

文章编号: 1006-9941(2012)04-0414-04

基于支持向量机的 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性预测

范磊¹, 潘功配¹, 欧阳的华², 吕惠平¹, 逢高峰¹

(1. 南京理工大学化工学院, 江苏南京 210094; 2. 武警工程大学装备运输系, 陕西西安 710086)

摘要: 为了提高烟火药燃烧特性预测的准确性, 采用支持向量机(support vector machine, SVM)理论对镁/聚四氟乙烯(Mg/PTFE)烟火药的燃烧特性进行了预测, 并将预测结果与测试结果进行了比较。结果表明, 由支持向量机预测模型得到的结果与实验结果基本一致, 预测的燃速最大相对误差为 9.96%, 燃烧温度最大相对误差为 9.84%, 燃烧热最大相对误差为 4.20%。

关键词: 军事化学与烟火技术; 支持向量机; 烟火剂; 燃烧特性

中图分类号: TJ530

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.04.004

1 前言

镁/聚四氟乙烯(Mg/PTFE)烟火剂是一种高能混合物, 以此为主体的配方具有负氧差大、配方可调性强、燃烧温度高、热值大等特点, 为此在红外诱饵、点火药以及推进剂等方面得到了广泛应用^[1-2]。但 Mg/PTFE 的燃烧性能是制约其应用的关键因素, 故对此进行相关研究显得尤为必要。

目前, 已有针对 Mg/PTFE 体系的 Ladouceur 和 Kubota 燃烧数值模型^[3]以及相关理论研究等^[4], 但由于燃烧反应过程十分复杂, 此类研究仅限于局部参数在有限条件下的模拟运算, 理论模型大都建立在各种假设和约束条件之上, 涉及到的因素较少, 不足以指导其燃烧性能的预测^[5-7]。本文结合相关实验数据, 基于支持向量机(SVM)理论对不同配比、不同粒径、不同黏合剂含量的 Mg/PTFE 体系的燃烧性能进行了预测, 以期对烟火药配方设计提供指导。

2 实验数据

在使用 SVM 网络建立的 Mg/PTFE 贫氧推进剂性能预测模型之前, 需要相关数据对该网络模型进行训练, 为获取网络训练所必须的训练数据, 首先采用试验对 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性进行了测试。

收稿日期: 2011-08-26; 修回日期: 2012-01-16

基金项目: 2009 年江苏省普通高校研究生科研创新计划项目(CX09B_105Z); 国家部委预研基金(40406030201)

作者简介: 范磊(1974-), 男, 讲师, 在读博士研究生, 主要从事军事化学与烟火技术研究。

在设计试验时, 考虑到网络模型的精度和泛化能力在很大程度上取决于训练样本的准确性和完备性, 因此训练数据的合理性是建立良好网络模型的重要前提。为了得到较为合理的训练数据, 本试验采用均匀设计的方法来获取试验点, 以保证训练样本的完备性和均匀性。试验时, 采用 YX-ZR/Q 金鹰全自动量热仪, 德国 IMPAC 公司生产的 IGA-140 非接触式远红外测温仪和高速摄影法对 Mg/PTFE 烟火药的燃烧热、燃烧温度和燃烧速度进行测试, 具体结果见表 1。

3 SVM 网络 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性预测的建模

3.1 SVM 网络的基本思想

SVM 是一种在统计学习理论上发展而成的机器学习方法, 该方法与传统神经网络方法存在很大不同。SVM 网络基于结构风险最小化准则, 将网络训练的误差作为约束条件求解置信区间的最小化问题, 此时求得的期望风险才会达到一个较小的水准, 因此它的泛化能力要明显强于其他神经网络。SVM 处理问题的基本思想是利用核函数将输入样本空间映射到高维特征空间, 在这个高维空间中寻找一个最佳分类面, 得到输入与输出变量间的非线性关系。

3.2 SVM 网络用于 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性预测的建模

把 Mg/PTFE 烟火药配方的数学模型看作一个多输入多输出的映射关系 f :

