

文章编号: 1006-9941(2014)02-0221-05

# 基于 HLLE-SVM 预测混合炸药爆轰性能

魏小红<sup>1</sup>, 常双君<sup>1</sup>, 申孝立<sup>2</sup>, 耿瑞雄<sup>1</sup>, 雷琛琛<sup>1</sup>

(1. 中北大学化工与环境学院, 山西 太原 030051; 2. 二炮驻五一九厂军代室, 山西 长治 046012)

**摘要:** 为了预测炸药爆轰参数并提高预测精度, 提出一种将 Hessian 局部线性映射算法 (HLLE) 和支持向量机理论 (SVM) 相结合的预测方法。选取 16 种传统混合炸药作为研究对象, 利用 Hessian 局部线性映射算法理论, 对原始数据进行降维处理, 再将降维后的数据作为输入, 应用 SVM 对炸药爆速、爆热做回归预测, 采用遗传算法 (GA) 选取最佳惩罚因子、核函数参数, 将预测结果与文献值对比分析, 预测相对误差在  $\pm 3\%$  之内。最后将该方法应用于新型熔铸混合炸药 2,4-二氨基-3,5-二硝基-1-氧吡嗪 (LLM-105)/1-甲基-3,5-二硝基-1,2,4-三唑 (DNMT) 和 LLM-105/1-甲基-4,5-二硝基咪唑 (4,5-MDNI) 爆速预测, 与试验值做比较, 相对误差分别为 2.91%、3.72%。结果表明, 该方法对混合炸药爆轰参数预测误差较小, 模型精度较高。

**关键词:** 物理化学; 混合炸药; 支持向量机 (SVM); Hessian 局部线性映射算法 (HLLE); 爆轰参数

**中图分类号:** TJ55; O64

**文献标志码:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.02.019

## 1 引言

混合炸药作为一种相对不稳定系统, 组份比较复杂<sup>[1]</sup>, 影响其性能的主要因素与爆轰参数之间存在着复杂的非线性关系, 用相关理论很难获得精确的数学计算模型, 特别是目前研制的新型含铝混合炸药, 其临界直径较大, 属于非理想炸药, 传统计算或预测方法无法准确预估其爆轰性能参数。近年来, 国内外很多学者对炸药性能参数预测进行了相关研究, 如常艳<sup>[2]</sup>等人分析非理想爆轰能量预测模型, 编制了数值计算软件, 来计算含铝炸药爆轰参数; Ricardo Infante-Castillo<sup>[3]</sup>利用自然键轨道电荷和硝基基团中氮的化学位移作为结构参数, 建立定量模型来预测芳香硝基化合物的爆热; 一些学者利用分子结构、电子轨道等参数对相关性能参数进行预测<sup>[4-5]</sup>, 但因这些方法本身存在的不足和炸药性能参数是多因素相互作用的结果, 使结果误差都较大, 效果不理想。所以急需寻求一种新型方法来较为准确的预测混合炸药的性能参数。

支持向量机方法 (Support Vector Machine,

SVM) 是近些年得到广泛关注的一种通用的机器学习方法, 它是较神经网络预测、灰色理论等统计方法更为智能化的算法, 并且在解决小样本、非线性及高维模式识别中表现出特有的优势, 对于回归问题表现出良好性能<sup>[6-7]</sup>, 然而 SVM 缺乏数据预处理过程, 该过程对结果的精度影响很大。Hessian 局部线性映射算法 (HLLE) 是流形学习算法的一种<sup>[10]</sup>, 它是在保持数据信息足够完整的意义下合理约减数据集, 可以很好地弥补 SVM 的不足。本研究将两种算法相结合, 通过 HLLE 进行数据处理, SVM 做回归预测, 对传统混合炸药爆热、爆速做出预测, 并利用该方法对研制的新型混合炸药爆速进行预测并与实验值对比, 验证方法的合理性与可行性, 为今后新型炸药的相关性能参数预测提供理论依据。

