

文章编号: 1006-9941(2007)06-0637-04

基于人工神经网络和混合遗传算法的炸药爆速预测

马忠亮¹, 徐方亮^{1,2}, 刘海燕¹, 张文才¹

(1. 中北大学化工与环境学院, 山西 太原 030051;

2. 中国人民解放军 66352 部队, 北京 010518)

摘要: 运用基于最优保存和自适应交叉变异的混合遗传算法训练的 BP 神经网络, 根据三维数据建模和炸药的分子量、氧平衡以及装药密度, 构建了一个 3-4-1 型的炸药爆速预测 BP 神经网络模型。同时利用训练好的神经网络模型对炸药的爆速进行了预测。预测结果表明: 模型预测值与有关文献的实验值接近, 绝对误差为 $\pm 7\%$; 也说明了炸药的分子量、氧平衡和装药密度等相关参数与其爆速具有一定的可类推性。

关键词: 物理化学; 爆速; 炸药; 人工神经网络; 混合遗传算法

中图分类号: TJ55; TP183; O64

文献标识码: A

1 引言

人工神经网络(Artificial Neuron Networks)是基于模拟人脑智能特点和结构的一种信息处理系统, 具有并行分布处理与存储、高度容错、自组织、自适应和自学习功能, 被广泛应用于各个研究领域^[1-4]。遗传算法^[5](Genetic Algorithm, GA)是模拟自然界生物进化机制的一种算法, 即遵循适者生存、优胜劣汰的法则。在科学和生产实践中表现为: 在所有可能的解决方法中找出最符合该问题所要求的条件的解决方法, 即找出一个最优解。因此可将人工神经网络和遗传算法等智能方法应用于火炸药科学领域的研究。常见的简单遗传算法(Simple Genetic Algorithm, SGA)同神经网络结合起来解决一些非线性问题时不十分有效; 最优保存遗传算法(Optimum Maintaining Simple Genetic Algorithm, OMSGA)虽在群体平均性能优越于自适应交叉变异遗传算法(Adaptive Genetic Algorithm, AGA), 但 OMSGA 易陷入局部最优解; AGA 虽不易陷入局部最优解, 但交叉概率 p_c 和变异概率 p_m 的计算量大^[6-7]。而通常采用基于 BP 神经网络的算法以及其改进算法, 不仅具有收敛速度慢, 易陷入局部最小的缺点, 且算法性能同网络的初始权值的选取有很大关系。针对这一问题, 本文提出了基于最优保存和自适应交叉变异的混合遗传算法来优化神经网络权值和阈值; 并根

据三维数据建模和炸药的分子量 M 、氧平衡 OB 和装药密度, 建立了 3-4-1 体系的炸药爆速预测神经网络模型。通过对炸药爆速的预测来说明该 BP 神经网络模型的稳定性和有效性。

2 基于混合遗传算法的神经网络算法

采用的是最优保存(OMSGA)和自适应交叉变异(AGA)的混合遗传算法。在执行混合遗传算法时, 把当前代(设当前代为 t 代)的 N 个个体组成的随机群体分成两个相对独立的子群体: 子群体 N_1 含有 $[\lambda_t * N]$ 个个体 ($[\lambda_t * N]$ 表示取 $[\lambda_t * N]$ 的整数。下同)。子群体 N_2 含有 $(N - [\lambda_t * N])$ 个个体。 λ_t 称为第 t 代的划分系数。其中 N_1 子群体施行 OMSGA, N_2 子群体施行 AGA。经这两种算法各自复制、交叉和变异后, 独立产生 N_1 个个体和 N_2 个个体。然后再把这 $N(N_1 + N_2)$ 个个体混合作为群体的下一代。并确定新的划分系数 λ_{t+1} , 根据 λ_{t+1} 把这新的 N 个个体分成两个子群体。直到满足算法终止条件。

