

文章编号: 1006-9941(2015)04-0340-06

遗传算法在燃烧产物平衡组分计算中的应用

谢中元¹, 周霖², 王浩¹, 李守殿³

(1. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065; 2. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081; 3. 中国兵器工业规划研究院, 北京 100053)

摘要: 基于化学平衡原理, 在最小自由能法求解的基础上, 通过引入遗传算法, 确定自变量的选取以及其变化范围, 明确了适应函数, 建立了燃烧产物平衡组分计算方法, 并应用文献数据与实验结果对计算结果的准确性进行验证。结果表明: 贫氧化合物(TNT, Tetryl, TNBA)燃烧产物组分含量与燃温的计算结果与文献值的误差分别在 1% 与 1.5% 以内, 富氧化合物(RDX, PETN, Nitromethane)燃烧产物组分含量与燃温的计算结果与文献值的误差分别在 7.7% 与 5% 以内, 不同 CsNO₃ 含量的丁羟等离子推进剂爆热计算结果与实验测试结果的最大误差为 4.27%。该方法可为火炸药配方设计、性能预估以及燃烧产物组分种类的确定等提供重要手段。

关键词: 军事化学与烟火技术; 燃烧; 平衡组分; 最小自由能; 遗传算法

中图分类号: TJ012.1

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.04.006

1 引言

燃烧产物平衡组分的准确计算是火炸药配方设计与性能预估的重要研究内容。目前, 燃烧产物组分含量的计算方法主要有平衡常数法、最小自由能法等, 其中最小自由能法由于不需要知道化学反应的中间过程且不涉及化学反应平衡常数的选取而应用最为广泛^[1], 如美国国家航空和宇宙航行局采用最小自由能法计算了包含 20 种元素的燃烧产物组成^[2]; 国内焦清介^[3]、刘晶如^[4]、庞维强^[5]等应用最小自由能法计算了烟火药的燃烧产物组成, 得到了与实验相符的结果。然而, 最小自由能法求解过程中由于采用泰勒展开法、Newton 法、布罗依登法^[1]等方法对非线性方程组进行求解, 其初始值设置难度增加, 且对于多组分多相态的复杂的化学反应, 其收敛也比较困难。

遗传算法是 Holland J 教授^[6-7]提出的基于生物遗传和进化机制的适合于复杂系统优化的自适应概率优化计算方法, 包含变量编码、复制、交叉、变异等过

程, 具有全局优化、操作简便以及较强的鲁棒性等特点, 在单目标寻优、多目标寻优、参数优化、计划调度等方面具有广泛的应用。近年来, 遗传算法逐渐开始应用于化学平衡计算, 安维中^[8]、潘功配^[9]、贾冬梅^[10]等应用遗传算法对含化学反应体系的相平衡进行求解, 取得了良好效果。

基于遗传算法的优良特性以及火炸药的燃烧特性, 本研究拟在最小自由能法的基础上引入遗传算法建立燃烧产物平衡组分计算方法, 并以文献数据与实验测试结果验证计算结果的正确性。

2 计算模型

2.1 问题描述

热力学平衡理论^[1]表明, 当燃烧产物体系达到动态平衡时, 自由能取得最小值, 反之, 当体系自由能达到最小值时, 燃烧产物体系即为系统平衡体系, 这就是最小自由能法求解燃烧产物平衡组分的基本原理。为表述清楚, 设气态产物组分编号为 1, 2, ..., N, 固态产物的组分为 N+1, N+2, ..., M, 则体系自由能 G 可表述为^[9]:

$$G = \sum_1^N n_i u_i^g + \sum_{N+1}^M n_i u_i^s \quad (1)$$

式中, 气态产物组分化学势 u_i^g (J · mol⁻¹), 表示为:

$$u_i^g = \left(\frac{G_m}{RT} \right)_i^g + RT \left[\ln \left(\frac{n_i^g}{n} \right) + \ln p \right] \quad (2)$$

收稿日期: 2014-03-01; 修回日期: 2014-05-25

基金项目: 863 计划资助项目 (A2220061374), 所青年创新基金项目 (SJQC1204)

