{\text{обр}}$ – тепловой эффект реакции образования одного моля вещества из простых веществ, его составляющих, находящихся в устойчивых стандартных состояниях (при стандартных условиях $p = 101,325$ кПа, $T = 298$ К).

Энтальпия имеет размерность энергии (кДж). Ее величина пропорциональна количеству вещества; энтальпия единицы количества вещества (моль) измеряется в кДж/моль (в исследовании энтальпия образования измерялась в ккал/кг).

В термодинамической системе выделяющуюся теплоту химического процесса условно считают отрицательной (экзотермический процесс, $\Delta H < 0$), а поглощение системой теплоты соответствует эндотермическому процессу, $\Delta H > 0$.

Для прогнозирования энтальпии образования сформирована база данных, в которую вошли следующие характеристики: количество углерода C , водорода H , кислорода O и азота N в составе высокоэнергетических веществ, молярная масса

вещества, плотность, теплота взрыва, теплота образования, объем продуктов взрыва и энтальпия образования высокоэнергетических веществ (определенная экспериментально). Для обучения, настройки и валидации работы нейросети использовались данные 39 высокоэнергетических веществ. Часть исходных данных приведена в таблице 15.

Первое прогнозирование проводилось для определения теплоты образования ВВ. На рис.58 приведена структура этой нейронной сети.

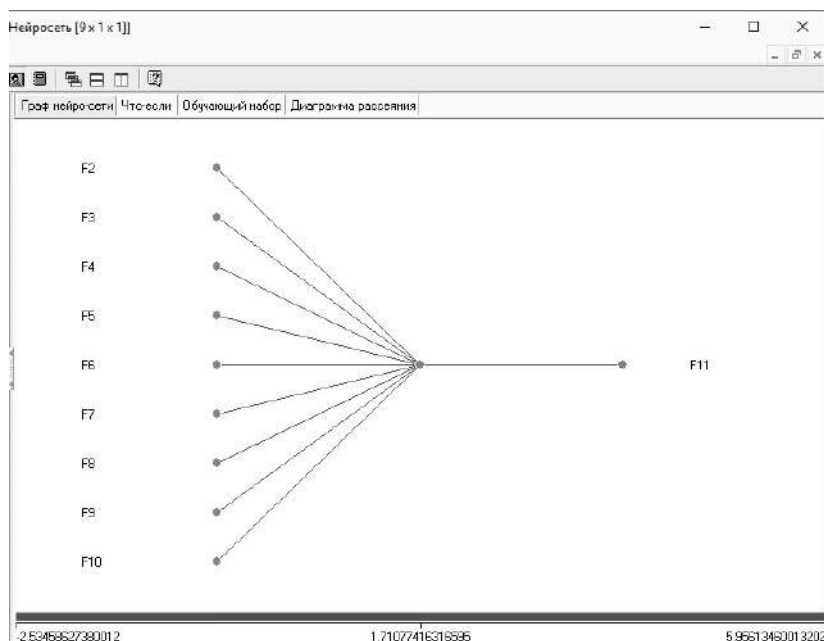


Рис. 58. Структура нейронной сети, вычисляющей теплоту образования

Разработка нейронной сети средствами DeductorStudio начинается с импорта исходных данных. Далее необходимо задать входы и выходы системы, а также нормализовать данные в определенном диапазоне.

В основу входного слоя нейросети помещены данные, находящиеся в интервале столбцов таблицы со второго по десятый (Таблица 4), в последнем столбце находятся данные выходного слоя. Нормализация данных проводилась в диапазоне $[-1; 1]$.

На следующем этапе структура нейронной сети(рис. 58.) – определены передаточные функции и количество нейронов для скрытого слоя. Исходя из условных правил построения нейронных сетей (количество связей между нейронами должно быть в несколько раз меньше, чем количество обучающих

примеров) в скрытом слое выделен один нейрон. Структура сети представлена на рис. 58.

Таблица 14

Исходные данные для прогнозирования теплоты образования ВВ

ВВ	количество				молярная масса, г/моль	плотность г/см ³	теплота взрыва, МДж/кг	теплота образования, ккал/кг	объем продуктов взрыва, л/кг	энтальпия образования, ккал/кг
	С	Н	О	N						
Тетразен	2	8	1	10	188,15	1,635	2,3	270,2	425	240,2
Гексаметилентри пероксиддиамин	6	12	6	2	208,17	1,3	3,29	-384,3	1097	-413,7
ДНБ	6	4	4	2	164,077	1,567	3,43	-21,1	670	-38,7
ТНБ	6	3	6	3	213,0825	1,688	4,45	42,23716166	711	-48,8
тротил	7	5	6	3	227,13	1,663	4,19	-17,8	730	-70,6
2,4,6- Тринитроксолол	8	7	6	3	241,2	1,604	4,06	-82,1	700	-101,7
2,4,6-Тринитроанизол	7	5	3	7	243,1305	1,708	3,66	-131	740	-150,6
ТНФ	6	3	7	3	229,1	1,763	4,4	-51,7	730	-259,3
Пикрат аммония	6	6	7	4	246,14	1,717	3,36	-381,8964817	680	-375,4

Перед началом обучения сети задаются параметры его (обучения) остановки, а также тестовое и валидационное множества.

Опытным путем установлено, что при указанной структуре сети (рис. 11) оптимальным временем обучения является 15000 эпох [4, 5].

Прогнозирование энтальпии образования высокоэнергетических веществ на тестовом и валидационном множествах показывает, что нейронная сеть выдает результаты, с некоторой ошибкой, в основном не превышающей доверительный интервал. Данные, полученные в результате прогнозирования, частично представлены в таблице 5 в столбце «F11_OUT» (на белом фоне таблицы располагаются примеры из обучающего множества данных; на светло-сером – из тестового множества; на темно-сером – из валидационного).

Таблица 15

Результаты прогноза теплоты образования

Граф нейро-сети Что-если Обучающий набор Диаграмма рассеяния													
F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10	F11	F11_OUT	F11_ERR	
Тетразен	2	8	1	10	188,15	1,635	2,3	270,2	425	240,2	137,65662584166	0,00552951034594721	
Гексаметиленпероксиддиамин	6	12	6	2	208,17	1,3	3,29	-384,3	1097	-413,7	-419,962621249609	2,06245158345098E-5	
ДНБ	6	4	4	2	164,077	1,567	3,43	-21,1	670	-38,7	-58,6624894541241	0,000209556370106669	
ТНБ	6	3	6	3	213,0825	1,688	4,45	42,23716166	711	-48,8	-45,1807806409181	6,8881291311836E-6	
тротил	7	5	6	3	227,13	1,663	4,19	-17,8	730	-70,6	-80,7405686777235	5,40749453275501E-5	
2,4,6-Тринитроксиллол	8	7	6	3	241,2	1,604	4,06	-82,1	700	-101,7	-94,8289235299362	2,48268163430767E-5	
2,4,6-Тринитроанизол	7	5	3	7	243,1305	1,708	3,66	-131	740	-150,6	-52,923608993275	0,00501707596759779	
ТНФ	6	3	7	3	229,1	1,763	4,4	-51,7	730	-259,3	-161,900398340009	0,0049886820927425	
Пикрат аммония	6	6	7	4	246,14	1,717	3,36	-381,8964817	680	-375,4	-424,510547637544	0,00126829716505873	
ЭДНА	2	6	4	4	151,04	1,75	5,36	32,89	908	39,48	-21,2447436106257	0,00193911179164533	
нитроманнит	6	8	18	6	452,0954	1,8	6,09	-336,2	723	-357,2	-221,741942146389	0,00964897445809811	
Тетранитрометан	1	0	8	4	196,033	1,64	1,915	85	670	46,9	41,5289577467578	1,5170105654071E-5	
Нитрат гуанидина	1	6	3	4	122,084	1,436	1,87	-726,1	896	-761,7705842	-737,891393572948	0,000299854570343774	

Пакет DeductorStudio позволяет также отследить полученные результаты в графическом виде на «Диаграмме рассеяния» (рис. 59), которая создается автоматически. Здесь окружностями выделены экспериментальные значения энтальпии образования, а черными кружками – спрогнозированные. Есть несколько режимов просмотра диаграммы, в зависимости от интересующего множества данных. На рис.59 представлены все три множества: обучающее, тестовое, валидационное. Все точки, не вошедшие в доверительный интервал (за исключением одной на отметке [-289; -1050], она относится к тестовому множеству), относятся к обучающему множеству.

Диаграмма рассеяния (рис. 59) показывает адекватность разработанной нейронной сети. Ошибок обучения сети можно избежать, если увеличить количество эпох обучения, однако из-за малого набора исходных данных нейросеть «переобучается» и как следствие становится не способной прогнозировать адекватные результаты для других высокоэнергетических веществ. Для получения более точных результатов прогноза необходимо экспериментировать с входным набором аргументов и увеличить базу данных.

Все данные для исследования были взяты из справочной литературы [37].

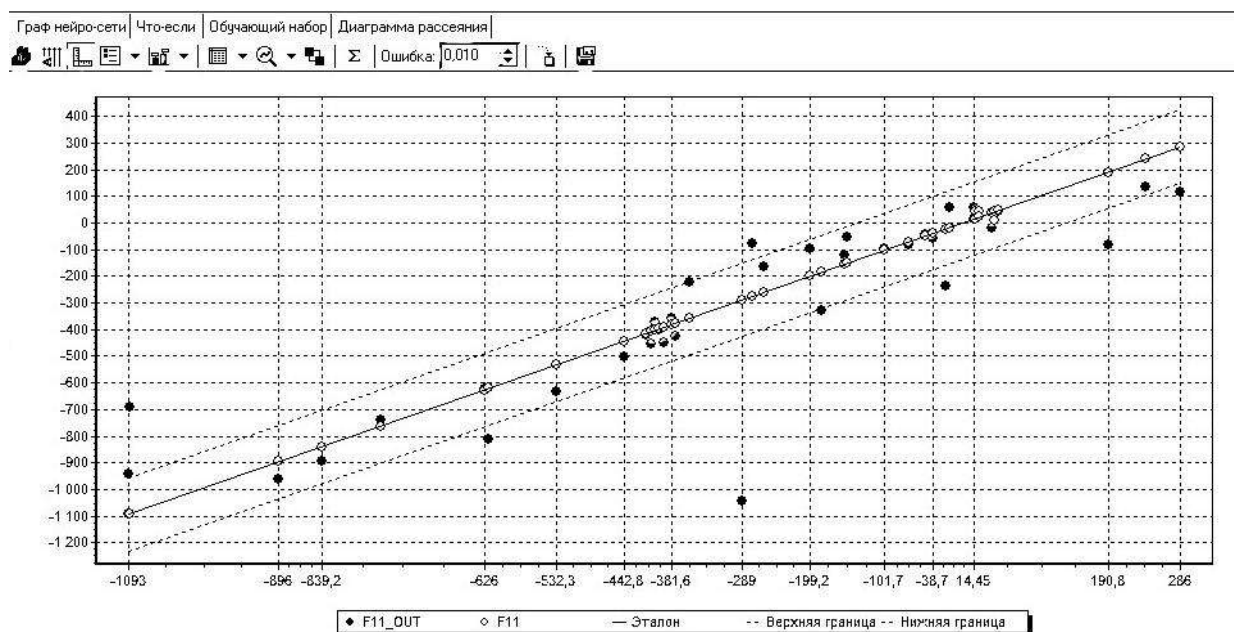


Рис. 59. Диаграмма рассеяния результатов прогнозирования

6.4. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

Стандартной теплотой (энтальпией) сгорания называют тепловой эффект реакции сгорания 1 моля вещества до простейших окислов в атмосфере кислорода при стандартных условиях.

Для прогнозирования этой физической величины составлена база данных высокоэнергетических веществ (приложение 35). Все данные были взяты из справочника [38].

В базу данных веществ вошли следующие характеристики:

- 1) название ВВ;
- 2) состав ВВ (количество атомов углерода, водорода, азота и кислорода);
- 3) молярная масса;
- 4) плотность;
- 5) критическая температура
- 6) критическое давление
- 7) критический объем
- 8) температура охлаждения;

- 9) температура кипения;
- 10) энтальпия сгорания ВВ, определенная экспериментально.

Общее количество ВВ по справочнику [38] составило 75. Однако принимая во внимание закон Гесса, который говорит о том, что энтальпия зависит от состояния вещества, в таблицу с прогнозируемыми данными вошли только твердые индивидуальные ВВ, количество которых равно 27.

Структура сети представлена на рис.60. В качестве алгоритма обучения многослойного перцептрона использовался метод обратного распространения ошибки.

Попытки прогнозирования энтальпии сгорания ВВ на таком маленьком множестве исходных данных не увенчались успехом, на рис. 61 видно, что сеть переобучается: прогноз энтальпии сгорания ВВ для сходных данных практически совпадает с экспериментальными значениями, а для граничных величин резко отличается на 200-300 кДж/моль. На рисунке 15 можно оценить эту картину на контрольных значениях.

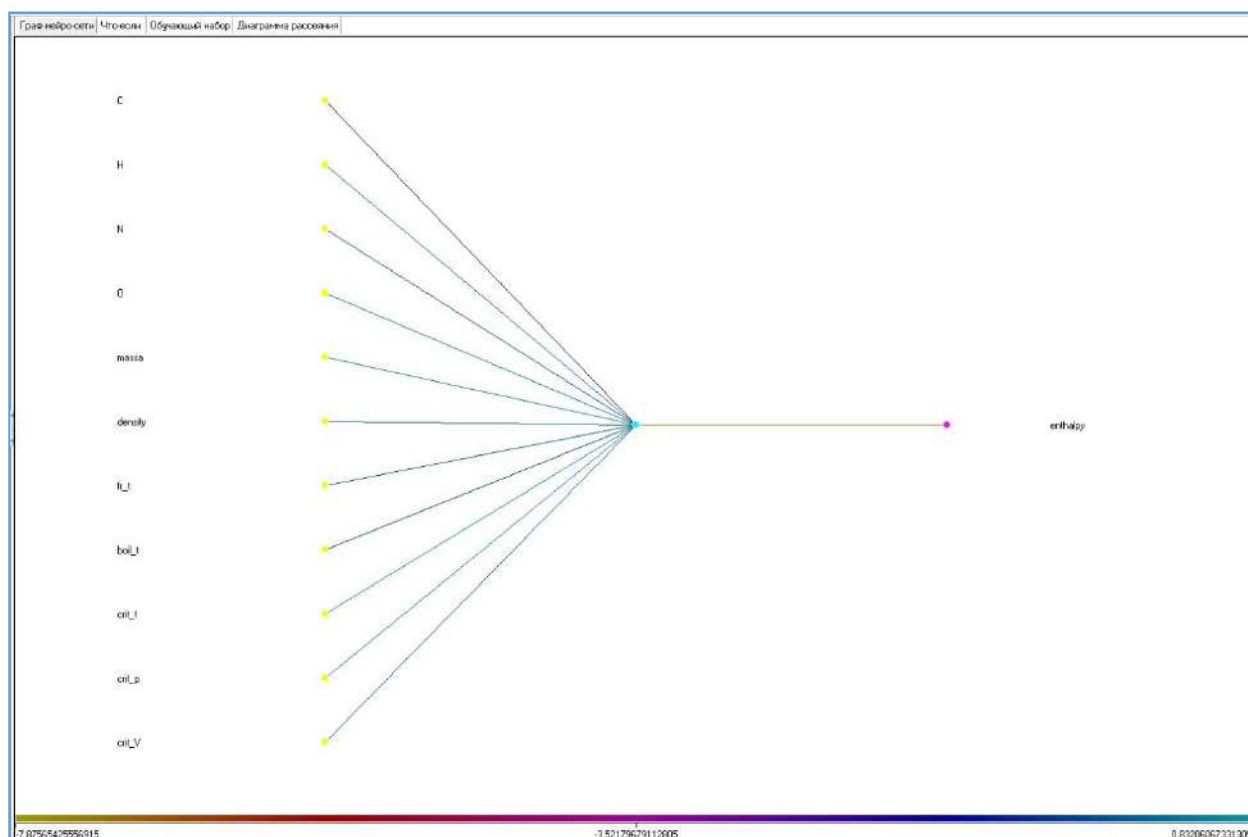


Рис. 60. Структура нейронной сети для прогнозирования энтальпии сгорания ВВ

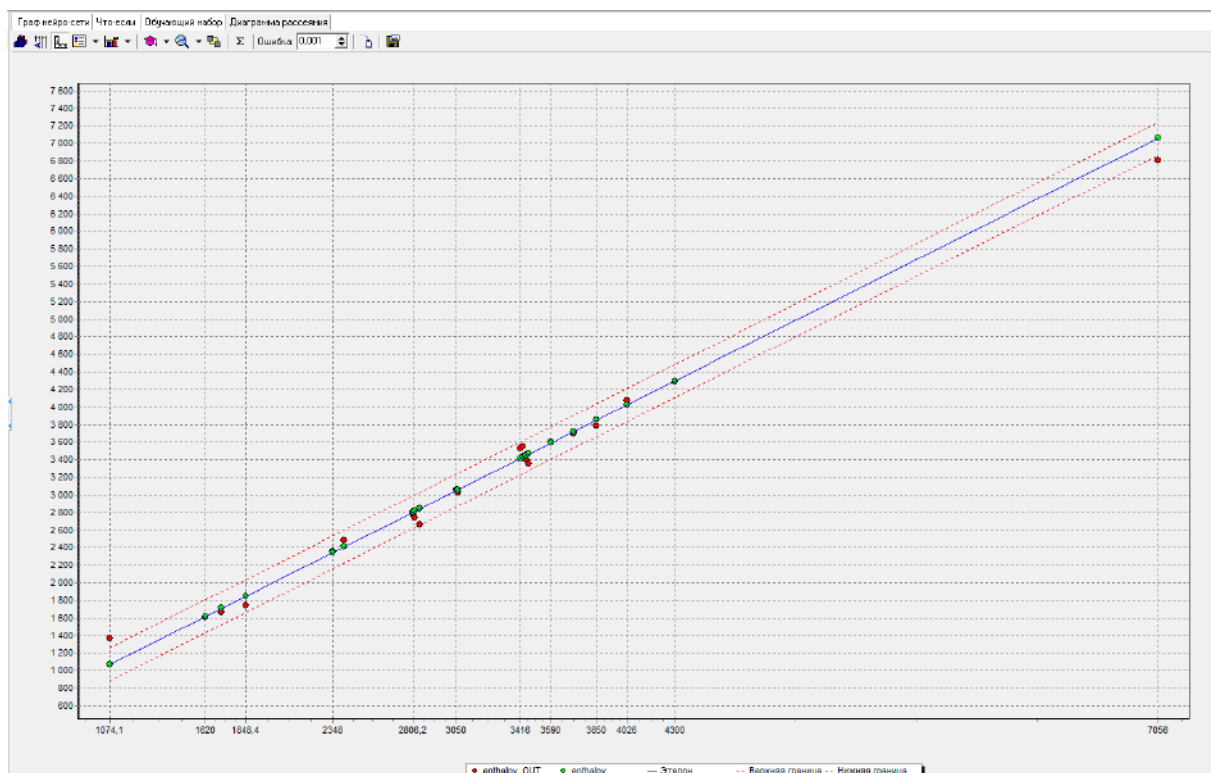


Рис. 61. Диаграмма рассеяния результатов прогнозирования энтальпии сгорания ВВ

Deductor Studio Lite (D:\documents\Ириша\НИИП\теория\энтальпия сгорания\поиски\first.ded) - [Нейросеть [11 x 1 x 1]]

Файл Правка Вид Окно ?

Сценарии Граф нейросети Что-если Обучающий набор Диаграмма рассеяния

Сценарии

- MS Excel (База данных: D:\document\...)
- Нейросеть [11 x 1 x 1]
- MS Excel (База данных: D:\document\...)
- Нейросеть [11 x 1 x 1]
- MS Excel (База данных: D:\document\...)
- Нейросеть [7 x 1 x 1]
- MS Excel (База данных: D:\document\...)
- Нейросеть [11 x 1 x 1]

C	H	N	O	massa	density	fr_t	boil_t	crit_t	crit_p	crit_V	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
2	5	1	1	59,068	1,16	177,8	430,07	761	66	215	1074,1	1370,14463520697	0,00244926678824839
3	5	1	1	71,079	1,13	184,1	378,68	710	57,3	260	1620	1604,50678762507	6,70817912595073E-6
3	7	1	1	73,095	0,957	82,4	401	718	49,8	267	1710	1669,47260098311	4,59006850651858E-5
4	7	1	1	85,106	1,1	230,9	418,73	741	54,5	298	1850	1745,29864374662	0,000306359348556971
4	11	1	2	105,137	1,0966	82,4	516	715	32,7	349	2410,5	2485,21239830107	0,000155993699621086
5	8	4	12	316,138	1,75	284,9	517,73	676	22,4	731	2348	2359,32391215955	3,58356005083961E-6
5	9	1	4	147,131	1,538	435,2	746,33	886	41,34	383,3	1848,4	1844,70999107815	3,80519165114823E-7
6	4	2	4	168,109	1,575	195,53	571,73	805	38,5	434	2813,5	2743,5258653871	0,000136834867208636
6	4	2	4	168,109	1,565	242,47	605,93	831	38,5	434	2843	2668,10943481098	0,000854780222832962
6	4	2	4	168,109	1,625	344,21	569,93	803	38,5	434	2806,2	2777,30808568383	2,332782986302E-5
6	6	2	2	138,126	0,9011	237,2	582,53	815	44,2	406	3060	3029,89329227162	2,53307609139514E-5
6	6	2	2	138,126	0,9015	160,7	544,73	784	44,2	406	3060	3149,35214450231	0,000223116487026453
6	6	2	2	138,126	1,424	297,5	636,8	851	44,2	406	3050	3056,08739039039	1,03558085164911E-6
6	14	2	2	146,189	0,6	409,73	647,33	821	35,3	502	3590	3603,37813890476	5,00164777393673E-6
6	15	1	1	117,191	0,92	136,13	454,73	681	34,4	436	3850	3785,49587068447	0,000116277781643423
6	15	1	2	133,191	0,989	113	497,75	672	36	454	3720	3696,9922781563	1,47934319829885E-5
7	5	3	6	227,133	1,654	177,53	571,73	795	30,4	480	3291,9	3262,37647594793	2,43589236232576E-5
7	6	2	4	182,136	1,52	57,373	602,33	814	34	487	3416	3526,06566944569	0,000338552060696408
7	6	2	4	182,136	1,3	126,5	602,33	814	34	472	3446	3409,73752427366	3,67482451543941E-5
7	6	2	4	182,136	1,283	150,53	544,73	770	36	487	3429	3549,70504300005	0,000407166963280554
7	6	2	4	182,136	1,26	137,93	638,33	842	34	487	3466	3359,25985633092	0,000318403086356047
7	6	2	4	182,136	1,32	198,5	598,73	814	34	473	3437	3400,53626356954	3,71572906918942E-5
7	7	1	1	121,139	1,186	122	519,8	787	41,1	382	3450	3404,69379955973	5,7363677672502E-5
7	7	1	2	137,138	1,1038	124,88	461,3	736	38	441	3550	3519,95437107879	2,52280859043422E-5
8	9	1	1	135,166	1,219	236,3	578,84	825	37,3	430	4026	4073,28639213002	6,2487631183166E-5
9	7	1	1	145,161	1,034	163,13	512,33	788	43,6	414	4300	4290,05165371551	2,76581731129761E-6
15	10	2	2	250,257	1,23	100,49	636,53	802	22,8	712	7056	6808,57718677051	0,00171080765140517

Рис.62. Результаты прогнозирования энтальпии сгорания ВВ

Недостатком данной нейронной сети является не только малый набор исходных данных для обучения, но также и набор характеристик необходимый

для прогнозирования. Речь идет о критическом состоянии вещества, когда всякое различие между жидкостью и паром в результате реакции пропадает.

В связи с сложившейся ситуацией было решено использовать для прогнозирования данные не только ВВ, но и других твердых индивидуальных веществ, которые состояли из атомов углерода, водорода, азота и кислорода.

По справочнику [38] была составлена новая таблица, которая включала 173 вещества, однако теперь критическими характеристиками было решено пренебречь. Кроме того, плотность веществ, из-за отсутствия данных по многим позициям, также не участвовала при следующем прогнозировании энтальпии сгорания индивидуальных веществ.

В результате, построенная на столь малом наборе характеристик нейронная сеть выдавала неутешительный прогноз. На рис.63 представлена структура сети. Результаты прогноза частично представлены в табл.16, а результаты проверки для вещества n-tetradecanoic acid на рис.64.

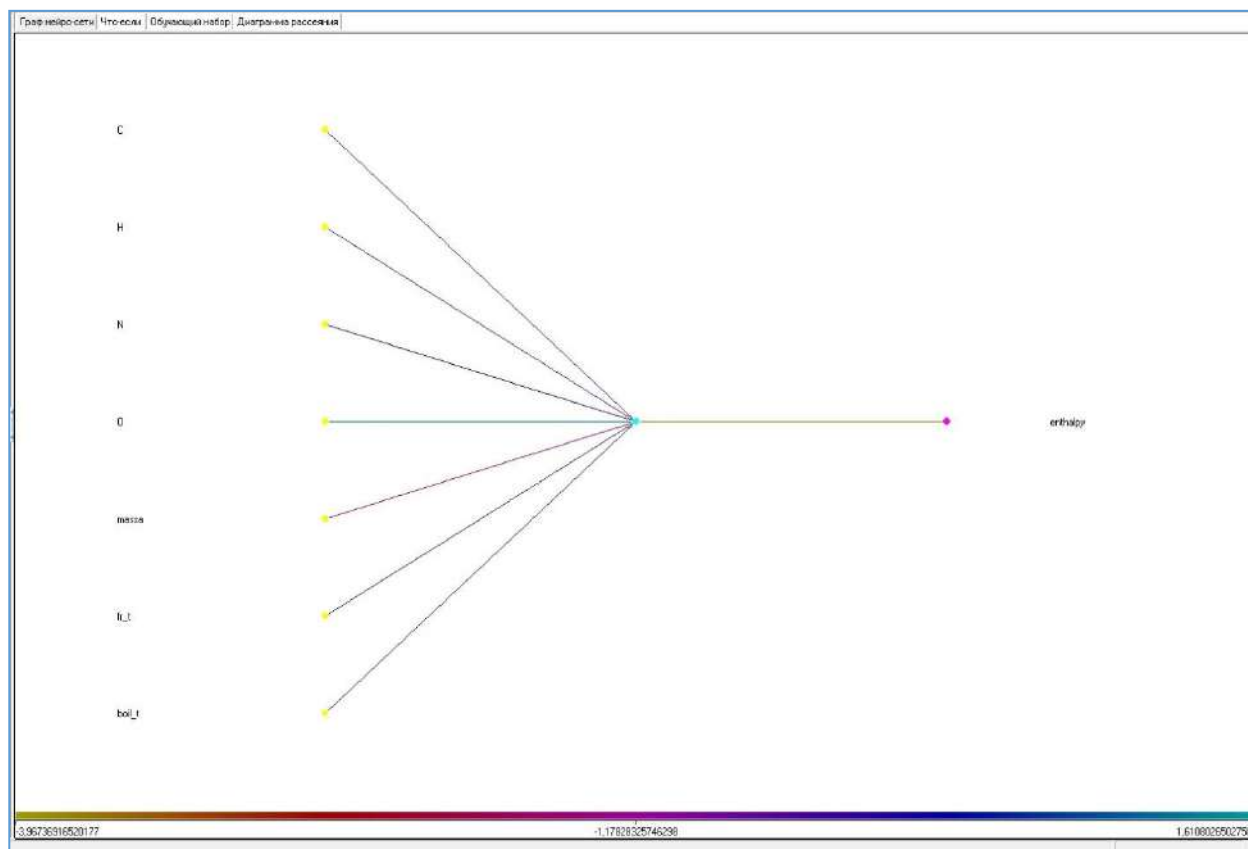
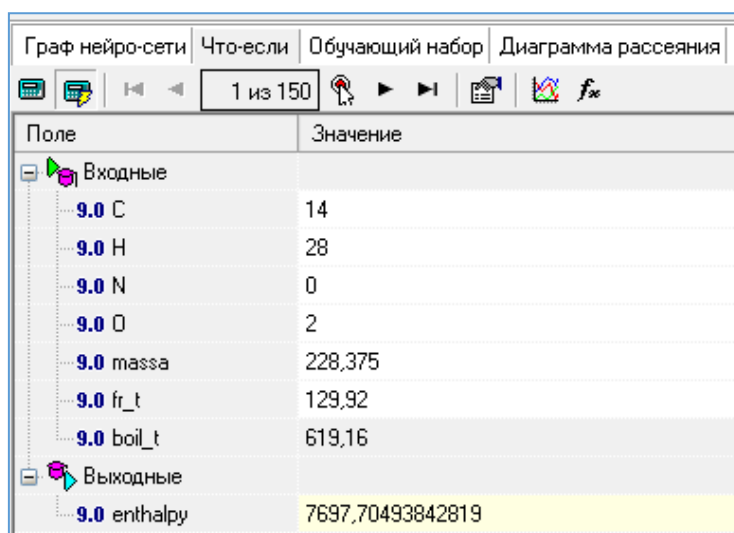


Рис. 63. Структура нейронной сети для прогноза энтальпии сгорания индивидуальных веществ при минимальном наборе характеристик веществ



Поле	Значение
Входные	
9.0 C	14
9.0 H	28
9.0 N	0
9.0 O	2
9.0 massa	228,375
9.0 fr_t	129,92
9.0 boil_t	619,16
Выходные	
9.0 enthalpy	7697,70493842819

Рис. 64. Проверка прогноза энтальпии сгорания для вещества n-tetradecanoicacid

На рис.64 представлена проверка прогнозирования энтальпии сгорания при помощи построенной нейронной сети на контрольном примере. В качестве тестового вещества использовалась кислота n-tetradecanoicacid, которая не участвовала при обучении сети. Ее экспериментальная энтальпия сгорания равна 8060 кДж/моль. Как видно из рис.64 сеть спрогнозировала значение 7697,7 кДж/моль, что сильно отличается от искомого значения.

Таблица 16

Результаты прогнозирования энтальпии
сгорания индивидуальных веществ

name	C	H	N	O	massa	fr_t	boil_t	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
▶ acetamide	2	5	1	1	59,068	177,8	430,07	1074,1	1997,01081926472	0,00540785578986856
malononitrile	3	2	2	0	66,062	89,15	425,03	1609	2163,03078230035	0,00194882758152807
ethylene carbonate	3	4	0	3	88,063	97,52	460,4	1083	1992,02364321187	0,00524633460145633
acrylamide	3	5	1	1	71,079	184,1	378,68	1620	2180,96744249656	0,00199793309127854
trioxane	3	6	0	3	90,079	142,7	238,1	1383,8	2118,85929289994	0,00343044430170351
n-methylacetamide	3	7	1	1	73,095	82,4	401	1710	2256,03316129683	0,00189296971072149
succinonitrile	4	4	2	0	80,089	136,67	512,6	2197,4	2434,80889368957	0,00035784882524898
succinic anhydride	4	4	0	3	100,074	247,73	506,17	1460	2141,86014586702	0,00295186329941041
fumaric acid	4	4	0	4	116,073	548,6	554	1247	2089,79804644464	0,00450975208373243
maleic acid	4	4	0	4	116,073	266,54	557,33	1268,4	2091,85195693141	0,00430508924973949
2-butyne-1,4-diol (gas?)	4	6	0	2	86,09	136,13	460,4	2050	2277,65030902101	0,000329035014150162
trans-crotonic acid (liq?)	4	6	0	2	86,09	160,52	365	1884,3	2312,81063922324	0,00116581287106902
succinic acid	4	6	0	4	118,089	370,4	604,13	13559,1	2148,69192615088	0,826623942968512
diglycolic acid	4	6	0	5	134,089	298,4	638,33	1354,8	2104,26580649016	0,00356622938573368
malic acid	4	6	0	5	134,089	266	623,93	1190	2108,91497040886	0,00536112929225487
tartaric acid	4	6	0	6	150,088	402,8	728,33	1009	2045,11106679019	0,00681582219293822
2-methacrylamide	4	7	1	1	85,106	230,9	418,73	1850	2479,23343340682	0,00251379123554097
trans-2-butene-1,4-diol	4	8	0	2	88,106	81,14	458,33	2170	2370,24271551985	0,000254576950385363
piperazine	4	10	2	0	86,137	222,8	294,8	2738	2897,79903388432	0,000162126469683358
tert-butanol	4	10	0	1	74,123	78,48	180,36	2423,9	2652,94237267702	0,000333071363750188
diethanolamine	4	11	1	2	105,137	82,4	516	2410,5	2603,95227877184	0,000237603769934943
glutaric anhydride	5	6	0	3	114,101	130,73	553,17	2270	2426,24723095971	0,000154999496086048
citraconic acid	5	6	0	4	130,1	181,4	632,93	1870	2346,95210104805	0,00144429251285216
itaconic acid	5	6	0	4	130,1	330,08	622,13	1853,2	2349,04339586208	0,00156097049360164
pentaerythritol tetranitrate	5	8	4	12	316,138	284,9	517,73	2348	2499,19839921502	0,000145144309528519
levulinic acid	5	8	0	3	116,117	95	474	2238	2568,13212585835	0,000691960341558856
glutaric acid	5	8	0	4	132,116	207,5	612,3	1975,3	2452,76187951479	0,00144738155551576
L-glutamic acid	5	9	1	4	147,131	435,2	746,33	1848,4	2545,36205996372	0,00308406769408812
2,2-dimethyl-1-propanol	5	12	0	1	88,15	129,2	235,58	3099,5	3084,48050821371	1,43224100302684E-6
tert-pentyl-alcohol	5	12	0	1	88,15	128,93	235,67	3049,7	3084,43019812927	7,6580844128189E-6
neopentyl glycol	5	12	0	2	104,149	260,33	409,73	2868	2907,82745661678	1,00709577457908E-5
pentaerythritol	5	12	0	4	136,148	501,8	676,13	2498,1	2638,15647864099	0,000124540909575321
1,3,5-trinitrobenzene	6	3	3	6	213,106	257,45	886,73	2679,9	2532,15688283562	0,000138586249847299
m-dinitrobenzene, 1,3-Dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	195,53	571,73	2813,5	2745,82759506833	2,90756109214916E-5
o-dinitrobenzene, 1,2-Dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	242,47	605,93	2843	2726,90722183821	8,55689170805811E-5
p-dinitrobenzene, 1,4-Dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	344,21	569,93	2806,2	2743,88744138238	2,46522631961224E-5
1,4-dicyano-2-butene	6	6	2	0	106,127	168,53	524,93	3350	3184,02553142906	0,000174899352189855
m-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	237,2	582,53	3060	3002,95445060635	2,0660896471905E-5
o-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	160,7	544,73	3060	3027,71074539637	6,6194463451775E-6
p-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	297,5	636,8	3050	2968,98307222232	4,16732304967106E-5
1,2-benzenediol	6	6	0	2	110,112	220,01	473,9	2733	2799,90044971941	2,84160495743911E-5
1,3-benzenediol	6	6	0	2	110,112	227,93	529,7	2719	2769,5065872226	1,61957727739103E-5
1,2,3-benzenetriol	6	6	0	3	126,112	272,93	587,66	2540	2678,98846609027	0,000122648757045248
p-hydroquinone	6	6	0	2	110,112	340,7	545	2470	2759,09369951916	0,000530619102823252
m-phenylenediamine	6	8	2	0	108,143	141,53	548,33	3320	3328,65766592566	4,75890762303325E-7
o-phenylenediamine	6	8	2	0	108,143	218,84	485,33	3330	3370,34773091619	1,03357943343017E-5
p-phenylenediamine	6	8	2	0	108,143	283,73	512,33	3330	3349,91359418811	2,51770552227955E-6
ascorbic acid	6	8	0	6	176,126	377,6	686,93	2163,9	2577,76988955399	0,00108751007646397

Для улучшения результатов прогнозирования было решено модернизировать базу данных, добавив в нее плотность вещества, а также значения стандартной энтальпии образования вещества. Эти характеристики были определены из других справочников и электронных баз данных, в частности

использовались источники [1], [39] и [40]. В результате общее количество исследуемых веществ составило 90 различных позиций.