$$Y = f(X) \quad (1)$$

表 1 Mg/PTFE 烟火药配方

Table 1 Formulations of Mg/PTFE pyrotechnics

No.	PTFE/Mg (mass ratio)	phenolic resin (mass content)	Mg size / μm	PTFE size /mm	experimental data		
					burning rate /mm · s ⁻¹	burning temperature /K	burning heat /MJ · kg ⁻¹
1	2.06	0.13	42.57	400	2.59	2174.4	17.856
2	2.06	0.21	86.66	400	1.10	2078.0	18.261
3	1.86	0.11	29.97	400	3.56	2392.0	17.833
4	1.86	0.19	86.66	140	1.76	2229.4	18.402
5	1.66	0.09	29.97	140	4.05	2459.4	17.797
6	1.66	0.17	56.89	140	2.63	2348.3	18.659
7	1.45	0.07	25.55	140	4.27	2482.1	17.762
8	1.45	0.15	56.89	90	3.19	2336.0	18.952
9	1.25	0.05	25.55	90	4.60	2405.6	17.865
10	1.25	0.13	42.57	90	3.95	2321.0	19.262
11	1.05	0.23	86.66	90	2.56	2106.6	20.238
12	1.05	0.11	42.57	25	5.11	2184.9	19.756
13	0.85	0.21	86.66	25	4.74	1929.1	21.104
14	0.85	0.09	29.97	25	6.94	2085.8	20.167
15	0.65	0.19	56.89	25	6.92	1784.1	21.904
16	0.65	0.07	29.97	5	8.48	1888.5	20.546
17	0.45	0.17	56.89	5	8.39	1566.3	22.654
18	0.45	0.05	25.55	5	9.76	1701.8	20.927
19	0.25	0.15	42.57	5	8.14	1395.8	23.502
20	0.25	0.23	25.55	400	6.90	1521.8	23.583
21	0.42	0.12	29.97	400	4.82	2451.8	18.892
22	0.42	0.15	42.57	400	5.47	2154.7	19.590
23	0.79	0.22	86.66	140	2.39	2343.0	17.629
24	0.79	0.08	25.55	140	7.21	1580.0	20.223
25	1.16	0.12	29.97	90	8.42	1393.7	22.127
26	1.16	0.18	56.89	90	4.28	2442.8	17.668
27	1.53	0.22	86.66	25	7.11	1550.9	22.891
28	1.53	0.08	25.55	25	6.15	2138.9	19.744
29	1.90	0.15	42.57	5	7.66	1913.1	20.118
30	1.90	0.18	56.89	5	8.14	1771.8	19.982

式中, Y 为 Mg/PTFE 烟火药的三种主要性能参数——燃烧热、燃烧温度和燃烧速度, 即:

$$Y = (Q, T, r) \quad (2)$$

X 为影响 Mg/PTFE 烟火药性能的四种因素, 即 PTFE/Mg 配比、粘合剂含量、镁粉粒径、PTFE 粒径。

本文的主要研究内容就是利用 SVM 网络对试验数据 (X, Y) 进行学习, 建立起由向量 X 到向量 Y 的非线性映射 f , 实现输入向量 X 即可预测与之对应的 Y 值的目。SVM 训练回归表达式为:

$$Y = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(x_i, x) + b \quad (3)$$

通过核隐式映射, 将输入空间 X 与输出空间 Y 联系起来, 非线性函数可以通过核特征空间中的线性学习器得到。实际上, 这个算法又称为核岭回归, 其解称为正则化网络, 其正则算子通过核隐式选择, 其中相应的 SVM 的训练网络如图 1 所示。

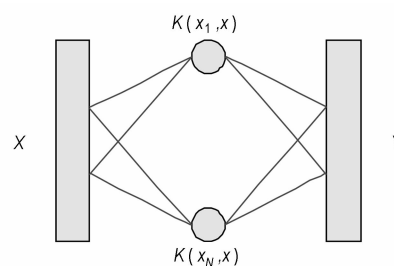


图 1 SVM 训练回归网络
Fig.1 SVM regression network

在使用 SVM 进行 Mg/PTFE 烟火药配方性能建模时, 核的选择对于 SVM 训练回归具有重要意义, 经过前期的实验, 本文使用径向基函数 (RBF) 核进行回归训练, 其表达式为:

$$K(x_i, x_j) = \exp(-\|x_i - x_j\|^2 / \sigma^2) \quad (4)$$

σ^2 为核的方差, 此时需要选择的参数有: 不敏感

系数 ε 、惩罚参数 C 及核参数 γ 。依据研究对象的特点,采用交叉验证的思想对 SVM 参数进行选择^[8-9],由于需要优化的参数不止一个,因此同时采取了遗传算法来寻找这些参数的最优值。将不敏感系数 ε 、惩罚参数 C 和核参数 γ 通过编码生成染色体种群,将训练样本集也划分为学习样本和检验样本,先用学习样本建立网络模型,再对检验进行预测,以预测相对误差作为目标函数进行最小化寻优,最后将寻优结果通过解码用于 SVM 的建模。