作者简介: 谢中元 (1982-), 男, 副研究员, 博士, 研究方向为火炸药配方与设计。email: 408671355@qq.com

通信联系人: 周霖 (1962-), 男, 教授, 博士生导师, 研究方向为火炸药配方与设计。email: zhoulin@bit.edu.cn

固态产物组分化学势 $u_i^s(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$ 表示为:

$$\mu_i^s = \left(\frac{G_m}{RT} \right)_i^s \quad (3)$$

式中,上标 g 和 s 分别表示为气态和固态; G_m 为燃烧产物标准状态下的自由能, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; R 为气体常数, $8.314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$; T 为体系温度, K; n_i 为燃烧产物组分的物质的量, mol; n_i^g 为燃烧产物组分中气态组分的物质的量, mol; n 为气态产物物质的量的总和, mol; p 为燃烧产物压强, MPa。

式(1)中气态燃烧产物与固态燃烧产物同时需满足以下约束条件:

$$\begin{cases} n_i \geq 0 & i=1, 2, \dots, M \\ \sum_{i=1}^N a_{ij} n_i + \sum_{i=N+1}^M a_{ij} n_i = N_j & j=1, 2, \dots, l \end{cases} \quad (4)$$

式中, a_{ij} 表示第 i 种燃烧产物中第 j 种元素的个数; N_j 为火炸药配方体系中第 j 种元素的物质的量, mol; l 为火炸药配方体系中元素的种类数。燃烧产物组分计算即在满足式(4)条件下,使得式(1)达到最小值时所求得的组分 n_i 。

2.2 计算方法

计算按以下步骤进行:(1)根据变量数 NVAR、种群大小 NIND、变量字节数 PRECI 以及变量变化范围对基因编码;(2)计算目标函数值并将其作为初始值,进入包含适应度、选择、交叉、变异的循环计算,当条件满足时跳出计算;(3)输出计算结果。如图 1 所示。

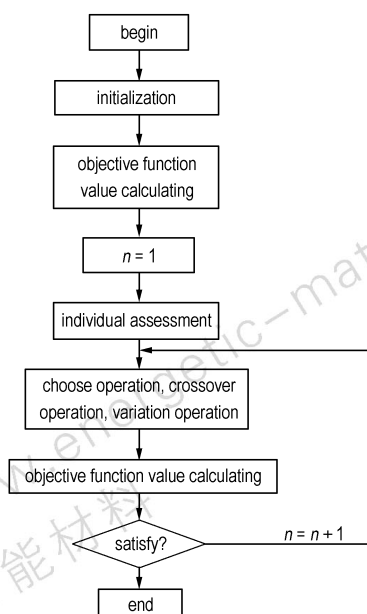


图 1 遗传算法计算框图

Fig. 1 Calculation flow chart of genetic algorithm

下面主要阐述遗传算法中自变量的选取与变化范围的确定、适应度函数的确定以及燃烧产物平衡组分计算方法。

2.2.1 自变量的选取与变化范围的确定

为叙述简便,以火炸药中应用广泛的 CHON 类化合物为例阐述自变量选取与变化范围确定的方法。

根据文献[1]中的研究结果,将 1 kg CHON 类化合物分子式表示为 $C_a H_b O_c N_d$ (下标表示化合物中相应元素的物质的量),燃烧产物组分(14 种)表示为:

$n_{C(\text{solid})}, n_{\text{CO}_2}, n_{\text{CO}}, n_{\text{CH}_4}, n_{\text{H}_2\text{O}}, n_{\text{H}_2}, n_{\text{H}}, n_{\text{HO}}, n_{\text{NH}_3}, n_{\text{N}_2}, n_{\text{N}}, n_{\text{NO}}, n_{\text{NO}_2}, n_{\text{O}}$ 。鉴于各组分含量均满足约束条件,将式(4)展开为:

$$\begin{cases} a = n_{C(\text{solid})} + n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} + n_{\text{CH}_4} \\ b = 2n_{\text{H}_2\text{O}} + 2n_{\text{H}_2} + n_{\text{H}} + n_{\text{HO}} + 3n_{\text{NH}_3} + 4n_{\text{CH}_4} \\ c = n_{\text{H}_2\text{O}} + 2n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} + n_{\text{HO}} + n_{\text{NO}} + 2n_{\text{NO}_2} + n_{\text{O}} \\ d = n_{\text{NH}_3} + n_{\text{NO}} + n_{\text{NO}_2} + n_{\text{N}} + 2n_{\text{N}_2} \end{cases} \quad (5)$$