При прогнозировании предполагалось использовать аналогичную предыдущим структурам нейронную сеть (с одним нейроном в скрытом слое, сигмоидной активационной функцией и обучением методом обратного распространения ошибки, число эпох – 15000). Однако подобные «настройки» сети возвращали плохой результат прогнозирования: экспериментальные данные отличались от прогнозируемых в интервале от 20 до 450 кДж (табл. 17).

Таблица 17

Результаты прогнозирования энтальпии сгорания
при помощи нейросети с одним нейроном в скрытом слое

name	C	H	N	O	massa	density	Hform	fr_t	boil_t	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
citric acid	6	8	0	7	192,125	1,665	-1548,8	307,4	726,53	1784	1908,85496619293	0,000154651048403958
sorbitol	6	14	0	6	182,174	1,49	-1353,7	207,86	938,93	2914,7	3047,99459155895	0,000176265079893419
ascorbic acid	6	8	0	6	176,126	1,65	-1160,3	377,6	686,93	2163,9	2248,40022330994	7,08364746032072E-5
L-glutamic acid	5	9	1	4	147,131	1,538	-1003,3	435,2	746,33	1848,4	2198,67649310571	0,00121720355386225
adipic acid	6	10	0	4	146,143	1,36	-994,3	306,23	640,13	2580	2642,65000283669	3,8938876409821E-5
glutaric acid	5	8	0	4	132,116	1,429	-960,5	207,5	612,3	1975,3	2096,84099037572	0,000146550318775556
pentaerythritol	5	12	0	4	136,148	1,396	-920,5	501,8	676,13	2498,1	2702,8146636782	0,000415756578863163
oxalic acid	2	2	0	4	90,036	1,9	-829,94	373,1	564,43	-242,9	996,757265820071	0,015245598777305
terephthalic acid	8	6	0	4	166,133	1,522	-816,3	800,6	1037,93	3057,6	3141,01419902606	6,90273488256629E-5
fumaric acid	4	4	0	4	116,073	1,64	-811,03	548,6	554	1247	1509,60685269524	0,00068415315684671
isophthalic acid	8	6	0	4	166,133	1,526	-801,5	654,8	895,73	3070,7	3082,71110972101	1,43122361760959E-6
maleic acid	4	4	0	4	116,073	1,59	-787,76	266,54	557,33	1268,4	1539,85500334683	0,000731032907699813
phthalic acid	8	6	0	4	166,133	1,593	-782,12	375,8	616,73	3091,5	2957,41939877764	0,000178350003860777
trimethylolpropane	6	14	0	3	134,175	1,176	-746,4	136,4	552	3413,7	3538,42089421809	0,000154319091420703
dimethyl terephthalate	10	10	0	4	194,187	1,075	-710	285,17	550,4	4411,5	4515,79828646816	0,000107918418549904
1-hexadecanol	16	34	0	1	242,445	0,8187	-686,4	120,56	593,6	9797	9020,23993199725	0,00598570084672346
lysine	6	14	2	2	146,189	0,6	-678,7	409,73	647,33	3590	3555,44552336023	1,18454036572868E-5
1-pentadecanol	15	32	0	1	228,417	0,829	-658,3	111	580,75	9207,2	8833,42743196783	0,00138597716347406
1-tetradecanol	14	30	0	1	214,392	0,823	-628,2	99,5	548,6	8562,7	8588,34804045209	6,52603811101236E-6
1-tridecanol	13	28	0	1	200,365	0,8223	-599,5	87,08	525,2	7953	8275,12824923903	0,0010294348110805
salicylic acid	7	6	0	3	138,123	1,443	-592,1	317,48	492,53	2894,7	2751,72441764163	0,000202798610025013
ethylene carbonate	3	4	0	3	88,063	1,321	-586,3	97,52	460,4	1083	1438,58872529478	0,00125440330695212
1,6-hexanediol	6	14	0	2	118,176	0,967	-583,86	107,6	469,4	3487,5	3684,73740294672	0,000385939985920861
neopentyl glycol	5	12	0	2	104,149	1,1	-551,2	260,33	409,73	2868	2966,2110157427	9,56889152116497E-5
1,2,3-benzenetriol	6	6	0	3	126,112	1,45	-551,1	272,93	587,66	2540	2527,16959707983	1,63313398210508E-6
pentaerythritol tetranitrate	5	8	4	12	316,138	1,75	-538,5	284,9	517,73	2348	2542,40093095837	0,000374919394055979
trioxane	3	6	0	3	90,079	1,17	-522	142,7	238,1	1383,8	1594,894903948	0,000442075782096355

Опытным путем было установлено, что наилучших результатов можно достичь, если в скрытом слое нейронной сети задать два нейрона. Все остальные параметры остались без изменения. Структура новой нейронной сети представлена на рис.65.

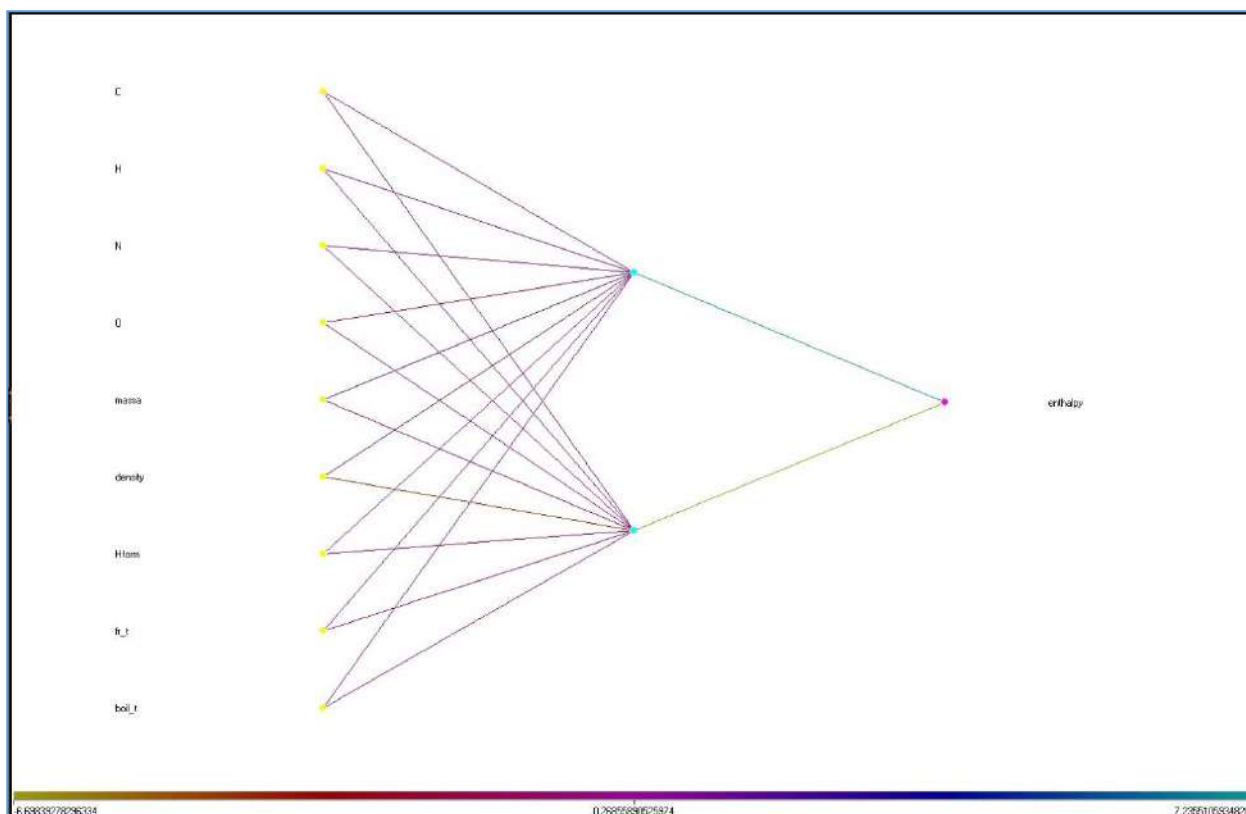


Рис. 65. Структура нейронной сети для прогнозирования энтальпии сгорания индивидуальных веществ

Результаты прогноза данной нейронной сети представлены в приложении 4.

В качестве контрольной проверки можно привести характеристики вещества *vanillin*, которое не участвовало при обучении, тестировании и валидации сети. Экспериментально определенная энтальпия сгорания для данного вещества равна 3660 кДж/моль. Значение, полученное в результате прогноза сети, равно 3638,5 кДж/моль (рис. 66). Результат, не совпадает с искомым значением, но достаточно хорош, т.к. если изучать различную справочную литературу, то можно убедиться, что экспериментальные значения в различных источниках могут отличаться в среднем на от 1 до 30 кДж/моль.

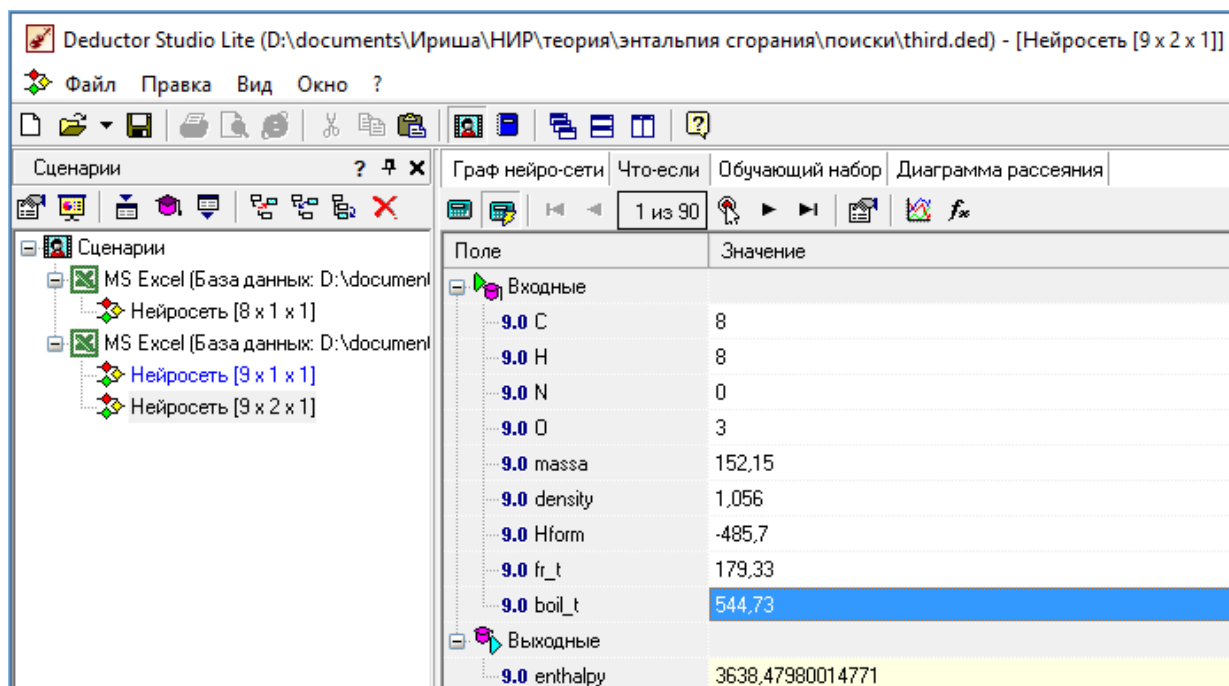


Рис. 66. Контрольная проверка прогноза сети на примере вещества vanillin

6.5. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

В рамках данной выпускной квалификационной работы исследованы термодинамические характеристики индивидуальных веществ, а именно прогнозирование и вычисление энтальпии сгорания. Результаты всех проведенных работ представлены в виде сводной таблицы, где для каждого вещества указана экспериментальная энтальпия сгорания, расчетная низшая и высшая энтальпии сгорания, спрогнозированная с помощью нейронной сети энтальпия сгорания (табл. 18).

Результаты расчетов / прогноза энтальпии сгорания

name	enthalpy	ent_calc_low	ent_calc_high	enthalpy_predicted	эксп-прогн	эксп-низш	эксп-вышш
2-methacrylamide	1850	2168,475	2323	1957,35	107,35	318,475	473
2-phenyl-2propanol	4690	4742,2	5007,1	4746,49	56,49	52,2	317,1
2,5-xyleneol	4110,6	4110,95	4331,7	4102,41	8,19	0,35	221,1
3,5-xyleneol	4112,8	4112,75	4333,5	4112,02	0,78	0,05	220,7
3,4-xyleneol	4114,9	4114,85	4335,6	4114,99	0,09	0,05	220,7
2,6-xyleneol	4119,8	4124,15	4344,9	4121,61	1,81	4,35	225,1
o-cresol	3517,4	3517,6	3694,2	3470,15	47,25	0,2	176,8
p-cresol	3522,6	3522,7	3699,3	3478,97	43,63	0,1	176,7
anthraquinone	6292	6287,9	6464,5	6214,73	77,27	4,1	172,5
1,2,4,5-tetramethylbenzene	5529,8	5506,25	5815,3	5478,03	51,77	23,55	285,5
8-hydroxyquinoline	4300	4304,975	4459,5	4325,81	25,81	4,975	159,5
camphene	5790	5794,8	6148	5761,18	28,82	4,8	358
2,4-dinitrotoluene	3416	3413,65	3546,1	3420,47	4,47	2,35	130,1
2,4,6-trinitrotoluene	3291,9	3295,925	3406,3	3293,17	1,27	4,025	114,4
2,6-dinitrotoluene	3429	3424,85	3557,3	3418,27	10,73	4,15	128,3
diphenylmethane-4,4-diisocyanate	7056	7058,75	7279,5	7058,40	2,40	2,75	223,5
diphenylmethane-4,4-diisocyanate	7056	7058,75	7279,5	7058,40	2,40	2,75	223,5
p-nitrotoluene	3550	3552,775	3707,3	3524,39	25,61	2,775	157,3
p-nitroaniline	3050	3040,95	3173,4	2991,74	58,26	9,05	123,4
p-dinitrobenzene, 1,4-Dinitrobenzene	2806,2	2806,7	2895	2670,79	135,41	0,5	88,8

Кроме того, в таблице представлена разница между экспериментальными и полученными в ходе исследования данными, взятая по модулю.

Ориентируясь на эти величины можно сделать следующие выводы:

- 1) расчетные данные по низшей энтальпии сгорания практически совпадают с экспериментальными, а это значит, что при составлении реакции горения индивидуального вещества в продуктах реакции необходимо указывать воду как газообразное вещество;
- 2) результаты прогноза сети недостаточно хороши, однако следует принять во внимание, что, например, для вещества 2-methacrylamide ошибка расчета низшей энтальпии образования также очень велика, т.е. приведенные справочные данные, к сожалению, не всегда достоверны и

поэтому на данном этапе невозможно обучить нейросеть для более точного прогнозирования энтальпии сгорания;

- 3) в целом результаты прогноза энтальпии сгорания индивидуальных веществ удовлетворительные, т.к. спрогнозированные значения попадают в интервал между величинами низшей и высшей энтальпий сгорания.

7. МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА

7.1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА

Экспериментальное определение теплоты взрыва производят в калориметре (стальная бомба объемом от несколько куб. см. до 50л. Перед опытом в калориметрической бомбе откачивают воздух [17]. На практике теплота взрыва определяет общую работоспособность высокоэнергетических веществ (фугасное действие, а также многие детонационные свойства). Теплота взрыва каждого индивидуального высокоэнергетического вещества не является его строгой константой, а варьируется в некоторых пределах и зависит от условий расширения продуктов взрыва, размеров заряда высокоэнергетического вещества, а также его начальной плотности. При этом диапазон изменения будет тем больше, чем больше кислородный баланс данного высокоэнергетического вещества будет отличаться от нулевого. Различают теплоту взрыва в случае если вода находится в виде пара (низшая) или с учетом конденсации воды в жидкость (высшая). При этом случай, когда вода находится в виде пара более соответствует реальным условиям взрыва.

Эксперименты показывают, что теплота взрыва определяется элементарным составом, химическим строением и плотностью высокоэнергетического вещества. В инженерных расчетах, как правило, не учитывается влияние таких факторов, как способ инициирования, диаметр заряда и прочее. Влияние элементарного состава отражается на составе продуктов взрыва; химическое строение влияет на теплоту взрыва через энтальпию образования. Плотность высокоэнергетического вещества оказывает влияние на состав продуктов взрыва и через них на теплоту взрыва.

7.2. РАСЧЁТНЫЕ МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА

Принято делить все высокоэнергетические вещества на две основные группы:

группа 1 – с положительным кислородным балансом;

группа 2 – с отрицательным кислородным балансом;

В настоящее время существует большое количество методов расчета теплоты взрыва высокоэнергетических веществ типа C-H-N-O [42]. К одним из них можно отнести:

- метод Военной инженерной академии им. Ф.Э. Дзержинского;
- метод ВИА и Института химической физики АН СССР (ИХФ);
- метод Г.А. Авакяна;
- метод расчёта при максимальной плотности вещества;
- метод расчёта при любой заданной плотности.

Первые два метода предполагают запись уравнения реакции взрывного превращения и количество продуктов взрыва.

7.2.1. Метод Г.А. Авакяна

Рассмотрим метод Г.А. Авакяна.

Входные данные:

a - количество углерода

b- количество водорода

c - количество азота

d- количество кислорода

ΔH_f^0 - энтальпия образования вещества, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ (справочная величина)

На основе исходных данных вычисляются другие показатели:

M - молярная масса, $\frac{\text{кг}}{\text{моль}}$

$$M = \frac{12,011 * a + 1,008 * b + 14,007 * c + 15,999 * d}{1000} \quad (40)$$

где коэффициенты при химических элементах – молярные массы соответствующих веществ.

α_k - кислородный коэффициент, характеристика степени насыщенности молекулы кислородом.

$$\alpha_k = \frac{d}{2 * a + \frac{b}{2}} \quad (41)$$

K_p - коэффициент реализации

$$K_p = 1 - 0,323 * \alpha^{0,24} \quad (42)$$

$\sum \Delta H_{\max}(ПВ)$ - максимальная суммарная теплота образования продуктов взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

$$\text{при } \alpha \geq 1 \sum \Delta H_{\max}(ПВ) = -393,5a - 120,3b \quad (43)$$

$$\text{при } \alpha \leq 1 \sum \Delta H_{\max}(ПВ) = -196,8d - 21,96b \quad (44)$$

$\Delta H_f^0(ПВ)$ - теплота образования продуктов взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$;

$$\Delta H_f^0(ПВ) = K_p * \sum \Delta H_{\max}(ПВ) \quad (45)$$

Q - теплота взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

$$Q = \Delta H_f^0(ПВ) - \Delta H_f^0 - 1,24 * (d + b + c) \quad (46)$$

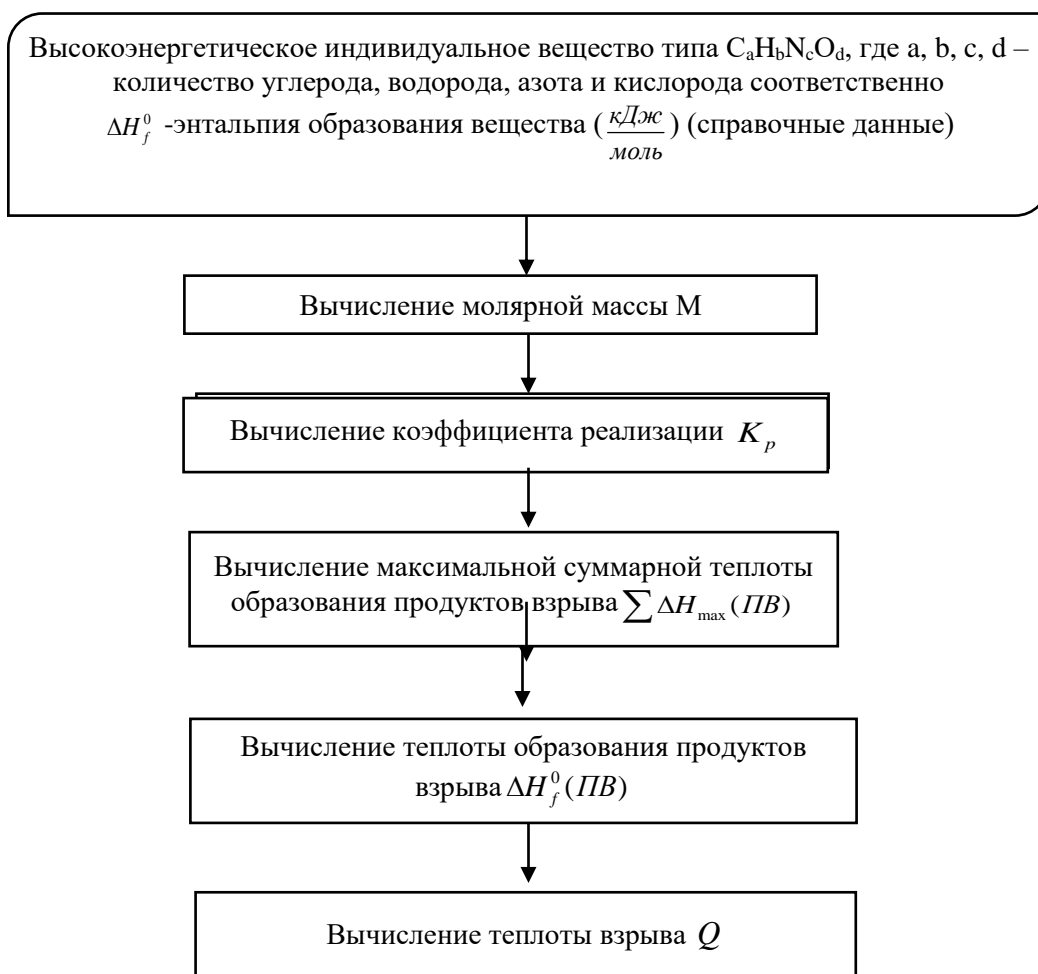


Рис. 67. Алгоритм метода Г.А.Авакяна

В таблице 19 можно увидеть часть результатов для некоторых веществ.

Таблица 19

№	Вещество (брутто- формула)	Экспериментальная теплота взрыва (кДж/моль)	Расчетная теплота взрыва (кДж/моль)	Ошибка, %
1	$C_3H_6N_6O_3$	790	844,17	8,23
2	$C_4H_8N_4O_4$	670	690,62	3,08
3	$C_7H_5N_5O_8$	1264	1281,10	1,35
4	$C_6N_6O_6$	1360	1453,86	6,9
5	$C_2H_4N_2O_4$	583,113	481,54	17,42
6	$C_6H_5N_6O_6$	910	876,4	3,69
7	$C_{11}H_{12}N_8O_4$	821,265	747,89	8,93
8	$C_6H_3N_3O_6$	870	967,78	11,24
9	$C_6H_3N_3O_7$	880	844,89	3,99
10	$C_7H_5N_3O_6$	980	906,46	7,5
1 – циклотриметилентринитрозоами; 2 – N,N-динитропиперазин; 3 – тетрил; 4 – бензотрифуроксан; 5 – 1,1-динитроэтан; 6 – диаминотринитробензол; 7 – дигидразиновая соль метилендинитрамина; 8 – 1,3,5-тринитробензол; 9 – 2,4,6-тринитрофенол (пикриновая кислота); 10 – 2,4,6-тринитротолуол.				

Можно отметить, что в целом среднее значение ошибки составило 22,99%.

На рис. 68 представлена диаграмма рассеивания, можно сделать вывод о том, что только 22 из 92 анализируемых вещества имеют ошибку менее 10% и они отмечены синими точками на диаграмме. Можно также отметить, что значение теплоты взрыва, выдаваемое при расчете данным методом обычно значительно выше экспериментального.

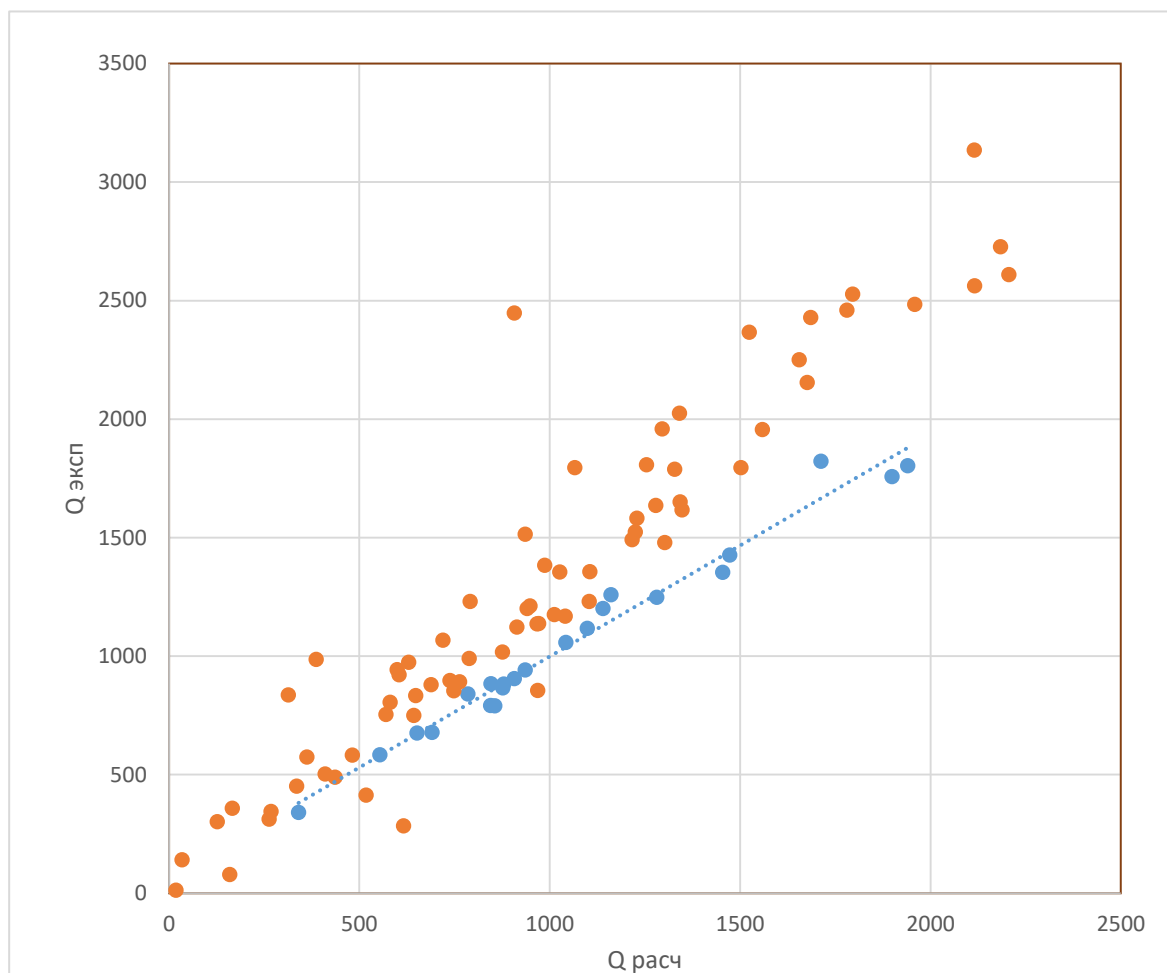


Рис. 68. Диаграмма рассеивания

В связи с тем, что средняя ошибка при использовании данного метода достаточно велико было решено продолжить исследование и рассчитать интересующий нас показатель по методу расчёта при любой заданной плотности. Использование данного метода также позволило расширить исходный перечень веществ, ведь в качестве входного параметра была добавлена ρ – плотность вещества, что позволило использовать высокоэнергетические индивидуальные вещества в различных для них агрегатных состояниях.

7.2.2. Метод для любой плотности

Входные данные:

а - количество углерода

b- количество водорода

c - количество азота

d- количество кислорода

ΔH_f^0 - энтальпия образования вещества, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ (справочная величина)

ρ – плотность, $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$.

На основе исходных данных вычисляются другие показатели:

M - молярная масса, $\frac{\text{кг}}{\text{моль}}$

$$M = \frac{12,011 \cdot a + 1,008 \cdot b + 14,007 \cdot c + 15,999 \cdot d}{1000} \quad (47)$$

где коэффициенты при химических элементах – молярные массы соответствующих веществ.

α_k - кислородный коэффициент, характеристика степени насыщенности молекулы кислородом.

$$\alpha_k = \frac{d}{2 \cdot a + \frac{b}{2}} \quad (48)$$

K_p - коэффициент реализации

При $\alpha \geq 1,4$

$$K_p = 1 - (0,528 - 0,165\rho) \cdot (1,4 - \alpha) \quad (49)$$

При $\alpha \leq 1,4$ расчёт K_p необходимо производить с учётом соотношения водорода и кислорода в молекуле:

$$K_p = 1 - (0,528 - 0,165\rho) \cdot (1,4 - \alpha)^{1,4} \cdot \left[1 - \left(\frac{b}{a+b} \right)^{\frac{5,73-2,28\rho}{(1,4-\alpha)^2}} \right] \quad (50)$$

$\sum \Delta H_{\max} (ПВ)$ - максимальная суммарная теплота образования продуктов взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

$$\text{при } \alpha \geq 1 \quad \sum \Delta H_{\max} (ПВ) = -393,5a - 120,3b \quad (51)$$

$$\text{при } \alpha \leq 1 \quad \sum \Delta H_{\max} (ПВ) = -196,8d - 21,96b \quad (52)$$

Q_{\max} - максимальная теплота взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

$$Q_{\max} = \sum \Delta H_{\max}(\text{ПВ}) - \Delta H_f^0 \quad (53)$$

Q - теплота взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

$$Q = K_p * Q_{\max} \quad (54)$$

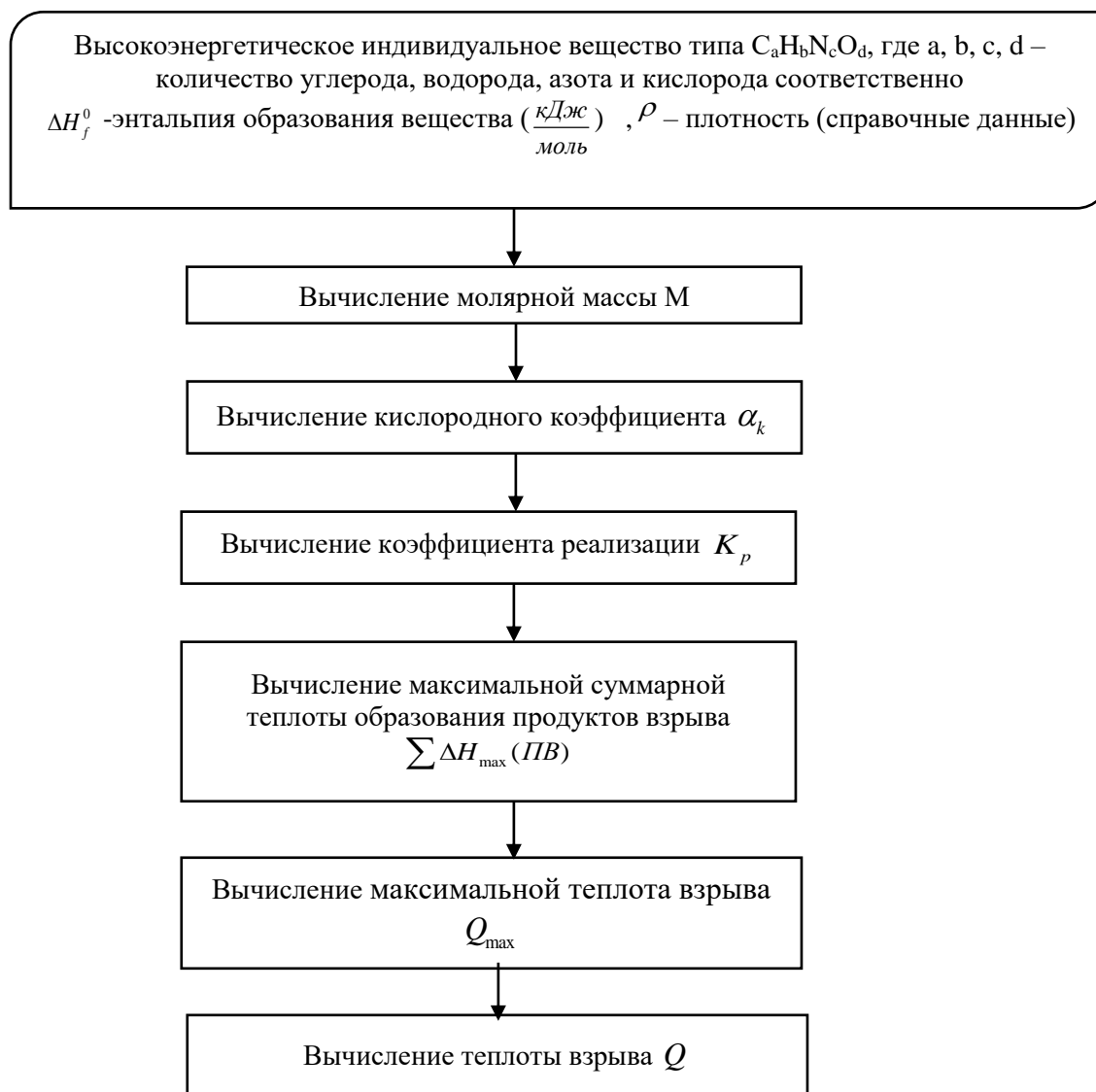


Рис. 69. Алгоритм метода для любой плотности

В таблице 20 можно увидеть часть результатов для некоторых веществ.