## 2 方法原理

### 2.1 支持向量机理论

支持向量机方法是建立在统计学习理论和结构风险最小化原理基础上的学习方法<sup>[8-9]</sup>, 它能很好地克服高维数和过拟合等传统算法不可规避的问题。将支持向量机推广到回归问题, 需要引入合适的损失函数, 常常选择的损失函数为  $\varepsilon$ -不敏感损失函数:

$$c(x, y, f(x)) = \max\{0, |y - f(x)| - \varepsilon\} \quad (1)$$

假设给定训练集数据  $\{(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, l\}$ , 其中  $x_i \in R^d$  是第  $i$  个学习样本的输入值,  $y_i$  是其对应的目

收稿日期: 2013-12-03; 修回日期: 2013-12-12

基金项目: 火炸药国防专项资助

作者简介: 魏小红 (1989-), 男, 主要从事安全评价研究。

e-mail: yezhiguisu@126.com

通信联系人: 常双君 (1968-), 女, 主要从事混合炸药制备及爆轰性能预测研究。e-mail: junchsh@163.com

标值, 根据  $\varepsilon$ -不敏感损失函数, 限定在线性函数集合:  $f(x) = (\omega \cdot x) + b, \omega \in R^d, b \in R$  中估计回归函数, 根据结构风险最小化, 得到回归线性支持向量算法。原始最优化问题形式如下:

$$\min_{\omega \in R^d, \xi^{(*)}, b \in R} \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + c \sum_{i=1}^l (\xi_i + \xi_i^*) \quad (2)$$

$$((\omega \cdot x_i) + b) - y_i \leq \varepsilon + \xi_i, i=1, 2, \dots, l \quad y_i - ((\omega \cdot x_i) + b) \leq \varepsilon + \xi_i^*, i=1, 2, \dots, l, \xi_i^* \geq 0, i=1, 2, \dots, l$$

其中,  $\|\omega\|^2$  为置信范围, 表现函数集的表达能,  $\sum_{i=1}^l (\xi_i + \xi_i^*)$  为经验风险。c 为惩罚因子, 决定了离群点带来的损失的重要性。 $\xi^{(*)}$  为松弛变量, 体现了  $\varepsilon$ -不敏感损失函数。

利用 Lagrange 乘子法处理原始最优化问题, 得到对偶问题, 解该问题, 构造线性回归函数, 对于非线性回归, 支持向量机首先利用核函数  $K(x, x')$  将非线性映射到高维特征空间, 在这个高维特征空间进行线性回归, 从而得到原空间非线性回归的效果, 目前常用核函数有线性核函数、多项式核函数、径向基核函数 (RBF)、Sigmoid 核函数等, 而通过相关应用和实验表明, 径向基核函数优于其他核函数, 当然核函数的优劣也是在不断试验调整中, 是当前不断研究的课题。本研究也是利用该核函数进行建模, 其函数形式如下:

$$K(x, x_i) = \exp(-\gamma \|x - x_i\|^2), \gamma > 0 \quad (3)$$

利用 RBF 核函数得到的非线性回归函数如下:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{i=1}^l (\bar{\alpha}_i^* - \bar{a}_i) (\varphi(x_i) \cdot \varphi(x)) + \bar{b} \\ &= \sum_{i=1}^l (\bar{\alpha}_i^* - \bar{a}_i) K(x_i, x) + \bar{b} \end{aligned} \quad (4)$$

通过训练集确立非线性回归函数后, 将测试集数据的样本输入值代入, 得到目标值, 即为预测数据值。

## 2.2 HLLC 方法

Hessian 局部线性映射算法 (HLLC)<sup>[10]</sup> 是流行算法的一种, 对高维数据有较好低维表示, 即输入样本点  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}, x_i \in R^D (i=1, 2, \dots, N)$ , 本征维数  $d$ , 邻域参数  $k$ , 而输出是数据的低维嵌入  $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}, y_i \in R^d (i=1, 2, \dots, N)$ , 且  $d < \min(k, D)$ , 该算法步骤如下:

