

文章编号: 1003-1480 (2025) 02-0045-08

基于遗传BP神经网络的Al/Fe₂O₃铝热剂热力学性能预测方法研究

薛美晨¹, 薛园园², 胡耀立¹, 欧阳的华³, 彭鹏⁴, 罗彬杰⁴

(1. 西安建筑科技大学 资源工程学院, 陕西 西安, 710055; 2. 陕西应用物理化学研究所, 陕西 西安, 710061; 3. 南京理工大学 化学与化工学院, 江苏 南京, 210094; 4. 湖北汉丹机电有限公司, 湖北, 襄阳, 441000)

摘要: 为了探索 Al/Fe₂O₃ 铝热剂热力学性能的预测方法, 采用遗传算法对 BP 神经网络的初始权值和阈值进行优化, 利用 HSC Chemistry 软件计算了不同温度及配比下的 Al/Fe₂O₃ 吉布斯自由能及反应焓变, 以此作为基础数据, 建立了基于遗传 BP 神经网络的 Al/Fe₂O₃ 铝热剂燃烧热力学性能预测模型, 分别得到了 124 组 Al/Fe₂O₃ 吉布斯自由能和化学反应焓变的训练集样本数据及 31 组预测集样本数据, 并计算了模型误差。结果表明: 该模型预测的 Al/Fe₂O₃ 吉布斯自由能及反应焓变的测试集均方根误差 (RMSE) 分别为 0.499 1 和 0.702 7, 平均绝对误差 (MAE) 分别为 0.533 2 和 0.441 1, 决定性系数 R² 分别为 0.982 7 和 0.988 5; 遗传 BP 神经网络能够用于 Al/Fe₂O₃ 铝热剂热力学性能的预测。

关键词: 铝热剂; 吉布斯自由能; 反应焓变; 遗传算法; BP 神经网络

中图分类号: TJ55; TQ560.7 文献标识码: A DOI: 10.3969/j.issn.1003-1480.2025.02.007

Research on the Prediction Method of Thermodynamic Properties of Al/Fe₂O₃ Aluminum Thermite Based on Genetic BP Neural Network

XUE Mei-chen¹, XUE Yuan-yuan², HU Yao-li¹, OUYANG Di-hua³, PENG Peng⁴, LUO Bin-jie⁴

(1. School of Resources Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an, 710055; 2. Shaanxi Applied Physics and Chemistry Research Institute, Xi'an, 710061; 3. School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, 210094; 4. Hubei Handan Electromechanical Co., Ltd, Xiangyang, 441000)

Abstract: In order to explore the prediction method for the thermodynamic properties of Al/Fe₂O₃ aluminum thermite, genetic algorithm was used to optimize the initial weights and thresholds of BP neural network. HSC Chemistry software was used to calculate the Gibbs free energy and reaction enthalpy change of Al/Fe₂O₃ at different temperatures and ratios. Based on this, a prediction model for the combustion thermodynamic properties of Al/Fe₂O₃ aluminum thermite was established using genetic BP neural network. 124 sets of training set sample data and 31 sets of prediction set sample data for Gibbs free energy and chemical reaction enthalpy change of Al/Fe₂O₃ were obtained, and the model error was calculated. The results show that the root mean square errors (RMSE) of the Gibbs free energy and reaction enthalpy change predicted by the model for Al/Fe₂O₃ are 0.499 1 and 0.702 7, respectively, with mean absolute errors (MAE) of 0.533 2 and 0.441 1, and determination coefficients R² of 0.982 7 and 0.988 5, respectively; Genetic BP neural network can be used for predicting the thermodynamic properties of Al/Fe₂O₃ aluminum thermite.

Key words: Aluminum thermite; Gibbs free energy; Reaction enthalpy change; Genetic algorithm; BP neural network

收稿日期: 2024-12-12

作者简介: 薛美晨 (1998-), 女, 在读硕士研究生, 主要从事含能材料配方及安全研究。

基金项目: 陕西省自然科学基金面上项目 (2024JC-YBMS 414)。

引用本文: 薛美晨, 薛园园, 胡耀立, 等. 基于遗传 BP 神经网络的 Al/Fe₂O₃ 铝热剂热力学性能预测方法研究[J]. 火工品, 2025(2): 45-52.

