第 29卷,第 5期
2009年 5月

光 谱 学 与 光 谱 分 析
Spectroscopy and Spectral Analysis

Vol. 29, No. 5, pp1193-1196
May, 2009

燃烧型发烟剂红外光谱特性专家系统的研究

宋东明, 关 华, 侯 伟, 潘功配

南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094

摘 要 为了实现燃烧型抗红外发烟剂配方的快速筛选, 文章在基于最小自由能法的烟火药燃烧产物预测模型的基础上, 设计了燃烧产物推理机, 建立了燃烧型发烟剂光谱特性专家系统, 研究了利用专家系统进行发烟剂配方快速筛选的可行性。在用户输入发烟剂配方后, 专家系统能够计算出发烟剂的燃烧产物及其含量, 然后利用红外加谱技术, 对各产物红外谱图进行加合, 模拟出烟幕的红外谱图, 进而利用面积积分法, 预测出烟幕在 3～5 μm和 8～14 μm的遮蔽指数。文章使用 FTIR光谱仪对一种 HC型发烟剂进行了测试, 结果表明, 专家系统的计算产物与实际产物相吻合, 遮蔽指数预测值与发烟剂的实际测试表现一致, 为燃烧型发烟剂配方的快速筛选提供了一种新方法。

关键词 红外光谱; 专家系统; 最小自由能法; 红外加谱; 烟幕; 遮蔽指数

中图分类号: TQ567.5 **文献标识码**: A **DOI**: 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)05-1193-04

引 言

燃烧型抗红外发烟剂在光电对抗中占有重要地位。传统的设计思路是在优选出满足遮蔽要求的烟幕材料后, 寻找能够通过燃烧反应生成此类物质的原材料, 然后通过大量试验确定各组分对发烟剂性能的影响, 最终设计出符合要求的配方。整个过程费时费力, 很难跟上光电武器日新月异的发展脚步。

燃烧型发烟剂产生的烟幕, 其遮蔽能力主要取决于发烟剂燃烧产物的红外光谱特性。如果能够根据发烟剂配方计算出发烟剂的燃烧产物和含量, 模拟出烟幕的红外谱图, 并预测出烟幕的遮蔽能力, 将大大缩短新型发烟剂的研制周期。专家系统技术是解决这个问题的最佳方法。

专家系统[1-4] (Expert system)是一个具有大量专门知识与经验的程序系统, 它利用人工智能技术和计算机技术, 根据某领域一个或多个专家提供的知识和经验, 进行推理和判断, 模拟人类专家的决策过程, 以便解决那些需要人类专家处理的复杂问题, 在各领域中有着广泛应用[5-13]。

本文在最小自由能法和红外加谱技术的基础上, 建立了燃烧型发烟剂红外光谱特性专家系统, 研究了利用专家系统预测发烟剂遮蔽能力的可行性。

1 专家系统的建立

系统以基于最小自由能法的烟火药燃烧产物预测模型[14]为基础设计了推理机, 它可以根据用户输入的发烟剂配方, 在产物数据库中搜索此配方可能生成的产物, 并调用推理所需的理化参数值, 计算出燃烧产物和产物含量; 然后根据计算产物及其含量, 调用红外谱图库, 使用红外光谱加谱技术[15]对产物的红外谱图进行叠加, 从而得到模拟的烟幕红外加合谱图; 最后调用遮蔽能力评价模块, 给出其指定波长范围的遮蔽指数。专家系统框架图见图 1。

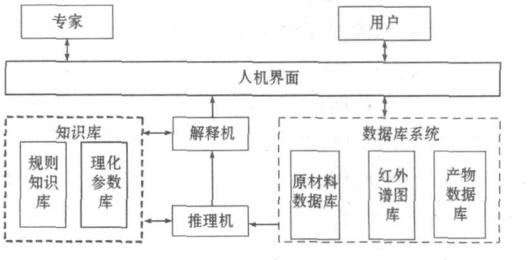

Fig. 1 Frame diagram of smoke agent infrared spectrum characteristic expert system

收稿日期: 2007-12-06, **修订日期**: 2008-03-08

基金项目: 国家"973"项目 (5133902)资助

作者简介: 宋东明, 1971年生, 南京理工大学化工学院博士研究生 e-mail: sdm306@yahoo.com.cn

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

2 实 验

2.1 仪器设备

使用 MB154S型 FTIR光谱仪 (加拿大, BOMEM公司), 中红外光源, DTGS检测器, 光谱采样间隔 2 cm^{-1}, 扫描范围 4 000～510 cm^{-1}, 扫描次数 8次, 处理软件为 WinBomem Easy。仪器配有特制小型烟幕箱 (0.13 m ×0.12 m ×0.16 m), 可直接对发烟剂燃烧产生的烟雾进行扫描。