Таблица 20

№	Вещество (брутто- формула)	Плотность	Экспериментальная теплота взрыва (кДж/моль)	По методу для любой плотности (кДж/моль)	Ошибка, %
1	$C_3H_6N_6O_3$	0,72	714,426	659,57	7,68
2	$C_3H_6N_6O_3$	1,51	874,806	833,83	4,68
3	$C_6N_6O_6$	0,95	1224,38	1197,519	2,19
4	$C_6N_6O_6$	1,76	1361,596	1400,706	2,87
5	$C_2H_4N_2O_4$	1,364	583,113	602,937	3,4
6	$C_6H_5N_6O_6$	0,57	732,089	699,04	4,51
7	$C_6H_5N_6O_6$	1,5	1001,24	914,972	8,62
8	$C_6H_3N_3O_6$	0,74	758,394	798,96	5,35
9	$C_6H_3N_3O_7$	0,9	796,146	838,907	5,37
10	$C_7H_5N_3O_6$	1	817,82238	779,88	4,64
1,2 - циклотриметилентринитрозоами; 3,4 – бензотрифуроксан; 5 – 1,1-динитроэтан; 6,7 – диаминотринитробензол; 8 – 1,3,5-тринитробензол; 9 – 2,4,6-тринитрофенол (пикриновая кислота); 10 – 10 – 2,4,6-тринитротолуол.					

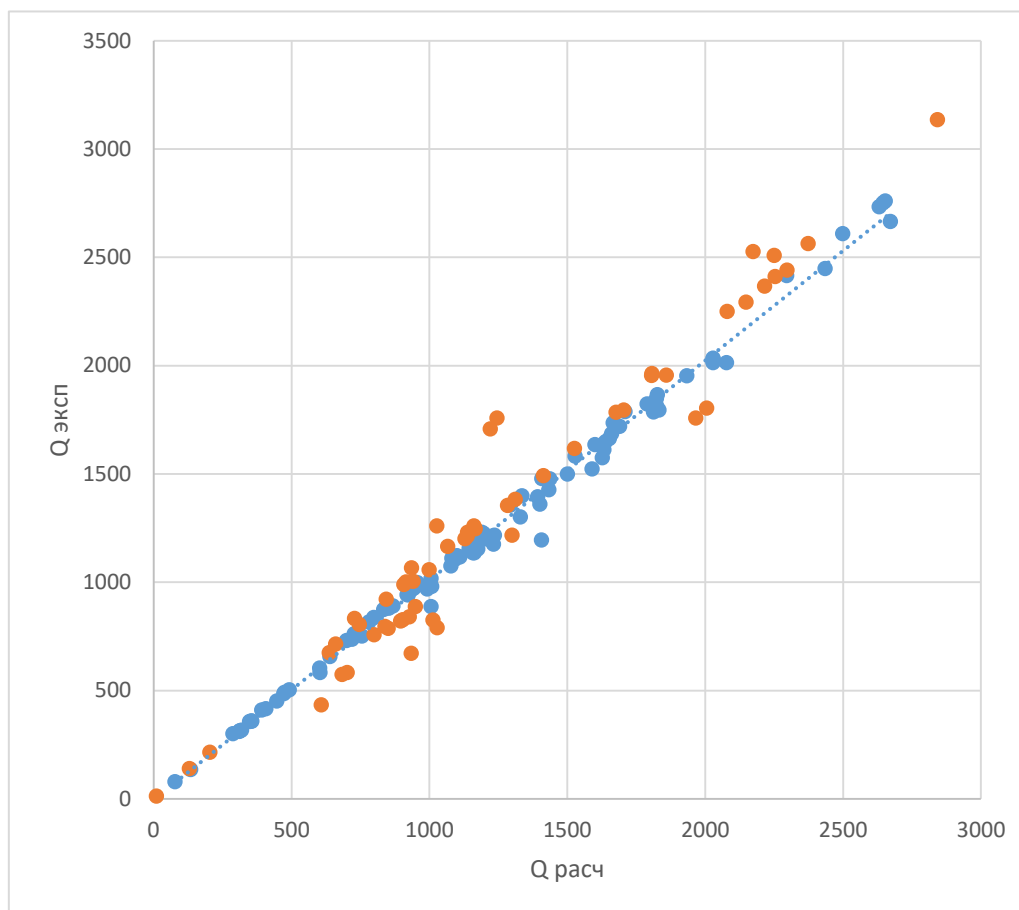


Рис. 70. Диаграмма рассеивания

Можно отметить, что в целом среднее значение ошибки составило 5,578%.

На рис. представлена диаграмма рассеивания, можно сделать вывод о том, что только 143 из 192 анализируемых вещества имеют ошибку менее 5% и они отмечены синими точками на диаграмме.

7.2.3. Сравнение расчётных методов определения теплоты взрыва

Анализируя расчетный методы определения теплоты взрыва, которые были перечислены ранее, можно сказать, что метод Военной инженерной академии им. Ф.Э. Дзержинского и метод ВИА и Института химической физики АН СССР (ИХФ) при их применении предполагают написание уравнения реакции взрывного превращения и количество продуктов взрыва, что сможет сделать не каждый исследователь и архитектор нейронной сети, в данном случае можно

обратиться за помощью к человеку, который хорошо разбирается в предметной области.

Что касается метода Г.А. Авакяна, то его результаты показывают значительную среднюю ошибку от результатов, полученных экспериментальными исследованиями. Метод расчёта при максимальной плотности вещества очень схож на метод Г.А. Авакяна, ведь в нём по умолчанию предполагается, что мы рассматриваем вещество в таком агрегатном состоянии, плотность которого для данного вещества максимальна.

Для метод расчёта при любой заданной плотности понадобился дополнительный параметр в качестве ρ - плотности вещества, что позволило расширить исходный перечень веществ тем, что любое вещество может быть рассмотрено в любом возможном для него агрегатном состоянии.

Поэтому наиболее приемлемым и точным расчётным методом по определению теплоты взрыва высокоэнергетических индивидуальных веществ можно считать метод расчёта при любой плотности.

7.3. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОСЕТИ

Для построения и обучения нейронной сети была выбрана аналитическая платформа «Deductor».

Используемый тип нейронной сети – многослойный персептрон.

На входы сети подаются следующие значения:

1. a - количество углерода
2. b - количество водорода
3. c - количество азота
4. d - количество кислорода
5. ΔH_f^0 - энтальпия образования вещества, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ (справочная величина)
6. ρ – плотность, $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$.

7. M - молярная масса, $\frac{\text{кг}}{\text{моль}}$

8. α_k - кислородный коэффициент, характеристика степени насыщенности молекулы кислородом.

9. K_p - коэффициент реализации

10. $\sum \Delta H_{\text{max}} (\text{ПВ})$ - максимальная суммарная теплота образования продуктов взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

11. Q_{max} - максимальная теплота взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

Выходом является:

Q - теплота взрыва, $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$

Количество скрытых слоев и нейронов подбиралось эмпирическим путем с учетом сложности поставленной задачи. Для их определения было проведено 15 экспериментов. Значения количества скрытых слоев менялось от одного до двух. Количество нейронов в скрытых слоях перебиралось от 3 до 8. Крутизна выбранной активационной функции также менялась, проверялись различные значения меньше или больше 1, но лучшие результаты были достигнуты при значении параметра равном 1. Для каждой модели исследовалось значение ошибки обучения. В результате была выбрана следующая структура модели:

- Количество входов – 11
- Количество скрытых слоев – 2
- Количество нейронов в первом скрытом слое – 3
- Количество нейронов во втором скрытом слое – 2
- Количество выходов – 1

Для обучения нейронной сети был использован метод обратного распространения ошибки.

Поскольку задача решается с помощью нейронных сетей, то необходимо подготовить данные для её обучения. Обучающий набор данных представляет собой набор наблюдений, для которых указаны значения входных и выходных

переменных. Часть такого набора данных для нейронной сети представлен в таблице 21.

Таблица 21

С	Н	N	O	Э	M	p	alfa	Kp	Hmax	Qmax	Qэксп
6	6	6	6	-139,7	0,25815	1,94	0,4	0,876137	1312,56	1172,86	790,4553
3	5	5	8	-380	0,2391	1,6	0,941176	0,912153	1684,2	1304,2	1231,309
6	5	5	6	-97,9	0,243135	1,84	0,413793	0,843341	1290,6	1192,7	1017,958
2	4	2	6	-243,9	0,152062	1,49	1	0,921983	1268,2	1024,3	974,0794
12	5	7	12	57,6	0,439209	1,64	0,45283	0,777219	2471,4	2529	1758,593
14	6	6	12	58,1	0,450232	1,74	0,387097	0,785728	2493,36	2551,46	1804,53
4	6	4	6	-277,6	0,206114	1,52	0,545455	0,82319	1312,56	1034,96	880,2173
4	8	2	7	-414,6	0,196115	1,38	0,583333	0,820858	1553,28	1138,68	1067,423
10	5	3	6	37,3	0,263165	1,65	0,266667	0,751878	1290,6	1327,9	1057,746
4	4	6	6	40	0,232112	1,94	0,6	0,884824	1268,64	1308,64	1137,014
0	5	3	3	-246,4	0,095058	1,63	1,2	1	601,5	355,1	358,3687
1	3	1	2	-74,73	0,06104	1,138	0,571429	0,808804	459,48	384,75	314,3416
1	3	1	2	-64,02	0,06104	0,991	0,571429	0,785309	459,48	395,46	311,786
1	4	0	0	-74,85	0,016043	0,716	0	0,755265	87,84	12,99	13,43377
1	0	4	8	82,3	0,196031	1,623	4	1,676533	393,5	475,8	837,1574
6	4	2	4	-27	0,168108	1,567	0,285714	0,750288	875,04	848,04	675,6812

Для построения нейросетевой модели, обучения нейронной сети и тестирования ее способности к прогнозированию был создан перечень высокоэнергетических индивидуальных веществ и их параметров, в состав которой по результатам изучения открытых источников были включены 192 высокоэнергетических индивидуальных вещества [6, 12, 14, 17].

В состав перечня вошли следующие вещества:

- ДИНА,
- ГНБ,
- Гексил,
- Циануразид,
- Тетразен,
- Эдна,
- и др.

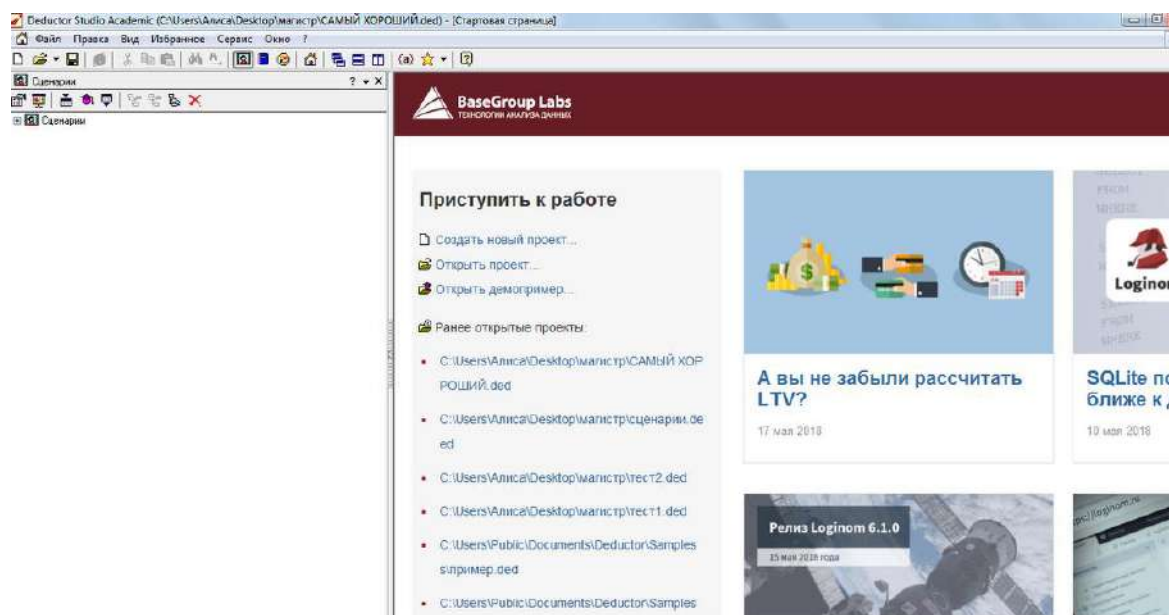


Рис. 71. Стартовая страница

Далее нажав F6 откроется окно «Мастера импорта» (рис.72), где будет предложено открыть текстовый файл или DeductorData файл.

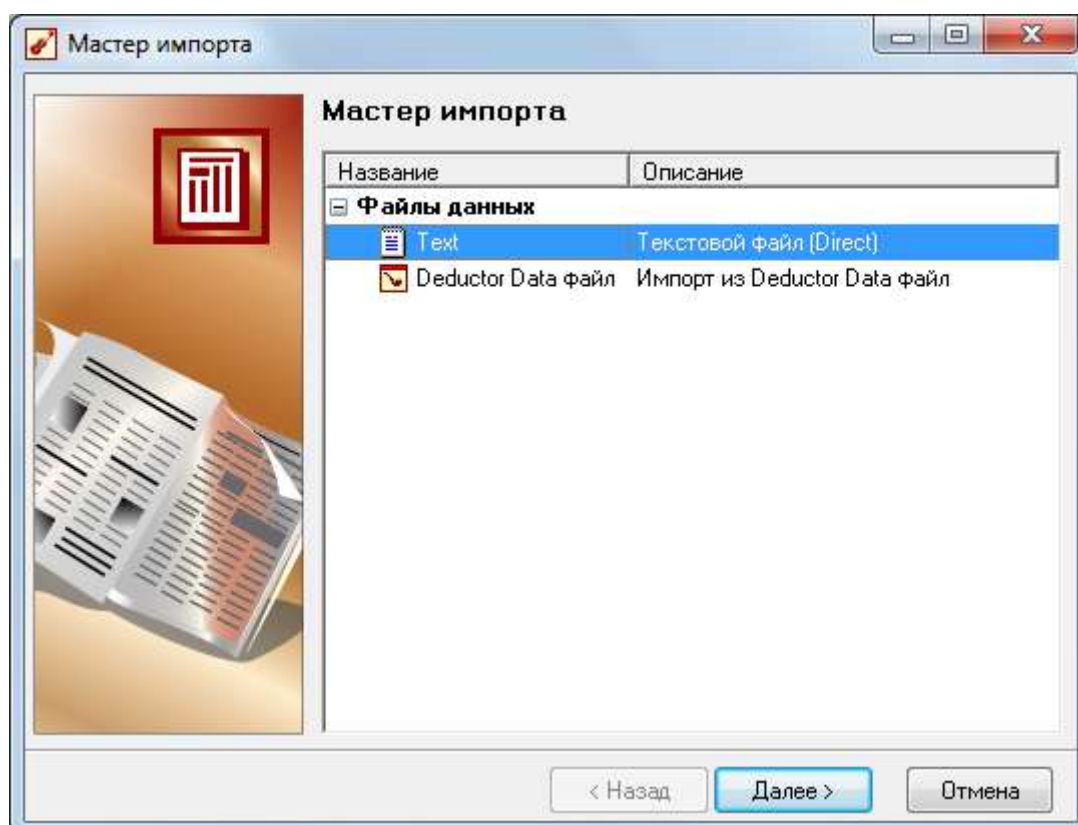


Рис. 72. Мастер импорта

Далее необходимо выбрать файл, содержащий данные для обучения нейросети («Данные.txt»).

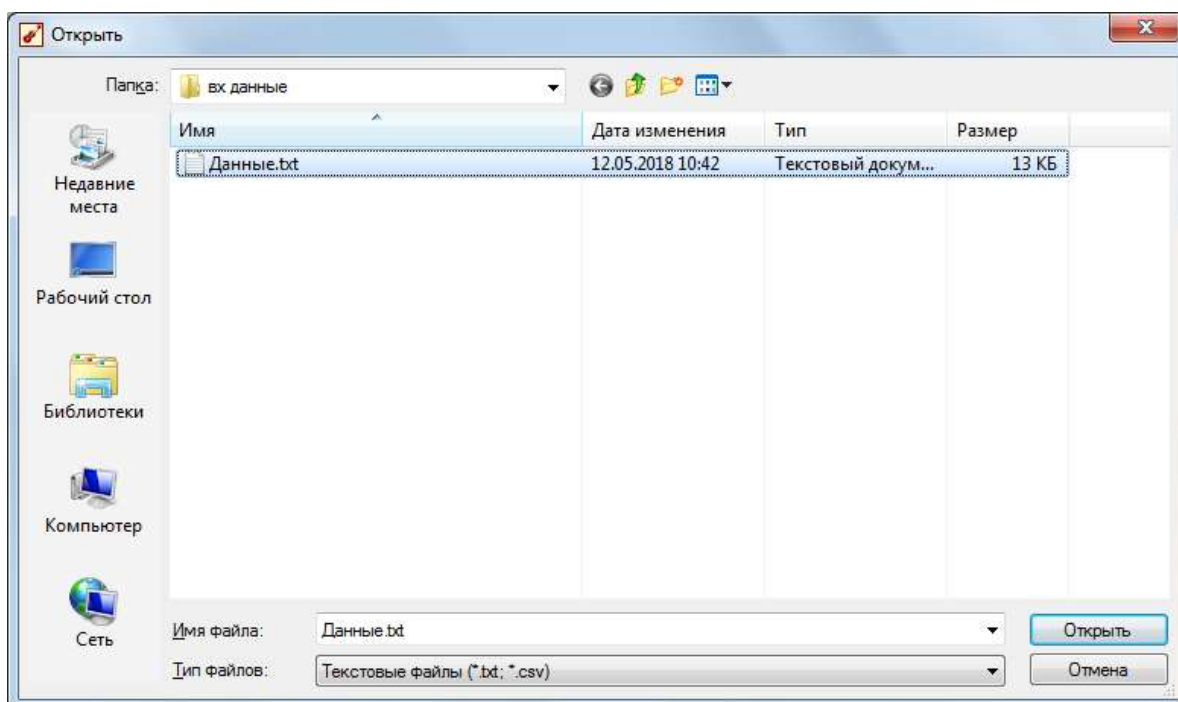


Рис. 73. Открытие .txt файла

Результат на втором шаге мастера импорта представлен на рис. 74. В данном случае нужно начинать импорт со строки 3, так как в текстовом файле первые строки содержали более полное название параметров входных данных, а также единицу их измерения.

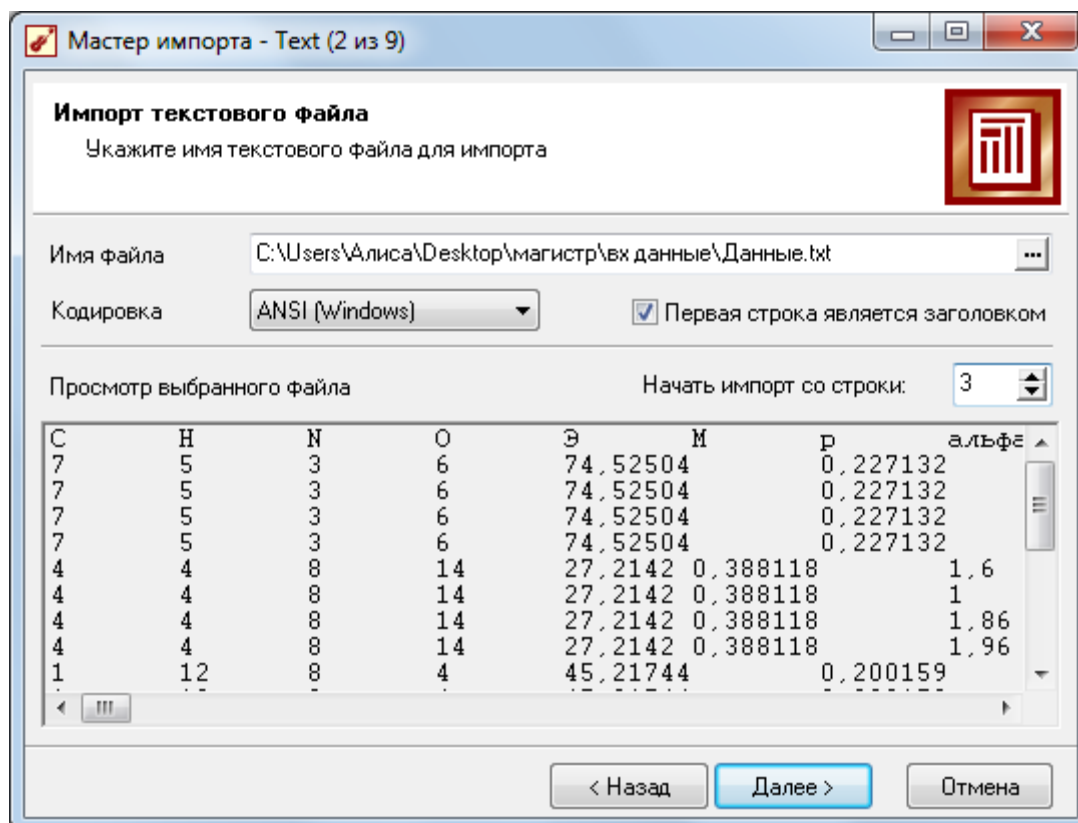


Рис. 74. Импорт .txt файла

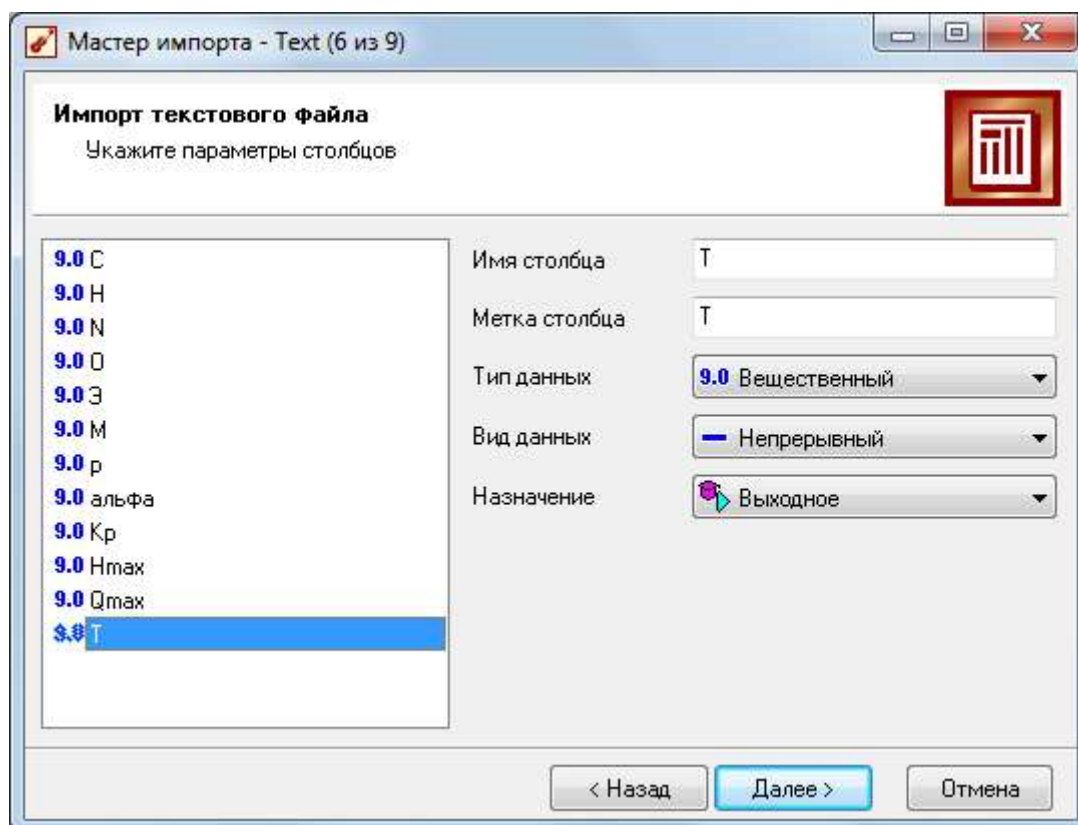


Рис. 75. Настройка параметров столбцов

На следующем шаге мы можем увидеть добавленный файл (рис. 76).

C	H	N	O	Э	М	р	альфа	Кр	Hmax
5	6	8	9	144.01	0.32215	1.975	0.632307652	0.903647961	1902.96
5	8	6	9	131.71	0.236152	1.79	0.642657143	0.881495151	1946.89
5	8	8	6	275.52	0.278168	1.74	0.426571428	0.832027833	1356.49
5	10	6	10	250.83	0.314167	1.72	0.886666667	0.882273889	2167.6
5	10	10	10	32.05	0.370195	1.91	0.666666667	0.911005173	2167.6
5	10	14	8	694.25	0.354225	1.67	0.533333333	0.9665765	1794
5	2	4	6	192.09	0.226104	1.79	0.451536462	0.800027676	1224.72
5	2	8	8	171.54	0.31413	1.89	0.615364615	0.952364486	1616.32
5	2	12	10	774.04	0.402156	1.967	0.768230769	0.896612667	2011.92
5	3	7	11	94.18	0.345128	1.88	0.814814815	0.88813689	2236.69
5	4	6	6	95.32	0.256134	1.91	0.426571428	0.943394738	1366.64
5	4	6	6	87.32	0.256134	1.942	0.426571428	0.956970381	1366.64
5	4	12	14	153.59	0.468168	2.07	1	0.949463913	2642.2
5	8	8	11	112.47	0.368175	1.84	0.6875	0.888108792	2540.48
5	8	8	12	27.32	0.384174	1.864	0.75	0.886325245	2637.28
5	8	8	12	27.32	0.384174	1.925	0.75	0.907797382	2637.28
5	8	12	10	953.54	0.403304	1.935	0.625	0.979693482	2143.69
5	10	8	8	119.95	0.322194	1.7	0.476666667	0.959071682	1794
7	6	8	12	301.29	0.388195	1.9	0.705882353	0.884991648	2493.36
7	7	7	8	152.42	0.317174	1.68	0.457142857	0.817342571	1728.12
7	12	8	8	20.92	0.336221	1.73	0.4	0.862174863	1637.92
8	0	8	16	594	0.464128	1.979	1	0.94414223	3149
8	0	8	16	594	0.464128	2.1	1	0.943677684	3149
8	0	12	4	1903.69	0.328168	1.8	0.25	0.719075927	767.2
8	0	16	6	3894.39	0.496194	1.75	0.375	0.732334549	1164.04
8	4	4	8	457.31	0.28414	1.81	0.444444444	0.915062938	1662.24
8	5	13	6	430.95	0.379213	1.84	0.324324324	0.921445337	1290.6
8	5	13	6	430.95	0.379213	1.865	0.324324324	0.920008859	1290.6
8	12	14	12	483.67	0.49627	1.722	0.545454545	0.899710718	2625.12
10	16	6	19	979.47	0.524261	1.63	0.678571428	0.851062093	4080.56
11	2	12	24	315.06	0.686197	2.063	1.043476361	0.856724574	4668.1
12	2	12	24	237.49	0.696208	2.057	0.96	0.940248145	4767.12
12	4	8	6	493.4	0.386212	1.81	0.307652308	0.790763952	1662.24

Рис. 76. Данные добавленного файла

Нажав на кнопку F7 будет вызван мастер обработки, включающий в себя множество инструментов для анализа и обработки данных. Выбираем «Нейросеть» (рис. 77).

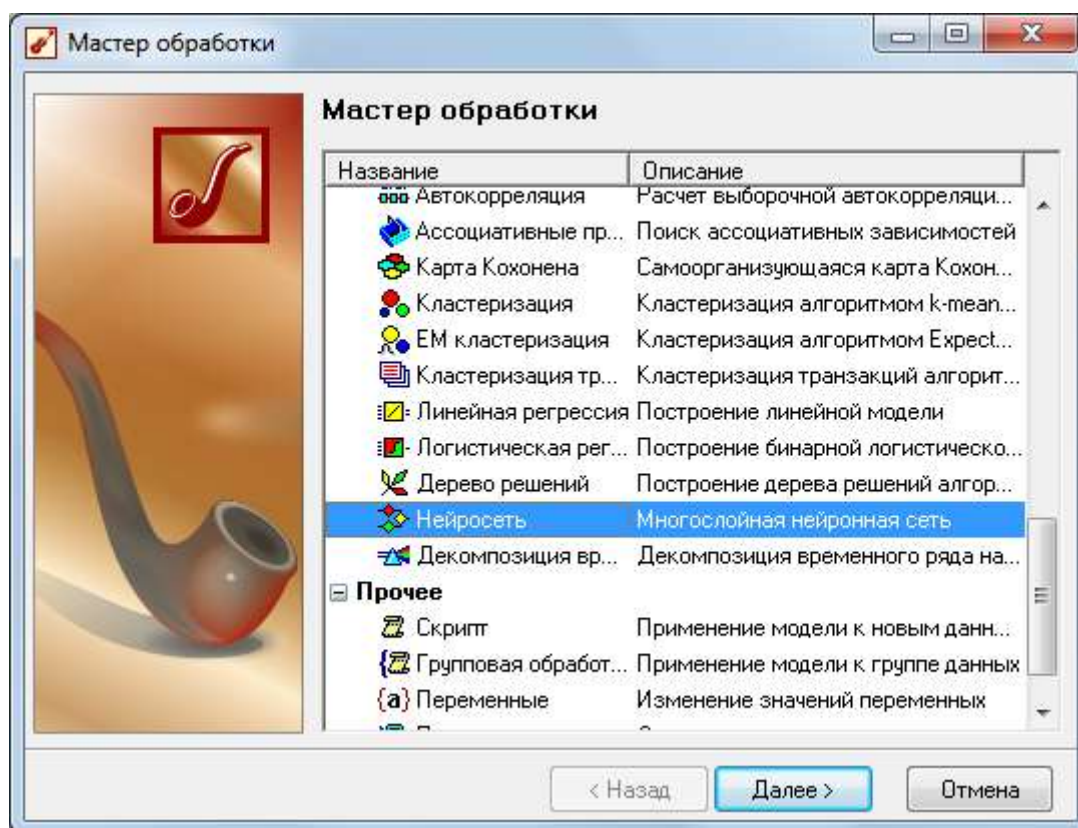


Рис. 77. Мастер обработки

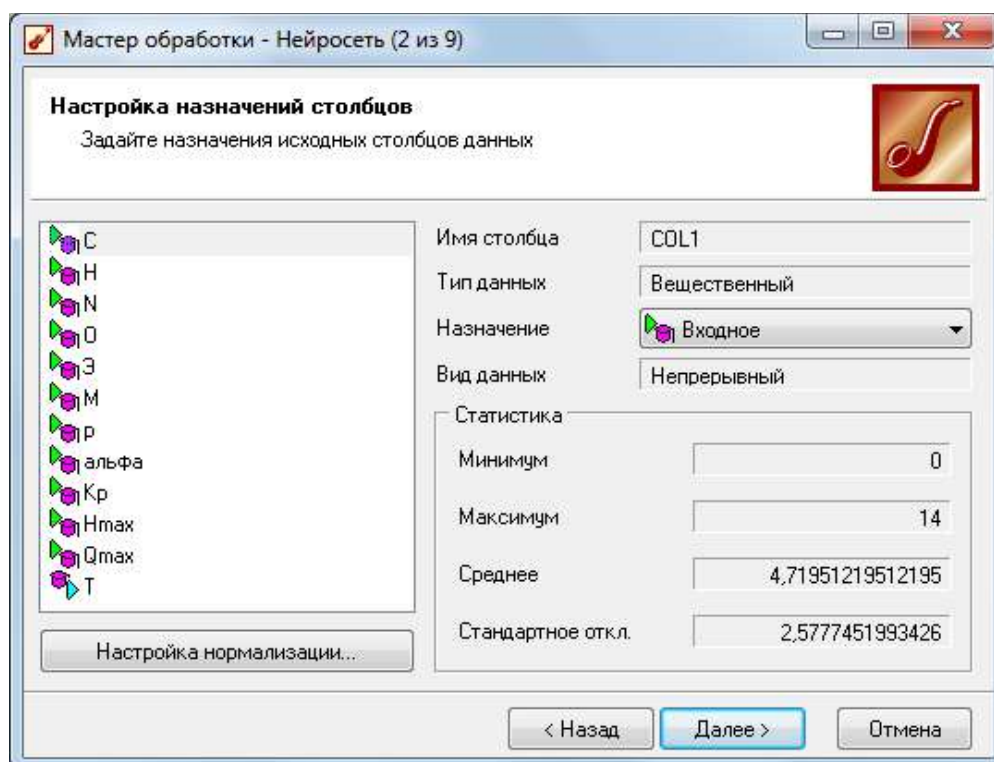


Рис. 78. Настройка назначений столбцов

На следующем шаге исходный набор данных разбивается на обучающее и тестовое множество (рис. 79).