含能材料的热力学性质（如比热容、焓、熵、吉布斯自由能和热力学函数等）以及热动力学行为（如活化能、指前因子和热动力学方程等）是评价含能材料性能，进而掌握其在不同生产、储存、运输和操作条件下反应速率的必要条件，对整个国防工业和国民经济的发展均具有重要意义^[1]。铝热剂作为一种被广泛关注的含能材料，是由铝和金属氧化物按一定比例配成的固体混合物，在一定条件下，可以发生剧烈的氧化还原反应，放出大量的热^[2]，现阶段广泛应用于冶金焊接、微含能器件、材料制备以及便携式热源等领域^[3-5]。王志强等^[6]利用均匀设计法对由 Al-Fe₃O₄、Al-Ba(NO₃)₂ 和 Al-MnO₂ 组成的复合铝热剂进行配方优化，采用 SPSS 软件进行二次回归分析，发现适当减少 Al-Ba(NO₃)₂ 含量可以提高反应温度，与试验结果相符。庄治华等^[7]通过实验研究发现，调节 Ni 添加量可以实现 Al/Fe₂O₃/Ni 铝热剂燃烧特性在一定范围内的平稳调控。Liu 等^[8]通过实验研究发现，增加 CuO 含量可以提高 Al/Mg/MoO₃/CuO 复合铝热剂的初始放热温度，有效降低铝热剂反应的活化能。前期研究多是通过试验测试铝热剂的燃烧性能，尚未建立铝热剂配方与性能之间的有效预测模型。

近年来，利用机器学习进行性能预测的方法被广泛应用于材料、环境、航天等领域^[9-11]，取得了较好的效果。柴凡等^[12]选取 5 种类型的神经网络对喷雾干燥法制备含能材料的平均粒径进行预测，结果表明逻辑回归模型（LR）的预测性能最优。常晓雅等^[13]归纳了机器学习算法在硝胺类含能材料（RDX、CL-20、ICM-102）、氧化剂（AP）和高能颗粒（Al、B）等含能材料分子模拟中的研究进展。

HSC Chemistry 软件主要用于模拟化学过程、热力学计算以及矿物加工，在材料工程、化学和采矿工程中有许多应用。Min Ku Jeon^[14]等采用 HSC Chemistry 软件研究了 Cs-O、Cs-I、Cs-Te、Cs-U 和 Cs-Mo 体系在氧化熔覆和高温挥发过程中的行为。Marie-Nour Kaydough 等^[15]使用 HSC Chemistry 软件研究了生物质与塑料共气化的热力学平衡模拟，并对得到的热力学数据进行了实验验证。郑光亚等^[16]采用 HSC Chemistry 软件对硫酸铝在不同气氛下的分解过

程进行热力学计算，并将计算结果与理论推导结果进行比较，表明 2 种方法所得结果相近。梁文政等^[17]以煅烧锰矿石为载氧体，采用 HSC Chemistry 软件模拟计算不同载氧体/煤粉质量比下煤化学链气化/燃烧产物组成的变化，并在鼓泡流化床上进行了煤化学链气化/燃烧实验，从而对计算结果进行了验证。

为此，本文以 Al/Fe₂O₃ 铝热剂为研究对象，利用 HSC Chemistry 软件计算了不同温度及 Al/Fe₂O₃ 配比下的吉布斯自由能及反应焓变值，为神经网络的学习训练提供基础数据；采用遗传 BP 神经网络算法构建 Al/Fe₂O₃ 铝热剂热力学性能预测模型，以期为铝热剂以及其它含能材料的性能预测与配方设计提供一种新方法。

1 方法原理

1.1 BP 神经网络

BP 神经网络的核心机制在于其独特的误差反向传播（Backpropagation）算法。该算法在训练过程中，通过将输出与预期值的差异，即误差，沿网络层次反向传递，指导神经元权重的调整，从而不断迭代优化网络参数，直至网络的输出值逼近或达到预设的期望目标，具有学习速度快、工作状态稳定的优势^[18]。BP 神经网络是一种多层的前馈型神经网络，其结构通常包括输入层、1 个或多个隐藏层以及输出层。网络各层之间通过全连接的方式实现信息的传递，即每个神经元与其上一层和下一层的所有神经元均建立连接。值得注意的是，同一层内的神经元之间无直接连接，而不同层的神经元则相互连接，这种连接方式有助于信息的逐层传递与处理，如图 1 所示。

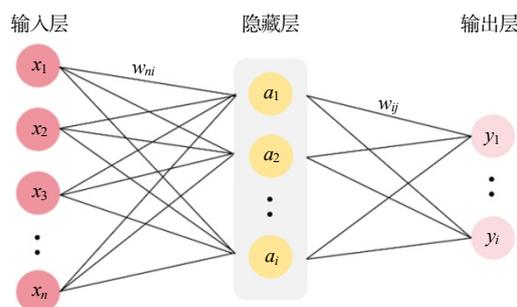


图 1 BP 神经网络结构图

Fig.1 Structure of BP neural network

BP神经网络的学习过程包括2个主要阶段：信息的正向传播和误差的反向传播。在正向传播过程中，输入数据通过输入层传入网络，经过各隐藏层逐层处理后，到达输出层。在输出层，计算实际输出与期望输出之间的误差。如果误差不符合预期，网络便进入误差的反向传播阶段。此时，误差从输出层反向传递，通过各层节点逐步反馈，并且每个节点会根据误差信号调整相应的连接权重，从而减少误差。经过一轮误差调整后，再次进入正向传播阶段，并持续迭代，直至误差达到预定的水平或训练次数达到事先设定的最大值。