- (1) 首先计算每个样本点的邻域点;
- (2) 对每个邻域计算中心化矩阵的最大的  $k$  个奇异值对应的右奇异向量, 并组成矩阵, 即获取零空间坐标;
- (3) 估计 Hessian 矩阵;
- (4) 利用邻域的 Hessian 矩阵构造对称矩阵  $H$ ;

- (5) 计算  $H$  最小  $d+1$  个特征值对应的特征向量, 去掉对应 0 特征值的常数向量, 得到  $H$  的零空间;
- (6) 计算出嵌入结果。

## 3 模型建立与验证

### 3.1 HLLC-SVM 爆轰性能参数预测模型的建立

选取文献[11]中 16 种传统混合炸药作为研究对象, 建立模型。炸药的爆炸反应是组分中可燃元素与氧气发生的剧烈氧化还原反应, 这些炸药的元素组成对爆轰性能有直接影响, 密度、生成热、氧平衡都是计算炸药爆轰参数的基本数据, 因此以炸药元素的质量分数即  $\omega_C, \omega_H, \omega_O, \omega_N$ 、生成热、密度以及其氧平衡作为确定炸药爆速及爆热的影响因素。其中氧平衡 (OB) 是按生成  $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$  计算。根据 HLLC 理论, 利用 Matlab 对影响因素进行降维处理。再对炸药爆轰参数爆速、爆热做归一化处理, 归一化所采用的映射如下:

$$y = \frac{(y_{\max} - y_{\min}) \times (x - x_{\min})}{x_{\max} - x_{\min}} + y_{\min} \quad (5)$$

式中,  $x_{\min}$  和  $x_{\max}$  是爆轰参数数据的最小值和最大值,  $y_{\min}$  和  $y_{\max}$  是映射的范围参数。

确定训练集与测试集, 采用遗传算法 (Genetic Algorithm, GA) 寻求最佳惩罚因子  $c$ 、核函数参数  $g$ , 从公式 (2) 中可知  $c$  的作用是在确定的数据子空间中调节学习机器置信区范围和经验风险的比例以使学习机器达到最好, 它是控制模型复杂度和逼近误差的折中,  $g$  即为公式 (3) 中的核函数参数  $\gamma$ , 在 SVM 中一般用  $g$  表示核函数参数, 它的改变实际上是隐含地改变映射函数, 从而改变样本数据子空间分布的复杂程度, 也就决定了线性分类达到最小误差。遗传算法是按照所选择的适应度函数并通过遗传中的选择、交叉和变异对个体进行筛选, 使适应度值好的个体被保留, 适应度差的个体被淘汰, 通过这样的反复循环, 直至满足条件。本研究对训练集进行交叉验证意义下的准确率作为 GA 中的适应度函数值, 对惩罚因子  $c$ 、核函数参数  $g$  进行二进制编码, 以适应度函数值评定优劣, 设定种群规模 20、终止进化代数 100, 应用遗传算子选择、交叉、变异运算来产生下一代种群, 直至适应度值满足要求, 返回最优的  $c$ 、 $g$  参数值。选用径向基核函数 (RBF) 作为模型的核函数, 利用 SVM 理论建立模型, 对训练集进行训练, 直至得到理想效果, 确立模型, 用该模型对测试集进行预测, 对比文献值, 对结果做出评价。为了评定预测结果的优劣, 本研究选用了相对误差、均方误差和相关系数作为标准, 均方误差越小说明