Мастер обработки - Нейросеть (3 из 9)

Разбиение исходного набора данных на подмножества
Настройте разбиение исходного множества данных на обучающее и тестовое множества

Способ разделения исходного множества данных: Случайно

Столбец для разделения исходного множества:

Множество	Размер		Порядок сортировки
	В процентах	В строках	
<input checked="" type="checkbox"/> Обучающее	80,00	131	По возрастанию
<input checked="" type="checkbox"/> Тестовое	20,00	33	По возрастанию
ИТОГО:	100,00	164	

Количество строк (всего) 164

< Назад Далее > Отмена

Рис. 79. Разбиение исходного набора данных на подмножества

На следующем шаге определяется общая структура нейронной сети: выбираются тип активационной функции, количество скрытых слоёв, количество нейронов в каждом из скрытых слоёв. В нашем случае в качестве функции активации была выбрана сигмоида с крутизной равной 1. Скрытых слоёв – 2, количество нейронов в первом слое – 3, во втором – 2.

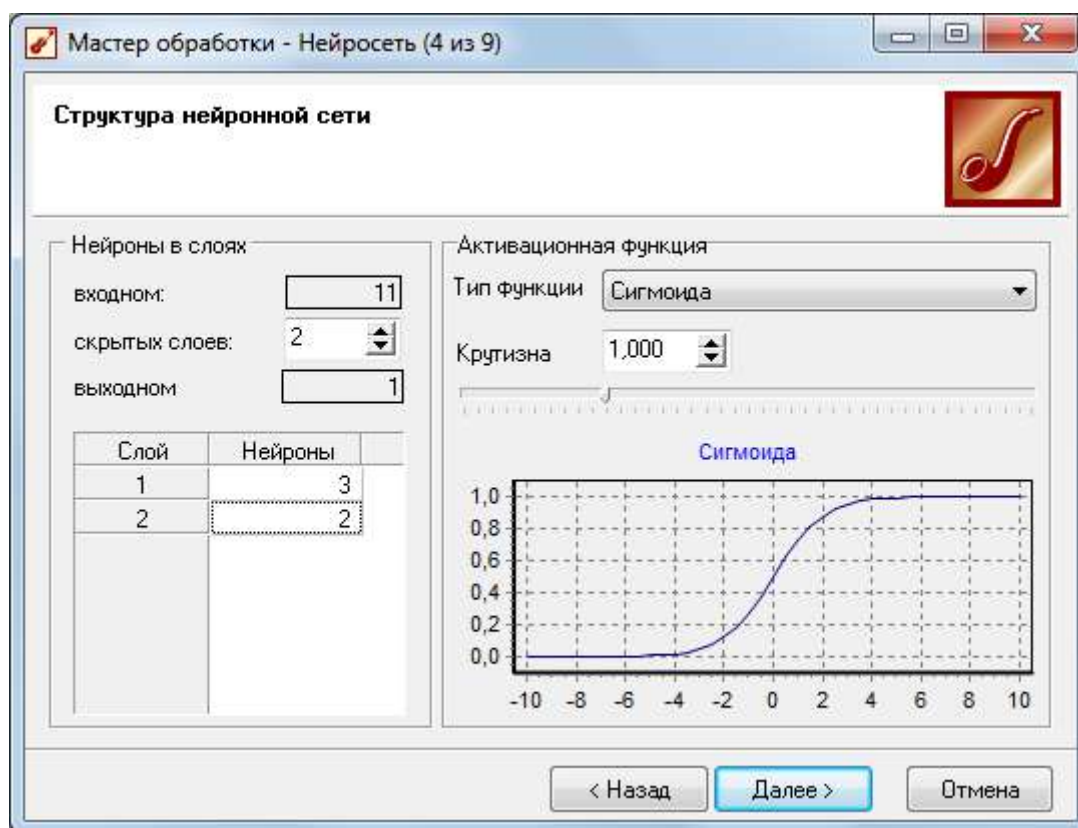


Рис. 80. Структура нейронной сети

На следующем шаге выбираем алгоритм обучения нейронной сети, в нашем случае это алгоритм обратного распространения ошибки (Back-Propagation) со следующим параметрами:

- Скорость обучения – 0,1
- Момент – 0,9

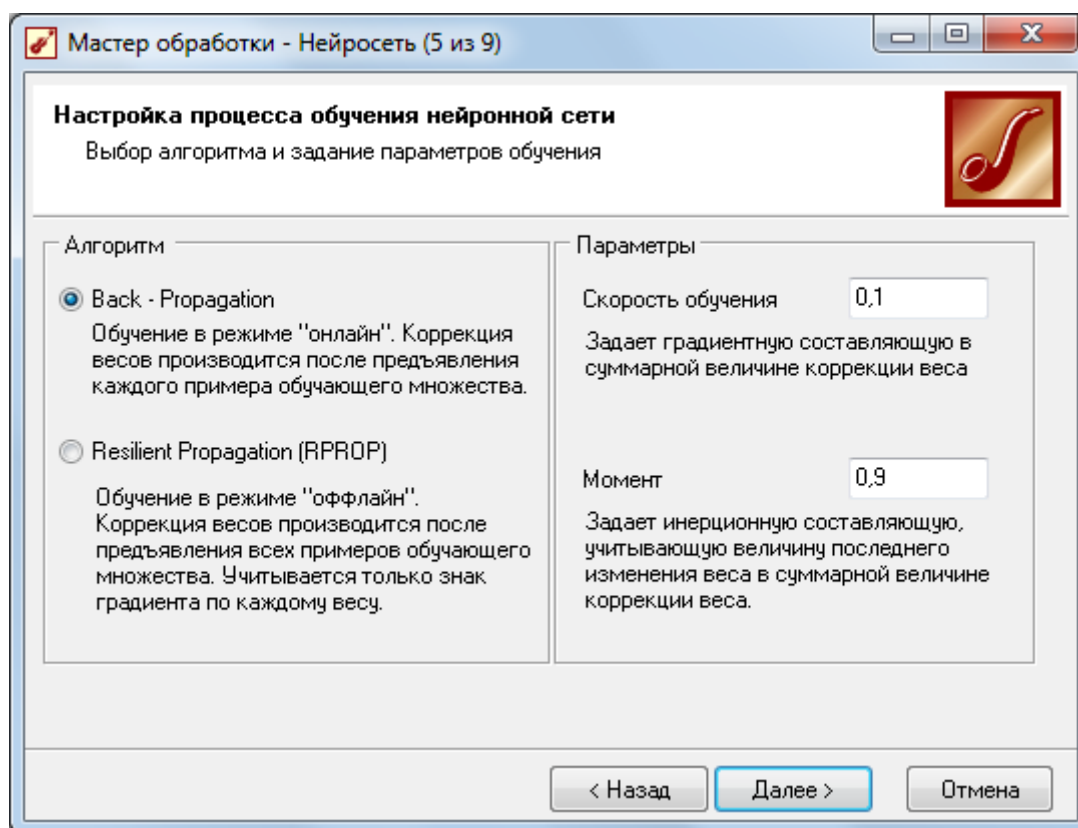


Рис. 81. Настройка процесса обучения нейронной сети

На следующем шаге определяются условия остановки обучения нейронной сети (рис. 82). Есть возможность задания количество эпох, после чего будет произведена остановка либо задать параметр, что ошибка меньше заданного числа. Параметром остановки было выбрано количество пройденных эпох – 30000.

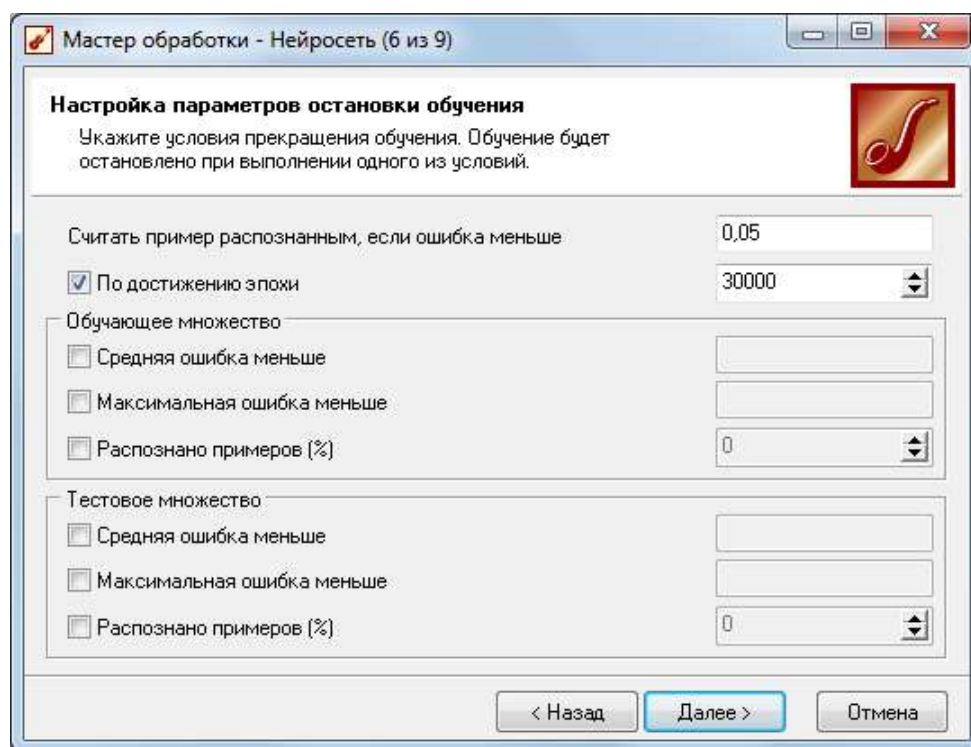


Рис. 82. Настройка параметров остановки обучения

На следующем шаге производится запуск обучения нейронной сети:

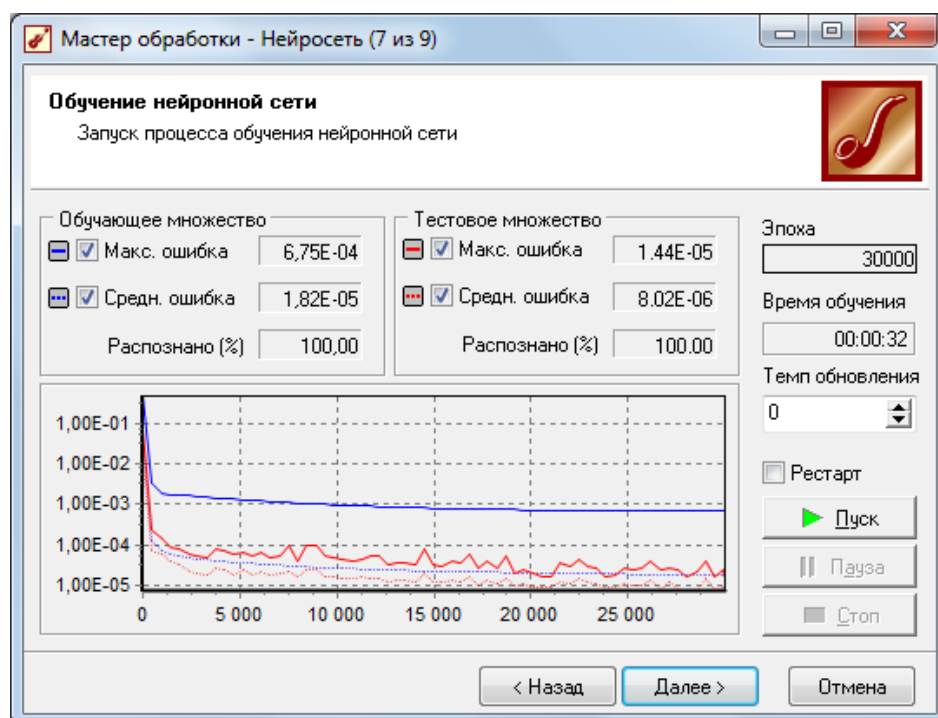


Рис. 83. Обучение нейронной сети

Результат среднеквадратической ошибки (рис. 83), полученной после обучения сети, равен 0,0000182.

На следующем шаге можно выбрать способы отображения результатов (рис. 84).

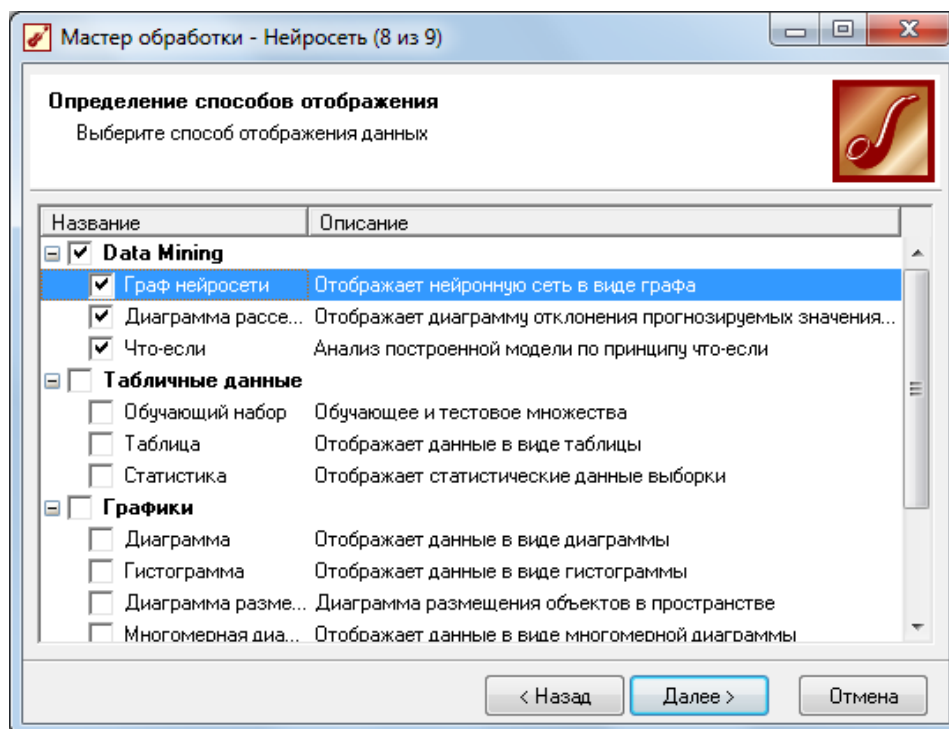


Рис. 84 Определение способов отображения

В итоге в качестве выходных результатов предыдущего шага мы получаем граф нейросети (рис. 85), диаграмму рассеяния (рис. 86).

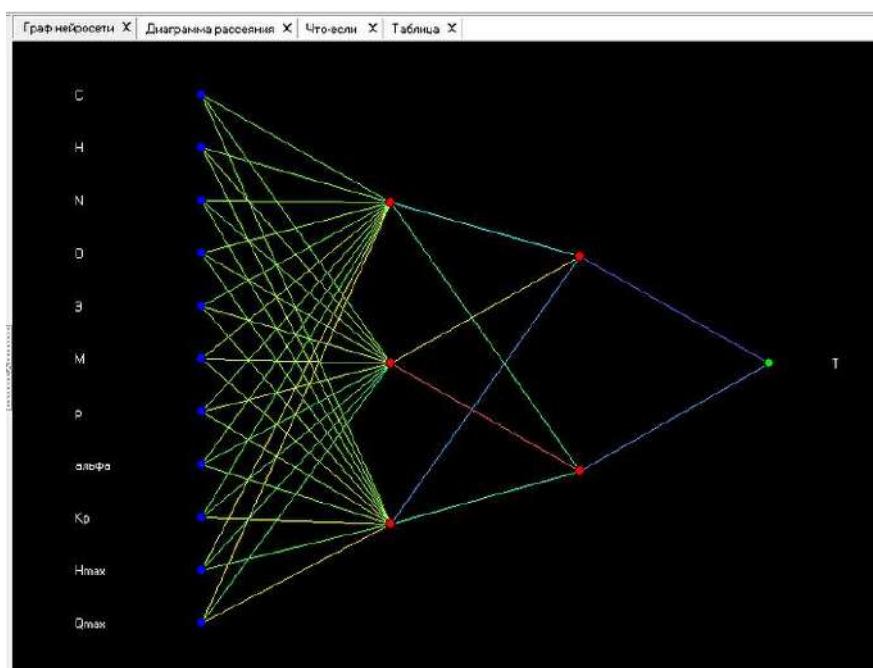


Рис. 85. Структура нейронной сети, вычисляющей теплоту взрыва

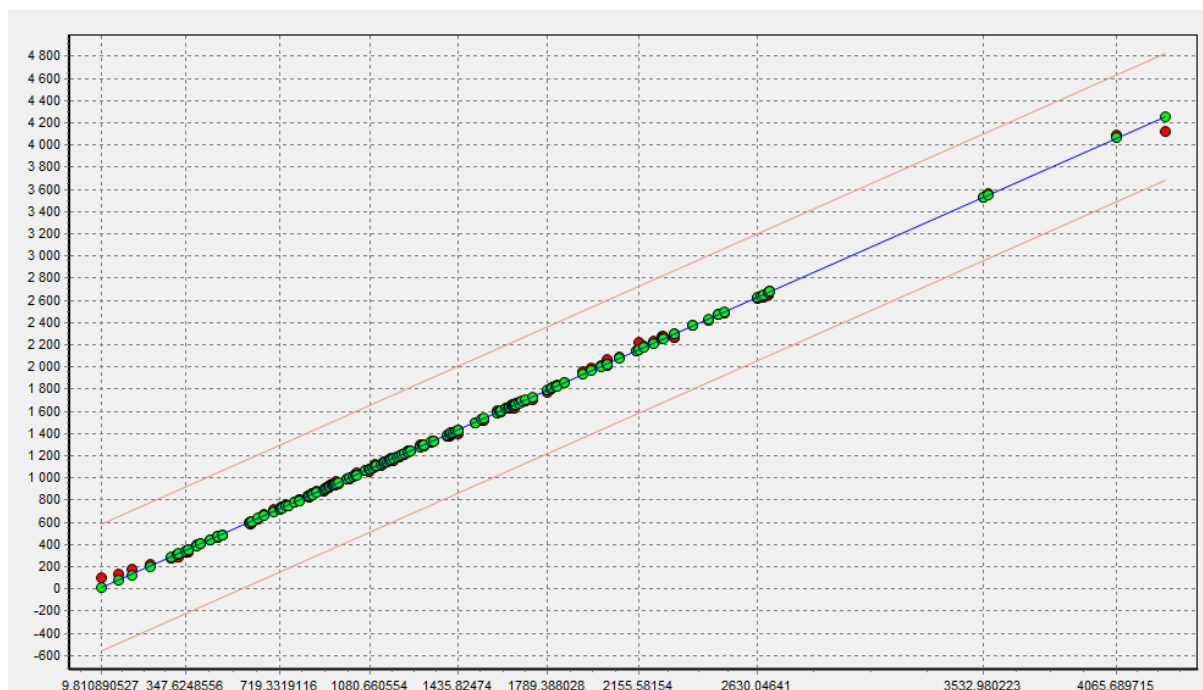


Рис. 86. Диаграмма рассеяния

Для одного и того же файла с данными можно прогнать множество сценариев с различными настройками обучения нейронной сети, так как мы уже подобрали оптимальную архитектуру, то посмотрим все ли входные параметры влияют на качество выходных результатов.

При неиспользовании при обучении таких параметров как молярная масса M , кислородный коэффициент α_k , коэффициент реализации K_p , максимальная суммарная теплота образования продуктов взрыва $\sum \Delta H_{\max}(ПВ)$, максимальная теплота взрыва Q_{\max} среднеквадратическая ошибка выше и равна – 0,000276; 0,0169; 0,000919; 0,000794; 0,000603, 0,00519.

7.4. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Таким образом можно сделать вывод о том, что для определения энергетического параметра высокоэнергетических индивидуальных веществ – теплоты взрыва – использование нейросетевой модели является более предпочтительным.

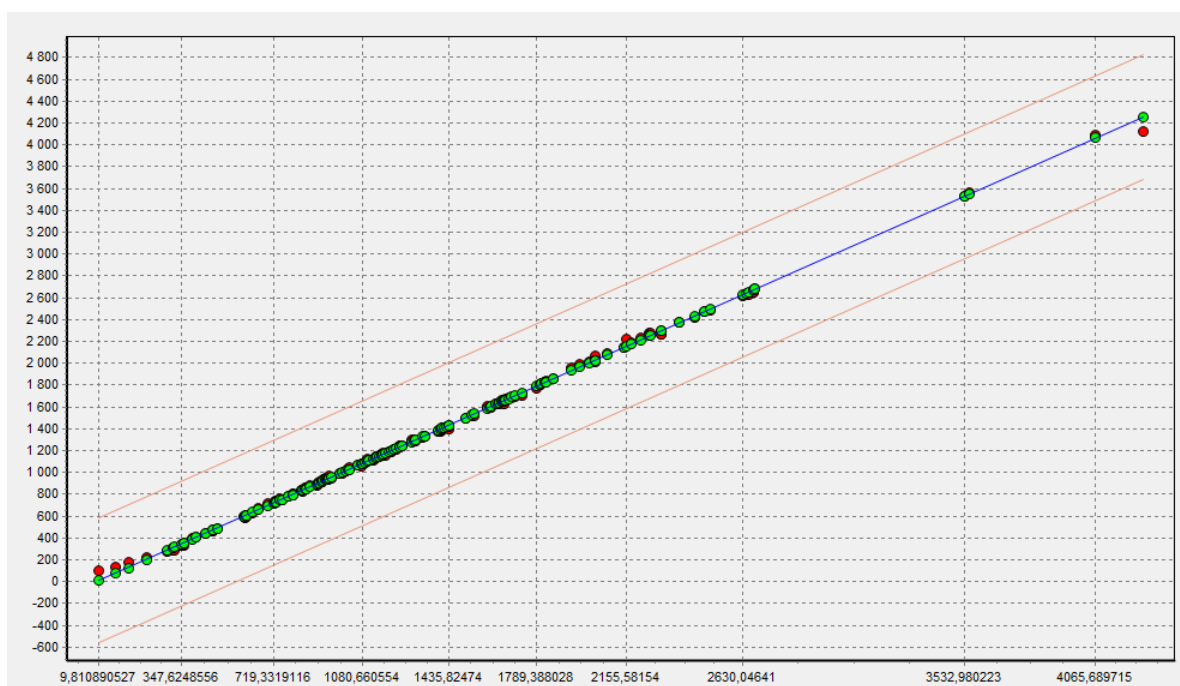
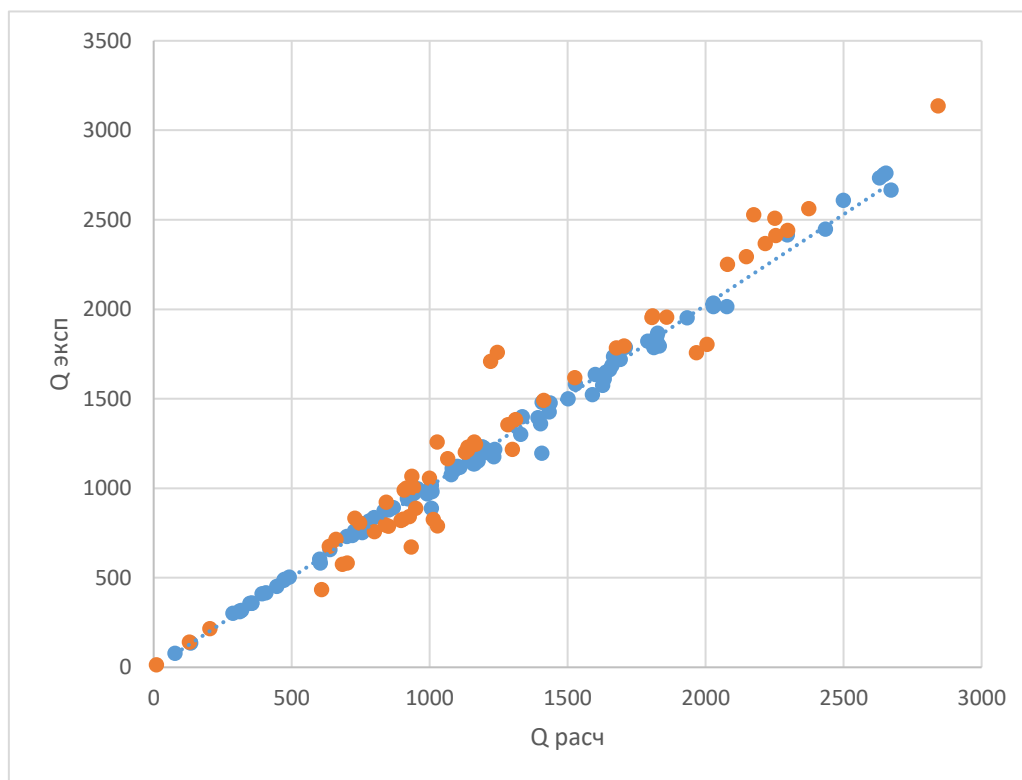


Рис. 87. а) диаграмма рассеяния при методе для любой плотности;
б) диаграмма рассеяния при нейросетевой модели

Таблица 22

№ п/п	Вещество	Q (метод Авакяна) (кДж/моль)	Q (метод для любой плотности) (кДж/моль)	Q (нейросеть) (кДж/моль)	Q (экспер.) (кДж/моль)
1	$C_9H_{18}N_6O_6$	1160,22 (7,91%)	1160,63 (7,88%)	1284,71 (1,97%)	1259,85
2	$C_6H_6N_{12}O_{12}$	2183,47 (20,12%)	2630,046 (3,79%)	2720,36 (0,48%)	2733,55
3	$C_5H_6N_8O_9$	1224,735 (19,64%)	1589,47 (4,29%)	1521,38 (0,18%)	1524,12
4	$C_3H_4N_6O_7$	986,27 (28,73%)	1310,89 (5,28%)	1389,46 (0,4%)	1383,9
5	$C_3H_5N_5O_8$	1007,54 (18,17%)	1152,78 (6,38%)	1154,56 (6,23%)	1231,31
6	$C_4H_8N_8O_8$	1341,41 (16,78%)	1532,82 (4,91%)	1700,85 (5,52%)	1611,93
7	$C_4H_8N_2O_7$	718,93 (32,65%)	934,69 (12,43%)	979,18 (8,27%)	1067,42

1- циклотриацетонтрипероксид; 2 - изовюрцитан; 3 - 2,5,7,9-Тетранитро-2,5,7,9-тетраазабицикло [4.3.0]нонан-8-он (К-56) ; 4 - 2,4,6-Тринитро-2,4,6-триазациклогексанон; 5 - циклотриацетонтрипероксид; 6 - 1,3,5,7-тетранитро-1,3,5,7-тетразокан (октоген); 7 - диэтиленгликольдинитрат

7

7.5. РУКОВОДСТВО ПРОГРАММИСТА

Для реализации задачи прогнозирования теплоты взрыва высокоэнергетических индивидуальных веществ разработано программное обеспечение по расчёту данного показателя по методу Г.А.Авакяна и методу для любой плотности.

Структурная схема программного обеспечения изображена на рис. 88 и рис. 89.

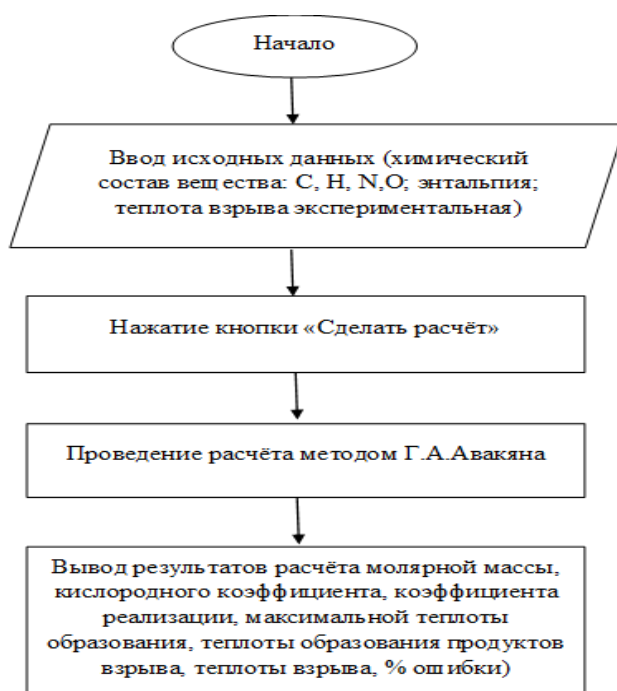


Рис. 88. Структурная схема программного обеспечения. Метод Г.А.Авакяна



Рис. 89. Структурная схема программного обеспечения. Метод для любой плотности

В качестве среды разработки программного обеспечения использовался пакет Microsoft Visual Studio 2017. В качестве основной технологии для разработки

оконного приложения использовался компонент WindowsForms. Программное обеспечение написано на объектно-ориентированном языке программирования C#.

7.6. РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Руководство пользователя для расчёта теплоты взрыва по методу Авакяна

На рис.90 представлено главное окно программы для расчёта теплоты взрыва по методу Авакяна.

Расчёт параметра методом Авакяна

Химический состав вещества

С	<input type="text"/>	М	<input type="text"/>	Теплота взрыва экспериментальная	<input type="text"/>	(кДж/моль)
Н	<input type="text"/>	(кг/моль)				
Н	<input type="text"/>	Кислородный коэффициент	<input type="text"/>			
О	<input type="text"/>	Коэффициент реализации	<input type="text"/>	Сделать расчёт		

Энтальпия (кДж/моль)

Максимальная теплота образования (кДж/моль)

Теплота взрыва расчетная

Теплота образования продуктов взрыва (кДж/моль)

% ошибки

Рис. 90. Главное окно программы. Расчёт параметра методом Авакяна

Необходимо заполнить поля «С», «Н», «N», «О» целочисленными данными, а также поля «Энтальпия (кДж/моль)», и «Теплота взрыва экспериментальная» числами с плавающей точкой. Необходимо учитывать единицу измерения. Вводятся данные, соответствующие требуемой задаче.

Программа позволит расчётным методом узнать теплоту взрыва вещества, а также % ошибки от результата, полученного экспериментальным путём. Для этого нужно нажать на кнопку «Сделать расчёт».

На рис.91 изображено окно программы с заполненными полями для расчета теплоты взрыва и % ошибки на примере вещества 2,4,6-тринитротолуола.

Химический состав вещества

C	7	M (кг/моль)		Теплота взрыва экспериментальная	980	(кДж/моль)
H	5	Кислородный коэффициент				
N	3	Коэффициент реализации		Сделать расчёт		
O	6					

Энтальпия (кДж/моль) -74,5

Максимальная теплота образования (кДж/моль)

Теплота взрыва расчетная

Теплота образования продуктов взрыва (кДж/моль)

% ошибки

Рис. 91. Главное окно программы с заполненными исходными данными

При нажатии на кнопку «Сделать расчёт» можно увидеть следующие результаты для выбранного вещества:

Химический состав вещества

C	7	M (кг/моль)	0,227132	Теплота взрыва экспериментальная	980	(кДж/моль)
H	5	Кислородный коэффициент	0,364			
N	3	Коэффициент реализации	0,746626	Сделать расчёт		
O	6					

Энтальпия (кДж/моль) -74,5

Максимальная теплота образования (кДж/моль) 1290,60

Теплота взрыва расчетная 906,46 (кДж/моль)

Теплота образования продуктов взрыва (кДж/моль) 963,60

% ошибки 7,50

Рис. 92. Главное окно программы с результатами

Руководство пользователя для расчёта теплоты взрыва по методу для любой плотности

На рис.93 представлено главное окно программы для расчёта теплоты взрыва по методу расчёта при любой заданной плотности.

Расчёт параметра

Химический состав вещества

C

H

N

O

M (кг/моль)

Кислородный коэффициент

Коэффициент реализации

Теплота взрыва экспериментальная (кДж/моль)

Сделать расчёт

Энтальпия (кДж/моль)

Максимальная теплота образования (кДж/моль)

Теплота взрыва расчетная (кДж/моль)

Плотность (г/см³)

Максимальная теплота взрыва (кДж/моль)

% ошибки

Рис. 93. Главное окно программы. Расчёт параметра

В данном случае необходимо заполнить поля «C», «H», «N», «O» целочисленными данными, а также поля «Энтальпия (кДж/моль)», «Плотность (г/см³)» и «Теплота взрыва экспериментальная» числами с плавающей точкой. Необходимо учитывать единицу измерения. Вводятся данные, соответствующие требуемой задаче.