在构建该模型时，设定以下参数：输入层具有 n 个节点，隐藏层具有 i 个节点，输出层具有 j 个节点。权值方面，从输入层到隐藏层的权值记为 w_{ni} ，从隐藏层到输出层的权值记为 w_{ij} 。同时，为了控制激活状态，设定阈值 b_i 和 c_j ，分别对应输入层到隐藏层以及隐藏层到输出层的连接。此外，模型的学习速率设定为 η ，激活函数选择 Sigmoid 函数。综合以上参数，模型的函数形式表述为：

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (1)$$

隐藏层节点个数：

$$i = \sqrt{n + j} + m \quad (2)$$

式(2)中： m 为0~10之间的任意数

隐藏层输出：

$$a_i = f\left(\sum_{n=1}^1 w_{ni}x_n + b_i\right) \quad (3)$$

输出层输出：

$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^1 w_{ij}a_i + c_j\right) \quad (4)$$

误差计算：

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k (Y_j - y_j)^2 \quad (5)$$

式(5)中： Y_j 为期望输出值。

BP神经网络算法能够灵活应对任意输入与输出间错综复杂的非线性关系，不仅具备高度的鲁棒性，能够在面临干扰和变化时维持稳定性能，还具有强大的泛化能力，使其能够有效地应用于各种实际场景中。然而，BP神经网络算法存在固有缺陷^[19]：在数据训

练过程中，由于依赖传统的梯度下降算法，有时可能会受限于局部最优解，即陷入局部极值点，进而影响到数据训练的有效性和收敛性，导致数据训练失败。同时，BP算法存在数据过拟合现象^[20]：随着样本训练容量的增加，其预测能力逐渐提高，但是当BP神经网络的样本训练容量达到某个峰值时，预测能力可能会出现拐点，即达到一个极值后开始下降，这说明单纯增加训练容量并不能提高预测能力。针对上述缺点，本文采用遗传算法（Genetic Algorithm, GA）对BP神经网络结构进行优化。

1.2 遗传算法

遗传算法由美国密歇根大学的Holland教授在20世纪70年代基于选择和遗传学提出，借鉴了自然界生物进化理论中的自适应、高度并行、随机全局搜索机制，模拟自然选择和遗传进化中的繁殖、交配和突变，有3种操作，即选择、交叉和变异^[21]。

选择操作是指从初始种群中挑选适应度较高的个体，以组成新的种群，其选择过程常通过轮盘赌法实现。在这种方法中，每个个体能否进入下一代取决于其适应度值与种群中所有个体适应度值总和的比例。这一比例决定了个体被选中的概率。其数学表达式为：

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^n F_i} \quad (6)$$

式(6)中： P_i 为选择个体的概率； F_i 为个体的适应度； n 为种群中的个体总数。

交叉：交叉是指1对染色体的2部分按一定方式交换，形成2个新个体。

变异：在遗传学领域，突变被视作基因层面的一种重要变异形式。当某个体的染色体经历了特定的变异过程，这种变化就被称为突变，经过这一过程的个体则转变为具有新特性的生物体。遗传算法也有突变概率，但这个概率非常小。

在遗传算法中，为了维持种群多样性与算法收敛性之间的平衡，采用一种自适应的交叉变异策略。当某个个体的适应度值低于种群的平均适应度时，算法会动态调整策略，增加该个体的交叉和变异概率，以增强其适应性，从而提高种群的多样性和搜索效率；

而当个体的适应度高于种群的平均适应度时, 算法则减小该个体的交叉和变异概率, 避免生成过多不适应的个体, 从而促进较高适应度个体的比例, 提升算法的收敛速度。

自适应交叉算子表示为:

$$C_c = \begin{cases} K_1 \frac{(F_{\max} - F_{\text{avg}})}{F_{\max} - F_a}, & F_a \leq F_{\text{avg}} \\ K_2, & F_a > F_{\text{avg}} \end{cases} \quad (7)$$

