

УДК 004.622
DOI 10.17513/snt.40616

**ПРИМЕНЕНИЕ КЛАСТЕРНОГО АНАЛИЗА ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ,
СРАВНИТЕЛЬНОГО АНАЛИЗА, ПОСТРОЕНИЯ ОПОРНЫХ РЯДОВ
ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ И ОПАСНОСТИ ГРУПП
ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Попок В.Н. ORCID 0000-0001-7800-7032

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«МИРЭА – Российский технологический университет», Москва, Российская Федерация,
e-mail: vnpopok@mail.ru*

В статье представлены результаты классификации, построения опорных рядов чувствительности и опасности групп пожаровзрывоопасных материалов с использованием методов кластерного анализа. Анализируется важная, прежде всего для прикладных работ, задача классификации объектов по набору признаков-свойств, в том числе для выбора объекта-аналога. Рассмотрена широкая номенклатура энергонасыщенных материалов с различными функциональными группами. Цель настоящей работы – классификация, сравнительный анализ, построение опорных рядов чувствительности и опасности групп пожаровзрывоопасных материалов с использованием кластерного анализа. Показано, что предлагаемые методы решения поставленных задач показывают высокую эффективность при обработке большого массива имеющихся многомерных экспериментальных результатов. Проведенными исследованиями определены матрицы евклидовых расстояний между рассматриваемыми объектами, чем обеспечивается алгоритм выбора объекта-аналога. На основе этого проведена классификация широкого перечня пожаровзрывоопасных материалов, построены дендрограммы и ряды чувствительности. Показано хорошее соответствие построенных рядов чувствительности и опасности практическим рядам. Установлена возможность классификации взрывчатых веществ на первичные (инициирующие) и вторичные без привлечения определяющих эти классы признаков-свойств. С учетом доминирования характеристик чувствительности и опасности отдельных компонентов в смесевых композициях, полученные результаты могут использоваться при решении рецептурных и технологических задач обеспечения безопасности. Отражены возможности расширения номенклатуры признаков-свойств и использования наблюдаемых корреляций между ними для повышения качества и информативности кластерного анализа, в том числе при решении других задач.

Ключевые слова: кластерный анализ, кластер, объекты, признаки, ряды чувствительности и опасности, аналоги

**APPLICATION OF CLUSTER ANALYSIS FOR CLASSIFICATION,
COMPARATIVE ANALYSIS, AND CONSTRUCTION
OF REFERENCE SERIES OF SENSITIVITY AND HAZARD
OF GROUPS OF FIRE AND EXPLOSIVE MATERIALS**

Popok V.N. ORCID 0000-0001-7800-7032

*Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education
“MIREA – Russian Technological University”, Moscow, Russian Federation,
e-mail: vnpopok@mail.ru*

The article presents the results of classification, construction of reference series of sensitivity and danger of groups of fire and explosive materials using cluster analysis methods. The task of classifying objects according to a set of features and properties, which is important primarily for applied work, is analyzed, including for selecting an analog object. A wide range of energy-saturated materials with various functional groups is considered. It is shown that the proposed methods for solving the tasks set show high efficiency in processing a large array of available multidimensional experimental results. The purpose of this work is to classify, compare, and build reference series of the sensitivity and hazard of groups of fire- and explosion-hazardous materials using cluster analysis. The research has determined the matrices of Euclidean distances between the objects under consideration, which ensures the algorithm for selecting an analog object. Based on this, a classification of a wide range of fire and explosive materials was carried out, dendograms and sensitivity ranges were constructed. A good correspondence of the constructed sensitivity and danger series to practical series is shown. The possibility of classifying explosives into primary (initiating) and secondary ones has been established without involving the properties defining these classes. Taking into account the dominance of the sensitivity and hazard characteristics of individual components in mixed compositions, the results obtained can be used to solve prescription and technological safety problems. The possibilities of expanding the range of features and properties and using the observed correlations between them to improve the quality and informativeness of cluster analysis, including when solving other tasks, are reflected.

