

# 利用ANN法预估芳香族多硝基化合物的密度



分

## 导航/NAVIGATE

[本期目录/Table of Contents](#)

[下一篇/Next Article](#)

[上一篇/Previous Article](#)

## 工具/TOOLS

[引用本文的文章/References](#)

[下载 PDF/Download PDF\(200KB\)](#)

[立即打印本文/Print Now](#)

[导出](#)

## 统计/STATISTICS

[摘要浏览/Viewed](#)

[全文下载/Downloads](#) 1362

[评论/Comments](#) 887



《*火炸药学报*》 [ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2007年第3期 页码: 9-15 栏目: 出版日期: 2007-06-30

Title: Prediction on Density of Aromatic Polynitro Compounds via the Artificial Neural Networks

文章编号: 1007-7812(2007)03-0009-07

作者: [蔡弘华](#); [田德余](#); [林振天](#); [刘剑洪](#); [洪伟良](#)  
深圳大学化学与化工学院

Author(s): -

关键词: [结构化学](#); [神经网络\(ANN\)](#); [密度预估](#); [芳香族多硝基化合物](#)

Keywords: [structural chemistry](#); [artificial neural network\(ANN\)](#); [density prediction](#); [aromatic polynitro compounds](#)

分类号: -

DOI: -

文献标志码: -

摘要: 运用神经网络模型,采用误差反向传播算法,对一系列芳香族多硝基化合物的密度进行了预测。结果表明,芳香族多硝基化合物的密度与其分子结构存在良好的相关性,选用分子结构描述码作为输入特征参数能取得较高的预估精度,预测结果的相对误差一般在±10%以内。

Abstract: -

## 参考文献/References:

- [1] 田德余,刘剑洪.化学推进剂计算能量学[M].郑州:河南科技出版社,1999.  
TIAN De yu, LIU Jian hong. Calculation Energetics of Propellants Chemistry [M]. Zhengzhou: Henan Science and Technology Press, 1999.
- [2] David R L. CRC Handbook of Chemistry and Physics [M]. 73rd Edition. Boca Raton: CRC Press, 1992-1993. [ZK]
- [3] 田德余.常用化合物性能数据手册[M].长沙:湖南科技出版社,1998.  
TIAN De yu. Common Compounds Properties Data Handbook [M]. Changsha: Hunan Science and Technology Press, 1988.
- [4] 张向东,赵立群,等.神经网络法预测有机物基础物性[J].*化工学报*, 1995, 46(1): 66-74.  
ZHANG Xiang dong, ZHAO Li qun. Prediction on physical properties of organic compounds with the artificial neural networks [J]. *Journal of Chemical Engineering*, 1995, 46(1):66-74.
- [5] 李谦,王黎,李伟,等.利用神经网络法预测烷烃的沸点[J].*化学研究*, 2001, 12(2): 49-50.  
LI Qian, WANG Li, LI Wei, et al. Prediction on boiling points of alkanes with the artificial neural networks [J]. *Journal of Chemical Research*, 2001, 12(2):49-50.
- [6] 刘建民,唐少春,徐复铭,等.基于ANN的丁羟复合推进剂燃速预测[J].*火炸药学报*, 2006, 29(3): 13-16.  
LIU Jian min, TANG Shao chun, XU Fu ming, et al. Prediction of burning rate of HTPB propellant by artificial neural

network model [J] .Chinese Journal of Explosives and Propellants,2006,29(3):13-16.

[7] 许禄, 胡昌玉. 化学中的人工神经网络法 [J] .化学进展, 2000, 12 (1) ; 18-31.

XU Lu, HU Chang yu. The artificial neural network in chemistry [J] . Chemistry Progress, 2000,12(1):18-31.

[8] 康赐荣. BP算法参数选择及应用 [M] .泉州: 科学技术出版社, 1995.

KANG Ci rong. Parameter Choices and Applications of BP Arithmetic [M] . Quanzhou: Science and Technology Press, 1995.

#### 相似文献/References:

[1]马海霞,宋纪蓉,肖鹤鸣,等.3,4-二硝基呋咱基氧化呋咱(DNTF)的密度泛函理论研究[J].火炸药学报,2006,(3):43.

[2]卢芳云,林玉亮,王晓燕,等.含能材料的高应变率响应实验[J].火炸药学报,2006,(1):1.

[3]廉鹏,来蔚鹏,王伯周,等.N5<sup>+</sup>、N5<sup>-</sup>、N8、N10结构与稳定性的密度泛函理论[J].火炸药学报,2007,(5):28.

[4]李正莉,王焯军,张有智.偏二甲基胍亲核性的量子化学研究[J].火炸药学报,2007,(5):49.

[5]刘剑洪,田德余,赵凤起,等.神经网络法计算非芳香族多硝基化合物的生成焓[J].火炸药学报,2004,(2):1.

---

备注/Memo: -

---

更新日期/Last Update: