МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ПРОДУКТОВ ДЕТОНАЦИИ ДЖОНСА-УИЛКИНСА-ЛИ С ПРИМЕНЕНИЕМ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЭКСПЕРИМЕНТА ЦИЛИНДР-ТЕСТ

М.А. Бирюкова¹, Н.Л. Клиначева², Е.Б. Смирнов^{1,2}, <u>Я.Е. Стариков²</u>, С.В. Шахмаев¹, О.А. Шершнева², Е.С. Шестаковская², А.П. Яловец²

¹ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия ²Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия

XVII Международная конференция «ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ» 19–23 мая 2025 г. Снежинск, Россия

Цилиндр – тест: постановка эксперимента





Рис. 1. Фотография разлета цилиндра, схема эксперимента и фотография экспериментальной установки.

Predrag Elek, Vesna Dzingalasevic, Slobodan Jaramaz, and Dejan Mickovic. Determination of detonation products equation of state from cylinder test: Analytical model and numerical analysis. Thermal Science, 19:138–138, 01 2013.

Уравнение состояния JWL

Общий вид:

$$P(E,V) = A\left(1 - \frac{\omega}{R_1 V}\right)e^{-R_1 V} + B\left(1 - \frac{\omega}{R_2 V}\right)e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V}.$$

Изэнтропа E(V):

$$E(V) = \int_{V}^{\infty} p dV = \frac{A}{R_{1}} e^{-R_{1}V} + \frac{B}{R_{2}} e^{-R_{2}V} + \frac{C}{\omega} V^{-\omega}.$$

Изэнтропа P(V):

$$P(V) = Ae^{-R_1V} + Be^{-R_2V} + CV^{-(1+\omega)}.$$

 $V = \rho_0 / \rho.$

Параметры: $A, B, C, R_1, R_2, \omega$.

M. L. Wilkins. The Equation of State of PBX 9404 and LX04-01, Lawrence Radiation Laboratory, Livermore, Rept. UCRL-7797 (1964).

Математическое моделирование



Предположения

- 1. Материал цилиндра предполагается несжимаемым, а его предел текучести постоянным.
- 2. Детонация предполагается идеальной, продукты взрыва полностью прореагировавшими, невязкими и расширяющимися изоэнтропически.
- 3. Характер течения предполагается стационарным и симметричным относительно оси цилиндра.

Загускин, В. Л. Метод расчета коэффициентов изэнтропы продуктов детонации / В. Л. Загускин, Н. А. Григорьев, Т. Н. Новикова, В. А. Филистович // Доклады IV Всесоюзного совещания по детонации. – 1989. – Т. 1. – С. 244-250.

Система уравнений для установившегося течения

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho rv) = 0,$$
$$u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} = 0,$$
$$u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r} = 0,$$
$$P = P(\rho).$$

ho – массовая плотность,

- *и*, *v* компоненты поля скорости в осевом и радиальном направлениях,
- x, r координаты в осевом и радиальном направлениях,
- *Р* давление.

Загускин, В. Л. Метод расчета коэффициентов изэнтропы продуктов детонации / В. Л. Загускин, Н. А. Григорьев, Т. Н. Новикова, В. А. Филистович // Доклады IV Всесоюзного совещания по детонации. – 1989. – Т. 1. – С. 244-250.

Система уравнений для установившегося течения

 $\begin{cases} \tilde{x} = x \\ -n \text{ среход в криволинейную систему координат, связанную с линиями тока } \\ d\tilde{r} = dr - \frac{v}{u} dx \end{cases}$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}}(\rho uS) = 0,$$

$$u\frac{\partial u}{\partial \tilde{x}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial \tilde{x}} = 0,$$

$$u\frac{\partial v}{\partial \tilde{x}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r} = 0,$$

$$P = P(\rho).$$

Загускин, В. Л. Метод расчета коэффициентов изэнтропы продуктов детонации / В. Л. Загускин, Н. А. Григорьев, Т. Н. Новикова, В. А. Филистович // Доклады IV Всесоюзного совещания по детонации. – 1989. – Т. 1. – С. 244-250.

Граничные условия

$$m\frac{\partial v}{\partial t} = P - \sigma \frac{h}{r}$$
 – внешняя граница (уравнение движения трубки).

 $\rho = \rho_{CJ,}$

 $u = c_{CJ}$, – левая граница (фронт детонационной волны). v = 0

Преобразование положения стенки цилиндра в траекторию

 $r(x) \to r(t),$

 $t = \frac{x}{D}$ – связь пространственной координаты со временем.

v = 0, $\frac{\partial P}{\partial r} = 0^{-0}$ - ось цилиндра (условие симметрии).