Keywords: cluster analysis, cluster, objects, signs, sensitivity and danger series, analogues

Введение

Оценка пожаровзрывоопасных материалов (ПВОМ) по их чувствительности и опасности, необходимая для решения вопросов лабораторной, технологической и эксплу-

атационной безопасности [1; 2, с. 108–134; 3, с. 250–273]. Она базируется на установлении аналогичности свойств и условий превращений ПВОМ со свойствами и условиями превращения ПВОМ из опорного

(или практического) ряда чувствительности и опасности [4–6]. Практическая важность сравнительного анализа заключается в возможности установления мер сходства и отличий ПВОМ по набору свойств материалов, в том числе качественных, их аналогичности или близости с определенными мерами в многомерном пространстве признаков и построении на их основе рядов чувствительности и опасности [1; 5; 6]. Однако в стандартизованной практике оценки чувствительности и опасности ПВОМ отсутствует формализованный алгоритм анализа многомерных данных [3, с. 275–280; 5]. Одним из следствий этого является несоответствие опорному ряду искусственных рядов чувствительности и опасности, построенных с использованием частных или усредненных критерии чувствительности ПВОМ [2, с. 87–95; 3, с. 90–99; 4].

С другой стороны, к настоящему времени разработаны математические методы [7, с. 130–149; 8; 9], алгоритмы и комплексы программ анализа, классификации, группировки, ранжирования многомерных данных. Данные методы показывают высокую эффективность для обработки данных различного типа [10, с. 113–120; 11, с. 474; 12, с. 180–200]. Среди этих методов, учитывая природу физико-химических свойств ПВОМ и задач по обеспечению безопасности работ с этим классом материалов, следует акцентировать внимание на методах кластерного анализа [6; 7, с. 37–52; 9]. Судя по большому объему публикаций и пакетов прикладных программ, кластерный анализ применяется на протяжении десятков лет в смежных областях знаний и технологической практике, однако практически не используется при решении вопросов оценки чувствительности и опасности ПВОМ. В кластерном анализе группировка объектов по совокупности свойств-признаков, установление их близости и аналогичности проводится на основе различных мер и шкал с построением наглядных дендрограмм объединения объектов в кластеры [7, с. 65–70; 9; 11, с. 378–385]. В качестве базовой меры близости объектов в большинстве методов кластерного анализа используется евклидово расстояние $S = d_{jk}$ между j -м и k -м объектами совокупности [7]:

$$d_{jk} = \sqrt{\sum_{i=1}^{i=M} (x_{ij} - x_{ik})^2},$$

где M – количество признаков-свойств; j, k – номера объектов, $j, k = 1 \dots N$; N – общее количество выбранных для анализа объектов. В качестве начального центра для расчета расстояний и группировки данных может

использоваться любой объект, что позволяет строить ряды объектов по возрастанию или убыванию меры близости между объектами или кластерами. В качестве критерия объединения объектов в группы служит достаточно общее требование – расстояние между объектами в группе должно быть меньше расстояния между группами. При этом анализ сопровождается дополнительными статистическими оценками. Методы, алгоритмы обработки данных с использованием кластерного анализа детально рассмотрены в многочисленных публикациях и реализованы в большом количестве доступных пакетов программ, например Deductor, Minitab, Statistica, SPSS и др., включающих обширный арсенал других статистических методов анализа данных [7, с. 96–108; 12, с. 160–170].

В настоящей статье представлены результаты, показывающие целесообразность и эффективность применения кластерного анализа для решения задач статистического анализа и группировки объектов из выборки данных по термическому разложению и тепловому взрыву достаточно широкой группы ПВОМ – индивидуальных энергетических соединений (вторичных и инициирующих взрывчатых веществ – ВВ) [5; 10, с. 187–194; 13].

Цель исследования – классификация, сравнительный анализ, построение опорных рядов чувствительности и опасности групп пожаровзрывоопасных материалов с использованием кластерного анализа.

Материалы и методы исследования

В качестве объектов исследования для кластеризации выбрана широкая группа энергетических соединений разных классов и назначения: нитрамины, нитроэфиры, окислители, соединения солевой природы, азиды, триазолы, ароматические нитро-соединения; инициирующие и вторичные ВВ – наполнители, пластификаторы и др.) [6; 10, с. 237–249; 13]. Энергетические соединения из класса вторичных ВВ [6; 10, с. 280; 13]: № 1 – 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензол (ТАТБ); № 2 – тринитротолуол (ТНТ); № 3 – 3-нитро-1,2,4-триазол-5-он (NTO); № 4 – 1,3,5,7-тетранитро-1,3,5,7-тетраазациклооктан (HMX), № 5 – циклотриметилентринитрамин (RDX), № 6 – гексанитрогексаазаизовюрцитан (HNIW); № 7 – 1,4,5,9-тетранитрозо-1,4,5,9-тетраазадекалин (THAD); № 8 – 1,9-диазидо-2,4,6,8-тетранитро-2,4,6,8-тетраазанонан (ДИАЗ-4); соли динитрагамида: № 9 – N-гуанилмочевинная (ГМС, GUDN); № 10 – гуанидиниевая (ГС, GDN); № 11 – аммониевая (ADN); № 12 – пента-