由于式(5)中包含 4 个线性化约束方程,因此可将 4 种组分表示为其它组分的线性关系式,进而使得独立燃烧产物组分变量由 14 个减少为 10 个,最小自由能函数(1)变为 10 个自变量的函数,且求解问题由线性化约束问题转化为线性化非约束问题。

变量的选取与取值范围确定,原则上可以从燃烧产物中任取 10 种组分,只要这 10 种组分涵盖所有元素即可,但是由于各组分含量差异较大,任意选定的自变量不容易确定其变化范围。基于此,根据文献[1, 3, 11, 12],首先将上述 14 种燃烧产物组分分为两组,第一组为主要组分,包含 $n_{C(\text{solid})}, n_{\text{CO}_2}, n_{\text{CO}}, n_{\text{H}_2\text{O}}, n_{\text{H}_2}, n_{\text{N}_2}$;第二组为次要成分,包含 $n_{\text{CH}_4}, n_{\text{H}}, n_{\text{HO}}, n_{\text{NH}_3}, n_{\text{N}}, n_{\text{NO}}, n_{\text{NO}_2}, n_{\text{O}}$,其中,主要组分含量总和占燃烧产物总含量的 95% 以上;然后根据次要组分含量少、变化范围小且容易确定等特点,选取包含不同元素的部分次要组分作为函数自变量,同时补充一定的主要成分作为自变量,本研究选取自变量为: $n_{C(\text{solid})}, n_{\text{CO}_2}, n_{\text{CH}_4}, n_{\text{H}}, n_{\text{HO}}, n_{\text{NH}_3}, n_{\text{N}}, n_{\text{NO}}, n_{\text{NO}_2}, n_{\text{O}}$;最后通过对文献[11]中火炸药燃烧产物组分含量的统计与整理,以较大上限确定各组分含量变化范围,如表 1 所示。

表 1 中 a、b、c、d 与 CHON 类化合物分子式下标相同。经计算表明,各变量的变化范围除 $n_{C(\text{solid})}$ 和 n_{CO_2} 需要根据不同物质稍作调整外,其他变量的取值范围不需调节就可以满足不同化合物燃烧产物计算需求。显然,相对于泰勒展开法、Newton 法以及布罗依登法^[13]等方法对于空间点的初始值设置,本方法对少

数自变量变化范围的确定要简便得多。

表 1 变量取值范围

Table 1 The range of input variables

variables	variation range	variables	variation range
$n_{C(solid)}$	(0, 0.4a)	n_{CO_2}	(0, 0.2a)
n_{HO}	(0, 0.1b)	n_H	(0, 0.1b)
n_{CH_4}	(0, 0.05a)	n_O	(0, 0.05c)
n_{NH_3}	(0, 0.1b)	n_N	(0, 0.05d)
n_{NO_2}	(0, 0.05d)	n_{NO}	(0, 0.05d)

2.2.2 适应度函数确定

适应度是与目标函数值(体系自由能 G)接近程度相对应的评价个体优劣的参数,越接近于目标函数值,则个体对应的适应度值越大,个体越容易继承。在 Matlab 遗传算法工具箱中是通过 Ranking (ObjV) 函数来计算个体适应度值的,其返回一个包含对应个体适应度的 FitnV 列向量。这个函数是从最小化方向对个体适应度进行排序的,即函数值越小,个体适应度越大,这正好与本研究的问题相吻合,因此可直接将目标函数(式(1))作为判别个体优劣的适应度函数。然而,Ranking 函数是对正值数列进行求解的,而自由能为负值,因此,需要在最小自由能值前加上一个较大的正数使得最小自由能为正值,考虑实际计算情况,本研究增加的正数为 2000。另外,由于各变量在其变化范围内是随机抽取的,因此很有可能出现组分含量为负值而不满足式(4),为使其在迭代过程中被淘汰,需要设定一个大的数值使其适应度变小,本研究设定其为 10000。适应度函数如式(6)所示,其中,“其它”是指燃烧产物组分含量为负值的情况。

$$\begin{cases} G_s = 2000 + G & n_C, n_{CO_2}, \dots, n_{H_2O} \geq 0 \\ G_s = 10000 & \text{其它} \end{cases} \quad (6)$$