定义算法中的两个性能指数: 在线性能和离线性能^[8]。在线性能表示算法在直到当前为止的时间内得到的所有性能值的平均值; 在函数 f 的响应面上, 搜索算法 α 的在线性能 $U_f(\alpha, T)$ 定义为:

$$U_f(\alpha, T) = \text{ave}_t[u_f(t)], t = 0, 1, 2, \dots, T$$

其中, $u_f(t)$ 为在时间 t 所得到的性能值。离线性能表示算法执行中得到的最优的性能值的平均值。在函数 f 的响应面上, 搜索算法 α 的离线性能 $U_f^*(\alpha, T)$ 定义为:

$$U_f^*(\alpha, T) = \text{ave}_t[u_f^*(t)], t = 0, 1, 2, \dots, T$$

其中, $u_f^*(t)$ 为在时间 $[0, t]$ 内最优的性能值。用

收稿日期: 2007-03-22; 修回日期: 2007-05-24

作者简介: 马忠亮(1967-), 男, 副教授, 从事新型发射药工艺和装药技术研究。

通讯联系人: 徐方亮(1981-), 男, 硕士, 主要从事发射药技术的研究。e-mail: xufangliang822@sohu.com

$n(t)$ 表示在时间 t 时适应值的在线性能 $U_f(\alpha, T)$ 的个体数; $n^*(t)$ 表示在时间 $[0, t]$ 时适应值在 $[U_f(\alpha, T) + U_f^*(\alpha, T)]/2$ 时的个体数。定义 $n(t)$ 与群体规模 N 的比值为 $\beta(t)$, $n^*(t)$ 与群体规模 N 的比值为 $\beta^*(t)$ 。

并根据 λ_t 必须满足: $0 \leq \lambda_t \leq 1, t = 0, 1, \dots, T$; 确定 λ_t 的取值规则如下:

- (1) 当 $\beta(t) \geq 0.6$ 时, λ_t 按 $\lambda_{t+1} = \frac{1}{6} + \frac{5}{6}\beta(t)$, $t = 0, 1, 2, \dots, T$;
- (2) 当 $\beta^*(t) \leq 0.2$ 时, λ_t 按 $\lambda_{t+1} = \frac{5}{3}\beta^*(t)$, $t = 0, 1, 2, \dots, T$;
- (3) 当 $\beta(t) \leq 0.6$ 且 $\beta^*(t) \geq 0.2$ 时, λ_t 按 $\lambda_{t+1} = \frac{1}{3} + \frac{5}{24}[\beta(t) + \beta^*(t)]$, $t = 0, 1, 2, \dots, T$;
- (4) 当 $\beta(t) \geq 0.6$ 且 $\beta^*(t) \leq 0.2$ 时, λ_t 按 $\lambda_{t+1} = \frac{1}{3} + \frac{1}{3}[\beta(t) - 3\beta^*(t)]$, $t = 0, 1, 2, \dots, T$ 。

3 混合遗传算法的操作步骤

在执行混合遗传算法时,由于划分系数 λ_t 的动态变化, λ_t 当 $\equiv 0$ 时。此混合算法即为自适应遗传算法; 当 $\lambda_t \equiv 1$ 时, 此混合算法为最优保存遗传算法; 在算法执行的过程中虽然种群规模 N 没有改变, 但是当划分系数 λ_t 随算法的执行而改变时, 它们的子群体规模 N_1 和 N_2 是随 λ_t 的改变而变化的。所以在此混合算法中实际参与相对独立的最优保存和自适应遗传算法的子群体的规模, 随代的延续而在发生变化。这实际是对神经网络的权值和阈值进行了优化。混合遗传算法的基本处理流程如图 1 所示。

具体操作步骤如下:

Step1 编码与初始群体的生成;

(1) 定义串的适应度函数 $f(x) = J[f(x)]$;

(2) 选取群体规模 N 、最优保存算法的交叉概率 p_c 和变异概率 p_m 、自适应算法中的 k_1, k_2, k_3, k_4 的值、终止条件、遗传代数等;