Нахождение толщины стенки цилиндра h $(r_{_{\!G\!H}} + h)^2 - r_{_{\!G\!H}}^2 = (r_{_{\!G\!H},0} + h_0)^2 - r_{_{\!G\!H},0}^2$ h_0 – толщина стенки недеформированного цилиндра, $r_{_{\!G\!H}}$ – внешний радиус цилиндра.

Задача оптимизации



 $R(t_i)$ – рассчитанная траектория стенки цилиндра, $R_{\exp}(t_i)$ – экспериментальная траектория стенки цилиндра, $\left\| R_{\vec{\theta}}(t_i) - R_{\exp}(t_i) \right\| \rightarrow \min$ – задача оптимизации, $\vec{\theta} = (A, B, C, R_1, R_2, \omega)$ – искомые параметры.

Рис. 3. Сравнение рассчитанной траектории с экспериментальными данными.

Задача оптимизации: снижение размерности

 $Ae^{-R_1V_{CJ}} + Be^{-R_2V_{CJ}} + CV_{CJ}^{-(\omega+1)} = -\rho_0(1-V_{CJ})D^2$ – изэнтропа P(V) в точке Чепмена-Жуге,

 $R_1 A e^{-R_1 V_{CJ}} + R_2 B e^{-R_2 V_{CJ}} + (\omega + 1) C V_{CJ}^{-(\omega+2)} = \rho_0 D^2$ – наклон касательной к P(V) в точке Чепмена-Жуге равен наклону линии Релея,

$$A\left(1-\frac{\omega}{R_{1}V_{CJ}}\right)e^{-R_{1}V_{CJ}} + B\left(1-\frac{\omega}{R_{2}V_{CJ}}\right)e^{-R_{2}V_{CJ}} + \frac{\omega}{V_{CJ}}\left(E_{0}+\frac{1}{2}P_{CJ}\left(1-V_{CJ}\right)\right) = P_{CJ} - \text{УРС в точке Чепмена-Жуге,}$$
$$\frac{P}{(1-V)} = -\rho_{0}D^{2} - \text{луч Релея-Михельсона.}$$

 $(A, B, C, R_1, R_2, \omega) \longrightarrow (R_1, R_2, \omega)$ – размерность пространства оптимизации снижается с 6 до 3.

Задача оптимизации: вклад слагаемых УРС



Рис. 4. Изоэнтропы E(V), построенные с разными наборами коэффициентов.

Задача оптимизации: вклад слагаемых УРС

Дополнительные ограничения:

$$P(V) = Ae^{-R_{1}V} + Be^{-R_{2}V} + CV^{-(1+\omega)},$$

$$\int_{V_{1}}^{V_{2}} Ae^{-R_{1}V} dV \ge \int_{V_{1}}^{V_{2}} \left[Be^{-R_{2}V} + CV^{-(1+\omega)} \right] dV,$$

$$\int_{V_{2}}^{V_{3}} Be^{-R_{2}V} dV \ge \int_{V_{2}}^{V_{3}} \left[Ae^{-R_{1}V} + CV^{-(1+\omega)} \right] dV,$$

$$\int_{V_{3}}^{V_{4}} CV^{-(1+\omega)} dV \ge \int_{V_{3}}^{V_{4}} \left[Ae^{-R_{1}V} + Be^{-R_{2}V} \right] dV,$$

$$V = \left\{ V_{CJ}, 2, 7, 10 \right\}.$$



11

Задача оптимизации: метод роя частиц

$$v_i^{t+1} = w \cdot v_i^t + c_1 \cdot r_1 \cdot (p_{\text{best}_i} - x_i^t) + c_2 \cdot r_2 \cdot (g_{\text{best}} - x_i^t),$$

- метод роя частиц (PSO).
 $x_i^{t+1} = x_i^t + v_i^{t+1}$

 v_i^t – скорость *i*-й частицы на итерации *t*, x_i^t – положение *i*-й частицы на итерации *t*, $r_1, r_2 \sim U(0,1),$

 p_{best_i} – лучшее положение *i*-й частицы, g_{best} – лучшее положение во всем рое.

$$\begin{split} c_{1,i} &= \frac{e^{F_{best}}}{e^{F_{best}} + e^{F_{best_i}}}, \quad c_{2,i} = \frac{e^{F_{best_i}}}{e^{F_{best}} + e^{F_{best_i}}}, \\ w &= \begin{cases} \xi & \text{при } F_i \leq F_{best} \cap F_i \leq F_{best_i}, \\ (F_i - F_{best})^{\gamma} & \text{при } F_{best} < F_i < F_{best_i}, \\ (2F_i - F_{best} - F_{best_i})^{\gamma} & \text{при } F_i > F_{best} \cap F_i > F_{best_i}, \end{cases} \\ \xi &= 0.01, \quad \gamma = 0.01. \end{split}$$

Ruan, Z., Jiang, X.-C., Song, Z.-Y., & Zhang, Y.-Z. (2023). Improved particle swarm optimization algorithm and its application to search for new magnetic ground states in the Hubbard model. *Physical Review Research*, *5*(4), 043275.