эритриттетранитрат (ТЭН, PETN); № 13 – динитразапентан (ДНП); № 14 – 1-этил-3-нитро-1,2,4-триазол (Э-3Н), № 15 – эвтектика (1 и 2)-этил-3-нитро-1,2,4-триазола (Э-3Н*); № 16 – бис(2-фтор-2,2-динитроэтил)формаль (БЭФ, FEFO); № 17 – N-бис-(β-нитроксистил)нитрамин (ДИНА); № 18 – нитроэтилэтилолнитротриазол (НЭЭНТ). № 19 – динитратдиэтиленгликоля (ДНДЭГ), № 20 – динитраттриэтиленгликоля (ДНТЭГ), № 21 – нитроглицерин (НГЦ), № 22 – триметилолэтантринитрат (ГМЕТН); № 23 – 1,3-диазидо-2-нитро-2-азопропан (ДИАЗ-1); № 24 – нитроцеллюлоза (НЦ); № 25 – фуразан-1,2,3,4-тетразин-1,3-диоксид (FTDO).

В качестве характеристик (признаков) термической чувствительности перечисленных соединений использовались параметры термического разложения компонентов в условиях термоанализаторов (Mettler Toledo) при фиксированной скорости повышения температуры (10 К/мин) – дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), дифференциального термического ДТА) и гравиметрического анализов (ТГА) [5; 6; 13]; температура (T) начала экзотермического разложения Тн, температура максимума первого пика экзотермического разложения Т_{max}, температура Т_k, соответствующая завершению первого пика экзотермического разложения. В условиях ТГА определялась относительная к начальной потеря массы образцом ΔM(T_{max}) при температуре T_{max}. Параметры теплового взрыва компонентов характеризуются данными по значениям критической температуры Т_{kr}, соответствующей времени задержки (t₃) теплового взрыва t₃ ≈ 60 мин при фиксированном диаметре цилиндрических образцов 20 мм [6; 10, с. 167; 13]. Максимальная размерность матрицы объекты – свойства равна 25×6. Информация о группировке признаков на основе корреляционного анализа [13] не использовалась. При построении рядов чувствительности к термическим воздействиям (классификация) использовалась информация о самом низко чувствительном материале – эталоне (ТАТБ).

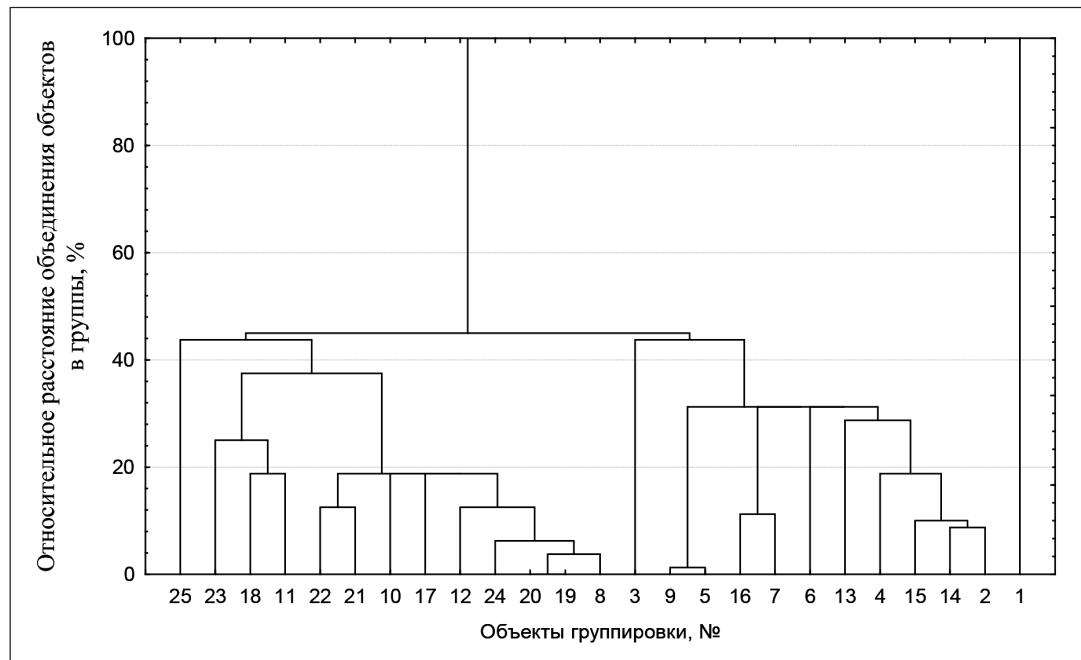
В более узкой группе соединений опорных рядов чувствительности к внешним воздействиям [1; 3, с. 116–129; 6], включющей инициирующие и вторичные ВВ, используются: № 1 – ТНТ; № 2 – тетрил; № 3 – тетразен; № 4 – RDX; № 5 – HMX; № 6 – ТЭН (PETN); № 7 – НГЦ; № 8 – три-нитрорезорцинат свинца, THPC; № 9 – гремучая ртуть; № 10 – азид свинца, AC; в качестве признаков рассматриваются температура вспышки T_{всп}, °C; теплота взрыва Q,

