

研究简报

人工神经网络法预测炸药组分的色谱保留值参数

章婷曦, 黄俊, 周申范

南京师范大学化学与环境科学学院!江苏南京210097,南京理工大学化工学院!江苏南京210094,

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 以分子拓扑指数作为炸药组分的结构描述符,利用反向传播算法(BP)人工神经网络,以Sigmoid函数为传递函数,分子连接性指数 $0\chi, 1\chi, 2\chi$ 与边邻接指数 (e) 为输入向量,反相高效液相色谱保留值参数 $\log k_w$ 和 S 为输出向量,将输入向量归一化至 $-3\sim 3$ 区间,输出向量归一化至 $0\sim 1$ 区间,网络精度取 0.5 ,学习步长 η 的初始值取 0.2 ,动量因子 α 取 0.5 ,通过对 20 种炸药的神经网络模型进行训练,建立了炸药分子结构与 $\log k_w$ 和 S 之间的定量模型。结果表明,该模型较好地反映了炸药分子结构与保留值之间的关系。

关键词 [保留值参数](#) [人工神经网络](#) [定量结构色谱保留相关](#) [分子拓扑指数](#)

分类号

Abstract

Key words

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(131KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“保留值参数”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [章婷曦](#)
- [黄俊](#)
- [周申范](#)