

# 利用 ANN 法预估芳香族多硝基化合物的密度

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, 广东 深圳 518060)

**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 $\pm 10\%$ 以内。

**关键词:**结构化学;人工神经网络(ANN);密度预估;芳香族多硝基化合物

中图分类号:TJ55;O625.61

文献标志码:A

文章编号:1007-7812(2007)03-0009-07

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

CAI Hong-hua, TIAN De-yu, LIN Zhen-tian, LIU Jian-hong, HONG Wei-liang

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Shenzhen University, Shenzhen Guangdong 518060, China)

**Abstract:** The densities of a series of aromatic polynitro compounds are predicted via an artificial neural network (ANN) based on erroneous reversed dissemination method. The results show a better correlation between the densities and molecular structures of aromatic polynitro compounds. Selecting molecular structure describers (MSD) as input characteristics parameters, a better predicted accuracy is obtained. The relative error between the predicted values and literature ones of the densities of aromatic polynitro compounds is within  $\pm 10\%$ .

**Key words:** structural chemistry; artificial neural network (ANN); density prediction; aromatic polynitro compounds

## 引言

芳香族多硝基化合物是一类常用的含能材料,也是多种推进剂的主要成分。在大多数应用中,其密度值都是一个基本参数,对火炸药的装填量以及武器系统的性能和复合固体推进剂的配方设计都具有重要意义,而其影响因素则较为复杂。目前,国内已有利用人工神经网络法(ANN)对火炸药及含能材料的各种性能参数进行预测的研究和报道,但对芳香族多硝基化合物密度预测的报道较少。

本研究收集了41种芳香族多硝基化合物的密度数据<sup>[1-3]</sup>,用人工神经网络法和分子结构描述码(MSD)进行模拟计算<sup>[4-6]</sup>,选择其中22种作为训练和校正集,19种为预测集,总效果较好,预测值与文献值的平均相对误差在 $\pm 10\%$ 以下。

## 1 神经网络的基本原理

神经网络是模仿人脑及神经系统的工作原理而建立起来的一种计算模型<sup>[7]</sup>。在人工神经网络模型的学习和训练过程中,计算机经若干次的输入输出循环,并通过某种特定算法反复调整内部的权系数,直到实际输出与期望输出间的误差降低到可接受程度,最终自行找到一种将误差减少到最小的拟合方式。误差反向传播法<sup>[8]</sup>(BP)就是比较具有代表性的一种算法,BP法支持delta规则的分析扩展到了带有隐藏节点的神经网络,当输出节点从隐藏节点获得输入,网络发现出现了误差,权系数的调整需要一个算法来找出整个误差是由不同的节点造成的。图1是“代码识别”反向传播的神经网络示意图。

采用误差反向传播神经网络,将一组样本作为

训练集,提供一系列的输入输出模式,令网络学习,依一定的学习规则调节各层节点间的连接权重,使网络的实际输出与期望值相比达到一定的精度要求<sup>[6]</sup>:

$$e = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (O_j - t_j)^2 \rightarrow \min$$

式中:  $e$  为输出误差;  $n$  为样本(训练集)数;  $t_j$  是样本  $j$  的期望输出值,  $O_j$  是网络实际计算的输出值。

人工神经网络 BP 模型实际上是一个从输入到输出等维非线性映射,应选择合适的样本特征作为输入参数,分子结构信息数值化是最重要的参数,它能反映分子的结构特征,具有通用性、简便、灵活的

特点。为此列出了芳香族多硝基化合物分子结构描述码,见表 1 和表 2。

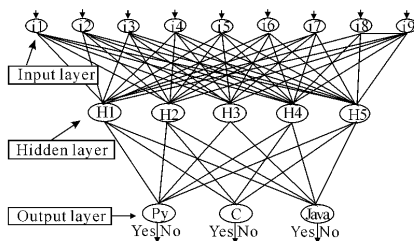


图 1 “代码识别”反向传播的神经网络

Fig. 1 “Code discriminating” erroneous reversed dissemination neural network

表 1 芳香族多硝基化合物分子子图

Table 1 Molecular subgraph of aromatic polynitro compounds

a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a10	a11	a12	a13	a14	a15
	$-\text{NO}_2_{(o-)}$	$-\text{NO}_2_{(m-)}$	$-\text{NO}_2_{(p-)}$	$\text{N}=\text{N}$			$-\text{CH}_3_{(o-)}$		$-\text{NH}_2$	$-\text{NH}_2$	$-\text{CH}_3_{(p-)}$	$-\text{CH}$	$-\text{COOH}$	$-\text{COH}$