2.2.3 燃烧产物平衡组分计算方法

燃烧产物平衡组分计算方法总体计算框图如图 2 所示,其中, $\Delta_r H_m^\ominus$ 表示为生成焓, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; ΔH 为燃烧产物焓变, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; T_0 为初始设置温度, K; H_i 为燃烧产物在某一温度下的焓, H_i^\ominus 为燃烧产物在标准状态下的焓, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

具体计算按以下步骤进行:(1)输入初始参数,具体如表 2 所示,其中,初始温度 T_0 设置为 3000 K 即可满足大部分火炸药燃烧温度的计算;种群大小 NIND 即数据量可设置为 200 左右,以减少计算时间并保证计算精度;最大迭代次数 MAXGEN 设置为 3000 左右即可保证计算精度;变量字节数 PRECI 设置为 20 即

可满足计算精度要求;代沟 GGAP 可固定设置为 0.7;变量变化范围除 $n_{C(solid)}$ 和 n_{CO_2} 需要根据不同物质中碳含量不同稍加修改上限和下限外,气体均按表 1 取值。(2)利用燃烧产物焓变 $\Delta_r H_m^\ominus$ 与混合物生成焓 $\Delta_r H_m^\ominus$ 的比较作为判断条件,由遗传算法确定温度变化的上下界 $[T_0, T_1]$ 。(3)利用 T_0 与 T_1 之间差值作为判断条件,采用二分法^[11]与遗传算法确定燃烧温度 T 以及燃烧产物各组分的物质的量 n_i ;(4)输出计算结果并按要求作图,具体如表 3 所示。

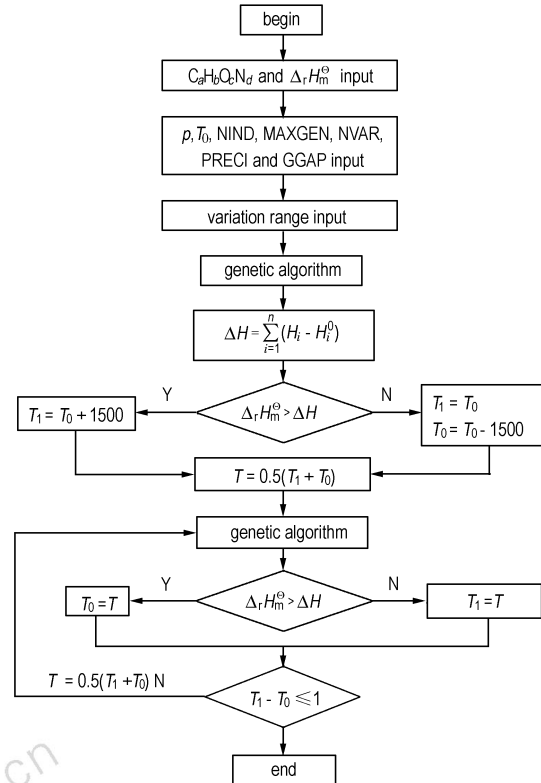


图 2 总程序计算框图

Fig. 2 Block diagram of the total calculation program

表 2 输入变量

Table 2 Input variables

variable name	symbol
compound formula	$C_a H_b O_c N_d$
enthalpy of formation	$\Delta_r H_m^\ominus$
combustion pressure	p
initial temperature	T_0
byte count of Variable	PRECI
population size	NIND
maximum iteration	MAXGEN
variable number	NVAR
Generation gap	GGAP
variation range of $n_{C(solid)}$	$[0, X * a]$ ($0 < X < 1$)
variation range of n_{CO_2}	$[0, Y * a]$ ($0 < Y < 1$)

表 3 输出参数

Table 3 Output parameters

parameters	symbol
isobaric combustion temperature	T_p
combustion heat	Q_v
mole number of total combustion products	n_0
mole number of combustion products	$n_{C(solid)}, n_{CO_2}, n_{CO}, n_{CH_4}, n_{H_2O}, n_{H_2}, n_H, n_{HO}, n_{NH_3}, n_{N_2}, n_N, n_{NO}, n_{NO_2}, n_O$