Применение машинного обучения для определения параметров УРС JWL

$$(P_{CJ}, D, E_0, \rho_0, R_1, R_2, \omega) \rightarrow R(t_i)$$

Аппроксимация траектории для компактного представления:

$$f(t, \vec{x}) = \frac{v_{\infty}t \cdot g(t)}{\frac{2v_{\infty}}{a_0}}g'(0) + g(t),$$

$$g(t) = (1+t)^{\sigma} - 1,$$

$$\vec{x} = \{a_0, v_{\text{inf}}, \sigma, t_0\} - \text{представление траектории в виде 4-х чисел.}$$

Задача регрессии:

Известны:
$$\vec{x}_{in} = \{P_{CJ}, D, E_0, \rho_0, a_0, v_{inf}, \sigma, t_0\},\$$
Предсказываются: $\vec{x}_{pred} = \{R_1, R_2, \omega\}.$

Применение машинного обучения: набор данных

Нормирование параметров:

$$\tilde{F} = \frac{F - F_{\min}}{F_{\max} - F_{\min}} \in [0, 1].$$

Генерация наборов параметров:

 $\left(\tilde{P}_{CJ}, \tilde{D}, \tilde{E}_{0}, \tilde{\rho}_{0}, \tilde{R}_{1}, \tilde{R}_{2}, \tilde{\omega}\right) \square U\left(\left[0, 1\right]^{7}\right)$ – каждая компонента имеет равномерное распределение.

Сгенерирован 1 000 000 наборов, получены результаты расчета для 170 000 наборов.

Разбиение по выборкам:

- Обучающая: 80%
- Валидационная: 10%
- Тестовая: 10%

Применение машинного обучения: сравнение архитектур

Название	Описание	MSE
Многослойный перцептрон (MLP)	Последовательные полносвязные слои с активациями в виде сигмоид. Количество каналов: [8, 32, 64, 32, 3]	0.0266
TabNet	Нейросетевая архитектура, использующая механизмы внимания (attention) и выбор признаков для улучшения работы с табличными данными.	0.0197
Градиентный бустинг (XGBoost)	Ансамбль, использующий решающие деревья в качестве базовых моделей, каждое из которых корректирует ошибки предыдущих.	0.0189

Arik, S. Ö., & Pfister, T. (2021). TabNet: Attentive Interpretable Tabular Learning. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, *35*(8), 6679-6687. https://doi.org/10.1609/aaai.v35i8.16826

Применение машинного обучения: сравнение архитектур

Название	Описание	MSE
Многослойный перцептрон (MLP)	Последовательные полносвязные слои с активациями в виде сигмоид. Количество каналов: [8, 32, 64, 32, 3]	0.0266
TabNet	Нейросетевая архитектура, использующая механизмы внимания (attention) и выбор признаков для улучшения работы с табличными данными.	0.0197
Градиентный бустинг (XGBoost)	Ансамбль, использующий решающие деревья в качестве базовых моделей, каждое из которых корректирует ошибки предыдущих.	0.0189

Решение: использовать предсказание как аппроксимацию минимума.

Название	Количество итераций
Без выбора начального приближения	≈ 250
С выбором начального приближения	≈ 80 (-68%)

Расчет для ТЭН, количество частиц – 1000.

Arik, S. Ö., & Pfister, T. (2021). TabNet: Attentive Interpretable Tabular Learning. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, *35*(8), 6679-6687. https://doi.org/10.1609/aaai.v35i8.16826



Рис. 6. Результаты расчетов для CompB и TEN. 1 – экспериментальные данные, 2 – расчет с помощью представленного метода, 3 – результаты математического моделирования с найденными коэффициентами, 4 – результаты математического моделирования с коэффициентами из работы [1].

¹Lee E. L, Hornig H. C. and Kury J. W. Adiabatic expansion of high explosive detonation products, UCRL-50422. -Livermore (CA), 1968.



Рис. 6. Результаты расчетов для TNT и Cyclotol. 1 – экспериментальные данные, 2 – расчет с помощью представленного метода, 3 – результаты математического моделирования с найденными коэффициентами, 4 – результаты математического моделирования с коэффициентами из работы [1].

¹Lee E. L, Hornig H. C. and Kury J. W. Adiabatic expansion of high explosive detonation products, UCRL-50422. -Livermore (CA), 1968.

Результаты расчетов



Рис. 8. Результаты расчетов для пластифицированного ТЭНа. 1 – экспериментальные данные, 2 – расчет с помощью представленного метода, 3 – результаты математического моделирования с найденными коэффициентами.

• Спасибо за внимание!

Стариков Ярослав Евгеньевич Аспирант кафедры вычислительной механики ЮУрГУ (НИУ) starikovie@susu.ru