3.3 训练数据的预处理

对于 N 个样本的集合 $\{(P_k, T_k) | P \in R^m, T \in R^n, k = 1, 2, \dots, N\}$,在利用神经网络建立起 P, T 这两个离散序列之间的映射关系时,先要把总样本划分为两个部分,即训练样本 ϕ_1 和检测样本 ϕ_2 :

$$\phi_1 = \{(P_k, T_k) | P \in R^m, T \in R^n, k = 1, 2, \dots, N_1, N_1 \leq N\}$$

$$\phi_2 = \{(P_k, T_k) | P \in R^m, T \in R^n, k = N_1 + 1, N_1 + 2, \dots, N\}$$

得到一个完善的映射关系需要两步:第一步是以训练样本 ϕ_1 作为神经网络的学习数据并得到一个映射关系;第二步是以检测样本 ϕ_2 为标准对得到的映射关系进行检测。若该网络对检测样本 ϕ_2 中的输入数据能够得到较为准确的输出预测值,则可认为此网络具有较好的泛化能力,具备实际应用价值;反之,则认为此网络不具备应用价值。

由于 Mg/PTFE 烟火剂的配方因素和性能的数据之间存在很大差异(表 1),最大数据与最小数据之间甚至相差上万倍,这种差异可能会对神经网络的训练造成不利影响,为了消除这种影响,在神经网络开始训练之前,对网络的输入输出数据进行归一化处理。需要说明的是,表 1 共有 30 组配方数据,选取前 20 组配方数据及其对应的燃速、燃烧温度和燃烧热数据作为训练样本,然后利用余下的 10 组数据进行预测试验,并将预测结果与其对应的试验结果进行比较验证。

4 预测结果分析与讨论

利于所建立的并经过训练好的 SVM 预测模型,对后十组不同组成的 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性进行预测,其对应的结果如图 2~图 4 所示,具体数值与相对误差见表 2。由图 2~图 4 和表 2 可知,所预测的结果只是在少数预测点的相对误差较大(如燃速最大相对误差 9.96%),其他的相对误差都较理想,都比较接近测试值。

此外,还可以看出, SVM 的预测相对误差都保持在一个较好的水准,分析其原因主要是由于 SVM 不同于

一般的采用经验风险最小化的神经网络,它是采用结构风险最小化的原则,即将网络的训练误差作为优化问题的约束条件,以置信区间为优化目标,同时兼顾了其学习能力和泛化能力,而不像一般神经网络那样存在学习能力和泛化能力的矛盾,即出现所谓“过拟合”问题。因此相较于其他神经网络, SVM 具有更好的泛化能力。

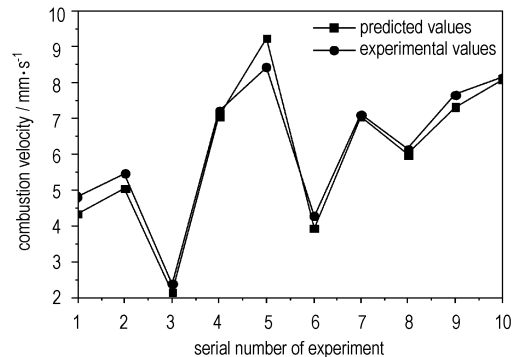


图 2 燃速的预测值与实验值

Fig. 2 Predicted and experimental values of the combustion velocity

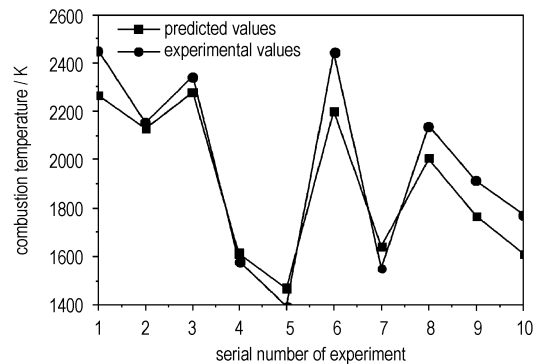


图 3 燃烧温度的预测值与实验值

Fig. 3 Predicted and experimental values of the combustion temperature

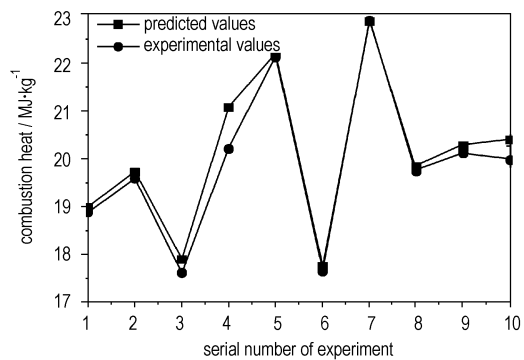


图 4 燃烧热的预测值与实验值比较

Fig. 4 Predicted and experimental values of the combustion heat

表 2 Mg/PTFE 燃烧特性的预测值与测试值

Table 2 Predicted and experimental values of the combustion characteristics for Mg/PTFE