表 2 各种芳香族多硝基化合物分子结构描述码

Table 2 MSD of aromatic polynitro compounds

序号	化合物	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a10	a11	a12	a13	a14	a15
1	tetranitrodibenzotetrazapentalene	2	4	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	2,4,6,2',4',6'-hexanitro-diphenylamine	2	4	0	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
3	3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphenyl	2	4	0	2	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
4	3-nitrobiphenyl	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	(z)-1,2-bis(2,4,6-trinitrophenyl)ethylene	2	4	0	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6	1,3,5-trinitrobenzene	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	1,3-dinitrobenzene	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	1,4-dinitrobenzene	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	2,3,4,6-tetranitroaniline	1	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	2,4-dinitroaniline	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
11	2,6-dinitroaniline	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
12	1-methyl-2,4-dinitrobenzene	1	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
13	2,4,6-trinitromcresol	1	2	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0
14	triaminotrinitrobenzene	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
15	2,4,6-trinitrophenol	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
16	4-nitrobiphenyl	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	3,4-dinitrodiphenylamine	2	0	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
18	2,5-dinitroaniline	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	3,5-dinitroaniline	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
20	3-nitrobenzenamine	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
21	2-nitrobenzenamine	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
22	4-nitrobenzenamine	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
23	3-methyl-2,4,6-trinitrobenzene	1	0	2	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0

续表2

序号	化合物	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a10	a11	a12	a13	a14	a15
24	1-methyl-2,4-trinitrobenzene	1	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
25	1-methyl-2,6-trinitrobenzene	1	2	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
26	1-methyl-4-trinitrobenzene	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
27	2,6-dinitrophenol	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
28	2,4-dinitrophenol	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
29	3-dinitrophenol	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
30	4-dinitrophenol	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
31	2-dinitrophenol	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
32	3-nitrobenzoic acid	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
33	4-nitrobenzoic acid	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
34	2-nitrobenzoic acid	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
35	2-nitrobenzaldehyde	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
36	3-nitrobenzaldehyde	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
37	2,4,6-trinitroaniline	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
38	1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzene	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
39	hexanitrobenzene	1	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
40	2,3,6-trinitrobenzoic acid	1	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
41	1-methyl-2,6-dinitrobenzene	1	2	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0

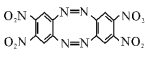
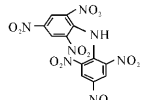
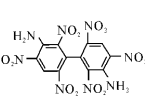
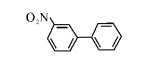
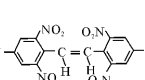
## 2 网络结构的确定和参数的选择

采用三层的网络结构,即输入层、隐含层和输出层来进行数据的处理,隐含层的节点数与问题的复杂性有关。理论上用一个隐含层和足够多的节点可以实现任意精度的输入-输出映射关系,但如果隐含

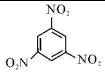

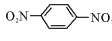
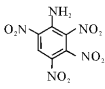
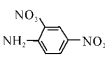
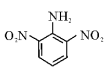
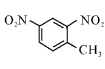
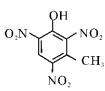
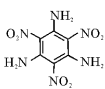
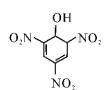
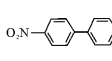
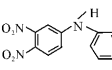
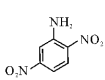
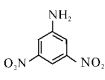


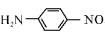
层的节点数过多,会降低神经网络的运行效率和预测能力。通过不断的测算,证明15-52-1的3层网络模型且当网络参数为学习速率0.02、学习次数1000时,可达到较高的预测精度,结果见表3。其中,序号为1~22的芳香族多硝基化合物作为训练和校正集,序号为23~41的19种化合物的有关数据为预测结果。

表3 芳香族多硝基化合物的密度预估<sup>[3]</sup>

Table 3 Predicted densities of aromatic polynitro compounds

序号	结构	化合物	分子式	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$		误差/%
				文献值	预估值	
1		tetranitrodibenzotetrazapentalene	$\text{C}_{12}\text{H}_4\text{N}_8\text{O}_8$	1.834	1.815	1.0
2		2,4,6,2',4',6'-hexanitro-diphenylamine	$\text{C}_{12}\text{H}_5\text{N}_7\text{O}_{12}$	1.640	1.698	3.5
3		3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphenyl	$\text{C}_{12}\text{H}_6\text{N}_8\text{O}_{12}$	1.790	1.907	6.5
4		3-nitrobiphenyl	$\text{C}_{12}\text{H}_9\text{NO}_2$	1.328	1.298	2.3
5		(z)-1,2-bis(2,4,6-trinitrophenyl)ethylene	$\text{C}_{14}\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_{12}$	1.790	1.809	1.1