3 实例计算与分析

3.1 CHON 类化合物燃烧产物平衡组分计算

为验证本方法的可行性及准确性,针对贫氧化合物(TNT, Tetryl, TNBA)与富氧化合物(RDX, PETN, Nitromethane),采用本方法计算结果与文献[11]中零近似法、平衡常数法计算结果进行对比,结果如表4、表5,其中,燃烧产物压力均为30 MPa,变量数

NVAR为10、种群大小NIND为200、变量字节数PRECI为20、最大迭代次数MAXGEN为3000、代沟GGAP为0.7、 T_0 设置为3000 K、 $n_{C(solid)}$ 变化范围设置为 $[0, 0.4a]$ 、 n_{CO_2} 变化范围设置为 $[0, 0.4a]$ 。

从表4可以看出,针对贫氧化合物,零近似法计算、平衡常数法、遗传算法三者计算结果非常接近,但仍然存在一定的差别。其中,相对于TNT, n_{H_2O} 与 n_{CH_4} 的平衡常数法计算结果分别为0.18, 0.25 mol,而零近似法计算结果均为零,这是因为零近似算法由于其自身假设与平衡常数法在微量元素计算方面存在较大的误差。遗传算法与平衡常数法计算结果基本吻合,组分含量误差在1%以内,温度误差在1.5%以内。

表5可以看出,针对富氧化合物,零近似法、平衡常数法、遗传算法三者计算结果存在一定差异。相对于PETN,零近似法与平衡常数法计算所得高含量组分 n_{CO} 之间误差最高为20%,温度误差为12%;平衡常数法与遗传算法计算所得高含量组分 n_{CO_2} 之间误差最大为7.7%,温度误差为4.9%。分析误差产生的原因在于:零近似法是基于最大放热原则而提出的

表 4 贫氧化合物计算结果

Table 4 Combustion products of negative-oxygen compounds obtained by caculation

molecular formula (1 kg)	$\Delta_r H_m^\theta$ /kJ · kg ⁻¹	calculation method	n_0 /mol	n_{H_2} /mol	n_{H_2O} /mol	n_{N_2} /mol	n_{CO} /mol	n_{CO_2} /mol	n_{CH_4} /mol	$n_{C(solid)}$ /mol	T_p /K
TNT(C _{30.84} H _{22.03} O _{26.43} N _{13.22})	-262 ^[11]	zero approximation ^[11]	44.03	11.01	0	6.60	26.42	0	0	4.40	2034
		equilibrium constant ^[11]	44.92	10.36	0.18	6.61	26.55	0.09	0.25	4.15	2042
		genetic algorithm	43.49	10.26	0.18	6.60	26.06	0.10	0.28	4.40	2068
Tetryl(C _{24.39} H _{17.42} O _{27.94} N _{17.42})	111 ^[11]	zero approximation ^[11]	41.79	6.41	2.30	8.71	23.19	1.18	0	0	2793
		equilibrium constant ^[11]	41.83	6.36	2.29	8.71	23.13	1.19	0	0	2784
		genetic algorithm	41.84	6.40	2.26	8.71	23.17	1.22	0.0002	0	2791
TNBA(C _{27.34} H _{11.67} O _{31.13} N _{11.67})	-1548 ^[11]	zero approximation ^[11]	38.89	4.08	1.75	5.83	25.09	2.14	0	0	2137
		equilibrium constant ^[11]	38.94	4.07	1.76	5.84	25.12	2.14	0	0	2131
		genetic algorithm	38.91	4.10	1.73	5.84	25.07	2.16	0.0015	0	2134