ккал/кг; нижний предел чувствительности к удару, H_o, мм. Цель анализа этой группы соединений – классификация на инициирующие и вторичные ВВ, сравнение с опорным рядом чувствительности и опасности. В качестве эталона с низкой чувствительностью [1] используется ТНТ. Статистическая обработка данных и их визуальное представление проводилось с использованием доступных пакетов программ: Deductor, Minitab.

Результаты исследования и их обсуждение

Далее приводится выборка из большого объема наиболее важных и интересных результатов. На рисунке показана дендрограмма объединения объектов в три кластера с использованием нормированного евклидового расстояния: первый кластер включает 1 объект – № 1, ТАТБ; второй кластер включает 11 объектов – № 1, 3, 5–7, 13–16, в том числе объекты опорных рядов – ТНТ, HMX, RDX; третий кластер включает остальные 13 объектов, в том числе объекты опорных рядов – ТЭН (PETN), НЦ, НГЦ. Процесс объединения объектов в группы начинается с объединения наиболее близких элементов, с минимальными расстояниями между ними. Устанавливая разные пороги по расстоянию объединения объектов (уровень отсечения), можно получать разное количество кластеров с разным содержанием элементов. Например, уровень отсечения 40% позволяет однозначно выделить два новых кластера, включающих по одному объекту: № 3 – ТНТ и № 25 – FTDO, которые расположены далеко – по расстоянию объединения, от предыдущих кластеров. Уровень отсечения в 35% приводит к определению нового кластера, включающего три объекта: № 11 – ADN, № 18 – НЭЭНТ, № 23 – ДИАЗ-1, менее термически устойчивые по рассматриваемым признакам, чем НГЦ [5], но более стойкие, чем FTDO [1; 6].

Более полный анализ результатов кластеризации целесообразно проводить с использованием матрицы евклидовых расстояний (или других мер [7, с. 117]) между объектами. В качестве примера в табл. 1 приведена «кусоченная» матрица (симметричная или инвариантная к транспонированию относительно главной диагонали) евклидовых расстояний между объектами в естественных переменных. Отсчет расстояний от диагональных элементов матрицы расстояний позволяет строить ряды объектов от любого объекта – соединения, выбранного в качестве первого члена ряда (эталона) – по значениям расстояний в соответствующем столбце или строке матрицы.