续表 3

序号	结构	化合物	分子式	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$		误差 / %
				文献值	预估值	
6		1,3,5-trinitrobenzene	$\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_6$	1.760	1.681	4.5
7		1,3-dinitrobenzene	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_4$	1.570	1.559	0.7
8		1,4-dinitrobenzene	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_4$	1.590	1.550	2.5
9		2,3,4,6-tetranitroaniline	$\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_5\text{O}_8$	1.867	1.763	5.6
10		2,4-dinitroaniline	$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_4$	1.620	1.582	2.4
11		2,6-dinitroaniline	$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_4$	1.620	1.569	3.1
12		1-methyl-2,4-dinitrobenzene	$\text{C}_7\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_4$	1.320	1.330	0.8
13		2,4,6-trinitromcresol	$\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_7$	1.680	1.541	8.3
14		triamino-trinitrobenzene	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_9\text{O}_6$	1.937	1.773	8.5
15		2,4,6-trinitrophenol	$\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_7$	1.763	1.743	1.1
16		4-nitrobiphenyl	$\text{C}_{12}\text{H}_9\text{NO}_2$	1.328	1.293	2.6
17		3,4-dinitrodiphenylamine	$\text{C}_{12}\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_4$	1.420	1.287	9.4
18		2,5-dinitroaniline	$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_4$	1.620	1.542	4.8
19		3,5-dinitroaniline	$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_4$	1.620	1.604	1.0
20		3-nitrobenzenamine	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_2$	1.420	1.482	4.4
21		2-nitrobenzenamine	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_2$	1.440	1.464	1.7
22		4-nitrobenzenamine	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_2$	1.420	1.477	4.0

续表3

序号	结构	化合物	分子式	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$		误差/%
				文献值	预估值	
23		3-methyl-2,4,6-trinitrobenzene	$\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_7$	1.320	1.328	0.6
24		1-methyl-2,4-dinitrobenzene	$\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_4$	1.320	1.330	0.8
25		1-methyl-2,6-dinitrobenzene	$\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_4$	1.320	1.318	0.2
26		1-methyl-4-nitrobenzene	$\text{C}_7\text{H}_7\text{NO}_2$	1.290	1.289	0.1
27		2,6-dinitrophenol	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_5$	1.680	1.629	3.0
28		2,4-dinitrophenol	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_5$	1.700	1.641	3.5
29		3-nitrophenol	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_3$	1.490	1.542	3.5
30		4-nitrophenol	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_3$	1.490	1.537	3.2
31		2-nitrophenol	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_3$	1.500	1.525	1.7
32		3-nitrobenzoic acid	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_4$	1.490	1.528	2.6
33		4-nitrobenzoic acid	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_4$	1.550	1.524	1.7
34		2-nitrobenzoic acid	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_4$	1.580	1.512	4.3
35		2-nitrobenzaldehyde	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_3$	1.280	1.257	1.8
36		3-nitrobenzaldehyde	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_3$	1.280	1.275	0.4
37		2,4,6-trinitroaniline	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_4\text{O}_6$	1.762	1.686	4.3
38		1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzene	$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_5\text{O}_6$	1.830	1.729	5.5
39		hexanitrobenzene	$\text{C}_6\text{N}_6\text{O}_{12}$	2.010	1.995	0.7

续表 3

序号	结构	化合物	分子式	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$		误差 / %
				文献值	预估值	
40		2,3,6-trinitrobenzoic acid	$\text{C}_7\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_8$	1.680	1.737	3.4
41		1-methyl-2,6-dinitrobenzene	$\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_4$	1.280	1.318	2.9

由图 2 可以看出, 预估与文献值吻合得较好, 图 3 中除个别化合物外, 密度的预估相对误差一般都在  $\pm 10\%$  以内。

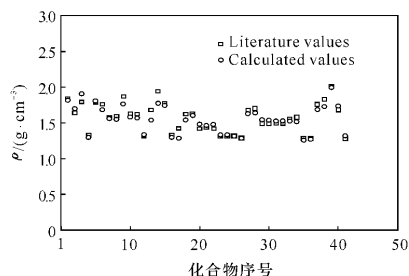


图 2 芳香族多硝基化合物的密度预估误差分析

Fig. 2 Error analysis of the predicted densities of the aromatic polynitro compounds

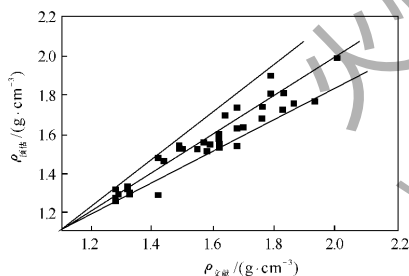


图 3 芳香族多硝基化合物密度预估数值的误差弥散度分析

Fig. 3 Dispersion analysis of the predicted densities of the aromatic polynitro compounds

