

температурного интервала, вне которого ошибка определения энергии активации одной реакции в условиях протекания другой не превышает  $\delta$ , дается неравенствами

$$\frac{E_2 - E_1}{R} \left[ \ln \frac{Q_2 z_2 \delta E_2}{Q_1 z_1 (E_2 - E_1 - \delta E_2)} \right]^{-1} \leq T_s \leq \frac{E_2 - E_1}{R} \left[ \ln \frac{(E_2 - E_1 - \delta E_1) Q_2 z_2}{Q_1 z_1 \delta E_1} \right]^{-1}.$$

Для случая реакций ( $n=3$ ) выделение промежуточной стадии возможно при условии, аналогичном сформулированному в предыдущей задаче. Оно соответствует выражению (3), где  $m = x_{23}(1 - x_{12})/(1 - x_{23})$ ;  $c = 2(1 - x_{12}x_{23})/(1 - x_{23})$ .

На рис. 3 показано изменение длины температурного плато доминирования промежуточной реакции при различных параметрах реакций. Промежуточная реакция выделяется тем отчетливее, чем сильнее неравенство (3).

Исследование проведено в предположении, что все реакции экзотермические. Расчет по (2) и (4), (5) возможен, если реакция, идущая с поглощением тепла, имеет энергию активации, намного большую, чем экзотермическая. Анализ других кинетических схем превращения, кроме рассмотренных независимых параллельных реакций, требует привлечения уравнений для концентрации реагентов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б., Лейпунский О. И., Либрович В. Б. Теория нестационарного горения пороха.— М.: Наука, 1975.
2. Виллюнов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ.— Новосибирск: Наука, 1984.
3. Страковский Л. Г., Уляков П. И., Фролов Е. И. ФГВ, 1980, 16, 6, 53.

Поступила в редакцию 4/XII 1986,  
после доработки — 30/III 1987

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ВВ К УДАРУ

А. В. Белик, В. А. Потемкин

(Челябинск)

Возможность надежного прогноза чувствительности взрывчатых веществ (ВВ) к удару имеет определенное теоретическое и практическое значение. Вместе с тем большое количество факторов, влияющих на чувствительность, противоречивость в воззрениях на механизм возникновения и развития взрыва, а также на механизм взрывчатого разложения затрудняют прогноз с точки зрения строгой физической модели.

В настоящей работе предпринята попытка осуществить прогноз чувствительности ВВ к удару с привлечением аппарата теории распознавания образов [1]. Расчеты проводились по программам DETERM, DREAM и PRINCE, написанных на алгоритмических языках ФОРТРАН и БЭЙСИК для ЭВМ ЕС-1022 и микроЭВМ «Электроника ДЭ-28» [2], которые реализуют метод потенциальных функций Р. Б. Мучника и метод главных компонент, модифицированный для теории распознавания образов. В отличие от имеющихся вариантов метода главных компонент настоящая модификация заключается в том, что расчет информационных весов признаков производится отдельно для каждого класса, т. е. один и тот же признак имеет различные значения информационных весов в разных классах.

В качестве объектов исследования выбраны 78 органических ВВ с известными в литературе данными по чувствительности к удару [3]. Поэтому в настоящей работе под чувствительностью ВВ к удару понимается высота копра, при которой статистическая вероятность взрыва составляет 50 % ( $H_{50\%}$ ) в условиях, определенных в [3].

Для описания объектов выбраны следующие признаки:

1)  $OB_{100}$  — избыток «встроенного» в молекулу окисляющего вещества на 100 г ВВ. Расчет выполняется по формуле

$$OB_{100} = \frac{100(2n_O - 2n_C - n_H - 2n_{COO})}{M},$$

где  $n_O$ ,  $n_C$ ,  $n_H$  и  $n_{COO}$  — количество атомов кислорода, углерода, водорода и количество карбоксильных групп в молекуле ВВ соответственно;  $M$  — молекулярная масса вещества;

2)  $\exp(OB_{100})$ . Основанием выбора этого признака послужила известная зависимость  $\ln H_{50\%} = A + B \cdot OB_{100}$  [3];

3)  $K$  — количество стерически затрудняющих молекулу групп. Согласно [3], такими группами могут быть:  $(O_2N)_2-C-C-(NO_2)_2$ ,  $(O_2N)_2-C-C(NO_2)_3$  и т. д. По аналогии с С-нитросоединениями распространен подобный подход и на N-нитросоединения;

4)  $P$  — модифицированный показатель разветвленности, согласно [3], вычисляется в несколько приемов. Вначале каждому неводородному атому  $i$  ставится в соответствие величина  $L_i$ , равная количеству связей данного атома с неводородными соседями. Затем для каждой связи определяется число, равное произведению значений  $L_i$ , которые приписаны атомам, образующим данную связь. После этого из полученных чисел извлекаются квадратные корни и берутся обратные величины, которые и приписываются каждой связи. Сумма таких величин по всем связям и составляет показатель разветвленности. Нетрудно заметить, что такой показатель будет тем больше, чем длиннее углеводородная цепь. Для объективной оценки этого фактора величина  $P$  принималась равной показателю разветвленности, деленному на число связей в молекуле с неводородными атомами. Включен данный признак на основе гипотезы: поры ВВ — как камеры двигателя внутреннего сгорания. При ударе в поре происходит адиабатическое сжатие смеси пара ВВ и воздуха с последующим воспламенением на горячей точке, выполняющей роль «свечи». Поэтому можно отметить некоторую аналогию  $P$  с октановым числом;