2.2 实验

配制一种 HC发烟剂, 组分质量比为六氯代苯∶镁粉 = 80∶20。取 0.05 g散药置于药筒中, 在小型烟幕箱中用药捻点燃, 对烟幕进行扫描, 得到红外谱图如图 2所示。使用专家系统计算该配方发烟剂燃烧产物, 模拟其 4 000～510 cm^{-1}的红外谱图, 计算 3 ～5 μm和 8～14 μm的遮蔽指数。

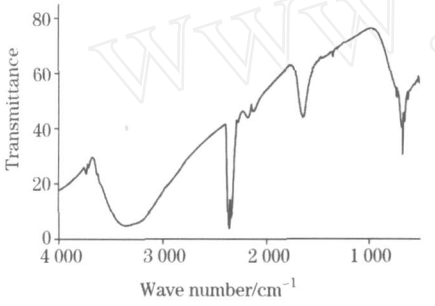

Fig. 2 Infrared spectrum of smoke

3 结果与讨论

3.1 实际产物与计算结果对比

由 3 450 cm^{-1}宽强峰和 1 641 cm^{-1}强峰可知, 烟幕中某组分含有大量结晶水, 根据发烟剂组分可能发生的反应, 可以判断烟幕中有大量 $MgCl_2 \cdot 6H_2O$。2 350 cm^{-1}处强峰属于 CO_2分子的反对称伸缩峰, 669 cm^{-1}为 CO_2分子面内和面外变形产生的吸收峰; 2 175和 2 119 cm^{-1}处双峰则属于 CO, 分析认为二者由药捻燃烧产生, 对药捻燃烧产物单独做红外扫描, 图中 CO_2和 CO的峰位和峰强均与烟幕谱图相似, 从而证实了这个分析。1 345 cm^{-1}处弱峰为 C_6Cl_6特征峰, C_6Cl_6属于发烟剂的主要成份, 易升华, 分析认为它主要产生于发烟剂燃烧时 C_6Cl_6的升华, 不属于燃烧产物。

使用大气采样器对烟幕进行采集, 将滤膜上收集到的物质经洗涤、烘干后, 采用 KBr压片法做红外谱图, 如图 3所示。由谱图可知, 烟幕中含有较多炭黑。最终确定发烟剂实际燃烧产物中含有大量 $MgCl_2 \cdot 6H_2O$和炭黑。

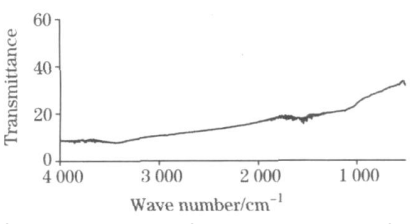

Fig. 3 Infrared spectrum of collection sample from smoke

专家系统计算结果如表 1所示。考虑到 Cl_2不产生红外吸收, 而 C_2Cl_4的含量过低, 其主要吸收峰 (915 cm^{-1})在实际谱图中无法显现, 可以认为专家系统的计算结果与实际产物是吻合的。

Table 1 Calculation result of combustion products

产物	质量百分含量 /%
$MgCl_2 \cdot 6H_2O$	78.33
C	20.22
Cl_2	1.29
C_2Cl_4	0.15

3.2 实际谱图与加合谱图的对比

计算机加谱是利用吸光度的加和性, 将 2个和 2个以上的红外光谱加和起来成为一张新的红外光谱。

在专家系统中输入发烟剂配方和配比, 得到加合的红外谱图, 见图 4。

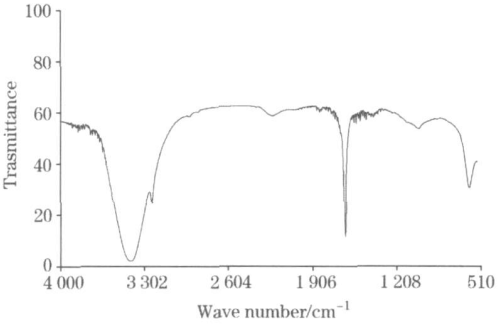

Fig. 4 Simulant infrared spectrum of expert system

对照两张红外谱图, 可以看到, 二者基本吻合, $MgCl_2 \cdot 6H_2O$中结晶水的 3 450和 1 641 cm^{-1}特征峰都在加合谱中反映出来了。其差别在于实际谱图中, CO_2的 2 350和 2 341 cm^{-1}特征峰以及 CO的 2 175和 2 119 cm^{-1}特征峰在加合谱中不存在。由 3.1可知, CO_2和 CO是药捻燃烧造成的, 计算出的燃烧产物中没有 CO_2和 CO, 所以模拟谱图中没有它们的特征峰。由于炭黑没有特征吸收峰, 所以在加合谱上仅反映为透过率的降低。