Программа позволит расчётным методом узнать теплоту взрыва вещества, а также % ошибки от результата, полученного экспериментальным путём.

На рис.94 изображено окно программы с заполненными полями для расчета теплоты взрыва и % ошибки на примере вещества гексогена.

Расчёт параметра

Химический состав вещества

C	6	M	(кг/моль)		Теплота взрыва экспериментальная	758,3938119	(кДж/моль)
H	3	Кислородный коэффициент					
N	3	Коэффициент реализации					
O	6						

Энтальпия (кДж/моль)

37,6812

Максимальная теплота образования (кДж/моль)

Максимальная теплота взрыва (кДж/моль)

Теплота взрыва расчетная

(кДж/моль)

Плотность (г/см³)

0,74

% ошибки

Сделать расчёт

Рис. 94. Заполнение полей для расчета теплоты взрыва и % ошибки

После ввода данных, необходимо нажать на кнопку «Сделать расчёт», после этого будут вычисляться оставшиеся параметры вещества в полях: «М (кг/моль)», «Кислородный коэффициент», «Коэффициент реализации», «Максимальная теплота образования (кДж/моль)», «Максимальная теплота взрыва (кДж/моль)», «Теплота взрыва расчетная (кДж/моль)», «% ошибки». Результат расчёта изображен на рис.95.

Расчёт параметра

Химический состав вещества

C	6	M	(кг/моль)	0,213105	Теплота взрыва экспериментальная	758,3938119	(кДж/моль)
H	3	Кислородный коэффициент		0,444			
N	3	Коэффициент реализации		0,622069			
O	6						

Энтальпия (кДж/моль)

37,6812

Максимальная теплота образования (кДж/моль)

1246,68

Теплота взрыва расчетная

798,96

(кДж/моль)

Плотность (г/см³)

0,74

Максимальная теплота взрыва (кДж/моль)

1284,36

% ошибки

5,35

Сделать расчёт

Рис. 95. Главное окно программы с результатами

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Проведено теоретическое обоснование, разработан подход, составлен комплекс программ, выполнено прогнозирование параметров высокоэнергетических веществ (фугасность, детонация, теплота образования, энтальпия сгорания, теплоты взрыва индивидуальных веществ);

2. Нейронная сеть, построенная в ExcelNeuralPackage, прогнозирует значение фугасности точнее численного метода (множественной регрессии).

3. При прогнозировании детонации: среднее значение модулей разности между экспериментальными данными и полученными с помощью расчетного метода Айзенштадта для всей выборки равна: 485,925. Для результатов прогнозирования: 291,97515.

Средняя ошибка результатов: ошибка моделирования = 6,9427%, ошибка прогнозирования = 4,3152%.

75% результатов полученных прогнозированием с помощью искусственной нейронной сети входят в доверительный интервал, в то время как лишь 47,5% результатов моделирования расчетным методом Айзенштадта не вышли за доверительный интервал. Это свидетельствует о состоятельности нейросетевого подхода в прогнозировании параметров быстропротекающих процессов.

4. Результаты прогноза энтальпии сгорания индивидуальных веществ удовлетворительные, т.к. спрогнозированные значения попадают в интервал между величинами низшей и высшей энтальпий сгорания.

5. Для определения энергетического параметра высокоэнергетических индивидуальных веществ – теплоты взрыва – использование нейросетевой модели является более предпочтительным.

6. Применение прогнозирования параметров высокоэнергетических веществ позволит проводить анализ полученных данных при синтезировании новых веществ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пироправка. Справочник по взрывчатым веществам, порохам и пиротехническим составам. Издание 6. Москва 2012
2. А. Г. Горст Пороха и взрывчатые вещества. Издание 3. Москва 1972.
3. Л. Г. Комарцова, А. В. Максимов «Нейрокомпьютеры», МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2004 г.
4. Миркес Е. М., Нейрокомпьютер. Проект стандарта. — Новосибирск: Наука, 1999.
5. Численные методы в задачах физики быстропротекающих процессов/А.В. Бабкин, В.И. Колпаков, В.Н. Охитин, В.В. Селиванов. — 2-е изд., испр. — Москва: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006. — 520с. : ил. (Прикладная механика сплошных сред: В 3 т. / Науч. Ред. В.В. Селиванов; Т. 3).
6. Круглов, В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика /В.В. Круглов, В.В. Борисов - Москва: Изд-во "Горячая линия - Телеком", 2002 с.: 382с.
7. Федотов, В.Х. Нейронные сети в MSExcel: Метод.указания к практ. занятиям и лаб. работам - Чебоксары: Чуваш.ун-т, 2004. 72с.
8. Айзенштадт, И. Н. Физика горения и взрыва. 1976. Т.12. №5 С. 758-763.
9. Трубников А.А, Козырев Н.В. Анализ экспресс методов расчета скорости детонации С-Н-Н-О конденсированных взрывчатых веществ // Ползуновский вестник - 2009 - №3 с. 121-125
10. Ляшева С.А., Шлеймович М.П., Кирпичников А.П., Гришина О.Д. Нейросетевое прогнозирование фугасности индивидуальных взрывчатых веществ // Вестник Казанского технологического университета. 2015. Т. 18. № 17. С. 171-173.
11. Ляшева С.А., Шлеймович М.П., Кирпичников А.П., Леонова И.В. Автоматизированная система расчёта энтальпии сгорания индивидуальных веществ // Вестник Казанского технологического университета. 2017. т. 20. № 17. с. 86-90;
12. Ляшева С.А., Шлеймович М.П., Кирпичников А.П., Леонова И.В. Нейросетевое прогнозирование термодинамических характеристик

индивидуальных веществ // Вестник Казанского технологического университета. 2017. Т. 20. № 18. с. 111-114.

13. Передерин, Ю.В. Количественный анализ и прогнозирование свойств компонентов энергетических конденсированных систем – бризантных взрывчатых веществ / Ю.В. Передерин, Н.И. Попок // Ползуновский вестник. – 2010. – № 4-1. – С. 126-130.

14. Сугак, Н.Ю. Расчёт взрывчатых характеристик ВВ: учебное пособие / Н.Ю. Сугак, С.В. Мочалов – Бийск: Изд-во алт. гос. техн. ун-та, 2013. – 106с.

15. Высокоэнергетические наполнители твердых ракетных топлив и других высокоэнергетических конденсированных систем. Физико-, термохимические характеристики, получение, применение: справочник / В.М. Зиновьев, Г.В. Куценко, А.С. Ермилов, И.И. Болдавин. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011. – 253 с.

16. Кирпичников А.П., Ляшева С.А., Шипина О.Т. Автоматизированная система моделирования параметров быстропротекающих процессов // Вестник Казанского технологического университета: Т. 17 №13; М-во образ. и науки России, Казан.нац.исслед.технолог.ун-т. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2014. – С.349-352.

17. Ляшева С.А., Шлеймович М.П., Кирпичников А.Р., Спицин А.Н. Прогнозирование скорости детонации индивидуальных взрывчатых веществ с использованием нейронной сети // Вестник Казанского технологического университета. 2015. Т. 18. № 15. С. 226-229.

18. Расчетный практикум по физической химии: Учебное пособие. / Под ред. А. ГЛ. Беляева — СПб.: Издательство СПХФА, 2006. — 48 с.

19. Андреев, К.К. Теория взрывчатых веществ / К.К.Андреев, А.Ф. Беляев. – М.: Оборонгиз, 1960. – 594 с.

20. Андреев, К.К. Теория взрывчатых веществ: учебник для химико-технологических специальностей вузов / К.К. Андреев, А.Ф. Беляев. – М.: Оборонгиз, 1960. – 560 с.

21. Физика взрыва: монография / под ред. К.П. Станюковича. – 2-е изд., перераб. – М.: Наука, 1975. – 704 с.
22. Демидов, П.Г. Горение и свойства горючих веществ / П.Г. Демидов, В.А. Шандыба, П.П. Щеглов. – 2-е изд., перераб. – М.: Химия, 1981. – 248 с.
23. Зеленкин, В.Г. Теория горения и взрыва: конспект лекций / В.Г. Зеленкин, С.И. Боровик, М.Ю. Бабкин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2011. – 166 с.
24. Андросов, А.С. Примеры и задачи по курсу «Теория горения и взрыва»: учебное пособие / А.С. Андросов, Е.П. Салеев. – М.: Академия ГПС МЧС России, 2008. – 80 с.
25. Бабкин, М.Ю. Теория горения и взрыва: учебное пособие к практическим занятиям / М.Ю. Бабкин, С.И. Боровик. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2012. - 62 с.
26. Горбонос М.Г. Методические указания по практическим занятиям и задания для самостоятельной работы по дисциплине "Технология и безопасность взрывных работ" для студентов специальности 130403 "Открытые горные работ". Часть 1. – Петрозаводск, Петрозаводский государственный университет, 2011 – 51с.
27. И.В. Леонова, С.А. Ляшева Применение нейронных сетей в прогнозировании характеристик быстропротекающих процессов Перспективные информационные технологии (ПИТ 2016): труды Международной научно-технической конференции / под ред. С.А. Прохорова. – Самара: Издательство Самарского научного центра РАН, 2016, С.111-115.
28. Боровиков, В.П. Нейронные сети. StatisticaNeuralNetworks. Методология и технологии современного анализа данных. Издание 2-е, перераб. и доп. – М.: Горячая линия-Телеком, 2008. – 392 с.
29. Илларионов, М.Г. Прогнозирование на основе аппарата нейронных сетей / М.Г. Илларионов, А.П. Кирпичников, Р.Р. Латыпова Вестник Казанского технологического университета. 2012. - Т. 15. № 1. – С. 163-164.

30. Высокоэнергетические наполнители твердых ракетных топлив и других высокоэнергетических конденсированных систем. Физико-, термохимические характеристики, получение, применение: справочник / В.М. Зиновьев, Г.В. Куценко, А.С. Ермилов, И.И. Болдавин. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011. – 253 с.

31. Илларионов, М.Г. Прогнозирование на основе аппарата нейронных сетей / М.Г. Илларионов, А.П. Кирпичников, Р.Р. Латыпова Вестник Казанского технологического университета. 2012. - Т. 15. № 1. – С. 163-164.

32. Пироправка. Справочник по взрывчатым веществам, порохам и пиротехническим составам. Издание 6. Москва 2012

33. Теплофизические свойства веществ. Справочник. Под ред. проф. Н.Б.Варгафтика. - М. - Л.: Госэнергоиздат, 1956. - 367 с.

34. Алемасов В.Е., Груздева З.Х., Дрегаллин А.Ф., Ляшев А.С. Погрешности термодинамического расчета при неточных значениях термодинамических свойств индивидуальных веществ. - В Сб.: Тепловые процессы и свойства рабочих тел двигателей летательных аппаратов. Казань, 1975: Вып.186.-С. 5-9.

35. Расчет теплотворной способности топлива: методические указания к расчётной работе по химической термодинамике /А.А. Литманович, Е.В. Новоселова, Г.Ю. Остаева, И.М. Паписов, Е.В. Полякова. – М.: МАДИ, 2014. – 20 с.

36. Портола В.А. Расчет процессов горения и взрыва: учебное пособие /В.А. Портола, Н.Ю. Луговцова, Е.С. Торосян; Юргинский технологический институт. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2012. – 108 с.

37. Ляшева С. А. Автоматизированная система исследования параметров быстропротекающих процессов. Перспективные информационные технологии (ПИТ 2015), Том 1: труды Международной научно-технической конференции /

под ред. С.А. Прохорова. – Самара: Издательство Самарского научного центра РАН, 2015. – 360 с.

38. Yaws, Carl L. Handbook of chemical compound data for process safety: comprehensive safety and health-related data for hydrocarbons and organic chemicals : selected data for inorganic chemicals 1 Carl L. Yaws. p. cm. - (Library of physico-chemical property data) Chemicals-Safety measures. I. Title. 11. Series. TP149.Y38 1997 660'.2804-d~2 1

39. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс] / This site provides thermochemical, thermophysical, and ion energetics data compiled by NIST under the Standard Reference Data Program. Режим доступа <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

40. PubChem [Электронный ресурс] / Open chemistry database. Режим доступа <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/search/>

41. V. A. Shlyapochnikov, A. E Evtushenko, B. B. Smirnov Variation of physicochemical properties in the aggregates of structural isomers. Russian Chemical Bulletin, Vol. 44, No. 5, May, 1995

42. Расчетный практикум по физической химии: Учебное пособие. / Под ред. А. Г. Л. Беляева – СПб.: Издательство СПХФА, 2006. – 48 с.

43. Ляшева, С.А. Нейросетевое прогнозирование параметров быстропротекающих процессов / С.А. Ляшева, М.П. Шлеймович // Аналитическая механика, устойчивость и управление Труды XI Международной Четаевской конференции, посвященной 115-летию со дня рождения Н.Г. Четаева и памяти академика АН РТ Т.К. Сиразетдинова – 2017. – С.118-123.

44. Ляшева, С.А. Прогнозирование параметров быстропротекающих процессов с использованием нейронных сетей / С.А. Ляшева, М.П. Шлеймович // Информационные технологии и математическое моделирование (ИТММ-2017) Материалы XVI Международной конференции имени А.Ф. Терпугова – 2017. – С.89-94.

45. Леонова, И.В. Применение нейронных сетей в прогнозировании характеристик быстропротекающих процессов / И.В. Леонова, С.А. Ляшева //

Перспективные информационные технологии труды Международной научно-технической конференции. - 2016. - С.111-115

46. Спицин, А.Н. Нейросетевое прогнозирование фугасности высокоэнергетических веществ / А.Н. Спицин, С.А. Ляшева // Информатика: проблемы, методология, технологии материалы XVI Международной научно-методической конференции. Под редакцией Тюкачева Н.А. - 2016. - С.264-268.

47. Ляшева, С.А. Сравнительный анализ результатов математического моделирования и нейросетевого прогнозирования параметров быстропротекающих процессов / С.А. Ляшева, А.Н. Спицин // Молодежь и XXI век - 2016 Материалы VI Международной молодежной научной конференции: в 4-х томах. Ответственный редактор Горохов А.А. - 2016. - С.121-123.

48. Леонова, И.В. Прогнозирование энтальпии образования высокоэнергетических ВЕЩЕСТВ / И.В. Леонова, С.А. Ляшева // Информатика: проблемы, методология, технологии материалы XVI международной научно-методической конференции. - 2016. - С.159-164.

49. Ляшева, С.А. Нейросетевое прогнозирование параметров быстропротекающих процессов / С.А. Ляшева, О.Д. Гришина // Информационные технологии и нанотехнологии Материалы Международной конференции и молодежной школы. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева (Национальный исследовательский университет)». - 2015. - С.171-174.

50. Ляшева, С.А. Автоматизированная система исследования параметров быстропротекающих процессов / С.А. Ляшева // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2015) труды Международной научно-технической конференции. СГАУ. - 2015. - С.91-94.

51. Спицин, А.Н. Автоматизированная система моделирования параметров быстропротекающих процессов на основе экспресс методов / А.Н. Спицин, С.А. Ляшева // Юность и Знания - Гарантия Успеха - 2015 Сборник

научных трудов 2-й Международной научно-практической конференции: В 2-х томах. Ответственный редактор: Горохов А.А. - 2015. - С.79-82.

52. Спицин, А.Н. Автоматизированная система прогнозирования параметров быстропротекающих процессов с использованием искусственной нейронной сети / А.Н. Спицин, С.А. Ляшева // ПРОГРЕССИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ПРОЦЕССЫ Сборник научных статей 2-й Международной молодежной научно-практической конференции в 3-х томах. Ответственный редактор: Горохов А.А. - 2015. - С.55-57.

53. Спицин, А.Н. Автоматизированная система моделирования параметров быстропротекающих процессов на основе экспресс методов / А.Н. Спицин, С.А. Ляшева // Поколение будущего: Взгляд молодых ученых - 2015 сборник научных статей 4-й Международной молодежной научной конференции в 4-х томах. Ответственный редактор: Горохов А.А. - 2015. - С.76-78.

54. Ляшева, С.А. Автоматизированная система моделирования параметров быстропротекающих процессов / С.А. Ляшева // Поиск эффективных решений в процессе создания и реализации научных разработок в российской авиационной и ракетно-космической промышленности Международная научно-практическая конференция. - 2014. - С.500-503.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1
Исходная база данных для прогнозирования фугасности

ВВ	Количес- тво С	Количе- ство Н	Количес- тво О	Количес- тво N	Молярная масса г/моль	Кислородн ый баланс	Плотно- сть, г/см3	Объем продукто в взрыва, л/кг	Фугасно- сть, мл
Октоген(α)	4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,87	782	450
Октоген(β)	4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,905	782	450
Октоген(γ)	4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,82	782	450
Октоген(δ)	4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,76	782	450
Октоген(ε)	4	8	8	8	296,1	0,8849946	1,919	782	450
Тетрил	7	5	8	5	287,15	0,8198756	1,73	765	350
Гексоген	3	6	6	6	222,12	0,8849946	1,86	908	500
ЭДНА	2	6	4	4	151,04	0,8528514	1,75	908	440
Нитрогуанидин	1	4	2	4	104,07	0,825953	1,932	1077	300
Нитрокарбамид	1	3	3	3	105,05282	0,9400161	1,73	853	310
ДИНА	4	8	8	4	240,13	0,8849946	1,675	924	480
ДНБ	6	4	4	2	164,077	0,722148	1,567	670	260
ТНБ	6	3	6	3	213,0825	0,802932	1,688	711	330
тротил	7	5	6	3	227,13	0,765178	1,663	730	285
тротил(при 82°С)	7	5	6	3	227,13	0,765178	1,467	730	285
2,4,6- Тринитроксил	8	7	6	3	241,2	0,735107	1,604	700	270
2,4,6- Тринитроанизол	7	5	7	3	243,1305	0,794017	1,708	740	300
ТНФ	6	3	7	3	229,1	0,833194	1,763	730	315
Пикрат аммония	6	6	7	4	240	0,812389	1,717	680	330
Динитронафтали- н	10	6	2	4	218	0,542794	1,5	488	100
гексил	12	5	12	7	439	0,806542	1,653	675	325
Гексанитростиль- бен	14	6	12	7	464,1937	0,776746	1,75	700	300
ТЭН(песок)	5	8	12	4	316,0746	0,940016	1,77	768	500
ТЭН(вода)	5	8	12	4	316,0746	0,940016	1,77	768	560
нитроманнит	6	8	18	6	452,0954	1,003412	1,8	723	490
нитроманнит(по	6	8	18	6	452,0954	1,003412	1,8	723	560

Динитроэтил- глицерин (в песке)	3	5	9	3			227,0477	0,988918	1,735	713		390
Динитроэтил- глицерин(в воде)	3	5	9	3			227,0477	0,988918	1,735	713		590
Динитроэтил- глицерин	2	4	5	2			136,0324	0,933682	1,489	737		640
Динитроэтил- глицерин	6	8	7	2			220,0752	0,799903	1,38	919		425
Триэтил- глицерин	6	12	8	2			240,0746	0,802932	1,335	851		320
Нитроэтил- глицерин	4	6	11	4			286,0642	0,975444	1,64	705		540
Нитрометан	1	3	2	1			61,0165	0,852851	1,137	1059		470
Динитроэтил- глицерин	5	6	13	8			386,1008	0,975444	1,792	687		528
Динитроэтил- глицерин (вещество "Б")	4	4	14	8			388,0892	1,057483	1,92	693		496
Динитроэтил- глицерин (вещество "Б")	4	4	14	8			388,0892	1,057483	1,96	693		496
Бензотрифурокс	6	0	6				252,1026	0,825953	1,901	655		450
Фульминат	2	0	2	2			284,63	7,828831	4,3	315		110
Нитроглицерин	2	4	6	2			152,063	9,400161	1,49	738		620
Пироксилит	6	7	11	3			297,132	6	1,7	994		375
Тетранитроэтил	7	5	8	5			287,144	8,0293191	1,867	827		430
Динитроэтил	10	6	4	2			218,168	6,4791118	1	488		100
тетрил	7	5	8	5			287,15	8,0293191	1,63	765		390
гексоген	3	6	6	6			222,12	8,849946	1,82	908		520
Динитроэтил	4	8	8	4			240,13	8,849946	1,675	924		480
Нитрат	1	6	3	2			94,07	9,400161	1,422	1027		325

метилamina									
Триаминогуанид иннитрат	1	7	3	5	137,099	9,400161	1,5	1206	350
Перхлорат аммония	0	4	4	1	117,4894	11,519927	1,952	810	220

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Тест 1. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, (Predicted)	мл	Отличие
Тетрил	350	350,722933		0,722933012
Гексоген	500	500,20487		0,204869954
ЭДНА	440	439,9088568		0,091143182
Нитрогуанидин	300	299,8579941		0,142005871
Нитрокарбамид	310	309,9956129		0,004387068
ДИНА	480	479,8773686		0,122631435
ДНБ	260	259,1401969		0,859803142
ТНБ	330	330,2706033		0,2706033
тротил	285	294,1143979		9,114397872
тротил(при 82°C)	285	283,319111		1,680088858
2,4,6- Тринитроксил	270	269,6478483		0,352151705
2,4,6-Тринитроанизол	300	293,3668587		6,633141306
ТНФ	315	315,7660299		0,766029948
Пикрат аммония	330	329,6635346		0,336465352
Динитронафталин	100	99,83321003		0,166789973
гексил	325	324,653617		0,346382962
Гексанитрогильбен	300	300,1073904		0,10739043
ТЭН(песок)	500	500,0987502		0,098750158
ТЭН(вода)	560	559,8660237		0,133976263
нитроманнит	490	490,0188662		0,018866223
нитроманнит(под водой)	560	559,4696742		0,530325767
нитроглицерин (в песке)	390	389,7093411		0,290658879
нитроглицерин(в воде)	590	590,206467		0,206467015
Динитроэтиленглицоль	640	640,3750188		0,375018831
Динитродиэтиленглицоль	425	424,9327073		0,067292673
Триэтиленглицольдиннитрат	320	320,2735301		0,273530052
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	540,2570933		0,257093338
Нитрометан	470	470,1116882		0,111688186

дитринитроэтилкарбамид	528	528,1942991	0,194299148
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б") (α)	496	491,9793998	4,020600158
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б") (β)	496	500,972726	4,972725982
Бензотрифуроксан	450	449,8961073	0,103892704
Фульминат ртути(II)	110	110,3037856	0,303785584
Нитроглицоль	620	619,9010034	0,09899658
Пироксилон	375	375,1572665	0,157266535
Тетранитроанилин	430	430,0548099	0,054809943
Динитронафталин	100	99,76369906	0,23630094
тетрил	390	390,0527778	0,052777753
гексоген	520	519,7543611	0,245638911
Диэтанолнитрамин, динитрат	480	479,5761677	0,423832294
Нитрат метилamina	325	325,156104	0,156104012
Триаминогуанидиннитрат	350	350,0704329	0,070432932
Перхлорат аммония	220	220,2234958	0,223495769

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Тест 2. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, (Predicted) мл	Отличие
Октоген(α)	450	451,728347	1,728347043
Октоген(β)	450	449,5841774	0,415822629
Октоген(γ)	450	452,0297087	2,029708651
Октоген(δ)	450	448,3502645	1,649735521
Октоген(ε)	450	448,2743783	1,725621716
ДИНА	480	479,8688549	0,131145109
ДНБ	260	260,1941654	0,19416538
ТНБ	330	329,0333526	0,96664743
тротил	285	282,7494016	2,250598426
тротил(при 82 °C)	285	285,7102955	0,710295487
2,4,6-Тринитроксил	270	269,8767637	0,123236296
2,4,6-Тринитроанизол	300	300,3382064	0,338206376
ТНФ	315	316,4026485	1,402648477
Пикрат аммония	330	330,2035453	0,203545295
Динитронафталин	100	100,019572	0,019572006
гексил	325	325,0263182	0,026318228
Гексанитростильбен	300	299,9371085	0,062891545
ТЭН(песок)	500	500,0091308	0,009130835

ТЭН(вода)	560	560,0241432	0,024143227
нитроманнит	490	490,0822	0,082199993
нитроманнит(под водой)	560	560,0289214	0,028921377
нитроглицерин (в песке)	390	390,016388	0,016387993
нитроглицерин(в воде)	590	590,0800922	0,080092245
Динитроэтиленглицоль	640	639,9726768	0,027323225
Динитродиэтиленглицоль	425	425,0633091	0,063309146
Триэтиленглицольдинитрат	320	319,9677574	0,032242636
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	539,8843736	0,115626445
Нитрометан	470	469,9660162	0,033983762
дитринитроэтилкарбамид	528	527,826587	0,173412987
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	496,2062632	0,206263225
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	495,7594218	0,240578217
Бензотрифуроксан	450	449,9750881	0,024911927
Фульминат ртути(II)	110	110,1290916	0,129091578
Нитроглицоль	620	619,9166072	0,083392817
Пироксиллин	375	375,0636818	0,063681765
Тетранитроанилин	430	430,1217589	0,12175889
Динитронафталин	100	99,94685572	0,053144278
тетрил	390	390,1066186	0,106618561
гексоген	520	520,1087968	0,10879678
Диэтанолнитраминдинитрат	480	480,113731	0,113731006
Нитрат метиламина	325	324,9488447	0,051155287
Триамингуанидининитрат	350	349,9531033	0,046896721
Перхлорат аммония	220	220,0000922	9,21764E-05

ПРИЛОЖЕНИЕ 4
Тест 3. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	449,0694391	0,930560861
Октоген(β)	450	450,2778579	0,277857905
Октоген(γ)	450	448,787897	1,212103026
Октоген(δ)	450	450,6422565	0,642256528
Октоген(ε)	450	450,9997459	0,99974592
Тетрил	350	349,6756725	0,32432746
Гексоген	500	501,3520668	1,352066794
ЭДНА	440	439,6568846	0,343115401

Нитрогуанидин	300	300,132758	0,132757981
Нитрокарбамид	310	309,6451006	0,354899357
2,4,6- Тринитрокислот	270	270,6896918	0,689691783
2,4,6-Тринитроанизол	300	299,6836015	0,316398522
ТНФ	315	315,1048499	0,10484986
Пикрат аммония	330	327,5930502	2,406949835
Динитронафталин	100	100,0447915	0,044791458
гексил	325	324,8679859	0,13201408
Гексанитростильбен	300	300,110962	0,110961997
ТЭН(песок)	500	500,2447397	0,244739741
ТЭН(вода)	560	559,9391913	0,060808712
нитроманнит	490	489,8383596	0,161640408
нитроманнит(под водой)	560	560,1487068	0,148706784
нитроглицерин (в песке)	390	392,4252473	2,425247327
нитроглицерин(в воде)	590	589,1451088	0,85489116
Динитроэтиленгликоль	640	640,0934685	0,093468497
Динитродиаэтиленгликоль	425	424,6033222	0,396677809
Триэтиленгликольдинитрат	320	319,9387086	0,061291354
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	538,9806235	1,019376549
Нитрометан	470	469,9663683	0,033631659
дитринитроэтилкарбамид	528	527,9952967	0,004703304
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	496,7573047	0,757304732
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	495,4048787	0,595121335
Бензотрифуроксан	450	450,0791464	0,079146354
Фульминат ртути(II)	110	109,7525971	0,247402905
Нитрогликоль	620	620,1652351	0,16523511
Пироксидин	375	375,0225543	0,022554268
Тетранитроанилин	430	429,6828856	0,317114416
Динитронафталин	100	99,99735287	0,002647132
тетрил	390	390,4752132	0,475213199
гексоген	520	520,2549231	0,254923123
Диэтанолнитраминдинитрат	480	479,7937979	0,206202066
Нитрат метилamina	325	325,5700195	0,570019499
Триамингуанидинитрат	350	350,4464745	0,446474511
Перхлорат аммония	220	219,9500432	0,049956818

ПРИЛОЖЕНИЕ 5
Тест 4. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	448,0836568	1,916343229
Октоген(β)	450	448,489471	1,510528978
Октоген(γ)	450	449,6202687	0,379731255
Октоген(δ)	450	455,5504932	5,550493203
Октоген(ϵ)	450	448,9201691	1,079830897
Тетрил	350	350,4623409	0,462340892
Гексоген	500	500,3806896	0,380689627
ЭДНА	440	440,1958457	0,19584569
Нитрогуанидин	300	300,0404368	0,040436848
Нитрокарбамид	310	309,1509062	0,849093753
ДИНА	480	480,1713777	0,171377709
ДНБ	260	261,128323	1,128323038
ТНБ	330	331,4675531	1,467553145
тротил	285	282,1666191	2,83338088
тротил(при 82°C)	285	285,0610435	0,061043505
гексил	325	324,9738527	0,026147291
Гексанитростильбен	300	299,9714644	0,02853565
ТЭН(песок)	500	505,1287786	5,128778609
ТЭН(вода)	560	556,5923114	3,407688563
нитроманнит	490	489,5231205	0,47687949
нитроманнит(под водой)	560	560,4649398	0,464939789
нитроглицерин (в песке)	390	390,3164469	0,316446866
нитроглицерин(в воде)	590	590,2169325	0,216932467
Динитроэтиленгликоль	640	639,8846612	0,115338827

Динитродиэтилглицоль	425	425,1306165	0,130616516
Триэтилглицольдинитрат	320	319,8982033	0,101796719
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	540,1558601	0,155860115
Нитрометан	470	469,6057911	0,394208866
дитринитроэтилкарбамид	528	527,5995847	0,400415267
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	497,3825108	1,382510844
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	494,887583	1,112417007
Бензотрифуроксан	450	450,3524259	0,352425862
Фульминат ртути(II)	110	109,7138953	0,286104677
Нитроглицоль	620	620,0483572	0,048357228
Пироксиллин	375	375,2279809	0,22798087
Тетранитроанилин	430	429,9257212	0,07427878
Динитронафталин	100	100,95756	0,957559975
тетрил	390	390,1435107	0,143510668
гексоген	520	520,1012254	0,10122544
Диэтанолнитраминдинитрат	480	479,8418528	0,158147192
Нитрат метилamina	325	324,8849767	0,115023274
Триаминогуанидиннитрат	350	349,8402421	0,159757936
Перхлорат аммония	220	220,3705192	0,37051922

ПРИЛОЖЕНИЕ 6

Тест 5. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, Б, мл	Фугасность, (Predicted) мл	Отличие
Октоген(α)	450	449,5728352	0,427164833
Октоген(β)	450	450,0839115	0,083911488
Октоген(γ)	450	449,5293493	0,470650682
Октоген(δ)	450	450,4943183	0,494318259
Октоген(ε)	450	450,378093	0,378093046
Тетрил	350	350,0596814	0,059681389

Гексоген	500	499,9487618	0,051238209
ЭДНА	440	439,9945504	0,00544959
Нитрогуанидин	300	300,0194324	0,019432403
Нитрокарбамид	310	309,9066015	0,093398532
ДИНА	480	479,9957104	0,004289564
ДНБ	260	260,032493	0,032492994
ТНБ	330	329,7047514	0,295248612
тротил	285	285,4586647	0,458664677
тротил(при 82°C)	285	284,92545	0,07454998
2,4,6- Тринитроксил	270	269,9645244	0,035475573
2,4,6- Тринитроанизол	300	299,591465	0,408535019
ТНФ	315	315,2695555	0,269555488
Пикрат аммония	330	330,0568116	0,056811612
Динитронафталин	100	100,0594589	0,059458947
нитроманнит(под водой)	560	559,9523993	0,047600699
нитроглицерин (в песке)	390	389,9888216	0,011178394
нитроглицерин(в воде)	590	589,9816707	0,018329284
Динитроэтиленглицоль	640	639,9663599	0,03364014
Динитродиэтиленглицоль	425	425,0274754	0,027475441
Триэтиленглицольдинитрат	320	319,9919748	0,008025219
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	540,0073913	0,007391298
Нитрометан	470	470,0098257	0,009825658
дитринитроэтилкарбамид	528	528,0050732	0,005073212
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	495,9759279	0,024072134
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	496,0045122	0,004512176
Бензотрифуроксан	450	449,9962045	0,003795491
Фульминат ртути(II)	110	109,9696115	0,030388537
Нитроглицоль	620	620,0291744	0,029174413
Пироксил	375	374,9819556	0,018044415
Тетранитроанилин	430	429,9719689	0,028031114
Динитронафталин	100	100,0508258	0,050825803
тетрил	390	390,0431375	0,043137534
гексоген	520	520,0813806	0,081380615
Диэтанолнитраминдинитрат	480	480,0133957	0,013395685
Нитрат метилamina	325	324,9842717	0,015728288
Триаминогуанидиннитрат	350	350,0494964	0,049496395
Перхлорат аммония	220	219,9591912	0,040808761

ПРИЛОЖЕНИЕ 7

Тест 6. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность Б, мл	Фугасность, (Predicted) мл	Отличие
Октоген(α)	450	450,2303799	0,230379908
Октоген(β)	450	450,0445029	0,044502894
Октоген(γ)	450	450,2021414	0,202141442
Октоген(δ)	450	450,0249709	0,024970897
Октоген(ε)	450	449,8885465	0,111453515
Тетрил	350	349,8957934	0,104206602
Гексоген	500	499,9437367	0,056263297
ЭДНА	440	440,0632998	0,06329976
Нитрогуанидин	300	299,9109672	0,089032801
Нитрокарбамид	310	310,0981366	0,09813659
ДИНА	480	480,1030299	0,103029918
ДНБ	260	260,2329198	0,232919783
ТНБ	330	328,76475	1,235249983
тротил	285	282,6673207	2,332679318
тротил(при 82°C)	285	285,6602398	0,660239776
2,4,6- Тринитроксид	270	270,0723383	0,072338258
2,4,6-Тринитроанизол	300	301,6289488	1,628948849
ТНФ	315	316,0597906	1,059790628
Пикрат аммония	330	330,0628868	0,062886784
Динитронафталин	100	100,0259102	0,025910156
гексил	325	324,9222055	0,077794474
Гексанитростильбен	300	300,0693808	0,069380813
ТЭН(песок)	500	499,9296246	0,070375441
ТЭН(вода)	560	559,9960319	0,003968125
нитроманнит	490	490,0380944	0,038094405
Триэтиленгликольдинитрат	320	320,2205014	0,220501436
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	540,0226095	0,022609535
Нитрометан	470	470,0225586	0,022558627
дитринитроэтилкарбамид	528	527,8123672	0,187632802
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	497,1218907	1,121890726
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	494,998587	1,001412956
Бензотрифуроксан	450	450,1256654	0,125665382
Фульминат ртути(II)	110	109,9366024	0,063397556
Нитрогликоль	620	620,0901999	0,090199937
Пироксиллин	375	375,0696334	0,069633418