5)  $T$  — признак типа соединения ( $T = 1$  для N-нитросоединений и  $T = 0$  для С-нитросоединений). Этот признак использовался только при совместном распознавании нитраминов с С-нитросоединениями.

В результате получаем, что признаки 1 и 2 — функции состава ВВ, а 3 и 4 несут информацию о структуре ВВ.

Все исследуемые соединения были разбиты на 3 класса (группы) по их значениям  $H_{50\%}$ . Первый класс представляют соединения с повышенной чувствительностью ( $H_{50\%} < 30$  см), второй — с  $H_{50\%} = 30 \div 70$  см, третий — с  $H_{50\%} > 70$  см. Значимость признаков для прогноза чувствительности оценивалась по изменению качества распознавания в методе потенциальных функций при добавлении каждого нового признака и определением информативных весов признаков по модифицированному методу главных компонент. В качестве эталонных объектов в методе потенциальных функций выбраны следующие соединения: бис(2, 2, 2-тринитроэтил)нитрамин (1-й класс); 2, 2, 2-тринитроэтил-3, 3, 3-тринитропропилнитрамин (1-й класс); N, N'-бис(2, 2, 2-тринитроэтил)-метиленидинитрамин (1-й класс); N-(2, 2, 2-тринитроэтил)нитраминоэтилнитрат (1-й класс); N, N'-бис(2, 2, 2-тринитроэтил)мочевина (1-й класс); 2, 2, 2-тринитроэтил-4, 4, 4-тринитробутират (1-й класс); этил-2, 2, 2-тринитроэтилкарбонат (2-й класс); 1, 1, 1, 7, 7, 7-гексанитрогептаноп-2 (2-й класс); 2, 2, 4, 6, 6-пентанитрогептан (2-й класс); 3, 6-динитраза-1, 8-октандинитрамин (3-й класс); нитроизобутил-4, 4, 4-тринитробутират (3-й класс); 2, 2-динитропропил-4, 4-динитровалерат (3-й класс). Качество распознавания оценивалось как количество правильно распознанных объектов, отнесенное к общему числу распознаваемых

Признак	Класс	Информативный вес		
		нитраминов	С-нитросоединений	нитраминов+ +С-нитросоединений
OB <sub>100</sub>	1	1,9434	2,0651	2,2278
	2	1,7949	1,6908	2,0710
	3	1,6859	1,4499	2,1948
exp(OB <sub>100</sub> )	1	-0,6674	0,3254	0,1205
	2	0,3425	1,3903	0,6265
	3	0,2117	1,3880	0,3660
K	1	-0,8736	-0,7935	-0,1196
	2	0,2186	-0,3982	0,4034
	3	-0,5136	-0,6282	0,2043
P	1	0,1209	-0,0098	0,0853
	2	-1,2702	0,2230	0,0346
	3	-1,3598	-0,7594	-0,0626
T	1	0	0	0,0315
	2	0	0	0,3934
	3	0	0	-0,0565

объектов, умноженное на 100 %. В результате получено, что при распознавании по признаку OB<sub>100</sub> качество составило 48,5 %; при добавлении признака exp(OB<sub>100</sub>) качество составило 51,5 %; добавление признака количества стерически затрудняющих групп повысило качество до 62,1 %; добавление признака, дифференцирующего вещества на нитрамины и С-нитросоединения, повысило качество распознавания до 72,7 %; введение показателя разветвленности привело к некоторому снижению качества распознавания (69,7 %).

Более детальная оценка значимости объектов и признаков для поставленной задачи классификации проведена в рамках модифицированного метода главных компонент. Задача решалась в трех вариантах: отдельно для нитраминов, отдельно для С-нитросоединений и при совместном рассмотрении двух классов веществ. Полученные результаты для информативных весов признаков приведены в таблице, откуда следует, что для качественного прогноза большое значение имеет OB<sub>100</sub>. В то же время его экспонента играет незначительную роль (исключения составляют классы 2 и 3 С-нитросоединений). Не очень высокие, но достаточно ощутимые для классификации значения признака K свидетельствуют в пользу вывода о сенсibiliзирующей роли стерически затрудняющих молекулу групп, сделанного в работе [3]. Однако их роль проявляется и для нитраминов, что не было отмечено в [3]. При этом разные знаки у информативных весов этого признака говорят о достаточно сложном и неоднозначном характере их влияния на чувствительность ВВ. Следует также обратить внимание на высокие значения информативных весов признака P для нитраминов. Совокупность всех приведенных данных хорошо объясняет получившуюся классификацию в рамках метода потенциальных функций.