3.3 烟幕遮蔽能力的计算

专家系统采用文献 [16]中面积积分法计算烟幕在指定波段的遮蔽指数, 指数越大, 烟幕遮蔽能力越强, 可以根据遮蔽指数的大小进行配方的快速筛选。对上述配方的计算结果如表 2所示。预测结果与 HC发烟剂在实际测试中的表现[17]是一致的。

Table 2 Calculation result of screening index

波段	3～5 μm	8～14 μm
遮蔽指数	0.440 5	0.295 7

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

4 结 论

本文以最小自由能法和红外加谱技术为基础，建立了燃烧发烟剂光谱特性专家系统，研究了利用专家系统预测发烟剂遮蔽能力的可行性。根据用户输入的配方和配比，专家系统使用最小自由能程序，计算出了燃烧产物的平衡组成，计算结果与通过红外谱图解析出的实际产物相吻合。采用红外加谱技术对各产物的红外谱图进行加合，模拟出了烟幕的红外谱图，加合谱图与实际谱图基本相似。根据烟幕的模拟谱图，利用面积积分法，预测了烟幕在指定波段的遮蔽指数，预测结果与 HC发烟剂的实际测试表现是一致的，为燃烧型发烟剂配方的快速筛选提供了一种新方法。

参 考 文 献

[1] YIN Zhao-qing, YIN Hao(尹朝庆，尹 皓). Artificial Intelligence and Expert System(人工智能与专家系统). Beijing: China Watepower Press(北京：中国水利水电出版社), 2001. 134.

[2] AO Zhi-gang(敖志刚). Introduction of Artificial Intelligence and Expert System(人工智能与专家系统导论). Hefei: University of Science and Technology of China Press(合肥：中国科技大学出版社), 2002. 165.

[3] WANG Yong, MA Ping, YANG Ming, et al(王 勇，马 萍，杨 明，等). Journal of System Simulation(系统仿真学报), 2006, 18(2): 17.

[4] WANG Zi-cai, WANG Yong(王子才，王 勇). Journal of Astronautics(宇航学报), 2007, 28(4): 779.

[5] LI Xin-cheng, CHEN Guang, ZHU Wei-xing, et al(李新城，陈 光，朱伟兴，等). Acta Metallurgica Sinica(金属学报), 2004, 40(10): 1051.

[6] ZHOU Wei, ZHOU Xiao-ping, ZHAO Guo-hong, et al(周 围，周小平，赵国宏，等). Chinese Journal of Analytical Chemistry(分析化学), 2004, 32(6): 735.

[7] LUO Li-qiang, MA Guang-zu(罗立强，马光祖). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2001, 21(6): 871.

[8] SONG Xin-min, LONG Yang-xi, JIA Zhi-jun, et al(宋新民，龙杨喜，贾志军，等). Journal of System Simulation(系统仿真学报), 2006, 18(4): 1038.

[9] HU Liang-ming, XU Cheng, FANG Jun(胡良明，徐 诚，方 峻). Journal of System Simulation(系统仿真学报), 2007, 19(4): 772.

[10] CAO De-fang, DENG Zhao-hui(曹德芳，邓朝晖). Diamond &Abrasives Engineering(金刚石与磨料磨具工程), 2007, (1): 64.

[11] LIU Shu-hua, ZHANG Xue-gong, ZHOU Qun, et al(刘淑华，张学工，周 群，等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2005, 25(6): 878.

[12] SHAO Yong-ni, HE Yong, PAN Jia-zhi, et al(邵咏妮，何 勇，潘家志，等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2007, 27(9): 1739.

[13] CEN Hai-yan, BAO Yi-dan, HE Yong(岑海燕，鲍一丹，何 勇). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2007, 27(3): 503.

[14] SONG Dong-ming, PAN Gong-pei, WANG Nai-yan(宋东明，潘功配，王乃岩). Journal of Projectiles Rockets Missiles and Guidance(弹箭与制导学报), 2006, 26(1): 120.