泛化能力越好, 相关系数越接近 1, 说明相关性越好, 其计算公式为:

$$R = \frac{(\sum_{i=1}^l f(x_i) y_i - \sum_{i=1}^l f(x_i) \sum_{i=1}^l y_i)^2}{(\sum_{i=1}^l f(x_i)^2 - (\sum_{i=1}^l f(x_i))^2)(\sum_{i=1}^l y_i^2 - (\sum_{i=1}^l y_i)^2)} \quad (6)$$

### 3.2 混合炸药爆速的预测

选取 16 种传统混合炸药为研究对象, 在保证训练集包含所研究炸药的全部类别的前提下, 选取总样本数

的 70%, 即选取 12 种炸药为训练集, 剩余的作为测试集, 详见表 1, 其中序号 1~12 为训练集, 序号 13~16 为测试集。利用 GA 对  $c, g$  参数进行优化, 参数寻优结果见图 1。预测结果见表 1, 训练集的相关系数  $R = 96.60\%$ , 均方误差  $MSE = 8.33 \times 10^{-5}$ , 相对误差都小于  $\pm 3\%$ , 说明训练所建立的模型泛化能力很好, 误差较小, 相关性较好, 能够反映各影响因素与炸药爆速之间的关系, 精度高。测试集的相关系数  $R = 99.48\%$ , 均方误差  $MSE = 3.90 \times 10^{-5}$ , 预测样本误差均小于  $\pm 3\%$ , 预测准确度好。

表 1 炸药爆速及其影响因素

Table 1 Detonation velocity and its factors

No. explosive	density /g · cm <sup>-3</sup>	$\Delta H_f$ /kJ · kg <sup>-1</sup>	OB	$\omega_C$ /%	$\omega_H$ /%	$\omega_N$ /%	$\omega_O$ /%	literature velocity <sup>[11]</sup> /m · s <sup>-1</sup>	predicted velocity/m · s <sup>-1</sup>	relative errors/%
1 EL506A	1.48	-1668.6	-59.4	28.821	4.248	15.006	51.925	7200	7398.505	2.757
2 C-3	1.6	-269.7	-41.8	22.802	2.830	32.763	41.604	7627	7628.214	0.016
3 Comp. B (order A)	1.68	41.8	-45.4	25.100	2.622	29.844	42.434	7840	8037.416	2.518
4 EL506C	1.48	-1777.4	-63.9	37.908	5.774	11.839	44.479	7000	7194.156	2.774
5 PBX-9011	1.77	-169.4	-39.072	20.760	3.180	34.300	41.760	8500	8315.399	-2.172
6 Picratol52/48	1.63	1037.1	-62.6	32.984	2.329	20.710	43.978	6970	7168.132	2.843
7 A-5	1.793	255.1	-25	16.964	2.827	37.371	42.837	8733	8530.193	-2.322
8 Cyclotol75/25	1.71	121.3	-34.6	21.356	2.579	33.033	43.031	7938	8132.371	2.449
9 A-3	1.64	118.8	-50.7	22.444	3.741	34.447	39.368	8470	8268.490	-2.379
10 PBX-9501	1.84	95.3	-26.875	17.651	2.862	36.422	43.066	8830	8626.935	-2.300
11 C-4	1.59	139.3	-46.4	21.844	3.541	34.447	40.168	8040	8081.058	0.511
12 Pentolite50/50	1.7	-1016.2	-42	27.985	2.372	18.076	51.566	7530	7736.839	2.747
13 B-3	1.62	35.1	-42.4	24.490	2.501	30.112	42.897	7700	7913.483	2.773
14 Octol 75/25	1.81	107.5	-34.6	21.356	2.579	33.033	43.031	8480	8387.116	-1.095
15 PBX-9007	1.64	298.2	-49.861	23.659	3.223	34.047	39.071	8090	8154.196	0.794
16 PBX-9205	1.67	243.0	-43.504	21.934	3.136	34.818	40.112	8170	8228.498	0.716