(3) 随机产生 N 个个体, 构成初始群体; 一般取 20 ~ 100, 本文群体规模取为 50。

Step2 根据划分系数 λ_t 的值。随机把群体划分成两个子群体 $N_1 = [\lambda_t * N]$ 和 $N_2 = (N - [\lambda_t * N])$;

Step3 运行混合遗传算法;

(1) 对 N_1 个个体实行最优保存遗传算法产生下一代子群体。其中的交叉概率和变异概率分别为 p_c

和 p_m , 并以概率 1 保留当前最佳个体至下一代;

(2) 对 N_2 个个体实行自适应遗传算法产生下一代子群体。其中的交叉概率和变异概率由以下公式计算:

$$p'_m = \begin{cases} k_1 (f_{\max} - f') (f_{\max} - \bar{f}), f' \geq \bar{f} \\ k_3, f' < \bar{f} \end{cases}$$

$$p'_c = \begin{cases} k_2 (f_{\max} - f) (f_{\max} - \bar{f}), f \geq \bar{f} \\ k_4, f < \bar{f} \end{cases}$$

$0 \leq k_1, k_2, k_3, k_4 \leq 1$ 其中, f_{\max} 为子群体 N_2 当前代中的最大适应度; \bar{f} 为子群体 N_2 当前代中的平均适应度; f' 为用于交叉的两个串中较大的适应度; f 为变异串的适应度。

Step4 由 Step3 产生的新子群体进行混合构成新的群体 N 作为 Step2 的下一代;

Step5 确定 λ_{t+1} 的值, 置 $\lambda_t = \lambda_{t+1}$;

Step6 重复 Step2 到 Step5, 直到满足某一性能指标或规定的遗传代数。

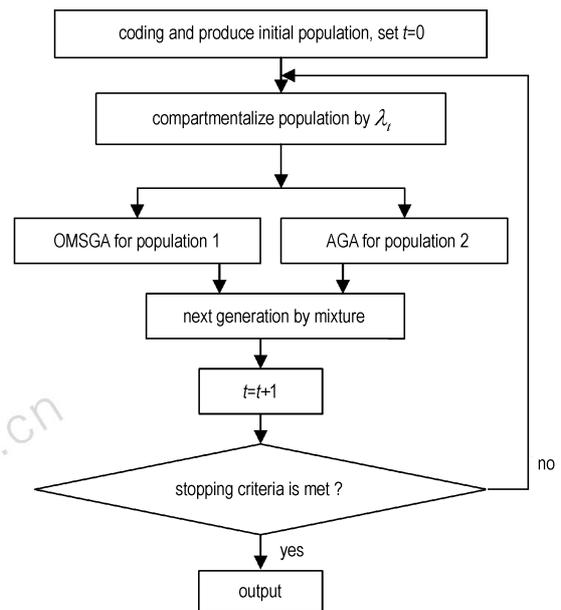


图 1 混合算法的基本流程图

Fig. 1 The basic flow chart of the hybrid genetic algorithm

4 实验结果及分析

运用基于最优保存和自适应交叉变异的混合遗传算法来训练 BP 神经网络, 使之从炸药的分子量 M 、氧平衡 OB 和装药密度 ρ_0 来预测其爆速。首先利用训练样本集对网络进行训练, 在采用主成分分析法分析验证训练样本集数据的有效性和分析验证其维数后, 确定使用三维数据建模; 最终确定网络结构为 3-4-1 型, BP 神经网络结构示意图如图 2 所示, 即 3 个输入节点(分别对