Анализ информативных весов объектов позволил из всей совокупности исследованных веществ отобрать 10 эталонных (для нитраминов): медина (1-й класс); гексоген (1-й класс); N-3, 3, 5, 5-пентанитропиперидин (1-й класс); эднa (2-й класс); 3-нитраза-1, 5-пентандинитрамин (2-й класс); 3, 6-дипитраза-1, 8-октандинитрамин (2-й класс); тетрил (2-й класс); 2, 2, 4, 7, 7, 10, 12, 12-октанитро-4, 10-диазатридекан (2-й класс); бис(2, 2-динитробутил)нитрамин (3-й класс); N, N'-диитро-N, N'-бис(3-нитразабутил)оксамид (3-й класс). Качество распознавания при их использовании составило 88,2 %.

С целью дальнейшего повышения качества распознавания введено понятие о классе, предложенное в [4] как совокупность признаков для каждого класса, имеющих наибольшие значения весов. В данном случае для каждого класса выбирались признаки с наибольшим абсолютным значением информативных весов. Введение понятия о классе позволило достичь качества распознавания 94,1%. Понятие о классе включало: для 1-го и 3-го классов —  $OB_{100}$  и  $P$ , для 2-го класса —  $OB_{100}$  и  $K$ . (Заметим, что информативные веса признаков для 10 эталонных объектов существенно отличаются от таковых, полученных при использовании в качестве эталонных всех 44 нитрамино. Следовательно, понятие о классе в данном случае отличается от следующего из результатов, приведенных в таблице.) Для С-нитросоединений выбраны следующие эталонные объекты: 2, 2, 2-тринитроэтилкарбонат (1-й класс); метил-2, 2, 2-тринитроэтилкарбонат (1-й класс); N-(2, 2, 2-тринитроэтил)-3, 3, 5, 5-тетранитропиперидин (1-й класс); бис(2, 2, 2-тринитроэтил)сукцинат (2-й класс); 1, 1, 1, 3-тетранитробутан (2-й класс); 2, 2-динитропропан-1, 3-диол-бис(4, 4, 4-тринитробутират) (2-й класс); нитроизобутил-4, 4, 4-тринитробутират (3-й класс); метилен-бис(4, 4, 4-тринитробутирамид) (3-й класс); 2, 2-динитробутил-4, 4, 4-тринитробутират (3-й класс). Качество распознавания составило 76%. Введение понятия о классе повысило качество распознавания объектов до 84%. Понятие о классе включало: для 1-го и 3-го классов —  $OB_{100}$  и  $K$ , для 2-го класса —  $OB_{100}$  и  $P$ .

Исходя из гипотезы компактности классов, можно провести статистический анализ информативных весов признаков по критерию Стьюдента для уровня значимости 0,95. В результате, из рассмотренной последовательности соединений выброшены N-метилэтилендинитрамин, 1, 1, 1, 3, 5, 5, 5-гептанитропентан, N, N'-бис(2, 2, 2-тринитроэтил)мочевина, 2, 2, 2-тринитроэтил-4, 4, 4-тринитробутират, 3, 3, 4, 4-тетранитрогексан, 2, 2, 4, 4, 6, 6-гексанитрогептан. В «химических» причинах «нестандартного» поведения чувствительности этих соединений предстоит еще разобраться, однако без учета таких молекул можно для нитрамино получить качество распознавания 97% (не распознан 2, 2, 5, 7, 7, 9, 12, 12-октанитро-5, 9-диазатридекан), а для С-нитросоединений — 90% (не распознаны этилен-бис(4, 4, 4-тринитробутират) и 2, 2-динитропропил-4, 4, 4-тринитробутирамид). Отметим, что в настоящем подходе группа гемдинитросоединений распознана полностью, в то время как подход [3] не давал надежного прогноза.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев В. И. Распознающие системы. Справочник.— Киев: Наук. думка, 1983.
2. Белик А. В., Потемкин В. А. Тез. VIII итоговой научной конф.— Челябинск, 1984.
3. Камлет М. Детонация и взрывчатые вещества.— М.: Мир, 1981.
4. Зенкин А. А., Зенкин А. И. Сборник работ по математической кибернетике.— М.: ВЦ АН СССР, 1981.

Поступила в редакцию 13/XI 1986

#### ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К УДАРУ СМЕСЕЙ МЕТАЛЛ — ОКИСЛИТЕЛЬ

*С. П. Бажанов, Е. Х. Гидаспова, С. М. Муратов,  
В. Г. Капцлович, В. И. Иванов, Л. Я. Кашпоров,  
С. И. Воронков  
(Куйбышев)*

Существующий стандарт [1] на методы определения чувствительности ВВ к удару предусматривает испытания ВВ при постоянных нагрузках 50—100 мг. Однако, как показывают исследования [2, 3], энергия инициирования смесей металл — окислитель в значительной степени за-