自适应变异算子表示为:

$$C_m = \begin{cases} K_3 \frac{(F_{\max} - F_{\text{avg}})}{F_{\max} - F_b}, & F_b \leq F_{\text{avg}} \\ K_4, & F_b > F_{\text{avg}} \end{cases} \quad (8)$$

式(7)~(8)中: F_a 为交叉前个体的适应度; F_b 为变异前个体的适应度; F_{\max} 和 F_{avg} 表示当前种群的最大适应度和平均适应度; K_1 、 K_2 、 K_3 和 K_4 均为 0~1 之间的随机数。

GA-BP 算法的实现过程为: 首先根据 BP 网络结构, 确定并初始化各层之间的连接权重和阈值。然后对种群中的个体进行编码, 通过遗传算法中的选择、交叉和突变操作筛选出适应度最优的个体, 作为 BP 网络的初始权重和阈值配置。最后, 利用这些配置好的权值和阈值, 将 BP 网络应用于训练数据的处理, 并进行预测仿真, 持续迭代直至预测误差达到可接受范围或迭代过程结束。这一流程确保了 GA-BP 算法在优化网络参数方面的有效性和高效性。GA-BP 算法的流程图如图 2 所示。

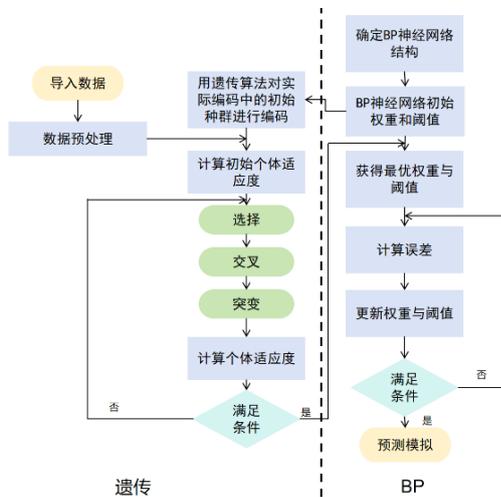


图 2 GA-BP 算法流程图

Fig.2 Flowchart of GA-BP algorithm

1.3 吉布斯自由能与反应焓变

在化学热力学反应中, 为了判断反应过程的进行方向 (当反应的吉布斯自由能变化为负值时, 表明反应可以自发进行), 引入了吉布斯自由能 (Gibbs free energy)。吉布斯自由能也被称为自由焓或自由能, 是热力学中的一个重要参数, 表示在某一热力学反应过程中, 反应物系统内能减少的部分, 其中一部分可以转化为外部做功的能量, 通常用 G 表示:

$$G = U - TS + pV = H - TS \quad (9)$$

式(9)中: U 为系统的内能; T 为绝对反应温度, K ; S 为熵; p 为压强; V 为体积; H 为焓。

当其他条件一定时, 同等反应温度环境下, 有:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (10)$$

ΔG 越小, 则反应速率越快。

依据热力学第一定律, 在燃烧反应中, 高能燃烧剂释放的热能会转化为其他形式的能量, 如机械能或光能, 同时总能量保持恒定, 即反应总放热量等于反应焓变 (ΔH) 的负数。可将化学反应中的热学变化描述成:

$$Q = U_2 - U_1 + W_{\text{tot}} \quad (11)$$

或:

$$Q = U_2 - U_1 + W_u + W \quad (12)$$

式(11)~(12)中: Q 为反应热; U 为热力学能; U_1 为反应的初状态热能; U_2 为反应的末状态热能; W_{tot} 为反应总功, 包含有用功 W_u 和体积变化功 W 。

对于恒温恒容反应而言, 物系体积保持不变, 故 $W=0$, 即:

$$Q = U_2 - U_1 + W_{u,v} \quad (13)$$

式(13)中: $W_{u,v}$ 为恒温恒容反应中的有用功, 满足:

$$\partial Q = dU + \partial W_{u,v} \quad (14)$$

而对于恒温恒压反应, 设反应前后的物系体积分别为 V_1 和 V_2 , 则反应所经历的体积变化功为 $W=p(V_2 - V_1)$, 又有 $W_{u,p}$ 为恒温恒压反应的有用功, 则 $Q=U_2 - U_1 + W_{\text{tot}}$ 可改写为:

$$Q = U_2 - U_1 + W_{u,p} + p(V_2 - V_1) \quad (15)$$

或:

$$Q = H_2 - H_1 + W_{u,p} \quad (16)$$

$$H = U + pV \quad (17)$$

$$\partial Q = dH + \partial W_{u,p} \quad (18)$$

当化学反应在恒温恒容或恒温恒压条件下,且未做有用功,即该化学反应进行彻底的不可逆反应,存在:

$$Q_V = U_2 - U_1 \quad (19)$$

$$Q_p = H_2 - H_1 \quad (20)$$

式(19)~(20)中: Q_V 为恒容热效应; Q_p 为恒压热效应。所谓反应焓变,即恒温恒容或恒温恒压条件下,反应前后物系的焓差。 ΔH 越小,反应放热量越大;反之, ΔH 越大,反应放热量越小。