表 5 富氧化合物计算结果

Table 5 Combustion products of oxygen-enriched compounds obtained by caculation

molecular formula (1 kg)	$\Delta_r H_m^\theta$ /kJ · kg ⁻¹	calculation method	n_0 /mol	n_{H_2} /mol	n_{H_2O} /mol	n_{N_2} /mol	n_{CO} /mol	n_{CO_2} /mol	n_{HO} /mol	n_{NO} /mol	T_p /K
RDX(C _{13.51} H _{27.03} O _{27.03} N _{27.03})	322 ^[11]	zero approximation ^[11]	40.52	3.51	9.99	13.51	9.99	3.51	0	0	3511
		equilibrium constant ^[11]	40.91	3.54	9.62	13.46	10.12	3.37	0.36	0.1	3375
		genetic algorithm	40.80	3.51	9.83	13.45	9.97	3.54	0	0.18	3439
PETN(C _{15.82} H _{25.32} O _{37.97} N _{12.66})	-1681 ^[11]	zero approximation ^[11]	34.79	0.73	11.93	6.33	5.60	10.22	0	0	3897
		equilibrium constant ^[11]	36.06	1.04	11.04	6.17	6.95	8.87	0.96	0.32	3473
		genetic algorithm	35.54	0.92	11.61	6.00	6.21	9.61	0	0.65	3646
Nitromethane (C _{16.39} H _{49.18} O _{32.79} N _{16.39})	-1502 ^[11]	zero approximation ^[11]	49.15	10.81	13.76	8.19	13.76	2.62	0	0	2628
		equilibrium constant ^[11]	49.21	10.80	13.91	8.19	13.73	2.65	0	0	2615
		genetic algorithm	49.20	10.87	13.68	8.19	13.68	2.71	0	0.001	2634

一种计算方法,当混合物体系为正氧平衡时,这种假设存在一定的不合理性从而导致计算结果误差较大;而平衡常数法与遗传算法是基于化学动态平衡的两种不同形式而提出的计算方法,致使两者计算结果误差相对较少,另外,由于本方法只涉及到初始状态与最终状态,不受化学反应过程以及平衡参数的影响,因此计算结果更具可信性。

3.2 CHONAlCICs 类推进剂热力学参数计算

爆热是表征推进剂热力学性能的重要参数,其数值大小与推进剂生成焓、燃烧产物组分含量等参数密切相关。基于此,针对于含 CsNO₃、铝粉的磁流体发

电机专用推进剂配方^[12],本研究首先采用氧弹量热仪测试了不同 CsNO₃ 含量推进剂的爆热值,然后应用本计算方法对上述配方的爆热值进行计算,结果如表 6 所示。计算中各配方的生成焓由组分生成焓按含量加和得到,其它计算条件设置与 2.1 节相同。

表 6 可以看出,计算结果与实验结果呈现相同的变化趋势,随着 CsNO₃ 含量的增加,推进剂爆热逐渐降低;计算结果与实验结果误差较少,当 CsNO₃ 含量为 4% 时,两者误差最大值为 4.27%,表明本方法可用于含多种元素、多种固态物质的推进剂热力学参数以及燃烧产物组分含量的计算。

表 6 推进剂配方及其性能

Table 6 Performance of propellants contained different CsNO₃ content

hydroxyl-terminated polybutadiene/%	Di-n-octyl sebacate/%	toluene diisocyanate/%	content/%			density /g · cm ⁻³	heat/kj · kg ⁻¹		error /%
			Al	AP	CsNO ₃		test	calculation	
13.8	1	0.6	18	64.6	2	1.781	6207	6004.7	3.26
13.8	1	0.6	18	62.6	4	1.802	6167	5903.4	4.27
13.3	1	0.6	18	61.1	6	1.814	6080	5831.2	4.09
13.8	1	0.6	18	58.6	8	1.830	5830	5769.5	1.03
13.8	1	0.6	18	56.6	10	1.851	5818	5658.6	2.74

4 结 论

(1) 在最小自由能法的基础上,引入遗传算法建立了火炸药燃烧产物组分计算方法,并采用文献数据与含铯盐(CsNO₃)推进剂实验测试数据验证了计算结果的正确性。

(2) 相比于泰勒展开法、牛顿法等传统燃烧产物求解方法中严格的初始值设置要求,本研究建立的方法仅需确定少量组分的变化范围,计算过程难度降低。

(3) 本研究建立的燃烧产物组分计算方法可适用于含 C、H、O、N、Al、Cl、Cs 等元素的复杂化学反应平衡体系的热力学参数以及燃烧产物组分含量的计算,具有精度高、计算简便等特点。

参考文献:

- [1] 潘功配,杨硕. 烟火学[M]. 北京:北京理工大学出版社,1997: 42-52.
- [2] White W B, Johnson S M, Dantzig G B. Chemical equilibrium in complex mixtures[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1958, 28(5): 751-755.
- [3] 崔庆忠,焦清介. 基于最小自由能原理设计黑火药组成[J]. 含能材料, 2004, 12(4): 214-217.
CUI Qing-zhong, JIAO Qing-jie. Design of the ingredients of black powder based on the least free-energy law[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2004, 12(4):

214-217.