Тетранитроанилин	430	429,9630716	0,0369284
Динитронафталин	100	100,0568252	0,056825164
тетрил	390	389,9529021	0,047097903
гексоген	520	519,9516221	0,048377909
Диэтанолнитрамиддинитрат	480	480,0000849	8,48985E-05
Нитрат метиламина	325	324,9833693	0,016630726
Триаминогуанидиннитрат	350	349,9340668	0,065933188
Перхлорат аммония	220	219,9646098	0,035390206

ПРИЛОЖЕНИЕ 8

Тест7. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	449,9695755	0,030424505
Октоген(β)	450	449,9102735	0,08972648
Октоген(γ)	450	450,4224017	0,422401696
Октоген(δ)	450	449,6152423	0,384757671
Октоген(ε)	450	450,064365	0,064364981
Тетрил	350	350,0934081	0,093408066
Гексоген	500	500,0709171	0,070917072
ЭДНА	440	439,9845318	0,015468178
Нитрогуанидин	300	300,0168091	0,016809069
Нитрокарбамид	310	310,0052863	0,005286281
ДИНА	480	479,9568875	0,043112506
ДНБ	260	260,0366229	0,03662292
ТНБ	330	330,1034506	0,103450557
тропил	285	286,2142214	1,214221397
тропил(при 82°C)	285	284,4797235	0,520276475
2,4,6- Тринитроксил	270	270,0480505	0,048050523
2,4,6- Тринитроанизол	300	299,2580426	0,741957396
ТНФ	315	314,8958682	0,10413177
Пикрат аммония	330	329,8161231	0,183876941
Динитронафталин	100	99,98780869	0,012191309
гексил	325	325,0388012	0,038801167
Гексанитростильбен	300	300,0151609	0,015160889
ТЭН(песок)	500	500,0139159	0,013915919
ТЭН(вода)	560	560,0390989	0,039098921
нитроманнит	490	490,1065613	0,106561323
нитроманнит(под водой)	560	559,9636676	0,03633239
нитроглицерин (в песке)	390	390,1969963	0,196996331

нитроглицерин(в воде)	590	589,958503	0,041496999
Динитроэтиленглицоль	640	639,9843311	0,015668942
Динитродиаэтиленглицоль	425	425,0247332	0,024733176
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	496,0329075	0,032907543
Бензотрифуроксан	450	450,0627949	0,062794897
Фульминат ртути(II)	110	109,9796206	0,02037943
Нитроглицоль	620	620,0178341	0,017834092
Пироксилин	375	374,974885	0,025115015
Тетранитроанилин	430	429,9516924	0,048307574
Динитронафталин	100	100,1306205	0,130620479
тетрил	390	389,9856813	0,014318734
гексоген	520	520,0149848	0,014984751
Диэтанолнитраминдинитрат	480	480,0187053	0,018705303
Нитрат метиламина	325	325,0174025	0,01740255
Триаминогуанидиннитрат	350	350,0420613	0,042061348
Перхлорат аммония	220	220,0071351	0,007135082

ПРИЛОЖЕНИЕ 9

Тест 8. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, (Predicted)	Фугасность, мл	Отличие
Октоген(α)	450	450,3324042		0,332404162
Октоген(β)	450	450,3398579		0,339857879
Октоген(γ)	450	449,3818294		0,618170628
Октоген(δ)	450	450,2758214		0,275821395
Октоген(ε)	450	449,6638554		0,336144601
Тетрил	350	349,9939862		0,006013771
Гексоген	500	499,9870073		0,01299268
ЭДНА	440	440,010865		0,010865028
Нитрогуанидин	300	300,0044307		0,004430685
Нитрокарбамид	310	309,9880537		0,011946265
ДИНА	480	480,012225		0,01222499
ДНБ	260	260,0094763		0,009476272
ТНБ	330	330,0048335		0,004833546
тротил	285	284,9164547		0,083545317
тротил(при 82°C)	285	284,999756		0,000244032
2,4,6- Тринитроксил	270	270,0121015		0,012101498

2,4,6-Тринитроанизол	300	300,0617507	0,061750712
ТНФ	315	314,99594	0,004059987
Пикрат аммония	330	330,0052898	0,00528976
Динитронафталин	100	99,99191937	0,008080626
гексил	325	325,0078845	0,00788447
Гексанитростильбен	300	299,9914958	0,008504232
ТЭН(песок)	500	500,0083986	0,008398649
ТЭН(вода)	560	559,9935329	0,006467105
нитроманнит	490	490,0020427	0,002042732
нитроманнит(под водой)	560	560,002838	0,00283797
нитроглицерин (в песке)	390	389,9957262	0,004273815
нитроглицерин(в воде)	590	590,0002865	0,000286534
Динитроэтиленглицоль	640	639,989924	0,01007603
Динитродиэтиленглицоль	425	424,9938546	0,00614539
Триэтиленглицольдинитрат	320	319,9956975	0,004302499
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	539,9979647	0,002035274
Нитрометан	470	469,9981952	0,001804783
дитринитроэтилкарбамид	528	527,9880496	0,01195035
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	496,0109129	0,010912928
Тетранитроанилин	430	429,9984567	0,001543277
Динитронафталин	100	99,99990301	9,69863E-05
тетрил	390	389,9862588	0,013741186
гексоген	520	519,9988571	0,001142873
Диэтанолнитраминдинитрат	480	480,0128688	0,012868806
Нитрат метилamina	325	325,0002577	0,000257667
Триамингуанидинитрат	350	349,998257	0,00174297
Перхлорат аммония	220	219,9860232	0,013976816

ПРИЛОЖЕНИЕ 10
Тест 9. Excel Neural Package

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, (Predicted) мл	Отличие
Октоген(α)	450	451,5637453	1,563745258
Октоген(β)	450	449,6421142	0,357885824
Октоген(γ)	450	451,8914573	1,891457274
Октоген(δ)	450	448,4341457	1,565854277
Октоген(ε)	450	448,5179687	1,4820313

Тетрил	350	351,8092926	1,809292639
Гексоген	500	500,6510154	0,651015379
ЭДНА	440	441,2626517	1,262651702
Нитрогуанидин	300	300,5729736	0,572973575
Нитрокарбамид	310	311,7145479	1,71454789
ДИНА	480	481,9156928	1,915692755
ДНБ	260	257,6847213	2,315278742
ТНБ	330	330,9407038	0,940703835
тротил	285	298,6195096	13,61950957
тротил(при 82°C)	285	282,9583696	2,04163041
2,4,6- Тринитрокислот	270	268,2591673	1,740832657
2,4,6- Тринитроанизол	300	291,9960462	8,003953815
ТНФ	315	313,8544806	1,14551939
Пикрат аммония	330	331,3238519	1,323851912
Динитронафталин	100	99,8476747	0,152325296
гексил	325	324,6336726	0,366327439
Гексанитростильбен	300	299,4789875	0,521012514
ТЭН(песок)	500	500,1672019	0,167201921
ТЭН(вода)	560	559,7744353	0,225564713
нитроманнит	490	489,958754	0,041246012
нитроманнит(под водой)	560	559,9366994	0,063300566
нитроглицерин (в песке)	390	387,1979892	2,802010795
нитроглицерин(в воде)	590	588,0569906	1,943009403
Динитроэтиленглицоль	640	640,6917643	0,691764307
Динитродиэтиленглицоль	425	423,4511243	1,548875662
Триэтиленглицольдинитрат	320	320,6702098	0,670209784
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	540,4114221	0,411422085
Нитрометан	470	470,0485703	0,048570348
дитринитроэтилкарбамид	528	528,4041042	0,404104169
дитринитроэтинитрамин (вещество "Б")(α)	496	496,8034744	0,803474447
дитринитроэтинитрамин (вещество "Б")(β)	496	494,7386265	1,261373523
Бензотрифуроксан	450	448,9106562	1,089343763
Фульминат ртути(II)	110	108,5945993	1,405400685
Нитроглицоль	620	620,1255219	0,125521875
Пироксиллин	375	374,3707297	0,629270255
Нитрат метиламина	325	324,3567153	0,643284723
Триаминогуанидиннитрат	350	350,1766793	0,176679282
Перхлорат аммония	220	219,9522959	0,047704149

ПРИЛОЖЕНИЕ 11

Тест 1. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	449,9984707	0,001529285
Октоген(β)	450	450,0015088	0,001508807
Октоген(γ)	450	450,0002629	0,000262933
Октоген(δ)	450	449,9996061	0,000393917
Октоген(ε)	450	449,9987865	0,001213485

Тест 2. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Тетрил	350	349,999901	9,90221E-05
Гексоген	500	499,9998959	0,000104083
ЭДНА	440	439,9997828	0,000217164
Нитрогуанидин	300	299,9996892	0,000310808
Нитрокарбамид	310	309,9997516	0,000248393

Тест 3. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
ДИНА	480	480,0000209	2,09321E-05
ДНБ	260	260,0001339	0,000133891
ТНБ	330	330,0001175	0,000117532
тротил	285	285,000135	0,000135025
тротил(при 82°C)	285	285,0001331	0,000133123

Тест 4. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
2,4,6- Тринитроксилол	270	270,0001531	0,000153087
2,4,6-Тринитроанизол	300	300,0001294	0,000129446
ТНФ	315	315,0001215	0,000121517
Пикрат аммония	330	330,0000846	8,46116E-05
Динитронафталин	100	100,0002393	0,000239295

Тест 5. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
----	----------------	-------------------------------	---------

гексил	325	324,9998353	0,000164665
Гексанитростильбен	300	299,9997592	0,000240829
ТЭН(песок)	500	499,9997568	0,000243193
ТЭН(вода)	560	559,9998434	0,000156605
нитроманнит	490	489,9996195	0,000380519

Тест 6. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
нитроманнит(под водой)	560	560,0002475	0,00024754
нитроглицерин (в песке)	390	390,0001338	0,000133766
нитроглицерин(в воде)	590	590,0001128	0,000112819
Динитроэтиленглицоль	640	640,0000913	9,13179E-05
Динитродиэтиленглицоль	425	425,0000758	7,5773E-05

Тест 7. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Триэтиленглицольдинитрат	320	320,0006143	0,000614334
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	540,0001492	0,000149182
Нитрометан	470	470,0002447	0,000244697
дитринитроэтилкарбамид	528	528,0001233	0,00012328
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	496,0002115	0,000211455

Тест 8. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	495,9999674	3,25613E-05
Бензотрифуроксан	450	449,9999611	3,89416E-05
Фульминаг ртути(II)	110	109,9998573	0,000142736
Нитроглицоль	620	619,9999717	2,82823E-05
Пироксилин	375	374,999981	1,90434E-05

Тест 9. Excel Neural Package.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Тетранитроанилин	430	430,0000363	3,63055E-05
Динитронафталин	100	100,0002409	0,000240885
тетрил	390	390,0000454	4,54431E-05

гексоген	520	520,0001415	0,000141467
Диэтанолнитраминдинитрат	480	480,000101	0,000101036

ПРИЛОЖЕНИЕ 12

Тест 1. Deductor

ВВ	Фугасност ь, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	417,5308689302	32,46913
Октоген(β)	450,0	424,5828978292	25,4171
Октоген(γ)	450,0	429,5608005814	20,4392
Октоген(δ)	450,0	416,369358288	33,63064
Тетрил	350,0	361,723910472	11,72391
Гексоген	500,0	423,9162821979	76,08372
ЭДНА	440,0	420,5059286931	19,49407
Нитрогуанидин	300,0	407,8931680793	107,8932
Нитрокарбамид	310,0	436,8914135777	126,8914
ДИНА	480,0	453,8296224108	26,17038
ДНБ	260,0	323,0226489945	63,02265
ТНБ	330,0	356,2005105736	26,20051
тротил	285,0	325,3637213503	40,36372
тротил(при 82°С)	285,0	341,6248703409	56,62487
2,4,6- Тринитроксил	270,0	294,1270281882	24,12703
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	344,1049713987	44,10497
ТНФ	315,0	373,022844361	58,02284
Пикрат аммония	330,0	368,8156430439	38,81564
Динитронафталин	100,0	142,597041725	42,59704
гексил			
	325,0	305,3574315733	19,64257
Гексанитростильбен	300,0	239,5927698208	60,40723
ТЭН(песок)	500,0	495,0427097688	4,95729
ТЭН(вода)	560,0	495,0427097688	64,95729
нитроманнит	490,0	588,4657451345	98,46575
нитроманнит(под водой)	560,0	588,4657451345	28,46575
нитроглицерин (в песке)	390,0	496,1043881617	106,1044
нитроглицерин(в воде)	590,0	496,1043881617	93,89561

Динитроэтиленгликоль	640,0	463,8880654079	176,1119
Динитродидиленгликоль	425,0	404,0670617612	20,93294
Триэтиленгликольдинитрат	320,0	413,1150840148	93,11508
Нитроизобутилглицеринитрат	540,0	514,0088817001	25,99112
Нитрометан	470,0	481,7346157492	11,73462
дитринитроэтилкарбамид	528,0	507,7812230444	20,21878
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	553,4912515691	57,49125
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	550,1726497343	54,17265
Бензотрифуроксан	450,0	337,9215374955	112,0785
Фульминат ртути(II)	110,0	-56,3999133208	166,3999
Нитрогликоль	620,0	486,4275426939	133,5725
Пироксилон	375,0	471,3762981094	96,3763
Тетранитроанилин	430,0	355,0652997955	74,9347
Динитронафталин	100,0	236,1978806517	136,1979
тетрил	390,0	370,6751019039	19,3249
гексоген	520,0	427,9581782651	92,04182
Дизанолнитраминдинитрат	480,0	454,5529166432	25,44708
Нитрат метиламина	325,0	467,4961330992	142,4961
Триаминогуанидинитрат	350,0	463,676761308	113,6768
Перхлорат аммония	220,0	430,9588332222	210,9588

ПРИЛОЖЕНИЕ 13

Тест 2. Deductor

ВВ	Фугасность ь, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	445,2984817622	4,701518
Октоген(β)	450,0	449,9071341916	0,092866
Октоген(γ)	450,0	453,1603006123	3,160301
Октоген(δ)	450,0	444,5394095974	5,46059
Тетрил	350,0	355,58612166	5,586122
Гексоген	500,0	426,9332234271	73,06678
ЭДНА	440,0	407,9897427065	32,01026
Нитрогуанидин	300,0	390,0011057469	90,00111
Нитрокарбамид	310,0	415,6459452477	105,6459

ДИНА	480,0	435,0173640551	44,98264
ДНБ	260,0	296,5047275493	36,50473
ТНБ	330,0	336,1192436975	6,119244
тротил	285,0	306,1130654267	21,11307
тротил(при 82°C)	285,0	316,7400757344	31,74008
2,4,6- Тринитроксилол	270,0	277,6415495469	7,64155
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	324,3004262519	24,30043
ТНФ	315,0	352,7179932945	37,71799
Пикрат аммония	330,0	360,3033403232	30,30334
Динитронафталин	100,0	147,6629079431	47,66291
гексил	325,0	310,5184303333	14,48157
Гексанитростильбен	300,0	246,6435399238	53,35646
ТЭН(песок)	500,0	482,7865319363	17,21347
ТЭН(вода)	560,0	482,7865319363	77,21347
нитроманнит	490,0	587,676630879	97,67663
нитроманнит(под водой)	560,0	587,676630879	27,67663
нитроглицерин (в песке)	390,0	478,1071630364	88,10716
нитроглицерин(в воде)	590,0	478,1071630364	111,8928
Динитроэтиленглицоль	640,0	433,3752211059	206,6248
Динитродиэтиленглицоль	425,0	361,5347339477	63,46527
Триэтиленглицольдинитрат	320,0	378,430124163	58,43012
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	500,2994370107	39,70056
Нитрометан	470,0	416,7698726771	53,23013
дитринитроэтилкарбамид	528,0	528,1052129724	0,105213
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	573,1869146715	77,18691
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	571,0181370576	75,01814
Бензотрифуроксан	450,0	346,1841436794	103,8159
Фульминат ртути(II)	110,0	84,3163544678	25,68365
Нитроглицоль	620,0	437,0901461796	182,9099
Пироксилон	375,0	418,6491654384	43,64917
Тетранитроанилин	430,0	334,171128928	95,82887
Динитронафталин	100,0	194,822247602	94,82225
тетрил	390,0	346,6636899482	43,33631
гексоген	520,0	413,2544178422	106,7456
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	419,1697808564	60,83022
Нитрат метиламина	325,0	406,2748952961	81,2749
Триаминогуанидинитрат	350,0	419,261688571	69,26169
Перхлорат аммония	220,0	396,3725951982	176,3726

ПРИЛОЖЕНИЕ 14

Тест 3. Deductor

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	443,2226094485	6,777391
Октоген(β)	450,0	451,9196019235	1,919602
Октоген(γ)	450,0	458,0586554352	8,058655
Октоген(δ)	450,0	441,7901636291	8,209836
Тетрил	350,0	361,5005754684	11,50058
Гексоген	500,0	428,8892056673	71,11079
ЭДНА	440,0	405,8576614457	34,14234
Нитрогуанидин	300,0	390,1533150563	90,15332
Нитрокарбамид	310,0	422,0788016701	112,0788
ДИНА	480,0	428,7366465904	51,26335
ДНБ	260,0	294,7465493251	34,74655
ТНБ	330,0	342,4657683805	12,46577
тротил	285,0	304,2969547074	19,29695
тротил(при 82°С)	285,0	324,3511961792	39,3512
2,4,6- Тринитросилол	270,0	268,3784873763	1,621513
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	321,1523948671	21,15239
ТНФ	315,0	356,4703207236	41,47032
Пикрат аммония	330,0	351,5832754925	21,58328
Динитронафталин	100,0	148,0036047018	48,0036
гексил			
	325,0	328,4542541911	3,454254
Гексанитростильбен	300,0	255,1845026932	44,8155
ТЭН(песок)	500,0	471,253991848	28,74601
ТЭН(вода)	560,0	471,253991848	88,74601
нитроманнит	490,0	586,485229911	96,48523
нитроманнит(под водой)	560,0	586,485229911	26,48523
нитроглицерин (в песке)	390,0	475,5025942102	85,50259
нитроглицерин(в воде)	590,0	475,5025942102	114,4974
Динитроэтиленгликоль	640,0	440,9821170438	199,0179

Динитродиаэтилглицоль	425,0	359,1091039314	65,8909
Триэтилглицольдинитрат	320,0	358,5859152218	38,58592
Нитроизобутилглицеринитрат	540,0	502,9121160952	37,08788
Нитрометан	470,0	446,0183243374	23,98168
дитринитроэтилкарбамид	528,0	542,0909286324	14,09093
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	591,5092306966	95,50923
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	587,4165283554	91,41653
Бензотрифуроксан	450,0	368,9210929482	81,07891
Фульминат ртути(II)	110,0	92,846469417	17,15353
Нитроглицоль	620,0	438,7452923131	181,2547
Пироксилон	375,0	407,9991986337	32,9992
Тетранитроанилин	430,0	329,04014575	100,9599
Динитронафталин	100,0	204,3881222169	104,3881
тетрил	390,0	351,7610602507	38,23894
гексоген	520,0	410,9177634633	109,0822
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	406,6725020452	73,3275
Нитрат метиламина	325,0	405,5153192675	80,51532
Триаминогуанидинитрат	350,0	426,9058981747	76,9059
Перхлорат аммония	220,0	393,7143885243	173,7144

ПРИЛОЖЕНИЕ 15

Тест 4. Deductor

ВВ	Фугасность ь, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	441,9897182796	8,010282
Октоген(β)	450,0	448,3530774963	1,646923
Октоген(γ)	450,0	452,8448604728	2,84486
Октоген(δ)	450,0	440,941635585	9,058364
Тетрил	350,0	361,9191672319	11,91917
Гексоген	500,0	429,3166255859	70,68337
ЭДНА	440,0	406,8092314905	33,19077
Нитрогуанидин	300,0	397,0028002658	97,0028
Нитрокарбамид	310,0	426,6684010624	116,6684
ДИНА	480,0	422,6537374595	57,34626

ДНБ	260,0	302,4010922264	42,40109
ТНБ	330,0	347,380462696	17,38046
тротил	285,0	308,1901315868	23,19013
тротил(при 82°С)	285,0	322,86328931	37,86329
2,4,6- Тринитросилол	270,0	271,0529816731	1,052982
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	324,6503439959	24,65034
ТНФ	315,0	361,6699421303	46,66994
Пикрат аммония	330,0	357,2009354312	27,20094
Динитронафталин	100,0	156,0699875669	56,06999
гексил	325,0	324,3214486912	0,678551
Гексанитроэтильбен	300,0	254,4073447256	45,59266
ТЭН(песок)	500,0	464,9945305383	35,00547
ТЭН(вода)	560,0	464,9945305383	95,00547
нитроманнит	490,0	571,7362130451	81,73621
нитроманнит(под водой)	560,0	571,7362130451	11,73621
нитроглицерин (в песке)	390,0	474,1747232228	84,17472
нитроглицерин(в воде)	590,0	474,1747232228	115,8253
Динитроэтиленглицоль	640,0	439,0172158457	200,9828
Динитродиэтиленглицоль	425,0	349,8620190197	75,13798
Триэтиленглицольдинитрат	320,0	346,060985331	26,06099
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	495,5661460695	44,43385
Нитрометан	470,0	434,4755485859	35,52445
дитринитроэтилкарбамид	528,0	533,3321985939	5,332199
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	584,7368554403	88,73686
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	581,742333456	85,74233
Бензотрифуроксан	450,0	378,9972020597	71,0028
Фульминат ртути(II)	110,0	86,4364025681	23,5636
Нитроглицоль	620,0	441,9740897723	178,0259
Пироксилон	375,0	406,1236950654	31,1237
Тетранитроанилин	430,0	337,9888828578	92,01112
Динитронафталин	100,0	204,135449643	104,1354
тетрил	390,0	355,1381667788	34,86183
гексоген	520,0	416,5487112281	103,4513
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	406,8913011174	73,1087
Нитрат метиламина	325,0	405,4292472433	80,42925
Триаминогуанидинитрат	350,0	423,1246987323	73,1247
Перхлорат аммония	220,0	394,9634807422	174,9635

ПРИЛОЖЕНИЕ 16

Тест 5. Deductor

ВВ	Фугасность ь, мл	Фугасность, (Predicted) мл	Отличие
Октоген(α)	450,0	443,7131854065	6,286815
Октоген(β)	450,0	452,2387395153	2,23874
Октоген(γ)	450,0	458,2567777098	8,256778
Октоген(δ)	450,0	442,3089764945	7,691024
Тетрил	350,0	363,33281011	13,33281
Гексоген	500,0	427,0134852407	72,98651
ЭДНА	440,0	402,1427606814	37,85724
Нитрогуанидин	300,0	381,9293044308	81,9293
Нитрокарбамид	310,0	416,4374680713	106,4375
ДИНА	480,0	434,1803362784	45,81966
ДНБ	260,0	290,7468311507	30,74683
ТНБ	330,0	341,7434408488	11,74344
тротил	285,0	303,9646574489	18,96466
тротил(при 82°С)	285,0	323,62335822175	38,62358
2,4,6- Тринитроксил	270,0	268,3145084972	1,685492
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	323,232977358	23,23298
ТНФ	315,0	358,2312729016	43,23127
Пикрат аммония	330,0	352,9368302341	22,93683
Динитронафталин	100,0	135,9085193396	35,90852
гексил	325,0	334,8592160111	9,859216
Гексанитростильбен	300,0	261,4869509075	38,51305
ТЭН(песок)	500,0	485,6110951326	14,3889
ТЭН(вода)	560,0	485,6110951326	74,3889
нитроманнит	490,0	611,7410921835	121,7411
нитроманнит(под водой)	560,0	611,7410921835	51,74109
нитроглицерин (в песке)	390,0	483,6553237238	93,65532
нитроглицерин(в воде)	590,0	483,6553237238	106,3447
Динитроэтиленгликоль	640,0	440,7014018631	199,2986
Динитродиэтиленгликоль	425,0	363,5578160359	61,44218
Триэтиленгликольдинитрат	320,0	366,7344834411	46,73448

Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	514,2061278322	25,79387
Нитрометан	470,0	439,7279636163	30,27204
дитринитроэтилкарбамид	528,0	552,6777550359	24,67776
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	604,2513635482	108,2514
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	600,2393380852	104,2393
Бензотрифуроксан	450,0	363,4560397252	86,54396
Фульминат ртути(II)	110,0	92,2883145725	17,71169
Нитроглицерин	620,0	440,0447896317	179,9552
Пироксилит	375,0	420,0369790278	45,03698
Тетранитроанилин	430,0	330,5876892516	99,41231
Динитронафталин	100,0	197,9581411751	97,95814
тетрил	390,0	352,7638024662	37,2362
гексоген	520,0	408,2677761019	111,7322
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	411,4226016767	68,5774
Нитрат метиламина	325,0	401,1827554582	76,18276
Триаминогуанидиндинитрат	350,0	419,3644896145	69,36449
Перхлорат аммония	220,0	393,8816614205	173,8817

ПРИЛОЖЕНИЕ 17

Тест 6. Deductor

ВВ	Фугасность ь, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	448,517303893	1,482696
Октоген(β)	450,0	451,4109506478	1,410951
Октоген(γ)	450,0	453,4535248276	3,453525
Октоген(δ)	450,0	448,0407032511	1,959297
Тетрил	350,0	368,1188404999	18,11884
Гексоген	500,0	445,7230080177	54,27699
ЭДНА	440,0	423,2449810941	16,75502
Нитрогуанидин	300,0	430,7828346741	130,7828
Нитрокарбамид	310,0	440,1321213593	130,1321
ДИНА	480,0	438,1365225084	41,86348
ДНБ	260,0	305,2833258418	45,28333
ТНБ	330,0	352,6561255758	22,65613

тротил	285,0	315,0056497522	30,00565
тротил(при 82°С)	285,0	321,6780587397	36,67806
2,4,6- Тринитросилол	270,0	275,0116127722	5,011613
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	333,594344353	33,59434
ТНФ	315,0	370,8392618898	55,83926
Пикрат аммония	330,0	362,6156104583	32,61561
Динитронафталин	100,0	141,0684792295	41,06848
гексил	325,0	318,8534545293	6,146545
Гексанитроэтильбен	300,0	255,9292784184	44,07072
ТЭН(песок)	500,0	474,2379161552	25,76208
ТЭН(вода)	560,0	474,2379161552	85,76208
нитроманнит	490,0	573,4143373338	83,41434
нитроманнит(под водой)	560,0	573,4143373338	13,41434
нитроглицерин (в песке)	390,0	479,5002190929	89,50022
нитроглицерин(в воде)	590,0	479,5002190929	110,4998
Динитроэтиленглицоль	640,0	438,4163772454	201,5836
Динитродиэтиленглицоль	425,0	359,4008274711	65,59917
Триэтиленглицольдинитрат	320,0	350,9263994292	30,9264
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	494,52579941	45,4742
Нитрометан	470,0	441,5593725436	28,44063
Дитринитроэтилкарбамид	528,0	527,7047189028	0,295281
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	582,9459660849	86,94597
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	581,584249965	85,58425
Бензотрифуроксан	450,0	381,0463909636	68,95361
Фульминат ртути(II)	110,0	86,6883010977	23,3117
Нитроглицоль	620,0	429,6523173432	190,3477
Пироксилин	375,0	418,5452221172	43,54522
Тетранитроанилин	430,0	343,7464245591	86,25358
Динитронафталин	100,0	166,4158856121	66,41589
тетрил	390,0	347,436185515	42,56381
гексоген	520,0	420,4736065713	99,52639
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	411,5254049421	68,4746
Нитрат метиламина	325,0	409,0262526318	84,02625
Триаминогуанидиннитрат	350,0	433,9458761609	83,94588
Перхлорат аммония	220,0	391,0721376967	171,0721

ПРИЛОЖЕНИЕ 18

Тест 7. Deductor

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	435,8360934531	14,16391
Октоген(β)	450,0	446,083164858	3,916835
Октоген(γ)	450,0	453,3163917321	3,316392
Октоген(δ)	450,0	434,1483405158	15,85166
Тетрил	350,0	355,0342398668	5,03424
Гексоген	500,0	420,264555053	79,73544
ЭДНА	440,0	396,6109058977	43,38909
Нитрогуанидин	300,0	377,5135945089	77,51359
Нитрокарбамид	310,0	421,7331003979	111,7331
ДИНА	480,0	420,1654041365	59,8346
ДНБ	260,0	306,7227114442	46,72271
ТНБ	330,0	340,6916793245	10,69168
тротил	285,0	298,8661828505	13,86618
тротил(при 82°С)	285,0	322,4947239725	37,49472
2,4,6-Тринитроксилол	270,0	261,4272994282	8,572701
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	315,0805073713	15,08051
ТНФ	315,0	353,1712442798	38,17124
Пикрат аммония	330,0	367,0461162048	37,04612
Динитронафталин	100,0	133,8403339006	33,84033
гексил	325,0	321,1922216398	3,807778
Гексанитростильбен	300,0	240,7696365242	59,23036
ТЭН(песок)	500,0	466,4462515436	33,55375
ТЭН(вода)	560,0	466,4462515436	93,55375
нитроманнит	490,0	584,0967214008	94,09672
нитроманнит(под водой)	560,0	584,0967214008	24,09672
нитроглицерин (в песке)	390,0	477,4750813398	87,47508
нитроглицерин(в воде)	590,0	477,4750813398	112,5249
Динитроэтиленглицоль	640,0	447,0702324493	192,9298
Динитродиэтиленглицоль	425,0	352,1945924878	72,80541
Триэтиленглицольдинитрат	320,0	351,6146641944	31,61466
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	505,4437358981	34,55626
Нитрометан	470,0	448,996071389	21,00393

Дитринитроэтилкарбамид	528,0	542,3999209644	14,39992
Дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	593,2246497378	97,22465
Дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	588,4024984884	92,4025
Бензотрифуроксан	450,0	368,2255536602	81,77445
Фульминат ртути(II)	110,0	-538,4107422193	648,4107
Нитроглицерин	620,0	465,6195212733	154,3805
Пироксилин	375,0	414,6498801831	39,64988
Тетранитроанилин	430,0	335,5672310642	94,43277
Динитронафталин	100,0	226,0203662727	126,0204
тетрил	390,0	364,5743704596	25,42563
гексоген	520,0	422,3078754063	97,69212
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	417,3865732405	62,61343
Нитрат метиламина	325,0	422,8477468807	97,84775
Триаминогуанидиндинитрат	350,0	436,6881689315	86,68817
Перхлорат аммония	220,0	307,762119185	87,76212

ПРИЛОЖЕНИЕ 19

Тест 8. Deductor

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	446,4014627686	3,598537
Октоген(β)	450,0	449,0434394725	0,956561
Октоген(γ)	450,0	450,9083642047	0,908364
Октоген(δ)	450,0	445,9663136644	4,033686
Тетрил	350,0	356,011654099	6,011654
Гексоген	500,0	427,9646676469	72,03533
ЭДНА	440,0	409,2601061173	30,73989
Нитрогуанидин	300,0	393,7629789225	93,76298
Нитрокарбамид	310,0	417,6184707441	107,6185
ДИНА	480,0	434,5080892236	45,49191
ДНБ	260,0	300,3810492237	40,38105
ТНБ	330,0	338,4419936023	8,441994
тротил	285,0	308,6822955713	23,6823
тротил(при 82°С)	285,0	314,7743830298	29,77438

2,4,6- Тринитросилол	270,0	280,1751808778	10,17518
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	327,4456492993	27,44565
ТНФ	315,0	356,2114199517	41,21142
Пикрат аммония	330,0	365,4877868065	35,48779
Динитронафталин	100,0	148,6831976548	48,6832
гексил			
	325,0	307,0866499851	17,91335
Гексанитростильбен	300,0	245,9471909799	54,05281
ТЭН(песок)	500,0	484,8573266611	15,14267
ТЭН(вода)	560,0	484,8573266611	75,14267
нитроманнит	490,0	586,2998322926	96,29983
нитроманнит(под водой)	560,0	586,2998322926	26,29983
нитроглицерин (в песке)	390,0	480,7005521578	90,70055
нитроглицерин(в воде)	590,0	480,7005521578	109,2994
Динитроэтиленглицоль	640,0	432,1693902036	207,8306
Динитродиэтиленглицоль	425,0	357,6204933135	67,37951
Триэтиленглицольдинитрат	320,0	375,5117865065	55,51179
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	499,352811289	40,64719
Нитрометан	470,0	405,8289653673	64,17103
дитринитроэтилкарбамид	528,0	525,11152593	2,888474
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496,0	571,7014204749	75,70142
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496,0	570,4581373201	74,45814
Бензотрифуроксан	450,0	348,8455967816	101,1544
Фульминат ртути(II)	110,0	80,062480433	29,93752
Нитроглицоль	620,0	438,795711243	181,2043
Пироксилин	375,0	421,1967562252	46,19676
Тетранитроанилин	430,0	339,9182732047	90,08173
Динитронафталин	100,0	189,8546065904	89,85461
тетрил	390,0	347,5703259032	42,42967
гексоген	520,0	416,4480902671	103,5519
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	421,748228689	58,25177
Нитрат метиламина	325,0	405,1581278221	80,15813
Триаминогуанидинитрат	350,0	414,6021102269	64,60211
Перхлорат аммония	220,0	397,3048821174	177,3049

Тест 9. Deductor

ВВ	Фугасность ь, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450,0	441,3530258651	8,646974
Октоген(β)	450,0	450,8155823332	0,815582
Октоген(γ)	450,0	457,4950339577	7,495034
Октоген(δ)	450,0	439,7944871527	10,20551
Тетрил	350,0	363,4797750243	13,47978
Гексоген	500,0	429,046807608	70,95319
ЭДНА	440,0	407,1533008645	32,8467
Нитрогуанидин	300,0	391,5848192047	91,58482
Нитрокарбамид	310,0	424,1063124708	114,1063
ДИНА	480,0	429,7884241221	50,21158
ДНБ	260,0	297,8594161046	37,85942
ТНБ	330,0	345,3296311643	15,32963
тротил	285,0	307,0515199306	22,05152
тротил(при 82°С)	285,0	328,8710619041	43,87106
2,4,6- Тринитроксилол	270,0	271,0263007762	1,026301
2,4,6-Тринитроанизол	300,0	323,3592207069	23,35922
ТНФ	315,0	358,5735305349	43,57353
Пикрат аммония	330,0	351,6640388993	21,66404
Динитронафталин	100,0	152,8452614729	52,84526
гексил	325,0	331,6401697178	6,64017
Гексанитростильбен	300,0	258,0024218977	41,99758
ТЭН(песок)	500,0	470,0584444023	29,94156
ТЭН(вода)	560,0	470,0584444023	89,94156
нитроманнит	490,0	583,9588218165	93,95882
нитроманнит(под водой)	560,0	583,9588218165	23,95882
нитроглицерин (в песке)	390,0	475,3463988742	85,3464
нитроглицерин(в воде)	590,0	475,3463988742	114,6536
Динитроэтиленгликоль	640,0	444,0215072474	195,9785
Динитродиэтиленгликоль	425,0	363,7269005426	61,2731
Триэтиленгликольдинитрат	320,0	361,3111530769	41,31115
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540,0	503,1452378834	36,85476
Нитрометан	470,0	454,874471693	15,12553
дитринитроэтилкарбамид	528,0	540,8682246477	12,86822

Дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б") (α)	496,0	589,4150626646	93,41506
Дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б") (β)	496,0	584,962094915	88,96209
Бензотрифуроксан	450,0	370,8003399949	79,19966
Фульминат ртути(II)	110,0	95,4418182242	14,55818
Нитрогликоль	620,0	436,9777079958	183,0223
Пироксилон	375,0	405,5569836277	30,55698
Тетранитроанилин	430,0	326,2335600393	103,7664
Динитронафталин	100,0	209,5469200672	109,5469
тетрил	390,0	350,7068565963	39,29314
гексоген	520,0	407,0892966855	112,9107
Диэтанолнитраминдинитрат	480,0	403,37794545	76,62205
Нитрат метилamina	325,0	405,5043073263	80,50431
Триаминогуанидинитрат	350,0	426,9044960833	76,9045
Перхлорат аммония	220,0	391,8340462567	171,834

ПРИЛОЖЕНИЕ 21.