### 3 讨 论

本研究应用的误差反向传播神经网络, 其网络误差受到特征输入参数(分子结构描述码)、网络输入层节点数、网络隐含层节点数、网络输出层节点数以及网络的训练学习次数等多方面的影响, 只有通过不断地对神经网络各种影响参数进行调整测试才可以稳定合适的网络结构, 从而提高人工神经

网络对密度预测的精确度。

#### 3.1 分子结构描述码的影响

芳香族多硝基化合物的很多特性是与结构相关的, 其密度与结构有密切关系。选用芳香族多硝基化合物的分子结构描述码(MSD)作为神经网络的特征输入参数, 从 41 组芳香族多硝基化合物的分子结构描述码抽取了 22 组作为训练集, 训练集占总样本的 53%, 足够多的训练数据才可以揭示这一类物质的内在规律, 才可以得到比较精确的人工神经网络, 从而获得较高精度的预测。

#### 3.2 神经网络隐含层节点数的影响

隐节点的作用是从样本中提取并存储其内在规律, 每个隐节点有若干个权值, 而每个权值都是增强网络映射能力的一个参数。隐节点数量太少, 网络从样本中获取信息的能力就差, 不足以概括和体现训练集中的样本规律; 隐节点数量过多, 又可能把样本中非规律性的噪声等也学会记牢, 从而出现所谓过度吻合问题, 反而降低了泛化能力, 此外隐节点太多还会增加训练时间。

设置多少个隐节点取决于训练样本数的多少、样本噪声的大小以及样本中蕴涵规律的复杂程度。一般来说, 波动次数多、幅度变化大的复杂非线性函数要求网络具有较多的隐节点来增强其映射能力。确定最佳隐节点数的一个常用方法称为试凑法, 可先设置较少的隐节点训练网络, 然后逐渐增加隐节点数, 用同一数据集进行训练, 从中确定网络误差最小时对应的隐节点数, 在用试凑法时, 可用一些确定隐节点数的经验公式。

用 15-52-1 和 15-18-1 三层网络结构的人工神经网络同时计算芳香族多硝基化合物的密度值, 隐含层节点数多的 15-52-1 计算精度较高。

#### 3.3 神经网络训练学习次数的影响

确定 BP 神经网络结构后, 就要设定网络训练学习的次数。大量的训练可以使人工神经网络更加“仔细”的分析芳香族多硝基化合物样本数据之间的内部规律, 得出更加准确的阈值和权系数, 从而提高网

络的预测能力。

选用15-52-1三层神经网络结构时,随训练次数的增加,网络误差呈下降趋势,当训练次数达到2600时,在训练过程中,网络误差出现上升的情况,当训练次数达到2700次时,网络误差就一直呈上升趋势,因此训练次数不能高于2600次。选用训练次数1000次就能达到较高的计算精度。

## 4 结 论

(1) 芳香族多硝基化合物的密度与其分子结构间存在良好的相关性,运用人工神经网络法能够对芳香族多硝基化合物密度的预估,其结果对火炸药及含能材料的研究具有一定参考价值。

(2) 采用隐含层节点数较多的15-52-1的三层误差反向传播法、训练次数在1000~2600次时,预测结果的精度较高,与文献值的相对误差一般在±10%以内。

### 参考文献:

- [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.
- [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. 人工神经网络法预测有机物基础性[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. 利用人工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.
- [9] Rodi W. Turbulence models and their applications in hydraulics-a state-of-the-art review [M]. Netherlands: Book Publication of International Association for Hydraulics Research, Delft, 1984.
- [10] 张济中. 分形[M]. 北京:清华大学出版社,1995:42-138.
- [11] 刘代俊. 分形理论在化学工程中的应用[M]. 北京:化学工业出版社,2006.
- LIU Dai-jun. Applied Fractal Theory in Chemical Engineering [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2006.
- [12] 蒋勇,郇榕,董刚,等. 基于一维全尺度湍流模型的氢气射流扩散火焰结构数值模拟[J]. 燃烧科学与技术,2006,12(5):401-407.
- JIANG Yong, QIU Rong, DONG Gang, et al. One-dimensional turbulence simulation of diffusion flame in a hydrogen-air jet with detailed chemistry [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2006, 12(5):401-407.
- [13] Magnussen B F, Hjertager B H. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion [C] // 16th Symposium (International) on Combustion. Cambridge, MA, 1976:19-29.
- [14] 臧雅茹. 化学反应动力学[M]. 天津:南开大学出版社,1995.
- ZANG Ya-yu. Dynamic of Chemical Reaction [M]. Tianjin: Nankai University Press, 1994.

(上接第8页)