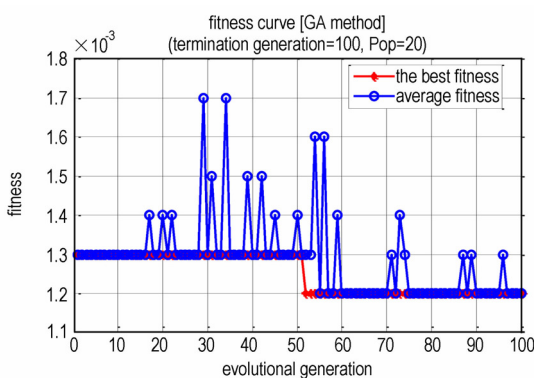


图 1 混合炸药爆速的 GA 寻优适应度曲线

Fig. 1 Fitness curves for velocity of composite explosives by GA

### 3.3 混合炸药爆热的预测

因所查数据的局限, 选用了表 1 中的 13 种混合炸药进行爆热预测, 见表 2。同样以样本数的 70% 为训练

集, 详见表 2, 其中序号 1~9 作为训练集, 序号 10~13 为测试集, 与爆速预测的影响因素略微不同, 选取炸药各自的 C、H、O、N 元素的质量分数即  $\omega_C, \omega_H, \omega_O, \omega_N$ 、生成热、理论密度 ( $\rho_{TMD}$ ) 以及其氧平衡作为其影响因素, 其中元素的质量分数、生成热以及氧平衡数值见表 1。利用 GA 对参数  $c, g$  寻优见图 2。预测结果如下, 其训练集的相关系数  $R = 98.54\%$ , 均方误差  $MSE = 1.58 \times 10^{-4}$ , 相对误差在  $\pm 2\%$ , 精度非常高, 而测试集误差有所增加, 除第 13 种炸药相对误差为 7.455% 外, 其余的也都在 3% 之内, 所以预测结果基本满足要求。

由以上可知, 在预测结果中, 有个别预测值与文献值误差较大, 这主要是由于数据的限制条件较大, 所收集到的数据及其影响因素有限, 使模型的识别能力与精度受到影响, 并且文献所提供的数据本身存在误差

也是导致误差产生的原因。如果能搜集到结构相近、数据较为准确的炸药做训练,尽可能提高模型精度,则预测效果将更为准确。在预测过程中,HLLE降维处理时间在2 s左右,遗传算法按所选择的适应度函数经过选择、交叉和变异等过程,寻求参数最优解,所需时间15 s左右,而当参数确定后,SVM的预测时间更短。