Множественная регрессия.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	446,6964	3,3036
Октоген(β)	450	445,7979	4,2021
Октоген(γ)	450	447,9801	2,0199
Октоген(δ)	450	449,5206	0,4794
Тетрил	350	361,8822	11,8822
Гексоген	500	431,5943	68,4057
ЭДНА	440	409,674	30,326
Нитрогуанидин	300	402,3945	102,3945
Нитрокарбамид	310	426,1709	116,1709
ДИНА	480	428,2512	51,7488
ДНБ	260	305,6294	45,6294
ТНБ	330	347,9309	17,9309
тротил	285	312,0552	27,0552
тротил(при 82°С)	285	317,0873	32,0873
2,4,6- Тринитроксил	270	277,0703	7,0703
2,4,6-Тринитроанизол	300	330,8763	30,8763
ТНФ	315	365,95	50,95
Пикрат аммония	330	367,1777	37,1777
Динитронафталин	100	149,9921	49,9921

гексил	325	316,1581	8,8419
Гексанитроэтильбен	300	253,2881	46,7119
ТЭН(песок)	500	478,1467	21,8533
ТЭН(вода)	560	478,1467	81,8533
нитроманнит	490	581,1793	91,1793
нитроманнит(под водой)	560	581,1793	21,1793
нитроглицерин (в песке)	390	481,8762	91,8762
нитроглицерин(в воде)	590	481,8762	108,1238
Динитроэтиленглицоль	640	434,548	205,452
Динитродиэтиленглицоль	425	348,4617	76,5383
Триэтиленглицольдинитрат	320	352,624	32,624
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	497,9802	42,0198
Нитрометан	470	409,6773	60,3227
дитринитроэтилкарбамид	528	529,4278	1,4278
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	582,5543	86,5543
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	581,5273	85,5273
Бензотрифуроксан	450	372,7339	77,2661
Фульминат ртути(II)	110	80,1154	29,8846
Нитроглицоль	620	441,5019	178,4981
Пироксилит	375	418,1297	43,1297
Тетранитроанилин	430	347,2173	82,7827
Динитронафталин	100	186,5161	86,5161
тетрил	390	353,3653	36,6347
гексоген	520	420,3753	99,6247
Диэтанолнитрамиддинитрат	480	416,0053	63,9947
Нитрат метиламина	325	402,2169	77,2169
Триаминогуанидинитрат	350	413,1471	63,1471
Перхлорат аммония	220	395,8549	175,8549

ПРИЛОЖЕНИЕ 22.

Тест 1. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	365,9599	84,0401
Октоген(β)	450	370,7181	79,2819
Октоген(γ)	450	360,1776	89,8224
Октоген(δ)	450	354,636	95,364
Октоген(ε)	450	372,7951	77,2049
Тетрил	350	408,7459	58,7459
Гексоген	500	382,364	117,636

ЭДНА	440	363,7812	76,2188
Нитрогуанидин	300	428,5192	128,5192
Нитрокарбамид	310	433,0196	123,0196
ДИНА	480	348,6553	131,3447
ДНБ	260	347,4451	87,4451
ТНБ	330	441,9854	111,9854
тропил	285	375,2133	90,2133
тропил(при 82°С)	285	352,8395	67,8395
2,4,6- Тринитроксилол	270	332,0408	62,0408
2,4,6- Тринитроанизол	300	393,795	93,795
ТНФ	315	463,9869	148,9869
Пикрат аммония	330	383,4052	53,4052
Динитронафталин	100	295,6851	195,6851
гексил	325	422,522	97,522
Гексанитростильбен	300	412,8489	112,8489
ТЭН(песок)	500	382,7299	117,2701
ТЭН(вода)	560	382,7299	177,2701
нитроманнит	490	434,5492	55,4508
нитроманнит(под водой)	560	434,5492	125,4508
нитроглицерин (в песке)	390	438,1756	48,1756
нитроглицериц(в воде)	590	438,1756	151,8244
Динитроэтиленглицоль	640	375,1409	264,8591
Динитродиаэтиленглицоль	425	348,8857	76,1143
Триэтиленглицольдинитрат	320	349,7288	29,7288
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	406,4516	133,5484
Нитрометан	470	650,3014	180,3014
дитринитроэтилкарбамид	528	441,7812	86,2188
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	506,1528	10,1528
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	509,3821	13,3821
Бензотрифуроксан	450	526,6721	76,6721
Фульминат ртути(II)	110	116,7266	6,7266
Нитроглицоль	620	314,6046	305,3954
Пироксилон	375	386,7376	11,7376
Тетранитроанилин	430	456,4582	26,4582
Динитронафталин	100	344,2633	244,2633
тетрил	390	428,2454	38,2454
гексоген	520	447,1879	72,8121
Диэтанолнитраминдинитрат	480	338,098	141,902
Нитрат метиламина	325	549,9405	224,9405
Триаминогуанидиннитрат	350	484,3605	134,3605
Перхлорат аммония	220	164,8291	55,1709

ПРИЛОЖЕНИЕ 23.

Тест 2. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	530,2918	80,2918
Октоген(β)	450	529,9453	79,9453
Октоген(γ)	450	530,7853	80,7853
Октоген(δ)	450	531,3752	81,3752
Октоген(ε)	450	529,8065	79,8065
Тетрил	350	351,4362	1,4362
Гексоген	500	479,5087	20,4913
ЭДНА	440	442,3433	2,3433
Нитрогуанидин	300	448,7501	148,7501
Нитрокарбамид	310	435,5598	125,5598
ДИНА	480	444,011	35,989
ДНБ	260	259,1194	0,8806
ТНБ	330	323,4819	6,5181
тротил	285	284,2104	0,7896
тротил(при 82°C)	285	294,245	9,245
2,4,6- Тринитроксилол	270	281,7384	11,7384
2,4,6-Тринитроанизол	300	291,8874	8,1126
ТНФ	315	331,5162	16,5162
Пикрат аммония	330	363,074	33,074
Динитрофталин	100	280,2838	180,2838
гексил	325	326,4898	1,4898
Гексанитростильбен	300	302,8336	2,8336
ТЭН(песок)	500	455,2533	44,7467
ТЭН(вода)	560	455,2533	104,7467
нитроманнит	490	498,1115	8,1115
нитроманнит(под водой)	560	498,1115	61,8885
нитроглицерин (в песке)	390	438,7417	48,7417
нитроглицерин(в воде)	590	438,7417	151,2583
Динитроэтиленглицоль	640	391,7869	248,2131
Динитродиэтиленглицоль	425	308,5787	116,4213
Триэтиленглицольдинитрат	320	392,2277	72,2277
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	465,3658	74,6342
Нитрометан	470	421,9034	48,0966
дитринитроэтилкарбамид	528	501,5726	26,4274
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	543,2132	47,2132

дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	544,4259	48,4259
Бензотрифуроксан	450	491,1973	41,1973
Фульминат ртути(II)	110	246,238	136,238
Нитрогликоль	620	313,642	306,358
Пироксилон	375	319,0295	55,9705
Тетранитроанилин	430	306,495	123,505
Динитронафталин	100	172,0517	72,0517
тетрил	390	307,6406	82,3594
гексоген	520	422,3523	97,6477
Диэтанолнитрамидинитрат	480	373,5016	106,4984
Нитрат метиламина	325	351,751	26,751
Триаминогуанидинитрат	350	474,1004	124,1004
Перхлорат аммония	220	250,9391	30,9391

ПРИЛОЖЕНИЕ 24.
Тест 3. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	454,4802	4,4802
Октоген(β)	450	454,5041	4,5041
Октоген(γ)	450	454,4475	4,4475
Октоген(δ)	450	454,4105	4,4105
Октоген(ε)	450	454,5139	4,5139
Тетрил	350	394,1912	44,1912
Гексоген	500	456,2995	43,7005
ЭДНА	440	445,1736	5,1736
Нитрогуанидин	300	404,472	104,472
Нитрокарбамид	310	414,6367	104,6367
ДИНА	480	459,0651	20,9349
ДНБ	260	319,9398	59,9398
ТНБ	330	369,3517	39,3517
тротил	285	354,3706	69,3706
тротил(при 82°С)	285	356,3503	71,3503
2,4,6- Тринитроксилол	270	326,616	56,616
2,4,6-Тринитроанизол	300	371,1157	71,1157
ТНФ	315	389,4021	74,4021
Пикрат аммония	330	404,564	74,564
Динитронафталин	100	71,3377	28,6623
гексил	325	307,4817	17,5183
Гексанитростильбен	300	224,5114	75,4886

ТЭН(песок)	500	484,5535	15,4465
ТЭН(вода)	560	484,5535	75,4465
нитроманнит	490	541,4668	51,4668
нитроманнит(под водой)	560	541,4668	18,5332
нитроглицерин (в песке)	390	492,6594	102,6594
нитроглицерин(в воде)	590	492,6594	97,3406
Динитроэтиленглицоль	640	449,0164	190,9836
Динитродиэтиленглицоль	425	419,4563	5,5437
Триэтиленглицольдинитрат	320	414,8999	94,8999
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	496,8641	43,1359
Нитрометан	470	384,7876	85,2124
дитринитроэтилкарбамид	528	496,026	31,974
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	530,3554	34,3554
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	530,6953	34,6953
Бензотрифуроксан	450	375,5931	74,4069
Фульминат ртути(II)	110	78,2005	31,7995
Нитроглицоль	620	386,4428	233,5572
Пироксилит	375	412,8817	37,8817
Тетранитроанилин	430	367,3571	62,6429
Динитронафталин	100	120,2178	20,2178
тетрил	390	368,3778	21,6222
гексоген	520	426,9735	93,0265
Диэтанолнитраминдинитрат	480	437,8228	42,1772
Нитрат метиламина	325	372,7008	47,7008
Триаминогуанидиннитрат	350	424,3127	74,3127
Перхлорат аммония	220	290,6579	70,6579

ПРИЛОЖЕНИЕ 25.
Тест 4. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	437,5062	12,4938
Октоген(β)	450	436,5875	13,4125
Октоген(γ)	450	438,799	11,201
Октоген(δ)	450	440,3164	9,6836
Октоген(ε)	450	436,217	13,783
Тетрил	350	367,4004	17,4004
Гексоген	500	416,3819	83,6181
ЭДНА	440	410,1319	29,8681
Нитрогуанидин	300	425,415	125,415
Нитрокарбамид	310	486,628	176,628
ДИНА	480	390,4461	89,5539
ДНБ	260	388,5226	128,5226
ТНБ	330	391,4104	61,4104
трогил	285	356,6315	71,6315
трогил(при 82°C)	285	368,4634	83,4634
2,4,6- Тринитроксилол	270	352,6371	82,6371
2,4,6-Тринитроанизол	300	369,6154	69,6154
ТНФ	315	402,5503	87,5503
Пикрат аммония	330	414,3839	84,3839
Динитронафталин	100	285,6922	185,6922
гексил	325	330,7302	5,7302
Гексанитростильбен	300	292,8348	7,1652
ТЭН(песок)	500	450,8997	49,1003
ТЭН(вода)	560	450,8997	109,1003
нитроманнит	490	465,9644	24,0356
нитроманнит(под водой)	560	465,9644	94,0356
нитроглицерин (в песке)	390	538,8284	148,8284
нитроглицерин(в воде)	590	538,8284	51,1716
Динитроэтиленглицоль	640	553,9862	86,0138
Динитродиэтиленглицоль	425	369,8651	55,1349
Триэтиленглицольдинитрат	320	399,5047	79,5047
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	509,6385	30,3615
Нитрометан	470	470,3185	0,3185
дитринитроэтилкарбамид	528	463,8635	64,1365
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	509,5141	13,5141
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	507,1432	11,1432
Бензотрифуроксан	450	405,4057	44,5943

Фульминат ртуті(II)	110	61,6351	48,3649
Нитроглицоль	620	477,5941	142,4059
Пироксилін	375	309,9466	65,0534
Тетранитроанилін	430	273,3894	156,6106
Динитронафталин	100	389,2229	289,2229
тетрил	390	310,7267	79,2733
гексоген	520	382,538	137,462
Діетанолнитрамидинитрат	480	360,9326	119,0674
Нитрат метиламіна	325	307,0802	17,9198
Триаміногуанідиннітрат	350	353,535	3,535
Перхлорат аммонія	220	333,4392	113,4392

ПРИЛОЖЕНИЕ 26.

Тест 5. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	491,6423	41,6423
Октоген(β)	450	491,5477	41,5477
Октоген(γ)	450	491,7342	41,7342
Октоген(δ)	450	491,7765	41,7765
Октоген(ε)	450	491,503	41,503
Тетрил	350	412,9211	62,9211
Гексоген	500	425,8272	74,1728
ЭДНА	440	394,2058	45,7942
Нитрогуанидин	300	359,5464	59,5464
Нитрокарбамид	310	369,4056	59,4056
ДИНА	480	404,637	75,363
ДНБ	260	370,5869	110,5869
ТНБ	330	376,9141	46,9141
трогил	285	380,7823	95,7823
трогил(при 82°C)	285	383,6219	98,6219
2,4,6- Тринитроксилол	270	386,6616	116,6616
2,4,6- Тринитроанизол	300	380,0976	80,0976
ТНФ	315	375,9911	60,9911
Пикрат аммония	330	416,3583	86,3583
Динитронафталин	100	413,0633	313,0633
гексил	325	427,1587	102,1587
Гексанитростильбен	300	410,938	110,938
ТЭН(песок)	500	419,3497	80,6503
ТЭН(вода)	560	419,3497	140,6503
нитроманнит	490	446,7272	43,2728
нитроманнит(под водой)	560	446,7272	113,2728
нитроглицерин (в песке)	390	407,6317	17,6317
нитроглицерин(в воде)	590	407,6317	182,3683
Динитроэтиленглицоль	640	381,8219	258,1781
Динитродиэтиленглицоль	425	365,4958	59,5042
Триэтиленглицольдинитрат	320	371,6699	51,6699
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	433,7589	106,2411
Нитрометан	470	344,7154	125,2846
дитринитроэтилкарбамид	528	491,4642	36,5358
дитринитроэтилнитраммин (вещество "Б")(α)	496	484,6945	11,3055
дитринитроэтилнитраммин (вещество "Б")(β)	496	484,9922	11,0078
Бензотрифуроксан	450	376,5688	73,4312

Фульминат ртуті(II)	110	322,9515	212,9515
Нитроглицоль	620	330,5633	289,4367
Пироксилін	375	325,0833	49,9167
Тетранитроанилін	430	345,283	84,717
Динитронафталин	100	330,7759	230,7759
тетрил	390	347,6353	42,3647
гексоген	520	356,9539	163,0461
Дистанолнитрамиддинитрат	480	358,2125	121,7875
Нитрат метиламина	325	317,7547	7,2453
Триаміногуанідиннітрат	350	312,509	37,491
Перхлорат аммонія	220	308,7206	88,7206

ПРИЛОЖЕНИЕ 27.
Тест 6. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	450,965	0,965
Октоген(β)	450	436,997	13,003
Октоген(γ)	450	466,94	16,94
Октоген(δ)	450	480,618	30,618
Октоген(ε)	450	430,719	19,281
Тетрил	350	416,983	66,983
Гексоген	500	436,508	63,492
ЭДНА	440	483,744	43,744
Нитрогуанидин	300	284,085	15,915
Нитрокарбамид	310	338,988	28,988
ДИНА	480	526,321	46,321
ДНБ	260	272,397	12,397
ТНБ	330	346,744	16,744
трогил	285	293,436	8,436
трогил(при 82°С)	285	280,377	4,623
2,4,6- Тринитроксилол	270	230,721	39,279
2,4,6-Тринитроанизол	300	325,182	25,182
ТНФ	315	363,943	48,943
Пикрат аммония	330	376,914	46,914
Динитронафталин	100	8,728	91,272
гексил	325	481,029	156,029
Гексанитростильбен	300	432,969	132,969
ТЭН(песок)	500	537,238	37,238
ТЭН(вода)	560	537,238	22,762
нитроманнит	490	531,683	41,683
нитроманнит(под водой)	560	531,683	28,317
нитроглицерин (в песке)	390	547,793	157,793
нитроглицерин(в воде)	590	547,793	42,207
Динитроэтиленгликоль	640	572,406	67,594
Динитродизтиленгликоль	425	400,609	24,391
Триэтиленгликольдинитрат	320	426,431	106,431
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	548,846	8,846
Нитрометан	470	473,893	3,893
дитринитроэтилкарбамид	528	519,873	8,127
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	508,249	12,249

дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	500,486	4,486
Бензотрифуроксан	450	231,113	218,887
Фульминат ртути(II)	110	-534,889	644,889
Нитроглицероль	620	604,873	15,127
Пироксилин	375	327,688	47,312
Тетранитроанилин	430	397,844	32,156
Динитронафталин	100	97,014	2,986
тетрил	390	378,464	11,536
гексоген	520	483,049	36,951
Диганолнитрамиддинитрат	480	477,597	2,403
Нитрат метиламина	325	438,957	113,957
Триаминогуанидиннитрат	350	479,443	129,443
Перхлорат аммония	220	224,045	4,045

ПРИЛОЖЕНИЕ 28.
Тест 7. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	470,9255	20,9255
Октоген(β)	450	471,2182	21,2182
Октоген(γ)	450	470,5472	20,5472
Октоген(δ)	450	470,1528	20,1528
Октоген(ε)	450	471,3418	21,3418
Тетрил	350	379,6893	29,6893
Гексоген	500	524,9279	24,9279
ЭДНА	440	468,7364	28,7364
Нитрогуанидин	300	397,8848	97,8848
Нитрокарбамид	310	450,8509	140,8509
ДИНА	480	510,8067	30,8067
ДНБ	260	289,511	29,511
ТНБ	330	355,4995	25,4995
трогил	285	324,7512	39,7512
трогил(при 82°С)	285	326,7215	41,7215
2,4,6- Тринитроксилол	270	285,0748	15,0748
2,4,6-Тринитроанизол	300	344,3448	44,3448
ТНФ	315	384,2669	69,2669
Пикрат аммония	330	362,6983	32,6983
Динитронафталин	100	120,6459	20,6459
гексил	325	314,4047	10,5953
Гексанитростильбен	300	298,6329	1,3671
ТЭН(песок)	500	458,8224	41,1776
ТЭН(вода)	560	458,8224	101,1776
нитроманнит	490	481,4349	8,5651
нитроманнит(под водой)	560	481,4349	78,5651
нитроглицерин (в песке)	390	529,9283	139,9283
нитроглицерин(в воде)	590	529,9283	60,0717
Динитроэтиленглицоль	640	471,447	168,553
Динитродизтиленглицоль	425	412,962	12,038
Триэтиленглицольдинитрат	320	392,0611	72,0611
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	482,6287	57,3713
Нитрометан	470	294,0838	175,9162
дитринитроэтилкарбамид	528	459,5421	68,4579
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	534,9824	38,9824

дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	537,827	41,827
Бензотрифуроксан	450	368,8022	81,1978
Фульминат ртути(II)	110	121,5835	11,5835
Нитроглицерь	620	346,8448	273,1552
Пироксилин	375	489,1998	114,1998
Тетранитроанилин	430	379,9401	50,0599
Динитронафталин	100	146,4093	46,4093
тетрил	390	361,9294	28,0706
гексоген	520	413,0461	106,9539
Диэтанолнитрамидинитрат	480	442,1401	37,8599
Нитрат метиламина	325	202,259	122,741
Триаминогуанидинитрат	350	242,7788	107,2212
Перхлорат аммония	220	252,849	32,849

ПРИЛОЖЕНИЕ 29.

Тест 8. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	504,5751	54,5751
Октоген(β)	450	495,8184	45,8184
Октоген(γ)	450	515,9841	65,9841
Октоген(δ)	450	527,9818	77,9818
Октоген(ε)	450	492,1384	42,1384
Тетрил	350	377,5536	27,5536
Гексоген	500	447,6188	52,3812
ЭДНА	440	430,9164	9,0836
Нитрогуанидин	300	334,0614	34,0614
Нитрокарбамид	310	474,7971	164,7971
ДИНА	480	429,5183	50,4817
ДНБ	260	332,8956	72,8956
ТНБ	330	349,4844	19,4844
трогил	285	300,175	15,175
трогил(при 82°С)	285	369,0361	84,0361
2,4,6- Тринитроксилол	270	279,7539	9,7539
2,4,6-Тринитроанизол	300	300,3749	0,3749
ТНФ	315	335,4439	20,4439
Пикрат аммония	330	404,0837	74,0837
Динитронафталин	100	274,8749	174,8749
гексил	325	385,8968	60,8968
Гексанитростильбен	300	271,5672	28,4328
ТЭН(песок)	500	467,2203	32,7797
ТЭН(вода)	560	467,2203	92,7797
нитроманнит	490	516,5541	26,5541
нитроманнит(под водой)	560	516,5541	43,4459
нитроглицерин (в песке)	390	506,1138	116,1138
нитроглицерин(в воде)	590	506,1138	83,8862
Динитроэтиленглицоль	640	523,1633	116,8367
Динитродиэтиленглицоль	425	354,5331	70,4669
Триэтиленглицольдинитрат	320	386,3835	66,3835
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	529,0227	10,9773
Нитрометан	470	241,1816	228,8184
дитринитроэтилкарбамид	528	528,9755	0,9755
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	530,2461	34,2461
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	527,769	31,769
Бензотрифурооксан	450	409,2612	40,7388

Фульминат ртуті(II)	110	54,0024	55,9976
Нитроглицоль	620	393,8559	226,1441
Пироксилін	375	348,8159	26,1841
Тетранитроанилін	430	278,956	151,044
Динитронафталин	100	245,2274	145,2274
тетрил	390	373,3776	16,6224
гексоген	520	390,675	129,325
Діетанолнітратиндінітрат	480	386,5368	93,4632
Нитрат метиламіна	325	348,525	23,525
Триаміногуанідиннітрат	350	357,0515	7,0515
Перхлорат аммонія	220	221,653	1,653

ПРИЛОЖЕНИЕ 30.

Тест 9. STATISTICA Neural Networks.

ВВ	Фугасность, мл	Фугасность, мл (Predicted)	Отличие
Октоген(α)	450	480,5112	30,5112
Октоген(β)	450	481,2396	31,2396
Октоген(γ)	450	479,4619	29,4619
Октоген(δ)	450	478,1896	28,1896
Октоген(ε)	450	481,5295	31,5295
Тетрил	350	365,8872	15,8872
Гексоген	500	437,6174	62,3826
ЭДНА	440	376,1148	63,8852
Нитрогуанидин	300	368,3856	68,3856
Нитрокарбамид	310	400,9229	90,9229
ДИНА	480	399,7858	80,2142
ДНБ	260	250,6046	9,3954
ТНБ	330	328,9801	1,0199
трогил	285	275,6085	9,3915
трогил(при 82°C)	285	272,9425	12,0575
2,4,6- Тринитроксилол	270	258,6154	11,3846
2,4,6- Тринитроанизол	300	298,8194	1,1806
ТНФ	315	358,0838	43,0838
Пикрат аммония	330	347,0256	17,0256
Динитронафталин	100	132,4255	32,4255
гексил	325	376,9561	51,9561
Гексанитростильбен	300	301,9223	1,9223
ТЭН(песок)	500	467,3739	32,6261
ТЭН(вода)	560	467,3739	92,6261
нитроманнит	490	594,2519	104,2519
нитроманнит(под водой)	560	594,2519	34,2519
нитроглицерин (в песке)	390	483,762	93,762
нитроглицерин(в воде)	590	483,762	106,238
Динитроэтиленглицоль	640	397,7834	242,2166
Динитродиэтиленглицоль	425	340,6899	84,3101
Триэтиленглицольдинитрат	320	407,0978	87,0978
Нитроизобутилглицеринтринитрат	540	500,6553	39,3447
Нитрометан	470	350,1439	119,8561
дитринитроэтилкарбамид	528	536,8967	8,8967
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(α)	496	538,8379	42,8379
дитринитроэтилнитрамин (вещество "Б")(β)	496	538,8177	42,8177
Бензотрифуроксан	450	363,3253	86,6747

Фульминат ртуті(II)	110	137,6094	27,6094
Нитроглицоль	620	510,2215	109,7785
Пироксилін	375	557,3795	182,3795
Тетранитроанилін	430	432,3629	2,3629
Динитронафталин	100	176,6863	76,6863
тетрил	390	420,967	30,967
гексоген	520	451,3618	68,6382
Діетанолнитрамиддинітрат	480	495,972	15,972
Нітрат метиламіна	325	453,9983	128,9983
Триаміногуанідиннітрат	350	433,6825	83,6825
Перхлорат аммонія	220	451,8157	231,8157

ПРИЛОЖЕНИЕ 31.
База высокоэнергетических веществ для прогнозирования детонации

ВВ	Количество				Кислород			Плотность, г/см ³	Скорость детонации, м/с	Энтальпия образования, ккал/кг
	С	Н	О	N	Молярная масса, г/моль	Кислородный коэффициент	Кислородный баланс			
1 Октоген	4	8	8	8	296,1	66,66667	0,884995	1,89	9110	14,45
2 Тетрил	7	5	8	5	287,15	48,48485	0,819876	1,63	7500	16,7
3 Тетрил_2	7	5	8	5	287,15	48,48485	0,819876	1,7	7620	16,7
4 Гексоген	3	6	6	6	222,12	66,66667	0,884995	0,9	5900	16,825
Гексоген_5 3	3	6	6	6	222,12	66,66667	0,884995	1,77	8640	16,825
6 ЭДНА	2	6	4	4	151,04	57,14286	0,852851	1,55	7750	39,48
Нитрогуа	1	4	2	4	104,07	50	0,825953	1,2	6775	-22,0932
Нитрокар	1	3	3	3	105,0528	85,71429	0,940016	1	4700	-153,458
8 бамид	2	1	7	7	235,072	155,5556	1,084564	1,89	9110	14,45
9 НК-55	4	8	8	4	240,13	66,66667	0,884995	1,6	7730	-274,4
10 ДИНА	6	6	12	12	438,185	80	0,924579	1,96	9440	220
11 CL-20	3	3	4	6	187,0937	53,33333	0,838846	1,83	8680	45,3
12 TNAZ	6	4	4	2	392,6484	28,57143	0,722148	1,567	6100	-38,7
13 ДНБ	6	3	6	3	213,0825	44,44444	0,802932	1,66	7350	-48,8
14 ТНБ	7	5	6	3	227,13	36,36364	0,765178	1,64	6950	-70,6
15 тротил 2,4,6-										
Тринитро	8	7	6	3	241,2	30,76923	0,735107	1,51	6600	-101,7
16 ксилол										

215

34 Нитрометан	1	3	2	1	61,0165	57,14286	0,852851	1,137	6370	-442,8
Тетранитромета										
35 н	1	0	8	4	196,033	400	1,360495	1,64	6400	46,9
дитринитроэтил										
нитрамин										
36 (вещество "Б")	4	4	14	8	388,0892	140	1,057483	1,51	7950	-17
дитринитроэтил										
нитрамин_2										
37 (вещество "Б")	4	4	14	8	388,0892	140	1,057483	1,9	8520	-17
Триметилолэтан										
38 тринитрат	5	9	9	3	255,0697	62,06897	0,869946	1,4685	7100	-398,2
39 Пикрат аммония	6	6	7	4	240	46,666667	0,812389	1,63	7150	-375,4
40 Гексоген_2	3	6	6	6	222,12	66,666667	0,884995	1,7	8360	16,825

Приложение 32. Сравнительная таблица результатов

№	ВВ	С	Н	О	N	Молярная масса г/моль	Кислородный коэффициент	Кислородный баланс	Плотность, г/см3	Экспериментальная скорость детонации, м/с	Энтальпия образования, ккал/кг	Прогноз	Отличие от экспериментальной	Ошибка	По Айзенштадту	Отличие от экспериментальной	Ошибка
1	Октоген	4	8	8	8	296,1	66,6667	0,88499	1,89	9110	14,45	8714,136	395,86371	4,34538	8893	217	2,382
2	Тетрил	7	5	8	5	287,15	48,4848	0,81988	1,63	7500	16,7	7466,02	33,979885	0,45307	7352	148	1,97333
3	Тетрил_2	7	5	8	5	287,15	48,4848	0,81988	1,7	7620	16,7	7645,411	25,411005	0,33348	7562	58	0,76115
4	Гексоген	3	6	6	6	222,12	66,6667	0,88499	0,9	5900	16,825	5997,598	97,597869	1,6542	5934	34	0,57627
	Гексоген																
5	3	3	6	6	6	222,12	66,6667	0,88499	1,77	8640	16,825	8498,843	141,1565	1,63376	8544	96	1,11111
6	ЭДНА	2	6	4	4	151,04	57,1429	0,85285	1,55	7750	39,48	7511,736	238,26398	3,07437	8324	574	7,40645
	Нитрогуа																
7	нидин	1	4	2	4	104,07	50	0,82595	1,2	6775	-22,09	6859,432	84,432164	1,24623	7072	297	4,38376
	Нитрока																
8	рбамид	1	3	3	3	105,05	85,7143	0,94002	1	4700	-153,5	6278,856	1578,8563	33,5927	5462	762	16,2128
9	НК-55	2	1	7	7	235,07	155,556	1,08456	1,89	9110	14,45	8411,838	698,16248	7,66369	8181	929	10,1976
10	ДИНА	4	8	8	4	240,13	66,6667	0,88499	1,6	7730	-274,4	7735,032	5,032095	0,0651	7642	88	1,13842
11	CL-20	6	6	12	12	438,19	80	0,92458	1,96	9440	220	9936,416	496,41586	5,25864	9080	360	3,81356
12	TNAZ	3	3	4	6	187,09	53,3333	0,83885	1,83	8680	45,3	8680,014	0,0140069	0,00016	8250	430	4,95392
13	ДНБ	6	4	4	2	164,08	28,5714	0,72215	1,567	6100	-38,7	6327,719	227,71878	3,73309	4294	1806	29,6066
14	ТНБ	6	3	6	3	213,08	44,4444	0,80293	1,66	7350	-48,8	7556,122	206,12173	2,80438	7006	344	4,68027
15	Тротил	7	5	6	3	227,13	36,3636	0,76518	1,64	6950	-70,6	7339,455	389,45483	5,60367	7019	69	0,99281