2 数据来源及处理

2.1 数据来源

通过 HSC Chemistry 6.0 软件的“反应计算”模块计算不同温度和配比下 Al 与 Fe_2O_3 反应的吉布斯自由能和反应焓变,得到 0~100 °C 下 155 组不同配比的吉布斯自由能值和化学反应焓变值,部分数据如表 1 所示。

表 1 部分仿真数据
Tab.1 Partial simulation data

$w_{\text{Al}}/w_{\text{Fe}_2\text{O}_3}/\%$	温度/°C	$\Delta G/\text{kJ}$	$\Delta H/\text{kJ}$
45/55	0	-3 068.290	-3 197.457
45/55	25	-3 056.414	-3 198.661
45/55	50	-3 044.440	-3 199.782
45/55	75	-3 032.383	-3 200.790
45/55	100	-3 020.258	-3 201.675
44/56	0	-2 956.984	-3 080.189
44/56	25	-2 945.654	-3 081.362
...
15/85	0	-421.082	-426.043
15/85	25	-420.615	-426.346
15/85	50	-420.121	-426.668
15/85	75	-419.603	-426.992
15/85	100	-419.061	-427.310

2.2 数据处理

使用 Matlab 软件进行编程,采用单隐含层的 BP 神经网络模型。为了确保预测结果的准确性,在神经网络训练之前,需要对输入和输出数据进行归一化处理,从而将网络的输入和输出数据被限制在[0, 1]或[-1, 1]的区间内。在对比预测值与实际值时,预测值需要经过反归一化处理。因此,本研究使用最小-最大归一化方法,将数据范围限定在 0~1 之间。具体

的归一化过程按照公式(21)对输入和输出变量分别进行处理。

$$\bar{X}_i = \frac{X_i - X_{\min}}{X_{\max} - X_i} \quad (21)$$

式(21)中: X_i 为输入数据或输出数据; X_{\min} 为数据变换的最小值; X_{\max} 为数据变换的最大值。

数据归一化后再对隐藏层节点数进行选择,依据隐藏层节点数公式进行计算,经过反复试验得出吉布斯自由能与化学反应焓变的最佳隐藏层节点数分别为 8 和 7。遗传算法的主要程序首先是初始化种群。经过实验设置,种群规模为 50,遗传代数设置为 5。

3 结果分析与讨论

在模型开发过程中,使用 1 组数据(通常称为训练集)来训练模型。训练集的一部分可以单独放置,用于系统算法的误差分析,并且可以根据误差最小化来调整数据。数据集的另一部分称为测试集。通过一些指标或误差计算参数来评价预测结果的合理性。将 155 组试验数据按照 80:20 比例分割,其中,124 组数据用于训练模型,31 组数据用于测试模型。

本文采取均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)以及决定系数(R^2)作为衡量模型预测精度的工具。RMSE 是指预测值与实际观测值之间差异的平方的期望值,用于衡量数据的波动程度, RMSE 值越小,表示预测模型对实验数据的描述越精确。MAE 能够更直观地反映预测值与实际值之间的误差, MAE 值越小,表明模型的预测精度越高。 R^2 是评估回归模型拟合优度的统计指标, R^2 值越接近 1, 表示模型的拟合效果越好。通过计算这些指标,可以评估模型在预测或分类任务中的表现,并找出可能的改进方向。RMSE、MAE 和 R^2 可表示如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (22)$$

$$MAE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |(y_i - \hat{y}_i)| \quad (23)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (24)$$

根据表 1 的数据集进行遗传 BP 神经网络模型预测, 分别得到 124 组 Al/Fe₂O₃ 不同配比及温度下的吉布斯自由能和化学反应焓变训练集样本数据, 以及 31 组预测集样本数据, 如图 3~4 所示。