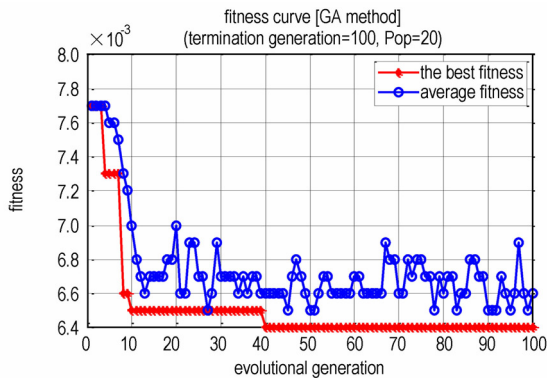


图2 混合炸药爆热的GA寻优适应度曲线

Fig. 2 Fitness curves for heat of composite explosives by GA

表2 炸药爆热及其影响因素

Table 2 Explosion heat and its factors

No.	explosive	$\rho_{TMD}$ /g · cm <sup>-3</sup>	literature values <sup>[11]</sup> /kJ · kg <sup>-1</sup>	predicted values /kJ · kg <sup>-1</sup>	relative errors/%
1	C-3	1.719	6063.9	6098.277	0.567
2	EL506C	1.484	5896.62	5929.8	0.563
3	PBX-9011	1.795	6398.46	6414.707	0.254
4	A-5	1.793	6774.84	6742.727	-0.474
5	PBX-9501	1.855	6649.38	6559.638	-1.35
6	C-4	1.663	6649.38	6614.553	-0.524
7	Pentolite50/50	1.71	6398.46	6432.837	0.537
8	B-3	1.75	6440.28	6473.143	0.51
9	Octol75/25	1.835	6565.74	6531.662	-0.519
10	Cyclotol75/25	1.776	6565.74	6754.706	2.878
11	A-3	1.672	6607.56	6580.574	-0.408
12	PBX-9007	1.697	6523.92	6381.576	-2.182
13	PBX-9205	1.72	6105.72	6560.914	7.455

### 3.4 与新型熔铸混合炸药爆速试验值对比

将LLM-105分别与DNMT(质量比63:37)、4,5-MDNI(质量比65:35)进行熔铸,得到符合技术要求的长17.97 mm、 $\Phi$ 19.96 mm和长17.58 mm、 $\Phi$ 19.64 mm的熔铸型混合炸药药柱,其密度分别为1.728, 1.691 g · cm<sup>-3</sup>,根据药柱组分,计算出相对分子量为1000时混合炸药的分子式,依据相关参数,通过相关理论计算得出药柱的原子组成、生成热、氧平衡。以表1中的16种混合炸药为训练集,建立模型,对这两种新型熔铸混合炸药的爆速进行预测。

根据GJB772A-1997方法702.1爆速电测法,采用ZBS-10A型爆速测试仪对两种新型熔铸混合炸药的爆速进行了测试,其与HLLE-SVM预测值的比较见表3。由表3可见,新型熔铸混合炸药爆速的HLLE-SVM预测值与实测值的误差分别为2.91%和3.72%,可以满足爆速预测要求,能够为实际应用提供参考。

表3 LLM-105/DNMT和LLM-105/4,5-MDNI爆速的预测值与实验值对比

Table 3 Comparison of predicted and experimental values of detonation velocity for LLM-105/DNMT and LLM-105/4,5-MDNI

explosive	test values /m · s <sup>-1</sup>	predicted values of HLLE-SVM/m · s <sup>-1</sup>	relative errors /%
LLM-105/DNMT	7813	8040.664	2.91
LLM-105/4,5-MDNI	7512	7791.672	3.72

## 4 结论

(1) 将支持向量回归机和Hessian局部线性映射算法相结合,建立HLLE-SVM爆轰参数预测模型,对传统混合炸药爆速预测,其测试样本的相关系数 $R=99.48\%$ ,均方误差 $MSE=3.90 \times 10^{-5}$ ,精度较高,能够满足对爆速预测的要求。

(2) 利用HLLE-SVM对传统混合炸药爆热进行预测,并与文献值进行对比分析,测试集最大误差为7.455%,尽管相对误差有所增加,但其整体精度符合爆热预测需求,能较为准确地预测混合炸药的爆热。

(3) 对LLM-105/DNMT和LLM-105/4,5-MDNI新型熔铸型混合炸药进行爆速预测,并与试验测试值进行比较,误差分别为2.91%、3.72%,表明采用HLLE-SVM方法对炸药爆轰参数预测是有效的,能够对新型炸药性能参数的预测提供一定的理论基础,操作简单,在实际应用中有较高推广价值。

### 参考文献:

- [1] 王晓峰. 军用混合炸药的发展趋势[J]. 火炸药学报, 2011, 34(4): 1-2.  
WANG Xiao-feng. Developmental trends in military composite [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2011, 34(4): 1-2.
- [2] 常艳, 张奇. 含铝炸药爆炸能量预估[J]. 含能材料, 2012, 20(6): 770-774.  
CHANG Yan, ZHANG Qi. Explosion energy prediction of aluminized explosive[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2012, 20(6): 770-774
- [3] Samuel P, Hernandez-Rivera, Ricardo Infante-Castillo. Predic-

