

И.В. Маклашова<sup>1</sup>, А.Д. Шлыков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

## ПОЛУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ JWЛ

Предложен алгоритм получения параметров уравнения состояния JWЛ методом дифференциальной эволюции машинного обучения на основе термодинамического моделирования свойств продуктов детонации

I.V. MAKLASHOVA<sup>1</sup>, A.D. SHLYKOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute)

<sup>2</sup>Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

## OBTAINING PARAMETERS OF THE JWЛ EQUATION OF STATE

An algorithm has been proposed for obtaining the parameters of the JWЛ equation of state using the differential evolution method of machine learning based on thermodynamic modeling of the properties of detonation products.

Для описания свойств продуктов детонации (ПД) большинства взрывчатых веществ наиболее часто используется эмпирическое уравнение состояния (УРС) типа Ми-Грюнайзена Джонса - Уилкинса - Ли (уравнение JWЛ) [1, 2], имеющее вид:

$$p_{pd}(\rho_{pd}, e_{pd}) = A \left[ 1 - \frac{\omega}{R_1 V_{pd}} \right] \exp(-R_1 V_{pd}) + B \left[ 1 - \frac{\omega}{R_2 V_{pd}} \right] \exp(-R_2 V_{pd}) + \omega \rho_{pd} (e_{pd} - e_0)$$

где  $V_{prod} = \frac{p_0}{\rho_{pd}}$  – коэффициент расширения продуктов детонации,  $p_{pd}$  – давление продуктов детонации,  $A$ ,  $B$ ,

$C$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  и  $\omega$  являются параметрами, специфичными для каждого взрывчатого материала. Первый член уравнения определяет поведение ПД при очень высоких давлениях и низкой степени расширения, второй дополнение относится к зоне промежуточного давления, а третий член описывает изэнтропическое расширение в области низкого давления, соответствующей большой степени расширения. В этом контексте только параметр  $\omega$  имеет физический смысл и приблизительно удовлетворяет соотношению  $\omega=1-\gamma$ , где  $\gamma$  – политропная постоянная для ПД при сильном расширении продуктов при давлении, близком к атмосферному, т.е. расширения идеального газа с эффективным показателем адиабаты  $1+\omega$ .

Для термодинамического моделирования параметров детонации и дальнейшего расширения ПД применялись физически обоснованные модели уравнений состояния многокомпонентного флюида, основанные на теории возмущений и конденсированного наноглерода [3]. Такие расчеты дают возможность определять параметры детонации с высокой точностью [3, 4], обеспечивая хорошее согласие с экспериментальными данными. На основе термодинамического расчета получены характеристики продуктов детонации в точке Чепмена-Жуге: давление, скорость детонации, теплота взрывчатого разложения, состав, температура и другие термодинамические и теплофизические свойства, а также свойства ПД при изэнтропическом расширении от точки Чепмена-Жуге до атмосферного давления ( $p_{pd}, \rho_{pd}, e_{pd}$ ).

Для подбора параметров УРС JWЛ использовался метод дифференциальной эволюции [5] машинного обучения с использованием функций библиотеки SciPy [6]. На каждом итерационном шаге оптимизации коэффициентов  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  и  $\omega$  по термодинамическим данным изэнтропического расширения ( $p_{pd}, \rho_{pd}, e_{pd}$ ) определяются свойства ПД в точке Чепмена-Жуге и проверяется выполнение всех условий сохранения.

Полученные значения параметров УРС JWЛ тестовых веществ с высокой точностью воспроизводят значения давления, скорости детонации в точке Чепмена-Жуге, давление на изэнтропе расширения ПД и могут быть использованы в прикладных расчетах взрывных процессов для расчета свойств продуктов в произвольной точке пространства  $p_{pd}(\rho_{pd}, e_{pd})$ .

### Список литературы

1. Lee E.L., Hornig H.C., Kury J.W. Adiabatic expansion of high explosive detonation products, UCRL-50422, Livermore, California, USA, 1968
2. Urtiew, P.A., Hayes, B. Parametric study of the dynamic JWЛ-EOS for detonation products. // *Combust Explos Shock Waves* 27, 505–514 (1991). <https://doi.org/10.1007/BF00789568>
3. Викторов С.Б., Губин С.А., Маклашова И.В., Пепекин В.И. Прогнозирование детонационных характеристик безводородных взрывчатых веществ // *Химическая физика*. 2005. Т. 24. № 12. С. 22-45.
4. Victorov S.B., El-Rabii H., Gubin S.A., Maklashova I.V., Bogdanova Yu.A. An Accurate Equation-of-State Model for Thermodynamic Calculations of Chemically Reactive Carbon-Containing Systems. // *Journal of Energetic Materials* 2010, 28:sup1, 35-49, <https://doi.org/10.1080/07370652.2010.491496>
5. Storn R., Price K. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces. // *Journal of Global Optimization* 11, 341–359 (1997). <https://doi.org/10.1023/A:1008202821328>
6. <https://docs.scipy.org/doc/>