No.	burning rate/mm · s ⁻¹		burning temperature/K		burning heat/MJ · kg ⁻¹	
	predictive value	relative error/%	predictive value	relative error/%	predictive value	relative error/%
21	4.34	9.96	2265.4	7.60	18.996	0.55
22	5.03	8.04	2128.1	1.23	19.734	0.74
23	2.16	9.62	2279.0	2.73	17.915	1.62
24	7.03	2.50	1613.8	2.14	21.073	4.20
25	9.23	9.62	1470.4	5.50	22.189	0.28
26	3.93	8.18	2202.5	9.84	17.761	0.53
27	7.05	0.84	1641.4	5.84	22.867	0.11
28	5.99	2.60	2005.4	6.24	19.834	0.46
29	7.32	4.44	1765.3	7.73	20.273	0.77
30	8.10	0.49	1608.7	9.21	20.395	2.07

5 结 论

(1) 将支持向量机用于 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性的预测是可行的。本研究预测的燃速最大相对误差为 9.96%，燃烧温度最大相对误差为 9.84%，燃烧热最大相对误差为 4.20%。

(2) 本研究为 Mg/PTFE 烟火药燃烧特性的预测与配方设计提供了一种新的途径与方法。

参考文献:

- [1] 郑磊,潘功配,陈昕,等. 镁粉粒度对 Mg/PTFE 贫氧推进剂燃烧性能的影响[J]. 含能材料,2010,18(2): 180-183.
ZHENG Lei, PAN Gong-pei, CHEN Xin, et al. Effect of magnesium powder particle size on combustion properties of Mg/PTFE fuel-rich propellant[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2010, 18(2): 180-183.
- [2] Ernst Christian Koch. Metal-fluorocarbon-pyrolants: III. Development and application of magnesium/teflon/ viton (MTV)[J]. *Propellants, Explosives & Pyrotechnics*, 2002, 27(5): 262-266.

- [3] 潘功配. 高等烟火学[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学出版社, 2005.
- [4] Smit K J, DE Yong L V. A theoretical study of the combustion of magnesium/Teflon/Viton pyrotechnic compositions[R]. 1991, ADA 243244.
- [5] 许小平,张唯. 惩罚函数法计算燃烧产物的平衡组分[J]. 宇航学报, 1994(3): 90-95.
XU Xiao-ping, ZHANG Wei. Calculation of equilibrium composition of combustion products by penalty method[J]. *Journal of Astronautics*, 1994(3): 90-95.
- [6] 王天放,李疏芬. 最小自由能法求解 GAP 在等压绝热条件下的燃烧产物[J]. 火炸药学报, 2003(4): 16-19.
WANG Tian-fang, LI Shu-fen. Free-energy minimization investigation on combustion of GAP under constant pressure and adiabatic condition[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2003(4): 16-19.
- [7] 肖鹤鸣. 高能化合物的结构和性质[M]. 北京: 国防工业出版社, 2004.
- [8] Vladimir Cherkassky, Yunqian Ma. Practical selection of SVM parameteras and noise estimation for SVM regression[J]. *Neural Networks*, 2004(17): 113-126.
- [9] Jinbo Bi, Kristin P Bennett. A geometric approach to support vector regressin[J]. *Neuro computing*, 2003(55): 79-108.

Combustion Characteristics Forecast of Mg/PTFE Pyrotechnic Composition with Support Vector Machine

FAN Lei¹, PAN Gong-pei¹, OUYANG De-hua², Lü Hui-ping¹, PANG Gao-feng¹

(1. School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing 210094, China; 2. Department of Equipment and Transportation, Engineering College of Armed Police Force, Xi'an 710086, China)

Abstract: The combustion characteristics of Mg/polytetrafluorethylene (PTFE) were studied with support vector machine (SVM) method, in order to improve the accuracy of combustion characteristics forecasting for the pyrotechnic composition. The predicted values were compared with that of experiments also. The results show that the predicted and experimental values agree with each other, and this method has high accuracy. The prediction maximum relative errors of the combustion velocity, the combustion temperature and the combustion heat are 9.96%, 9.84%, 4.20% respectively.

Key words: military chemistry and pyrotechnics; support vector machine; pyrotechnic composition; combustion characteristics

CLC number: TJ530

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.04.007