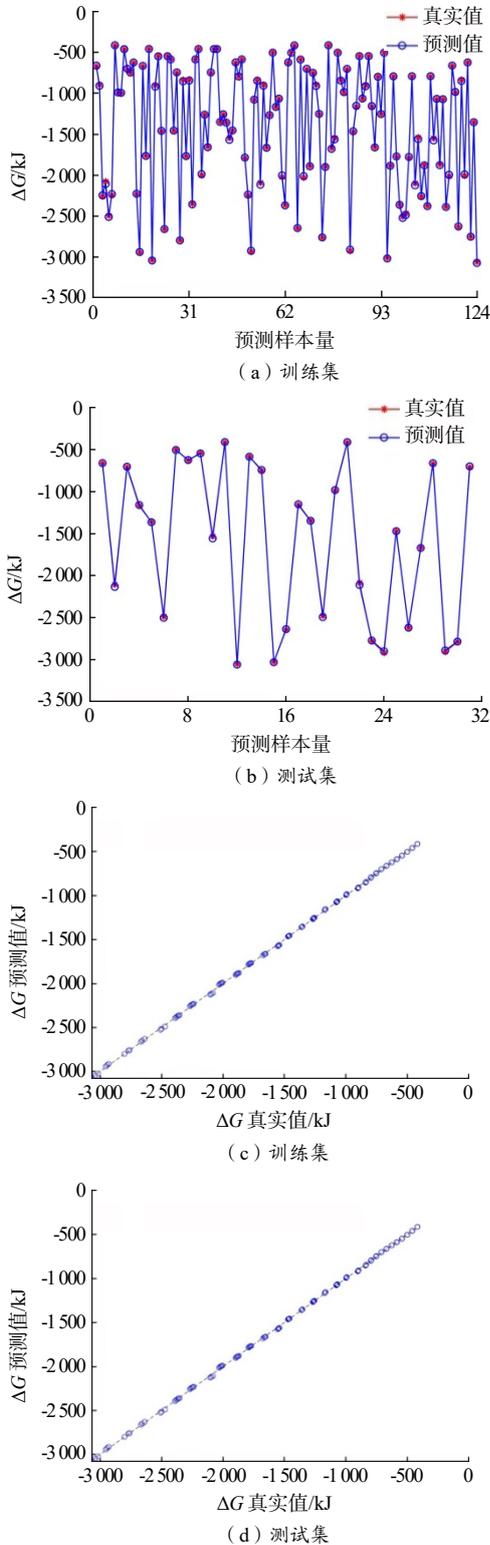


图 3 Al/Fe₂O₃ 燃烧 ΔG 遗传 BP 神经网络模型预测结果
Fig.3 Prediction results of Al/Fe₂O₃ combustion ΔG by genetic BP neural network model

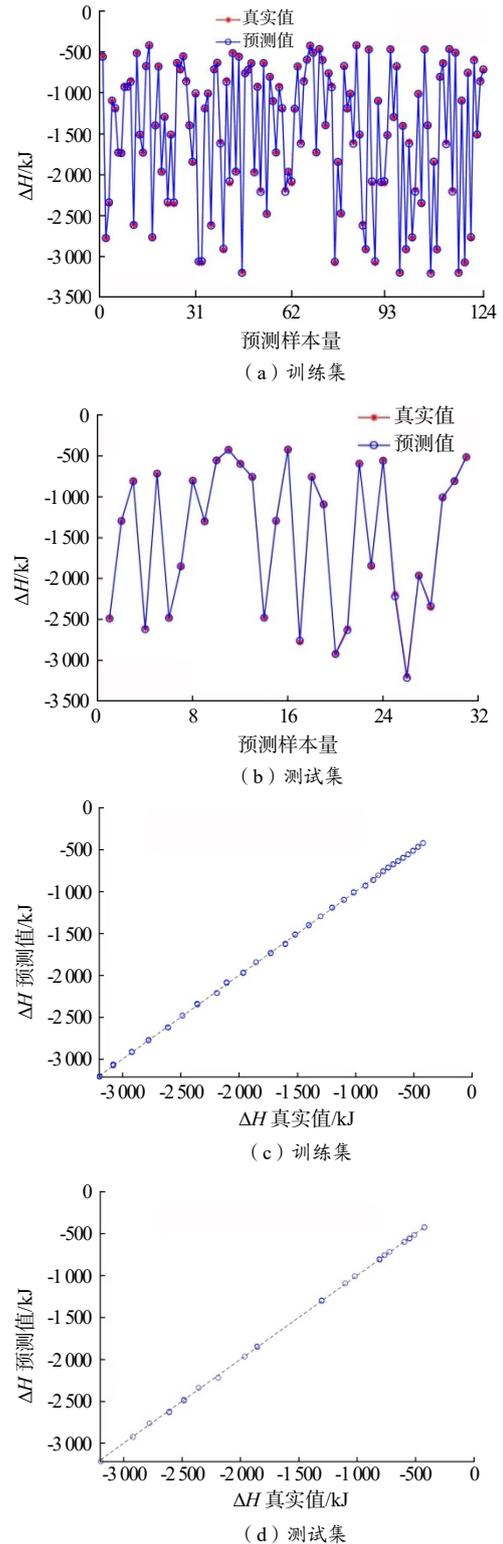


图 4 Al/Fe₂O₃ 燃烧 ΔH 遗传 BP 神经网络模型预测结果
Fig.4 Prediction results of Al/Fe₂O₃ combustion ΔH by genetic BP neural network model