Дендрограмма объединения индивидуальных соединений (относительное евклидово расстояние)
Примечание: составлена автором по результатам данного исследования

Используя, например, априорную информацию о наименее чувствительном компоненте (например, ТАТБ, столбец матрицы 1, табл. 1), можно построить ряд термической чувствительности (по увеличению чувствительности) некоторых штатных и перспективных соединений: ТАТБ < ТНТ < НМХ < НТО, HNIW < RDX < НЦ < ДНДЭГ, ДНТЭГ, PETN < ДИНА, ТМЕТН < НГЦ < НЭЭНТ, ADN < FTDO. Соединения опорных рядов выделены жирным шрифтом, а их порядок хорошо соответствует опорным рядам [1; 4; 6]. Матрица расстояний, как и разбиение совокупности данных на последовательность увеличивающегося количества $L = 3; 4; 10$ и 18 кластеров (табл. 1), позволяет определять наиболее близкие по обобщенной мере объекты. Это является основой выбора аналогов для оценки характеристик новых компонентов или в случае пропусков в данных, а также для определения признаков отличия [7, с. 112–125].

Например, нитротриазолы № 2 – НТО, № 14 – Э-ЗН, № 15 – Э-ЗН* близки по характеристикам термической чувствительности. В свою очередь, НЭНТ, содержащий нитротриазольную и нитроэфирную (как в структуре ДНДЭГ) группы, существенно менее термически стоек, чем ДНДЭГ и, например, Э-ЗН. Несколько отличается от прогноза работы [1] и положение FTDO относительно НГЦ. Последний показывает неочевидную близость к ТМЕТН. Пред-

ставляют несомненный практический интерес относительно – в сравнении с ADN, термически стойкие соли динитразовой кислоты № 9 и 10. Следует отметить устойчивость кластеров, включающих единичные объекты (например, TATB, FTDO и, частично, THT) при увеличении количества кластеров L , на которые разбивается совокупность данных. Полученные результаты кластеризации позволяют классифицировать и смесевые композиции на основе рассмотренных компонентов [8], определять доминирующие компоненты и смеси композиций по параметрам термического разложения и теплового взрыва [11, с. 113–126; 12, с. 124–1388]. Дополнительное тестирование показало, что полученная классификация ВВ достаточно устойчива при расширении количества признаков, например, за счет молекулярных дескрипторов [14] – пакет программ Dragon, или к введению бинарных признаков для некоторых функциональных групп [6; 7, с. 145–154].

Для группы данных, включающей инициирующие и вторичные ВВ из опорных рядов [4; 6], используются признаки, не связанные с классификацией ВВ по этим группам (табл. 2). Номера инициирующих ВВ [1; 2, с. 110–118; 3, с. 205–213] выделены в табл. 2 жирным шрифтом. В этой же таблице приведены значения евклидового расстояния (S) до объектов от ТНТ, выбранного в качестве эталона.

Таблица 1
Матрица евклидовых расстояний между объектами (усеченная)

№ объекта, шифр объекта	№ объекта, евклидово расстояние (S) от диагонального элемента (эталона), стоящего на диагонали					Количество кластеров, L, и принадлежность объектов к № кластера при заданном L				
	1	2	3	4	5	L= 3	L= 4	L= 6	L= 10	L= 18
1, ТАТЬ	0	92	63	74	142	1	1	1	1	1
2, НТО	92	0	34	22	51	2	3	3	4	9
3, ТНТ	63	34	0	30	81	2	3	3	3	3
4, НМХ	74	22	30	0	72	2	3	3	4	4
5, RDX	142	51	81	72	0	2	2	6	7	5
6, HNIW	118	27	61	45	29	2	2	6	7	6
7, ТНАД	142	51	85	69	18	2	2	6	7	7
8, ДИАЗ-4	178	86	116	106	35	3	4	2	6	12
9, ГМС	143	52	82	73	1	2	2	6	7	5
10, ГС	192	101	129	122	50	3	4	2	10	10
11, ADN	219	127	159	146	78	3	4	5	9	11
12, PETN	180	88	120	107	40	3	4	2	6	12
13, ДНП	112	23	50	45	31	2	2	6	5	13
14, Э-ЗН	86	7	32	15	58	2	3	3	4	9
15, Э-ЗН*	97	6	40	25	46	2	3	3	4	9
16, БЭФ	135	45	79	61	24	2	2	6	7	7
17, ДИНА	189	98	128	118	47	3	4	2	10	10
18, НЭЭНТ	211	119	150	139	69	3	4	5	9	18
19, ДНДЭГ	175	83	114	103	33	3	4	2	6	12
20, ДНТЭГ	175	83	114	103	33	3	4	2	6	12
21, НГЦ	196	105	138	122	59	3	4	2	6	15
22, ТМЕТН	189	98	131	115	52	3	4	2	6	15
23, ДИАЗ-1	229	137	168	157	87	3	4	5	9	2
24, НЦ	171	79	110	98	29	3	4	2	6	12
25, FTDO	250	159	191	176	110	3	4	4	2	8