应于分子量 M 、氧平衡 OB 和装药密度 ρ_0), 1 个输出节点(对应于爆速 D)和 4 个隐藏层节点; 训练样本集: 50, 预测样本集: 20; 学习速率和动量常数分别为 0.75, 0.5, 迭代训练次数为 50 次, 均方误差为 0.001; 网络训练完毕后, 采用回归分析检验网络。并利用训练好的模型对预测样本集的爆速值进行预测。表 1 给出了部分训练好的网络的模型值与有关文献实验值^[9-12]的比较, 表 2 为实际预测时的模型预测值与有关文献实验值^[9-12]的比较。表中 E_1 和 E_2 分别为爆速值计算结果的相对误差和绝对误差。从表 1 中可以看出, 通过对训练样本集中的炸药进行训练后所建立的神经网络模型能较好地反映出炸药的相关参数与爆速之间的复杂关系, 其模型值与文献实验值比较接近, 绝对误差为 $\pm 3\%$; 表 2 为部分炸药爆速网络预测值与文献实验值的比较果, 结果表明, 该网络模型的预测结果较为满意, 绝对误差为 $\pm 7\%$; 同时也进一步说明了炸药的分子量, 氧平衡和装药密度等相关参数与其爆速具有一定的可类推性; 且该神经模型收敛速度快。

VLW 状态方程是以维里 (VIRIAL) 理论为基础建立的 VLW 高温高压爆轰产物状态方程, 已被广泛应用于计算炸药的爆轰性能参数; 而且其计算值与实验值也非常接近, 精度较高^[13]。但是 VLW 状态方程在实际计算中需要依赖于爆轰产物的 LJ 势参数的确定, 并且计算过程复杂, 计算量大。然而, 本文提出的炸药爆速预测模型所得到的训练模型值或预测值, 虽然与火炸药界较为熟悉的 VLW 状态方程所计算的结果相比精度较差, 但是运用该网络模型预测炸药爆速时, 仅仅只需输入炸药的分子量 M 、氧平衡 OB 和装药密度 ρ_0 等数据就可以很快的得到其预测值。所以, 本文提出的基于混合遗传算法的人工神经网络模型可以用于新型炸药的爆速的估算与预测。

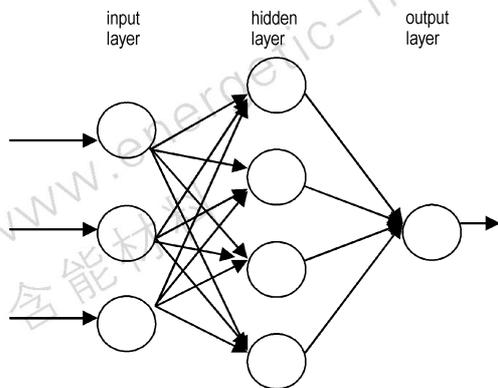


图 2 BP 神经网络结构示意图

Fig. 2 The structural diagrammatic sketch of BP Neural Networks

表 1 部分炸药爆速网络训练模型值与文献实验值的比较
Table1 The comparison of the detonation velocity of explosives between the model values of network trained and the experimental values of literature