由图 3 (a) 和图 3 (c)、图 4 (a) 和图 4 (c) 可见, Al/Fe₂O₃ 燃烧 ΔG 和 ΔH 遗传 BP 神经网络模型训练集的预测值与真实值基本重合, 个别样本有较小的偏差。由图 3 (b) 和图 3 (d)、图 4 (b) 和图 4 (d)

可见,模型测试集的预测值与真实值也基本重合。 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔG 和 ΔH 遗传 BP 神经网络模型误差分别如表 2~3 所示。

表 2 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔG 遗传 BP 神经网络模型误差
Tab.2 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ combustion ΔG genetic BP neural network model error

	RMSE	MAE	R^2
训练集	0.463 9	0.364 4	0.998 5
测试集	0.499 1	0.533 2	0.982 7

表 3 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔH 遗传 BP 神经网络模型误差
Tab.3 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ combustion ΔH genetic BP neural network model error

	RMSE	MAE	R^2
训练集	0.650 4	0.370 8	0.995 9
测试集	0.702 7	0.441 1	0.988 5

由表 2~3 可见, $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔG 和 ΔH 训练集的 R^2 分别为 0.998 5 和 0.995 9, 均接近 1, 表明模型对训练集数据的拟合程度较好。 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔG 测试集的 RMSE 及 MAE 分别为 0.499 1 和 0.533 2, R^2 为 0.982 7; ΔH 测试集的 RMSE 及 MAE 分别为 0.702 7 和 0.441 1, R^2 为 0.988 5, 表明遗传 BP 神经网络模型对 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔG 和 ΔH 的预测具有较高的准确性。

4 结论

(1) 采用遗传算法对 BP 神经网络的权值和阈值进行了优化, 加快了算法的收敛速度, 建立了基于遗传算法优化 BP 神经网络的 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 铝热剂燃烧热力学性能预测模型。

(2) 遗传 BP 神经网络模型对 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 燃烧 ΔG 和 ΔH 的预测具有较高的准确性, 能够用于 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 铝热剂热力学性能的预测。

(3) 经过其它参数样本数据(如不同的粒径下对应的燃烧速度)的训练后, 此方法还可用于含能材料其它性能的预测, 为含能材料的性能预测与配方设计提供了一种新方法。

参考文献:

[1] Smirnov L. P. Chemical physics of decomposition of energetic

materials. Problems and prospects[J]. Russ. Chem. Rev., 2004, 73(11): 1 121-1 141.

- [2] Sundaram D, Yang V, Yetter R A. Metal-based nanoenergetic materials: synthesis, properties, and applications[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2017(61): 293-365.
- [3] Meriç, C., E. Atik, and S. Şahin. Mechanical and metallurgical properties of welding zone in rail welded via thermite process[J]. Science and Technology of Welding and Joining, 2002, 7(3): 172-176.
- [4] 李刚, 马艳英, 刘宗阳, 等. $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 铝热剂粉尘着火敏感性[J]. 东北大学学报(自然科学版), 2024, 45(03): 415-421, 438.
- [5] 杨勇, 阎殿然, 董艳春, 等. 等离子喷涂 $\text{Al-Fe}_2\text{O}_3$ 复合粉合成纳米陶瓷复合涂层[J]. 材料热处理学报, 2011, 32(增刊 1): 136-139.
- [6] 王志强, 黄寅生, 杨研, 等. 复合铝热剂配方及其性能研究[J]. 爆破器材, 2019, 48(06): 39-42.
- [7] 庄治华, 刘宝振, 刘文庆, 等. Ni 添加量对 $\text{Al/Fe}_2\text{O}_3$ 能量释放特性的影响研究[J]. 火工品, 2024(2): 46-51.
- [8] Jun-Wang Liu, Shi Li, Mi Li, et al. Thermal analysis and pyrolytic behavior of bimetal and double oxidant thermite $\text{Al/Mg/MoO}_3/\text{CuO}$ [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2023, 48(3): 1-13.
- [9] 张琪鑫, 徐章洋, 冯萍, 等. 基于机器学习的卤化物双钙钛矿材料性能预测[J]. 太阳能学报, 2024, 45(04): 107-115.
- [10] 肖明君, 朱逸纯, 高雯媛, 等. 基于不同人工神经网络的水质预测方法对比[J]. 环境科学, 2024, 45(10): 5 761-5 767.
- [11] 程一哲, 王春光, 张恺宁, 等. 基于机器学习方法的 HTPB 推进剂力学性能预测研究[J]. 固体火箭技术, 2024, 47(01): 54-59.
- [12] 柴凡, 李伟伟, 史晓澜, 等. 喷雾干燥制备含能材料平均粒径的神经网络模拟[J]. 火工品, 2022(6): 60-64.
- [13] 常晓雅, 文明杰, 张迪, 等. 机器学习势在含能材料分子模拟中的研究进展[J]. 火炸药学报, 2023, 46(05): 361-377.
- [14] Min Ku Jeon, Jin Myung Shin, Jang Jin Park. Simulation of Cs behavior during the high temperature voloxidation process using the HSC chemistry code [J]. Journal of Nuclear Materials, 2012(430): 37-43.