- ting heats of explosion of nitroaromatic compounds through NBO charges and  $^{15}\text{N}$  NMR chemical shifts of nitro groups[J]. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2011, 963 (2-3): 279-283.
- [4] 袁方强, 蔡从中. 用结构参数预测硝基类炸药的撞击敏感度[J]. 爆炸与冲击, 2013, 33(1): 79-83.  
YUAN Fang-qiang, CAI Cong-zhong. Prediction of impact sensitivity of nitro energetic compounds by using structural parameters [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2013, 33(1): 79-83.
- [5] H Muthurajana, R Sivabalanb, N PonSaravananb, et al. Computer code to predict the heat of explosion of high energy materials [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2009, 161: 714-717.
- [6] Siamak Safarzadegan Gilan, Hamed Bahrami Jovein, Ali Akbar Ramezaniapour. Hybrid support vector regression-particle swarm optimization for prediction of compressive strength and RCPT of concretes containing metakaolin[J]. *Construction and Building Materials*, 2012, 34: 321-329.
- [7] Narwaria, Manish, Weisi Lin. Objective image quality assessment based on support vector regression[J]. *Neural Networks*, 2012, 21(3): 515-519.
- [8] Vladimir N. Vapnik. *Statistical Learning Theory*[M]. New York: Jone Wiley, 1988.
- [9] 刘俊娥, 曾凡雷, 郭章林. 基于 RS-SVM 模型的煤与瓦斯突出多因素风险评价[J]. 中国安全科学学报, 2011, 21(7): 21-25.  
LIU Jun-e, ZENG Fan-lei, GUO Zhang-lin. Study on multiple factors risk evaluation of coal and gas outburst based on RS-SVM model[J]. *China Safety Science Journal*, 2011, 21(7): 21-25.
- [10] 莫丽娟. 流形学习算法研究[D]. 广州: 中山大学, 2010: 11-14.  
MO Li-xian. Research on manifold learning algorithms [D]. Guangzhou: Sun Yat-Sen University, 2010: 11-14.
- [11] 孙国祥. 混合炸药及其发展[M]. 西安: 中国兵器集团第二零四研究所, 2008.  
SUN Guo-xiang. Composite explosions and its development [M]. Xi'an: Xi'an modern chemistry research institute, 2008.

## Prediction of the Composite Explosion Parameters by HLLE-SVM

WEI Xiao-hong<sup>1</sup>, CHANG Shuang-jun<sup>1</sup>, SHEN Xiao-li<sup>2</sup>, GEN Rui-xiong<sup>1</sup>, LEI Rui-chen<sup>1</sup>

(1. College of Chemical Engineering and Environment, North University of China, Taiyuan 030051, China; 2. The army Representative Agency of Second Artillery in 519 Factory, Changzhi 046012, China)

**Abstract:** In order to improve the prediction accuracy of the detonation parameters, a new method based on Support Vector Machine(SVM) theory and Hessian Local Linearly Embedding algorithm (HLLE) was proposed to predict 16 traditional composite explosives. The original data after dimension reduction with HLLE, was input to regressively predict the heat and velocity of composite explosion by SVM. The best kernel function parameter and penalty factor are selected by Genetic Algorithm(GA). The calculated results of the explosives almost agree with those of the literature, and the relative error is within  $\pm 3\%$ . Using the method, the values of detonation velocity for 2,4-diamino-3,5-dinitro pyrazine-1-oxide/1-methyl-3,5-dinitro-1,2,4-triazole and 2,4-diamino-3,5-dinitro pyrazine-1-oxide/1-methyl-4,5-dinitroimidazole were predicted and compared with experimental and the relative errors are 2.91% and 3.72%, respectively, showing that the proposed method is comparatively accurate.

**Key words:** physical chemistry; composite explosive; Support Vector Machine (SVM); Hessian Local Linearly Embedding algorithm (HLLE); detonation parameters

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.02.019