Примечание: составлена автором по результатам данного исследования

Таблица 2
Взрывчатые характеристики некоторых индивидуальных ВВ

№ ВВ	ВВ	T _{всп} , °C	Q, ккал/кг	H _о , мм	S от ТНТ
1	ТНТ	475	1050	240	0
2	Тетрил	257	1150	130	264
3	Тетразен	160	575	70	595
4	RDX	260	1380	90	421
5	НМХ	335	1360	120	361
6	ТЭН (PETN)	225	1460	100	500
7	НГЦ	222	1545	30	594
8	ТНРС	293	390	110	697
9	Гремучая ртуть	170	425	70	716
10	AC	330	408	110	671

Примечание: составлена автором на основе источников [1; 2, с. 110–154; 3, с. 172–189] и по результатам данного исследования (значения S).

Это позволяет построить общий опорный ряд инициирующих и вторичных ВВ по увеличению чувствительности и опасности: ТНТ, тетрил, НМХ, RDX, ТЭН (PETN),

НГЦ, тетразен, ТНРС, АС, гремучая ртуть. Этот ряд хорошо соответствует опорным рядам чувствительности и опасности ВВ [2, с. 112–123; 3, с. 112–139; 4]. Некоторые

вопросы вызывает положение тетрила в последовательности полученного ряда объектов, что не противоречит данным, приводимым в литературе для частных рядов чувствительности [1; 4; 6]. Дендрограмма объединения объектов (кластеризация) однозначно показывает два кластера, соответствующих инициирующим и вторичным ВВ.

Таким образом, приведенные результаты кластерного анализа позволяют сделать однозначное заключение о его эффективности при классификации ВВ: по типу, при построении рядов чувствительности и опасности, при определении аналогов, доминирующих компонентов и смесей и при решении других задач. Следует отметить, что пакеты *Deductor*, *Minitab* содержат опцию тестирования нового объекта на предмет отнесения к какому-либо кластеру или определения аналога, а также опцию группировки признаков.

Использование других подходов и методов, включая логико-структурный, корреляционный, факторный и дискриминантный анализы, нейросетевые алгоритмы, расширит, как показывают результаты представленного тестирования и данные ряда работ, информативность проведенной группировки и классификации, а также позволит получать корреляционные, функциональные и другие соотношения, в том числе инвариантные, с низким значением дисперсии результатов [13–15].

Выводы

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы:

1. Выбран в качестве базового, статистический метод группировки и классификации энергетических материалов по характеристикам их термического разложения и теплового взрыва – кластерный анализ.

2. Определены матрицы расстояний (евклидовых) между объектами, проведена группировка и классификация широкой группы индивидуальных энергетических материалов, описаны процедуры выбора аналогов, построены дендрограммы и ряды чувствительности, в том числе опорные.

3. Показана эффективность использования методов кластерного анализа для многомерной классификации соединений различных классов и назначения, построения опорных рядов, установления близости или аналогичности объектов по совокупности признаков.

Список литературы

1. Назин Г.М., Корсунский Б.Л. Определение термической стабильности взрывчатых веществ методом опорного ряда // Химическая физика. 2021. Т. 40. № 3. С. 53–59. URL: <https://www.sciencejournals.ru/cgi/getPDF.pl?jid=khimfiz&yea>

r=2021&vol=40&iss=3&file=KhimFiz2103009Nazin.pdf (дата обращения: 02.12.2025). DOI: 10.31857/S0207401X21030092.

2. Андреев В.В., Гусков А.В., Милевский К.Е. Экспlosивные вещества. Новосибирск: Издательство НГТУ, 2018. 342 с. [Электронный ресурс]. URL: <https://elibrary.nstu.ru/source?id=75410> (дата обращения: 02.12.2025).

3. Андреев К.К. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ. М.: Наука, 1966. 347 с. [Электронный ресурс]. URL: <https://djvu.online/file/mlSpUh5mZov0r> (дата обращения: 02.12.2025).