№	ВВ	С	Н	О	N	Молярная масса г/моль	Кислородный коэффициент	Кислородный баланс	Плотность, г/см ³	Экспериментальная скорость детонации, м/с	Энтальпия образования, ккал/кг	Прогноз	Отличие от экспериментальной	Ошибка	По Айзенштадту	Отличие от экспериментальной	Ошибка
16	2,4,6-Тринитр окисол	8	7	6	3	241,2	30,76923	0,7351	1,51	6600	-101,7	6659,257	59,257374	0,8978	6673	73	1,106
17	2,4,6-Тринитр оанизол	7	5	7	3	243,131	42,42424	0,794	1,6	7640	-150,6	7067,291	572,70894	7,4962	6831	809	10,59
18	ТНФ	6	3	7	3	229,1	51,85185	0,8332	1,6	7350	-259,3	7039,55	310,44977	4,2238	6442	908	12,35
19	ТНФ_2	6	3	7	3	229,1	51,85185	0,8332	1,77	7480	-259,3	7817,669	337,66887	4,5143	6952	528	7,059
20	ТАТБ	6	6	6	6	258	40	0,7829	1,8	7860	-129,4	7579,315	280,68523	3,5711	7741	119	1,514
21	гексил	12	5	12	7	439	45,28302	0,8065	1,6	7145	22,5	6978,386	166,61352	2,3319	6904	241	3,373
22	Гексанит ростильб	14	6	12	7	464,194	38,70968	0,7767	1,7	7000	41,5	7379,295	379,2949	5,4185	7110	110	1,571
23	дипикра	12	6	12	8	454,178	44,44444	0,8029	1,76	7400	-15,9	7820,226	420,22592	5,6787	7427	27	0,365
24	ТЭН	5	8	12	4	316,075	85,71429	0,94	1,17	6110	-407,4	6211,81	101,81047	1,6663	5931	179	2,93
25	ТЭН_2	5	8	12	4	316,075	85,71429	0,94	1,51	7520	-407,4	7673,81	153,80955	2,0453	7121	399	5,306
26	ТЭН_3	5	8	12	4	316,075	85,71429	0,94	1,72	8350	-407,4	8202,477	147,52283	1,7667	7856	494	5,916
27	ТЭН_4	5	8	12	4	316,075	85,71429	0,94	1,77	8590	-407,4	8287,457	302,54307	3,522	8031	559	6,508
28	нитрома ннит	6	8	18	6	452,095	112,5	1,0034	0,9	5600	-357,2	5658,767	58,767241	1,0494	4551	1049	18,73
29	нитрома ннит_2	6	8	18	6	452,095	112,5	1,0034	1,73	8260	-357,2	8554,021	294,02106	3,5596	7871	389	4,709

№	ВВ	С	Н	О	N	Кислоро		Плотно сть, г/см3	Эксперим ентальная скорость детонации , м/с	Энтальпия образова ния, ккал/кг	Прогноз	Отличие от эксперим ентальной	По Айзенш татту	Отличие от экспери менталь ной	Ошибка		
						Молярн дний	Кислор одный баланс										
30	цирин	3	5	9	3	227,048	105,882	0,9889	1,735	8100	-390,2	8134,244	34,244093	0,4228	7686	414	5,11111
	Динитроэ тиленглик																
31	оль	2	4	5	2	136,032	83,3333	0,9337	1,489	7200	-381,6	6747,045	452,95476	6,291	6440	760	10,5556
	Динитрод изтиленгл																
32	иколь	6	8	7	2	220,075	43,75	0,7999	1,38	6760	-532,3	6638,005	121,9954	1,8047	5905	855	12,6479
	Нитроизо бутилгли церинтри																
33	нитрат	4	6	11	4	286,064	100	0,9754	1,64	7860	190,8	7999,089	139,08923	1,7696	8456	596	7,5827
	Нитромет																
34	ан	1	3	2	1	61,0165	57,1429	0,8529	1,137	6370	-442,8	5546,587	823,41293	12,926	3252	3118	48,9482
	Тетранит																
35	рометан	1	0	8	4	196,033	400	1,3605	1,64	6400	46,9	6483,358	83,357826	1,3025	6367	33	0,51563
	дитринит роэтилни																
36	трамин	4	4	14	8	388,089	140	1,0575	1,51	7950	-17	7948,809	1,1909613	0,015	6871	1079	13,5723
	дитринит роэтилни																
37	трамин_2	4	4	14	8	388,089	140	1,0575	1,9	8520	-17	9579,158	1059,1584	12,431	8431	89	1,0446

№	ВВ	С	Н	О	N	Молярная масса г/моль	Кислородный коэффициент	Кислородный баланс	Плотность, г/см ³	Экспериментальная скорость детонации, м/с	Энтальпия образования, ккал/кг	Прогноз	Отличие от экспериментальной	Ошибка	По Айзенштадту	Отличие от экспериментальной	Ошибка
38	Триметил олантрат	5	9	9	3	255,0697	62,069	0,86995	1,4685	7100	-398,2	7144,46	44,46282803	0,62624	7015	85	1,19718
39	Пикрат аммония	6	6	7	4	240	46,6667	0,81239	1,63	7150	-375,4	7457,34	307,3439542	4,29852	6864	286	4
40	Гексоген_2	3	6	6	6	222,12	66,6667	0,88499	1,7	8360	16,825	8487,85	127,8492639	1,5293	8334	26	0,311

ПРИЛОЖЕНИЕ 33. РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

No	name	C	H	N	O	massa	density	fr_t	boil_t	crit_t	crit_p	crit_v	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
1	acetamide	2	5	1	1	59,068	1,16	177,8	430,07	761	66,0	215,0	1074,1	1370,144635207	0,0024492668
2	acrylamide	3	5	1	1	71,079	1,13	184,1	378,68	710	57,3	260,0	1620,0	1604,5067876251	0,0000067082
3	n-methylacetamide	3	7	1	1	73,095	0,957	82,4	401,0	718	49,8	267,0	1710,0	1669,4726009831	0,0000459007
4	2-methacrylamide	4	7	1	1	85,106	1,1	230,9	418,73	741	54,5	298,0	1850,0	1745,2986437466	0,0003063559
5	diethanolamine	4	11	1	2	105,137	1,0966	82,4	516,0	715	32,7	349,0	2410,5	2485,2123983011	0,0001559937
6	pentaerythritol tetranitrate	5	8	4	12	316,138	1,75	284,9	517,73	676	22,4	731,0	2348,0	2359,3239121596	0,0000035836
7	l-glutamic acid	5	9	1	4	147,131	1,538	435,2	746,33	886	41,34	383,3	1848,4	1844,7099910782	0,0000003805
8	m-dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	1,575	195,53	571,73	805	38,5	434,0	2813,5	2743,5258653871	0,0001368349
9	o-dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	1,565	242,47	605,93	831	38,5	434,0	2843,0	2668,109434811	0,0008547802
10	p-dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	1,625	344,21	569,93	803	38,5	434,0	2806,2	2777,3080856838	0,0000233278
11	m-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	0,9011	237,2	582,53	815	44,2	406,0	3060,0	3029,8932922716	0,0000253308
12	o-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	0,9015	160,7	544,73	784	44,2	406,0	3060,0	3149,3521445023	0,0002231165
13	p-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	1,424	297,5	636,8	851	44,2	406,0	3050,0	3056,0873903904	0,0000010356
14	lysine	6	14	2	2	146,189	0,6	409,73	647,33	821	35,3	502,0	3590,0	3603,3781389048	0,0000050016
15	6-aminohexanol	6	15	1	1	117,191	0,92	136,13	454,73	681	34,4	436,0	3850,0	3785,4958706845	0,0001162778
16	diisopropanolamine	6	15	1	2	133,191	0,989	113,0	497,75	672	36,0	454,0	3720,0	3696,9922781563	0,0000147934
17	2,4,6-trinitrotoluene	7	5	3	6	227,133	1,654	177,53	571,73	795	30,4	480,0	3291,9	3262,3764759479	0,0000243589
18	2,4-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,52	157,373	602,33	814	34,0	487,0	3416,0	3526,0656694457	0,0003385521
19	2,5-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,3	126,5	602,33	814	34,0	472,0	3446,0	3409,7375242737	0,0000367482
20	2,6-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,283	150,53	544,73	770	36,0	487,0	3429,0	3549,7050430001	0,000407167
21	3,4-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,26	137,93	638,33	842	34,0	487,0	3466,0	3359,2598563309	0,0003184031
22	3,5-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,32	198,5	598,73	814	34,0	473,0	3437,0	3400,5362635695	0,0000371573
23	formanilide	7	7	1	1	121,139	1,186	122,0	519,8	787	41,1	382,0	3450,0	3404,6937995597	0,0000573637
24	p-nitrotoluene	7	7	1	2	137,138	1,1038	124,88	461,3	736	38,0	441,0	3550,0	3519,9543710788	0,0000252281
25	acetanilide	8	9	1	1	135,166	1,219	236,3	578,84	825	37,3	430,0	4026,0	4073,28639213	0,0000624876
26	8-hydroxyquinoline	9	7	1	1	145,161	1,034	163,13	512,33	788	43,6	414,0	4300,0	4290,0516537155	0,0000027658
27	diphenylmethane-4,4-diisocyanate	15	10	2	2	250,257	1,23	100,49	636,53	802	22,8	712,0	7056,0	6808,5771867705	0,0017108077

Приложение 34. Результаты прогнозирования энтальпии сгорания индивидуальных веществ

№	name	C	H	N	O	massa	density	Hform	fr_t	boil_t	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
1	citric acid	6	8	0	7	192,125	1,665	-1548,8	307,4	726,53	1784,0	1729,6930512475	0,0000292585
2	sorbitol	6	14	0	6	182,174	1,49	-1353,7	207,86	938,93	2914,7	2842,311116005	0,0000519858
3	ascorbic acid	6	8	0	6	176,126	1,65	-1160,3	377,6	686,93	2163,9	2066,4732832196	0,0000941667
4	l-glutamic acid	5	9	1	4	147,131	1,538	-1003,3	435,2	746,33	1848,4	1969,9390476854	0,0001465456
5	adipic acid	6	10	0	4	146,143	1,36	-994,3	306,23	640,13	2580,0	2523,7509924647	0,0000313885
6	glutaric acid	5	8	0	4	132,116	1,429	-960,5	207,5	612,3	1975,3	1867,4617308785	0,0001153684
7	pentaerythritol	5	12	0	4	136,148	1,396	-920,5	501,8	676,13	2498,1	2380,4504483652	0,0001373162
8	oxalic acid	2	2	0	4	90,036	1,9	-829,94	373,1	564,43	-242,9	364,2991606439	0,0036576618
9	terephthalic acid	8	6	0	4	166,133	1,522	-816,3	800,6	1037,93	3057,6	3022,2419613209	0,0000124027
10	fumaric acid	4	4	0	4	116,073	1,64	-811,03	548,6	554,0	1247,0	1019,4554865214	0,0005136579
11	isophthalic acid	8	6	0	4	166,133	1,526	-801,5	654,8	895,73	3070,7	3032,1828975054	0,000014718
12	maleic acid	4	4	0	4	116,073	1,59	-787,76	266,54	557,33	1268,4	1108,9418431981	0,0002522521
13	phthalic acid	8	6	0	4	166,133	1,593	-782,12	375,8	616,73	3091,5	3040,1565195494	0,0000261524
14	trimethylolpropane	6	14	0	3	134,175	1,176	-746,4	136,4	552,0	3413,7	3342,6244042812	0,0000501167
15	dimethyl terephthalate	10	10	0	4	194,187	1,075	-710,0	285,17	550,4	4411,5	4463,4516879905	0,0000267757
16	1-hexadecanol	16	34	0	1	242,445	0,8187	-686,4	120,56	593,6	9797,0	9419,837201305	0,0014112337
17	lysine	6	14	2	2	146,189	0,6	-678,7	409,73	647,33	3590,0	3437,3744363958	0,0002310978
18	1-pentadecanol	15	32	0	1	228,417	0,829	-658,3	111,0	580,75	9207,2	9096,3172659458	0,0001219745
19	1-tetradecanol	14	30	0	1	214,392	0,823	-628,2	99,5	548,6	8562,7	8616,599393272	0,000028821
20	1-tridecanol	13	28	0	1	200,365	0,8223	-599,5	87,08	525,2	7953,0	8000,4974202147	0,0000223811
21	salicylic acid	7	6	0	3	138,123	1,443	-592,1	317,48	492,53	2894,7	2765,7220148359	0,0001650336
22	ethylene carbonate	3	4	0	3	88,063	1,321	-586,3	97,52	460,4	1083,0	946,2864905303	0,0001854232
23	1,6-hexanediol	6	14	0	2	118,176	0,967	-583,86	107,6	469,4	3487,5	3489,8360597382	0,0000000541
24	neopentyl glycol	5	12	0	2	104,149	1,1	-551,2	260,33	409,73	2868,0	2743,6524671691	0,0001533965
25	1,2,3-benzenetriol	6	6	0	3	126,112	1,45	-551,1	272,93	587,66	2540,0	2406,1308516827	0,0001777879
26	pentaerythritol tetranitrate	5	8	4	12	316,138	1,75	-538,5	284,9	517,73	2348,0	2302,2420022028	0,0000207719
27	trioxane	3	6	0	3	90,079	1,17	-522,0	142,7	238,1	1383,8	1125,4293870719	0,0006622584
28	phthalic anhydride	8	4	0	3	148,118	1,53	-460,37	268,0	544,1	3171,5	3097,847126245	0,0000538171
29	p-toluic acid	8	8	0	2	136,15	1,06	-429,2	355,28	527,0	3692,2	3649,8983236559	0,0000177524
№	name	C	H	N	O	massa	density	Hform	fr_t	boil_t	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
30	o-toluic acid	8	8	0	2	136,15	1,06	-416,5	218,66	497,93	3699,0	3688,6529373874	0,0000010621

31	2,6-di-tert-butyl-p-cresol	15	24	0	1	220,355	1,048	-410,0	159,53	508,73	8390,0	8546,3670045695	0,0002425669
32	benzoic acid	7	6	0	2	122,123	1,2659	-385,2	252,27	480,65	3095,14	2996,4373676124	0,0000966493
33	p-hydroquinone	6	6	0	2	110,112	1,3	-371,1	340,7	545,0	2470,0	2556,7452371082	0,0000746505
34	1,3-benzenediol	6	6	0	2	110,112	1,28	-370,7	227,93	529,7	2719,0	2586,8387735122	0,0001732804
35	1,2-benzenediol	6	6	0	2	110,112	1,344	-362,3	220,01	473,9	2733,0	2576,9873172936	0,0002414688
36	bisphenol a	15	16	0	2	228,291	1,195	-349,4	307,4	680,9	7590,4	7516,699319898	0,000053887
37	epsilon-caprolactam	6	11	1	1	113,159	10,1	-329,4	156,58	518,0	3362,1	3283,555867289	0,0000612024
38	camphor	10	16	0	1	152,236	992,0	-319,0	356,18	405,36	5560,0	5556,9269956802	0,000000937
39	n-methylacetamide	3	7	1	1	73,095	0,957	-318,8	82,4	401,0	1710,0	1520,7435073603	0,000353389
40	acetamide	2	5	1	1	59,068	1,16	-315,6	177,8	430,07	1074,1	925,7370549931	0,0002183696
41	p-tert-butylphenol	10	10	0	1	150,221	0,9	-310,5	209,14	463,51	5360,0	4918,7143951271	0,0019318827
42	2-methacrylamide	4	7	1	1	85,106	1,1	-252,0	230,9	418,73	1850,0	1957,3491248726	0,0001143242
43	2-phenyl-2propanol	9	12	0	1	136,194	0,9735	-250,4	96,8	395,6	4690,0	4746,4871714448	0,0000316549
44	2,5-xylenol	8	10	0	1	122,167	0,965	-246,3	166,71	412,12	4110,6	4102,4051401332	0,0000006662
45	3,5-xylenol	8	10	0	1	122,167	0,968	-244,5	146,19	431,13	4112,8	4112,0220059766	0,000000006
46	3,4-xylenol	8	10	0	1	122,167	0,983	-242,4	149,18	440,6	4114,9	4114,9936022039	0,0000000001
47	2,6-xylenol	8	10	0	1	122,167	1,01	-233,1	114,1	393,93	4119,8	4121,6058019546	0,0000000324
48	o-cresol	7	8	0	1	108,14	1,0465	-204,3	87,87	375,8	3517,4	3470,1516396352	0,000022147
49	p-cresol	7	8	0	1	108,14	1,0347	-199,2	94,6	395,56	3522,6	3478,9712465584	0,0000188837
50	anthraquinone	14	8	0	2	208,216	1,42	-188,5	546,8	715,82	6292,0	6214,7324113356	0,0000592292
51	1,2,4,5-tetramethylbenzene	10	14	0	0	134,221	0,868	-121,7	147,61	386,31	5529,8	5478,0306281708	0,0000265881
52	8-hydroxyquinoline	9	7	1	1	145,161	1,034	-83,0	163,13	512,33	4300,0	4325,8064478098	0,0000066069
53	camphene	10	16	0	0	136,237	0,842	-75,0	116,6	320,9	5790,0	5761,1816904415	0,0000082391
54	2,4-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,52	-66,4	157,373	602,33	3416,0	3420,4685543139	0,0000001981
55	2,4,6-trinitrotoluene	7	5	3	6	227,133	1,654	-63,2	177,53	571,73	3291,9	3293,1659953014	0,0000000159
56	2,6-dinitrotoluene	7	6	2	4	182,136	1,283	-55,2	150,53	544,73	3429,0	3418,2656851615	0,0000011431
57	diphenylmethane-4,4-diisocyanate	15	10	2	2	250,257	1,23	-53,0	100,49	636,53	7056,0	7058,3970352287	0,000000057
58	diphenylmethane-4,4-diisocyanate	15	10	2	2	250,257	1,23	-53,0	100,49	636,53	7056,0	7058,3970352287	0,000000057
59	p-nitrotoluene	7	7	1	2	137,138	1,1038	-48,2	124,88	461,3	3550,0	3524,3889045532	0,0000065073
60	p-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	1,424	-45,6	297,5	636,8	3050,0	2991,7405444322	0,0000336724
61	p-dinitrobenzene, 1,4-Dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	1,625	-38,0	344,21	569,93	2806,2	2670,7869251927	0,0001819125
Ni	name	C	H	N	O	massa	density	Hform	fr_t	boil_t	enthalpy	enthalpy_OUT	enthalpy_ERR
62	1,3,5-trinitrobenzene	6	3	3	6	213,106	1,76	-37,0	257,45	886,73	2679,9	2693,9647763401	0,0000019625
63	m-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	0,9011	-34,2	237,2	582,53	3060,0	3008,2971817787	0,0000265198

64	benzophenone	13	10	0	1	182,222	1,111	-34,0	118,76	582,96	6292,0	6222,1169964759	0,0000484489
65	diphenyl ether	12	10	0	1	170,211	1,0661	-32,11	80,37	496,96	5920,0	5843,3286581347	0,0000583186
66	dibenzofuran	12	8	0	1	168,195	1,0886	-29,2	180,5	544,48	5680,0	5606,1048142565	0,0000541718
67	m-dinitrobenzene, 1,3-Dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	1,575	-27,0	195,53	571,73	2813,5	2728,5441183717	0,0000716025
68	o-nitroaniline	6	6	2	2	138,126	0,9015	-26,0	160,7	544,73	3060,0	3026,2979762869	0,0000112682
69	triethylenediamine	6	12	2	0	112,175	1,14	-14,2	321,98	345,2	3760,0	3754,5461142099	0,0000002951
70	m-phenylenediamine	6	8	2	0	108,143	1,14	-7,9	141,53	548,33	3320,0	3332,4431309377	0,000001536
71	o-dinitrobenzene, 1,2-Dinitrobenzene	6	4	2	4	168,109	1,565	-2,0	242,47	605,93	2843,0	2751,1312632342	0,0000837292
72	2-methylnaphthalene	11	10	0	0	142,2	1,0058	44,9	94,24	465,89	5582,7	5539,1348986954	0,0000188286
73	acenaphthene	12	10	0	0	154,211	1,0242	72,0	200,14	531,3	6001,4	5941,2998297064	0,0000358338
74	diphenylmethane	13	12	0	0	168,238	1,3421	75,1	77,43	507,69	6658,9	6606,4599654657	0,0000272814
75	naphthalene	10	8	0	0	128,174	1,0253	78,53	176,5	424,38	4980,9	4945,5178058845	0,0000124197
76	fluorene	13	10	0	0	166,222	1,203	90,2	238,62	567,12	6425,1	6360,1125750523	0,0000418986
77	biphenyl	12	10	0	0	154,211	1,041	98,2	156,6	491,0	6031,7	5972,0313750892	0,000035321
78	dibenzopyrrole	12	9	1	0	167,21	1,1	101,7	472,64	670,48	5935,6	5843,4807403179	0,0000841864
79	phenanthrene	14	10	0	0	178,233	1,179	110,1	210,61	644,54	6834,4	6780,1487623446	0,0000291985
80	anthracene	14	10	0	0	178,233	1,25	121,0	420,98	647,65	6847,4	6805,9251402608	0,0000170652
81	pyrene	16	10	0	0	202,255	1,271	125,2	303,19	742,64	7620,1	7665,4170406341	0,0000203734
82	diphenylamine	12	11	1	0	169,226	1,2	130,0	127,4	575,6	6180,0	6121,7288342043	0,0000336859
83	chrysene	18	12	0	0	228,293	1,274	145,3	496,4	825,8	8679,4	8749,057612018	0,0000481369
84	p-terphenyl	18	14	0	0	230,309	1,23	158,8	413,33	708,8	9052,5	8982,5099837111	0,0000485974
85	m-terphenyl	18	14	0	0	230,309	1,195	161,6	188,33	710,33	9050,0	8958,0324910944	0,0000839093
86	o-terphenyl	18	14	0	0	230,309	1,16	179,8	133,16	636,53	9050,0	8990,4405195508	0,0000351919
87	malononitrile	3	2	2	0	66,062	1,19	187,7	89,15	425,03	1609,0	1392,9995528508	0,0004628609
88	fluoranthene	16	10	0	0	202,255	1,252	190,2	230,32	721,04	7695,0	7728,3393053804	0,0000110269
89	hydrazobenzene	12	12	2	0	184,241	1,158	221,0	267,8	571,73	6394,6	6346,6295986534	0,0000228291
90	p-aminoazobenzene	12	11	3	0	197,24	1,09	323,0	262,13	679,73	6380,0	6307,1918998969	0,0000525897

ПРИЛОЖЕНИЕ 35. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ И ПОГНОЗИРОВАНИЯ ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ
 ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

№	name	enthalpy	ent_cale_low	ent_cale_high	enthalpy_predicted	эксп-прогн	эксп-низш	эксп-выш
1	citric acid	1784,0	1779,6	1956,2	1729,6930512475	54,30694875	4,4	172,2
2	sorbitol	2914,7	2700,25	3009,3	2842,311116005	72,388884	214,45	94,6
3	ascorbic acid	2163,9	2168,1	2344,7	2066,4732832196	97,42671678	4,2	180,8
4	l-glutamic acid	1848,4	2052,525	2251,2	1969,9390476854	121,5390477	204,125	402,8
5	adipic acid	2580,0	2575,95	2796,7	2523,7509924647	56,24900754	4,05	216,7
6	glutaric acid	1975,3	1974,4	2151,0	1867,4617308785	107,8382691	0,9	175,7
7	pentaerythritol	2498,1	2498,1	2763,0	2380,4504483652	117,6495516	0	264,9
8	oxalic acid	-242,9	198,91	243,06	364,2991606439	607,1991606	441,81	485,96
9	terephthalic acid	3057,6	3057,25	3189,7	3022,2419613209	35,35803868	0,35	132,1
10	fumaric acid	1247,0	1246,67	1334,97	1019,4554865214	227,5445135	0,33	87,97
11	isophthalic acid	3070,7	3072,05	3204,5	3032,1828975054	38,51710249	1,35	133,8
12	maleic acid	1268,4	1269,94	1358,24	1108,9418431981	159,4581568	1,54	89,84
13	phthalic acid	3091,5	3091,43	3223,88	3040,1565195494	51,34348045	0,07	132,38
14	trimethylolpropane	3413,7	3307,55	3616,6	3342,6244042812	71,07559572	106,15	202,9
15	dimethyl terephthalate	4411,5	4434,25	4655,0	4463,4516879905	51,95168799	22,75	243,5
16	1-hexadecanol	9797,0	9721,05	10471,6	9419,837201305	377,1627987	75,95	674,6
17	lysine	3590,0	3375,25	3684,3	3437,3744363958	152,6255636	214,75	94,3
18	1-pentadecanol	9207,2	9113,8	9820,2	9096,3172659458	110,8827341	93,4	613
19	1-tetradecanol	8562,7	8508,55	9170,8	8616,599393272	53,89939327	54,15	608,1
20	1-tridecanol	7953,0	7901,9	8520,0	8000,4974202147	47,49742021	51,1	567
21	salicylic acid	2894,7	2887,95	3020,4	2765,7220148359	128,9779852	6,75	125,7
22	ethylene carbonate	1083,0	1077,9	1166,2	946,2864905303	136,7135095	5,1	83,2
23	1,6-hexanediol	3487,5	3470,09	3779,14	3489,8360597382	2,336059738	17,41	291,64
24	neopentyl glycol	2868,0	2867,4	3132,3	2743,6524671691	124,3475328	0,6	264,3
25	1,2,3-benzenetriol	2540,0	2535,45	2667,9	2406,1308516827	133,8691483	4,55	127,9
26	pentaerythritol tetranitrate	2348,0	2396,4	2573,0	2302,2420022028	45,7579978	48,4	225
27	trioxane	1383,8	1384,05	1516,5	1125,4293870719	258,3706129	0,25	132,7
28	phthalic anhydride	3171,5	3171,33	3259,63	3097,847126245	73,65287376	0,17	88,13

№	p-toluic acid name	enthalpy	ent_calc_low	ent_calc_high	enthalpy_predicted	эксп-прогн	эксп-низш	эксп-вышш
29		3692,2	3686,2	3862,8	3649,8983236559	42,30167634	6	170,6
30	o-toluic acid	3699,0	3698,9	3875,5	3688,6529373874	10,34706261	0,1	176,5
31	2,6-di-tert-butyl-p-cresol	8390,0	8394,7	8924,5	8546,3670045695	156,3670046	4,7	534,5
32	benzoic acid	3095,14	3094,85	3227,3	2996,4373676124	98,70263239	0,29	132,16
33	p-hydroquinone	2470,0	2715,45	2847,9	2556,74522371082	86,74523711	245,45	377,9
34	1,3-benzenediol	2719,0	2715,85	2848,3	2586,8387735122	132,1612265	3,15	129,3
35	1,2-benzenediol	2733,0	2724,25	2856,7	2576,9873172936	156,0126827	8,75	123,7
36	bisphenol a	7590,4	7487,9	7841,1	7516,699319898	73,7006801	102,5	250,7
37	epsilon-caprolactam	3362,1	3361,775	3604,6	3283,555867289	78,54413271	0,325	242,5
38	camphor	5560,0	5550,8	5904,0	5556,9269956802	3,07300432	9,2	344
39	n-methylacetamide	1710,0	1708,175	1862,7	1520,7435073603	189,2564926	1,825	152,7
40	acetamide	1074,1	1076,025	1186,4	925,7370549931	148,362945	1,925	112,3
41	p-tert-butylphenol	5360,0	4833,75	5054,5	4918,7143951271	441,2856049	526,25	305,5
42	2-methacrylamide	1850,0	2168,475	2323,0	1957,3491248726	107,3491249	318,475	473
43	2-phenyl-2propanol	4690,0	4742,2	5007,1	4746,4871714448	56,48717144	52,2	317,1
44	2,5-xyleneol	4110,6	4110,95	4331,7	4102,4051401332	8,194859867	0,35	221,1
45	3,5-xyleneol	4112,8	4112,75	4333,5	4112,0220059766	0,777994023	0,05	220,7
46	3,4-xyleneol	4114,9	4114,85	4335,6	4114,9936022039	0,093602204	0,05	220,7
47	2,6-xyleneol	4119,8	4124,15	4344,9	4121,6058019546	1,805801955	4,35	225,1
48	o-cresol	3517,4	3517,6	3694,2	3470,1516396352	47,24836036	0,2	176,8
49	p-cresol	3522,6	3522,7	3699,3	3478,9712465584	43,62875344	0,1	176,7
50	anthraquinone	6292,0	6287,9	6464,5	6214,7324113356	77,26758866	4,1	172,5
51	1,2,4,5-tetramethylbenzene	5529,8	5506,25	5815,3	5478,0306281708	51,76937183	23,55	285,5
52	8-hydroxyquinoline	4300,0	4304,975	4459,5	4325,8064478098	25,80644781	4,975	159,5
53	camphene	5790,0	5794,8	6148,0	5761,1816904415	28,81830956	4,8	358
54	2,4-dinitrotoluene	3416,0	3413,65	3546,1	3420,4685543139	4,468554314	2,35	130,1
55	2,4,6-trinitrotoluene	3291,9	3295,925	3406,3	3293,1659953014	1,265995301	4,025	114,4
56	2,6-dinitrotoluene	3429,0	3424,85	3557,3	3418,2656851615	10,73431484	4,15	128,3
57	diphenylmethane-4,4-diisocyanate	7056,0	7058,75	7279,5	7058,3970352287	2,397035229	2,75	223,5
58	diphenylmethane-4,4-diisocyanate	7056,0	7058,75	7279,5	7058,3970352287	2,397035229	2,75	223,5
59	p-nitrotoluene	3550,0	3552,775	3707,3	3524,3889045532	25,61109545	2,775	157,3
60	p-nitroaniline	3050,0	3040,95	3173,4	2991,7405444322	58,25945557	9,05	123,4
61	p-dinitrobenzene, 1,4-Dinitrobenzene	2806,2	2806,7	2895,0	2670,7869251927	135,4130748	0,5	88,8

№	name	enthalpy	ent_calc_low	ent_calc_high	enthalpy_predicted	эксп-прогн	эксп-низиш	эксп-высш
62	1,3,5-trinitrobenzene	2679,9	2686,775	2753,0	2693,9647763401	14,06477634	6,875	73,1
63	m-nitroaniline	3060,0	3052,35	3184,8	3008,2971817787	51,70281822	7,65	124,8
64	benzophenone	6292,0	6290,75	6511,5	6222,1169964759	69,88300352	1,25	219,5
65	diphenyl ether	5920,0	5899,14	6119,89	5843,3286581347	76,67134187	20,86	199,89
66	dibenzofuran	5680,0	5660,2	5836,8	5606,1048142565	73,89518574	19,8	156,8
67	m-dinitrobenzene, 1,3-Dinitrobenzene	2813,5	2817,7	2906,0	2728,5441183717	84,95588163	4,2	92,5
68	o-nitroaniline	3060,0	3060,55	3193,0	3026,2979762869	33,70202371	0,55	133
69	triethylenediamine	3760,0	3797,9	4062,8	3754,5461142099	5,45388579	37,9	302,8
70	m-phenylenediamine	3320,0	3320,5	3497,1	3332,4431309377	12,44313094	0,5	177,1
71	o-dinitrobenzene, 1,2-Dinitrobenzene	2843,0	2842,7	2931,0	2751,1312632342	91,86873677	0,3	88
72	2-methylnaphthalene	5582,7	5582,65	5803,4	5539,1348986954	43,5651013	0,05	220,7
73	acenaphthene	6001,4	6003,25	6224,0	5941,2998297064	60,10017029	1,85	222,6
74	diphenylmethane	6658,9	6641,7	6906,6	6606,4599654657	52,44003453	17,2	247,7
75	naphthalene	4980,9	4980,93	5157,53	4945,5178058845	35,38219412	0,03	176,63
76	fluorene	6425,1	6414,95	6635,7	6360,1125750523	64,98742495	10,15	210,6
77	biphenyl	6031,7	6029,45	6250,2	5972,0313750892	59,66862491	2,25	218,5
78	dibenzopyrrole	5935,6	5912,025	6110,7	5843,4807403179	92,11925968	23,575	175,1
79	phenanthrene	6834,4	6828,35	7049,1	6780,1487623446	54,25123766	6,05	214,7
80	anthracene	6847,4	6839,25	7060,0	6805,9251402608	41,47485974	8,15	212,6
81	pyrene	7620,1	7630,45	7851,2	7665,4170406341	45,31704063	10,35	231,1
82	diphenylamine	6180,0	6182,175	6425,0	6121,7288342043	58,2711658	2,175	245
83	chrysene	8679,4	8679,4	8944,3	8749,057612018	69,65761202	0	264,9
84	p-terphenyl	9052,5	8934,75	9243,8	8982,5099837111	69,99001629	117,75	191,3
85	m-terphenyl	9050,0	8937,55	9246,6	8958,0324910944	91,96750891	112,45	196,6
86	o-terphenyl	9050,0	8955,75	9264,8	8990,4405195508	59,55948045	94,25	214,8
87	malononitrile	1609,0	1610,05	1654,2	1392,9995528508	216,0004471	1,05	45,2
88	fluoranthene	7695,0	7695,45	7916,2	7728,3393053804	33,33930538	0,45	221,2
89	hydrazobenzene	6394,6	6394,1	6659,0	6346,6295986534	47,97040135	0,5	264,4
90	p-aminoazobenzene	6380,0	6375,175	6618,0	6307,1918998969	72,8081001	4,825	238

Ляшева Стелла Альбертовна
Шлеймович Михаил Петрович

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ**

Подписано к печать 20.12.2019.
Формат 60х84^{1/16}. Бумага офсетная
Гарнитура «Times». Печать цифровая.
Усл. печ. 13,19 л. Печ. 14,19 л. Тираж 200 экз. Заказ № 263.
420111, Казань, Дзержинского, 9/1. Тел. 8(917)264-84-83.
Отпечатано в редакционно-издательском центре «Школа»
E-mail: ric-school@yandex.ru

ISBN 978-5-00162-086-0



9 785001 620860 >