[15] WENG Shi-fu(翁诗甫). Fourier Transform Infrared Spectrometry(傅里叶变换红外光谱仪). Beijing: Chemical Industry Press(北京：化学工业出版社), 2005. 124.

[16] ZHANG Shi-cai, WANG Nai-yan, WANG Yun-long, et al(张世才，王乃岩，王云龙，等). Initiators & Pyrotechnics(火工品), 2003, (1): 11.

[17] CHEN Hai-ping(陈海平). Base of Smoke Technology(烟幕技术基础). Beijing: Weapon Industry Press(北京：兵器工业出版社), 2002. 22.

Study on Expert System of Infrared Spectral Characteristic of Combustible Smoke Agent

SONG Dong-ming, GUAN Hua, HOU Wei, PAN Gong-pei

College of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China

Abstract The present paper studied the application of expert system in prediction of infrared spectral characteristic of combustible anti-infrared smoke agent. The construction of the expert system was founded, based on the theory of minimum free energy and infrared spectral addition. After the direction of smoke agent was input, the expert system could figure out the final combustion products. Then infrared spectrogram of smoke could also be simulated by adding the spectra of all of the combustion products. Meanwhile, the screening in-

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

dex of smoke was provided in the wave bands of 3-5 μm and 8-14 μm. FTIR spectroscope was used to investigate the performance of one kind of HC smoke. The combustion products calculated by the expert system were coincident with the actual data, and the simulant infrared spectrum was also similar to the real one of the smoke. The screening index given by the system was consistent with the known facts. It was showed that a new approach was offered for the fast discrimination of varieties of directions of smoke agent.

Keywords Infrared spectrum; Expert system; Theory of minimum free energy; Spectral addition; Smoke; Screening index

(Received Dec. 6, 2007; accepted Mar. 8, 2008)

中国化学会关于召开“第 10届全国分析化学年会暨第 10届原子光谱学术会议”的征文通知(第一轮通知)

中国化学会决定于 2009年 10月中旬在风景秀丽的历史文化名城——扬州召开“第 10届全国分析化学年会暨第 10届原子光谱学术会议”,并委托扬州大学负责筹办。会议将就我国自上届学术会议以来分析化学学科的新成就、新进展及我国分析化学学科的发展进行学术交流和研讨,会议将组织分析化学前沿的专题报告、分组报告和讨论,并邀请部分国外学者和海外华裔学者与会。热忱欢迎大家踊跃投稿和参加会议。现将有关事项通知如下:

一、征文内容

(1)原子光谱分析法;(2)分子光谱分析法;(3)色谱法与分离科学;(4)电分析化学法;(5)波谱法(包括顺磁、核磁共振);(6)质谱分析;(7)过程分析;(8)联用方法与自动化分析;(9)痕量分析;(10)形态、表面及结构分析;(11)生物分析化学;(12)临床与药物分析;(13)环境分析化学;(14)食品分析;(15)芯片分析;(16)纳米分析化学;(17)分析仪器及装置;(18)质量控制;(19)化学与生物信息学;(20)有关分析化学的其他研究。凡已在刊物上发表或在全国会议上报告过的论文不在应征之列。

二、征文要求

应征论文须用 Word软件编辑,包括题目、作者、单位、必要的图表、结果和讨论、主要参考文献(2～5篇),用 A4纸打印,版心尺寸为 15 cm ×24 cm,标题用小三号黑体,正文用小四号宋体,全文(包括图表)约为 1 000～1 500字,请勿超过两页。文末须附英文题目、作者姓名和单位。截稿日期:2009年 8月 30日。

三、收稿地址

稿件请用挂号信邮寄至江苏省扬州大学瘦西湖校区化学化工学院,朱霞石、徐琴同志收(邮编 225002),并在信封上注明“会议征文”和通讯联系人详细地址、邮编及 e-mail地址。也可以附件直接发至:fenxi@yzu.edu.cn电子信箱。有关稿件的处理意见、会议具体日期、地点及注册费用等项事宜请见第二轮通知。筹备组联系电话:0514-87972034, 13196492806(朱霞石)。

会议网站:http://ac.yzu.edu.cn

本会欢迎国内外分析仪器公司、厂商到会介绍和展出产品,有关具体事宜请与筹备组联系。

会议筹备组联系人:王赫胤 0514-82158781 传真:0514-87975244

第 10届全国分析化学年会筹备组

扬州大学化学化工学院、扬州大学分析测试中心代章

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net