explosives	molecular formula	molecular weight (M)	oxygen balance (OB)	charge density /g · cm ⁻³	detonation velocity / cm · s ⁻¹		E_1	E_2 /%
					D_{exp}	D_{mod}		
TNA	C ₆ H ₄ O ₄ N ₆	224	-0.045	1.720	7.300	7.137	0.16	2.23
ONT	C ₁₈ H ₆ O ₃ N ₁₆	494	-0.073	1.800	7.330	6.962	-0.37	-5.06
TNT	C ₇ H ₅ O ₆ N ₃	221	-0.061	1.609	6.890	7.042	0.15	2.21
HMX	C ₄ H ₈ O ₈ N ₈	296	-0.014	1.890	9.110	9.319	0.21	2.23
ABH	C ₂₄ H ₆ O ₁₄ N ₂₄	854	-0.043	1.780	7.600	7.602	0.02	0.21
NG	C ₆ H ₄ O ₃ N ₃	228	0.000	1.600	7.700	7.097	0.01	0.18
TNB	C ₇ H ₅ O ₆ N ₃	213	-0.035	1.662	7.350	7.159	-0.19	-2.56
HND	C ₁₂ H ₅ O ₁₂ N ₇	439	-0.033	1.590	7.000	7.097	0.10	1.38
2NU	C ₃ H ₄ O ₅ N ₄	176	-0.017	1.640	7.655	7.515	-0.14	-1.79
NBGN	C ₄ H ₆ O ₁₁ N ₄	286	0.000	1.640	7.860	7.849	0.10	0.12
TANN	CH ₃ O ₃ N ₇	167	-0.021	1.460	7.930	7.873	-0.06	0.59
HNAB	C ₁₂ H ₄ O ₈ N	444	-0.041	1.600	7.310	7.295	-0.01	0.20
DATB	C ₆ H ₅ O ₃ N ₆	241	-0.039	1.790	7.520	7.687	0.17	2.26
PETN	C ₅ H ₈ O ₄ N ₁₂	300	-0.033	1.760	8.260	8.321	0.06	0.69
DDNP	C ₆ H ₂ O ₃ N ₄	210	-0.038	0.900	5.700	5.797	0.09	1.66
DIPAM	C ₁₂ H ₆ O ₈ N ₁₂	446	-0.043	1.760	7.400	7.564	0.05	0.61
PNHA	C ₆ H ₇ O ₁₁ N ₁₁	409	-0.011	1.766	8.471	8.358	-0.17	-1.95
HNS	C ₁₄ H ₆ O ₆ N ₁₂	438	-0.057	1.700	7.000	7.154	0.15	2.14
TNEH	C ₁₀ H ₁₂ O ₁₆ N ₆	472	-0.021	1.588	7.242	7.268	0.03	0.36
7610	C ₄ H ₆ O ₈ N ₆	266	-0.011	1.785	8.550	8.384	-0.17	-1.94

表 2 部分炸药爆速网络预测值与文献实验值的比较
Table2 The comparison of the detonation velocity of explosives between the predicted values of network and the experimental values of literature

explosives	molecular formula	molecular weight (M)	oxygen balance (OB)	charge density /g · cm ⁻³	detonation velocity / cm · s ⁻¹		E_1	E_2 /%
					D_{exp}	D_{pre}		
Tetry 1	C ₇ H ₅ O ₃ N ₈	281	-0.041	1.710	7.850	8.109	0.26	3.27
RDX	C ₃ H ₆ O ₆ N ₆	222	-0.014	1.770	8.720	8.456	-0.26	-3.03
HONA	C ₁₃ H ₅ O ₉ N ₁₈	557	-0.035	1.780	7.560	7.943	0.38	5.07
DNTNN	C ₅ H ₁₀ O ₈ N ₁₄	394	-0.018	1.563	7.714	7.928	0.21	2.77
TACOT	C ₁₂ H ₄ O ₈ N ₈	388	-0.046	1.850	7.256	7.338	0.08	1.13
TNEB	C ₈ H ₈ O ₁₆ N ₆	444	-0.009	1.659	7.679	7.726	0.05	0.69
Expl D	C ₆ H ₆ O ₄ N ₇	240	-0.046	1.550	6.844	7.225	0.38	5.57
EDNA	C ₂ H ₆ O ₄ N ₄	150	-0.020	1.620	8.100	7.869	-0.23	-2.85
DINA	C ₄ H ₈ O ₄ N ₄	240	-0.017	1.630	7.712	8.208	0.50	6.43
TATB	C ₆ H ₆ O ₆ N ₇	272	-0.033	1.880	7.760	8.148	0.39	5.00
11 [#] NC	C ₃₄ H ₂₉ O ₃₉ N ₁₁	1255	-0.011	1.300	6.305	6.434	0.13	2.04
BTNEU	C ₅ H ₆ O ₅ N ₁₃	328	-0.024	1.860	9.123	8.847	-0.28	-3.06