4. Назин Г.М., Корсунский Б.Л., Казаков А.И. Чувствительность взрывчатых веществ к удару и скорость реакции термического разложения // Химическая физика. 2023. Т. 42. № 3. С. 49–57. URL: <https://www.sciencejournals.ru/cgi/getPDF.pl?jid=khimfiz&year=2023&vol=42&iss=3&file=KhimFiz2303012Nazin.pdf> (дата обращения: 02.12.2025). DOI: 10.31857/S0207401X23030123.

5. Popok V.N., Vdovina N.P., Bychin N.V. Compatibility of nanodispersed powders of metals and their oxides with components of mixed energy materials // Nanotechnologies in Russia. 2013. Vol. 8. № 1–2. P. 99–107. URL: <https://link.springer.com/article/10.1134/S1995078013010126> (дата обращения: 02.12.2025). DOI: 10.1134/S1995078013010126.

6. Попок В.Н. Некоторые результаты статистической группировки и классификации энергетических материалов по характеристикам термического разложения и теплового взрыва // Бутлеровские сообщения. 2019. Т. 57. № 2. С. 41–49. URL: <https://butlerov.com/files/reports/2019/vol57/2/41/19-57-2-41.pdf> (дата обращения: 02.12.2025). EDN: YZJGUX.

7. Статистические методы для ЭВМ // Под ред. Энслейна К., Релстона Э., Уилфа Г.С.М.: Наука, 1986. 464 с. [Электронный ресурс]. URL: <https://thelib.net/1745502-statisticheskie-metody-dlya-jevm.html> (дата обращения: 02.12.2025).

8. Thomas G.S., Shaji A.P., Jacob S. Data Mining – Cluster Analysis // International Journal of Research Publication and Reviews. 2021. Vol. 2. № 4. P. 137–142. URL: <https://www.ijrpr.com/uploads/V2ISSUE4/IJRPR347.pdf> (дата обращения: 02.12.2025).

9. Saganowska P., Wesolowski M. Principal component and cluster analyses as supporting tools for co-crystals detection // J. Therm. Anal. Calorim. 2017. Vol. 130. P. 45–55. URL: <https://d-nb.info/113230881X/34> (дата обращения: 02.12.2025). DOI: 10.1007/s10973-017-6436-8.

10. Попок В.Н. Сокристаллизация компонентов смесевых энергетических материалов. Казань: Издательство ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие», 2023. 324 с. [Электронный ресурс]. URL: <https://koha.benran.ru/cgi-bin/koha/opac-detail.pl?biblionumber=2250073> (дата обращения: 02.12.2025). ISBN 978-5-6047662-3-1.

11. Han J., Kamber M. Data Mining Concepts and Techniques. Elsevier. 2015. 560 p. URL: https://www.academia.edu/22412092/DATA_MINING_CONCEPTS_AND_TECHNIQUES_3RD_EDITION (дата обращения: 02.12.2025).

12. Воскобойников Ю.Е. Статистический анализ экспериментальных данных в пакетах Mathcad и Excel. М.: Лань, 2022. 212 с. [Электронный ресурс]. URL: <https://reader.lanbook.com/book/256109?demoKey=6e300b7e1a9129edfcc87441097d089d#2> (дата обращения: 02.12.2025). ISBN 978-5-507-45039-8.

13. Попок В.Н. Корреляция характеристик теплового взрыва и термического разложения компонентов и композиций смесевых энергетических материалов // Бутлеровские сообщения. 2018. Т. 56. № 12. С. 71–78. URL: <https://butlerov.com/files/reports/2018/vol56/12/71/18-56-12-71.pdf> (дата обращения: 02.1.2.2025). EDN: YTAETZ.

14. Zhao Y., Mulder R.J., Houshyar S., Le T.C. A review on the application of molecular descriptors and machine learning in polymer design // Polymer Chemistry. 2023. Vol. 14. P. 3325–3346. URL: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/py/d3py00395g> (дата обращения: 02.12.2025). DOI: 10.1039/D3PY00395G.

15. Yamada H., Liu C., Wu S., Koyama Y., Ju S., Shiomi J., Morikawa J., Yoshida R. Predicting Materials Properties with Little Data Using Shotgun Transfer Learning // ACS Cent. Sci. 2019. Vol. 5. P. 1717–1730. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC680804/> (дата обращения: 02.12.2025). DOI: 10.1021/acscentsci.9b00804.

Конфликт интересов: Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest: The author declares that there is no conflict of interest.