- [15] Marie-Nour Kaydouh, Nissrine El Hassan. Thermodynamic simulation of the co-gasification of biomass and plastic waste for hydrogen-rich syngas production[J]. Results in Engineering, 2022(16): 100-771.
- [16] 郑光亚, 陈正杰, 辜芳, 等. 不同气氛下硫酸铝高温分解热力学分析[J]. 化学研究, 2019, 30(03): 248-253.
- [17] 梁文政, 王坤, 赵荣洋, 等. 基于锰矿石载氧体的宁东煤化学链燃烧特性[J]. 石油学报(石油加工), 2020, 36(06): 169-177.
- [18] X. F. Zoua, Y. J. Hua, X. B. Long, et al. Prediction and optimization of phosphorus content in electroless plating of Cr12MoV die steel based on PSO-BP model[J]. Surfaces and Interfaces, 2020(18): 100-443.
- [19] Guomin Han, Hong bo, Gang Wang, et al. Prediction and control of profile for silicon steel strip in the whole tandem cold rolling based on PSO-BP algorithm[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2024(120): 250-259.
- [20] LI Y F, YANG S, LU Y, et al. Multi-parameter methane measurement using near-infrared tunable diode laser absorption spectroscopy based on back propagation neural network[J]. Infrared Physics & Technology, 2022(125): 104-275.
- [21] Hao Peng, Han Wu, Junwu Wang. Research on the prediction of the water demand of construction engineering based on the BP neural network[J/OL]. Advances in Civil Engineering, [2020-11-1]. <https://doi.org/10.1155/2020/8868817>.

火工烟火技术“十五五”发展论坛征文通知

为促进火工烟火行业创新发展、学术繁荣和人才成长,推动我国“十五五”火工烟火技术的创新与发展,促进技术交流与应用,加快火工烟火技术的创新、发展和跨越,定于 2025 年三季度举办火工烟火技术“十五五”发展论坛。现就论坛征文有关事项通知如下:

一、征文内容

火工品、火工药剂、烟火剂新技术、新工艺、新材料;火工品、火工药剂、烟火剂理化分析、测试和试验技术;火工品、火工药剂、烟火剂协同设计与评估技术;火工品、火工药剂、烟火剂安全性和可靠性新技术;火工品、火工药剂、烟火剂工程化技术;火工品、火工药剂、烟火剂数字化设计、仿真、试验技术;火工品、火工药剂、烟火剂专业数据库、知识库建设技术;火工品、火工药剂、烟火剂制造自动化、数字化、智能化技术;火工烟火行业数智工程、标准化和科技情报的研究、体系建设、发展趋势;火工烟火技术发展热点、重点、难点问题;火工烟火技术发展规划、路线图;2035 年火工烟火技术发展趋势和展望。

二、征文要求

论文研究成果具有较高的理论水平或应用价值;论文未在国内正式出版物上发表过,文责自负;提交的论文为非密,不得涉及敏感信息,可以公开发表,且须通过所在单位的保密审查,在提交论文电子版的同时,必须提交论文电子版保密审批单;提交论文后需要电话确认,确保电子版论文和保密审批单收到;论文格式按照科技论文标准规范,要求用 Word 2010 以上版本软件排版;论文格式及排序:题目,作者名,单位名,所在地,邮编,中文摘要,中文关键词,正文,参考文献,作者简介。

三、征文时间

欢迎各位专家、学者、科技人员、高校师生踊跃投稿。征文截止时间为 2025 年 4 月 30 日。优秀论文将推荐到《火工品》期刊发表。研讨会召开的具体时间、地点另行通知。

四、联系方式

投稿邮箱: hgyh2022@163.com

联系地址: 陕西省西安市朱雀大街 213 号

邮 编: 710061

联系人: 李 靖 029-85333137 18991266652

王建华 029-85333274 13152441200。