4 结论

本文结合神经网络和自适应交叉变异、最优保存的混合遗传算法, 构建了一个网络结构 3-4-1 型炸药爆速预测神经网络模型。在实际预测实验中取得

了较为满意的预测结果,绝对误差为 $\pm 7\%$,虽精度不及 VLW 状态方程;但其运算简单、方便。这表明了这种结合人工神经网络和混合遗传算法的炸药爆速预测神经网络模型是可行的,对新型的炸药爆速的估算与预测及研究具有一定的指导意义。

参考文献:

- [1] Dan S. Application of neural networks to optimal robot trajectory planning[J]. *Robotics and Autonomous Systems*, 1993, 11(1): 23-24.
- [2] 胡守仁. 神经网络导论[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1993.
- [3] Zarate L E, Becker M, Garrido B D M, Rocha H S C. An artificial neural network structure able to obstacle avoidance behavior used in mobile robots[C] // IEEE 28th Annual Conference of the Industrial Electronics Society, 2002, (3): 2457-2461.
- [4] Holland JH. *Adaptation in Natural and artificial Systems*[M]. Ann Arbor: The University of Michigan Press, 1995.
- [5] 王耀南. 计算智能信息处理技术及其应用[M]. 长沙: 湖南大学出版社, 1999.
- [6] 李军, 边华棋. 用于最优化的计算智能[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
- [7] 孟炳泉, 孙方裕. 基于最优保存和自适应性的混合遗传算法[J]. 高等学校计算数学学报, 2002, 24(3): 244-253.
MENG Bing-quan, SUN Fang-yu. A hybrid genetic algorithm bases on optimum maintaining and adaptive genetic algorithm[J]. *Numerical Mathematics A Journal of Chinese Universities*, 2002, 24(3): 244-253.
- [8] De Jong K A. An analysis of the behavior of a class of genetic adaptive systems[D]. Ann Arbor: University of Michigan, 1975.
- [9] 孙荣康, 任特生, 高怀琳. 猛炸药的化学与工艺学(上册)[M]. 北京: 国防工业出版社, 1981: 195-410.
- [10] 劳允亮. 起爆药化学与工艺学[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1997.
- [11] 徐更光. 炸药性能与应用[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1991.
- [12] 秦尚文. 爆炸物品安全管理[M]. 成都: 四川科学技术出版社, 1988.
- [13] 龙新平, 何碧, 蒋小华, 等. 论 VLW 状态方程[J]. 高压物理学报, 2003, 17(4): 247-254.
LONG Xin-ping, HE Bi, JIANG Xiao-hua, et al. Discussions on the VLW Equation of State[J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2003, 17(4): 247-254.

Predicting the Detonating Velocity of Explosives Based on Artificial Neural Network and Hybrid Genetic Algorithm

MA Zhong-liang¹, XU Fang-liang^{1,2}, LIU Hai-yan¹, ZHANG Wen-cai¹

(1. *hemical Industry and Ecology Institute of North University of China, Taiyuan 030051, China;*

2. *Chinese People's Liberation Army No. 66352, Beijing 010518, China)*

Abstract: The model predicting the detonation velocity of explosives was founded on the back propagation (BP) neural-network (BP neural-network has been trained by a hybrid genetic algorithm which based on elitist model algorithm and adaptive crossover mutation), the three-dimension data modeling, molecular weight, oxygen balance and charge density of explosives. The detonation velocity of some explosives were predicted by using the ameliorative BP neural network model. The forecast results indicate that the predicted values by using this model approaches the experimental volues in literature. The absolute errors are $\pm 7\%$. And there are some analogies between the relative parameters (including the molecular, oxygen balance and charge density of explosives) and the detonation velocity of explosives. The results also show that the yield model has high predicting accuracy. It is a novel method for predicting and estimating the detonation velocity of new explosives.

Key words: physical chemistry; detonation velocity; explosives; artificial neural network; hybrid genetic algorithm