- [4] 刘晶如,吕勇,辛伟. 含能热塑性聚氨酯推进剂的能量计算与分析[J]. 固体火箭技术, 2012, 35(3): 376-381.
LIU Jing-ru, Lü Yong, XIN Wei. Calculation and analysis on energy characteristics of energetic thermoplastic polyurethane propellant[J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2012, 35(3): 376-381.
- [5] 庞维强,张晓宏,樊学忠. 含 Cs 盐的 HTPB/AP/Al 复合推进剂特性研究[J]. 固体火箭技术, 2011, 34(5): 619-622.
PANG Wei-qiang, ZHANG Xiao-hong, FAN Xue-zhong. Study on properties of HTPB-based composite propellant with cesium salt[J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2011, 34(5): 619-622.
- [6] Holland J H. Adaptation in natural and artificial systems [M]. Ann Arbor: University of Michigan Press, 1975.
- [7] Montastruc L, Azzaro P C, Pibouleau L, et al. Use of genetic algorithms and gradient based optimization techniques for calcium phosphate precipitation[J]. *Chemical Engineering and Processing*, 2004, 43(10): 1289-1298.
- [8] 安维中,胡仰栋,袁希钢. 多相多组分化学平衡和相平衡计算的遗传算法[J]. 化工学报, 2003, 54(5): 691-694.
AN Wei-zhong, HU Yang-dong, YUAN Xi-gang. Calculation of multiphase and multicomponent chemical equilibrium using genetic algorithm[J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 2003, 54(5): 691-694.
- [9] 范磊,潘功配,欧阳的华,等. 基于遗传算法结合支持向量机的 Mg/PTFE 贫氧推进剂配方优化[J]. 推进技术, 2012, 33(4): 620-624.
FAN Lei, PAN Gong-pei, OUYANG De-hua, et al. Application of genetic algorithm-support vector machine in formula optimization of Mg/PTFE fuel rich propellant [J]. *Journal of Propulsion*

- Technology, 2012, 33(4): 620-624.
- [10] Jia D M, Deng W S. Phase and chemical equilibrium calculations by using of a hybrid method of the genetic algorithm[J]. *Computers and Applied Chemistry*, 2011, 28(9): 1175-1178.
- [11] 周霖. 爆炸化学基础[M]. 北京:国防工业出版社, 2005: 33-37.
- [12] 周霖, 谢中元. 含 Cs 盐推进剂燃烧产物导电特性研究[J]. 含能材料, 2009. 17 (1): 99-102.
- ZHOU Lin, XIE Zhong-yuan. Research on electrical conductivity of combustion production of composite propellant containing Cs salt[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2009, 17 (1): 99-102.
- [13] 赵慕愚, 徐宝琨. 复杂化学平衡计算 [M]. 长春: 吉林大学出版社, 1990: 1-10.

Application of Genetic Algorithm in Calculation of Combustion Equilibrium Composition

XIE Zhong-yuan¹, ZHOU Lin², WANG Hao¹, LI Shou-dian³

(1. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China; 2. State Key Laboratory of Explosion Science and Echnology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China; 3. Norincogroup Planning and Research Institute, Beijing 100053, China)

Abstract: Genetic algorithm for the calculation of combustion equilibrium composition was proposed based on the principles of chemical equilibrium and the method of minimum free energy. By determining the independent variables and its range, the fitness function was confirmed. To validate the accuracy of the genetic algorithm, the calculation results were compared with the data from references experiment. Results show that the calculation values agree well with the reference data with error less than 1% and 1.5% for combustion equilibrium composition and combustion temperature of negative-oxygen compounds, and less than 7.7% and 5% for that of oxygen-enriched compounds. And the theoretic calculations are well coincident with those obtained by tests of hydroxyl-terminated polybutadiene solid Propellants. The maximum error between them is 4.27%, which demonstrates that the genetic algorithm can be used in compound design, performance prediction and combustion products confirming.

Key words: combustion; equilibrium composition; minimum free energy; genetic algorithm

CLC number: TJ012.1

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.04.006