DOI: 10.11883/bzycj-2016-0132
文章编号: 1001-1455(2018)01-0060-06

一种基于 Hugoniot 关系的爆轰产物等熵状态方程*

刘益儒,胡晓棉
(北京应用物理与计算数学研究所,北京 100088)

摘要: 对 136 组不同炸药的爆轰产物压力-粒子速度实验数据进行分段拟合,得到一个过 C-J 点的爆轰产物 Hugoniot 经验关系;对该经验关系进行 Riemann 积分,得到一个描述爆轰产物压力相对比容关系的爆轰产物等熵状态方程,该方程的参数仅为炸药的初始比容和 C-J 状态量,与传统经验等熵状态方程相比,不需要进行实验标定,因此可节约标定方程的实验成本和计算成本。为验证方程的合理性,采用该方程在压力相对比容平面上给出了 Comp-B、HMX、PETN、ANFO、TNT 以及 LX-14 炸药的爆轰产物等熵膨胀曲线,发现与采用 JWL 状态方程给出的相应炸药爆轰产物等熵膨胀曲线符合较好。

关键词: 等熵状态方程;Riemann 积分;爆轰产物;Hugoniot 关系
中图分类号: O381 **国标学科代码**: 1303510 **文献标志码**: A

炸药爆轰产物等熵状态方程描述的是热力学平衡条件下爆轰产物在 C-J 点后近似等熵膨胀过程中的热力学状态参量之间的关系,是炸药做功能力的主要表征。研究爆轰产物等熵状态方程对掌握炸药爆轰性能及发展爆炸力学具有重要意义。

目前爆轰产物等熵状态方程分为两类:一类是从理论模型出发的状态方程,如 BKW、JCZ 和 Williamsburg 等熵状态方程等[1-3],这类方程形式复杂且计算量较大,不适用于工程计算;另一类为经验或半经验状态方程,最常用的有常 γ 以及 JWL 形式的等熵状态方程[4-5],这类方程形式简单、比较适用于工程计算,但往往需要特定的标定实验确定方程经验参数,例如常 γ 状态方程的经验参数通过拟合平面爆轰波冲击靶板的初始自由表面速度实验数据确定,JWL 状态方程的经验参数通过拟合圆筒实验数据确定。这些标定实验往往成本高、周期长,且在获得实验数据后,还需考虑如何合理拟合这些实验数据,并且目前获得较好的标定结果还依赖于复杂的二维流体动力学数值计算,这又增加计算成本。

为此,有必要发展一种不需要实验标定,形式简单,又能满足工程计算的爆轰产物等熵状态方程。本文中基于压力-粒子速度平面上爆轰产物 Hugoniot 经验关系,利用 Riemann 积分,发展一种新的爆轰产物等熵状态方程形式,该方程的参数仅为炸药的初始比容和 C-J 状态量,这些参数通过简单且成本较低的炸药密度和爆轰参数测量实验即可直接获得,避免复杂的参数标定过程,和传统的经验或半经验等熵状态方程相比,可节约标定参数计算成本。

1 爆轰产物等熵状态方程建模

1.1 爆轰产物 Hugoniot 经验关系

Cooper[6] 对 136 组炸药爆轰产物压力粒子速度实验数据进行收集并建立数据库,这些实验数据涉及 14 种理想或非理想炸药,初始密度范围为 1.13~7.47 g/cm^3。采用的实验方法包括自由表面速度法和阻抗匹配法:两者均采用平面爆轰波冲击不同厚度的的惰性靶板,但前者测量靶板内自由表面粒子速度,将数据外推到零厚度靶板,再利用靶板冲击 Hugoniot 关系求得爆轰产物压力粒子速度数据;后者(如水箱法)测量距界面不同位置处的冲击波速度或压力,并外推到界面位置,再利用靶板冲击

* 收稿日期: 2016-05-13; 修回日期: 2016-07-08
第一作者: 刘益儒(1987—),女,博士,助理研究员; 通信作者: 胡晓棉,hu_xiaomian@iapcm.cn。

Hugoniot 关系求得 p-u 数据。Cooper[6] 采用相应炸药的 C-J 爆压 p_{CJ} 和粒子速度 u_{CJ} 对这些数据进行无量纲化后，发现，p/p_{CJ} 和 u/u_{CJ} 在高压和低压时分别较好地符合二次方函数和幂函数关系，因此拟合得到如下分段形式的爆轰产物爆轰产物压力粒子速度 Hugoniot 经验关系：

$$\frac{p}{p_{CJ}}=\begin{cases}F_1\left(\dfrac{u}{u_{CJ}}\right)=a+b\left(\dfrac{u}{u_{CJ}}\right)+c\left(\dfrac{u}{u_{CJ}}\right)^2 & p/p_{CJ}>d\\ F_2\left(\dfrac{u}{u_{CJ}}\right)=m\left(\dfrac{u}{u_{CJ}}\right)^n & p/p_{CJ}\leqslant d\end{cases} \tag{1}$$

式中：$d=0.08$，表征函数分段位置；$a=2.412$，$b=-1.731\,5$，$c=0.319\,5$，$m=235$，$n=-8.71$，为 5 个拟合系数。需指出的是，在拟合实验数据时，需考虑如下 2 个约束条件：(1)根据产物等熵线过 C-J 点的条件，应有当 $p=p_{CJ}$ 时，$u=u_{CJ}$，从而根据式(1)，有 $a+b+c=1$；(2)根据炸药爆轰产物 Rayliegh 线与等熵线在 C-J 点处相切的条件，应有 $\left.\dfrac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}u}\right|_{CJ}=\dfrac{p_{CJ}}{u_{CJ}}$，从而根据式(1)应有 $b+2c=1$。显然，Cooper[6] 在拟合数据过程中只考虑了第 1 个约束条件，为此 Lanterman[7] 同时考虑 2 个约束条件，并适当调整 d 值，即令 $d=0.1$，对实验数据进行了重新拟合，得到新的拟合系数，即 $a=2.258\,5$，$b=-1.517$，$c=0.258\,5$，$m=206.5$，$n=-8.62$。

值得注意的是，表征函数分段位置 d 值的选取与人为判断有关，并没有明确物理意义，除了约束条件，d 值的选取亦可直接影响拟合曲线的拟合优度。文献[6]中的拟合曲线的拟合优度值为 $R^2|_{F_1}=0.957$ 和 $R^2|_{F_2}=0.806$，而文献[7]中的拟合曲线的拟合优度值为 $R^2|_{F_1}=0.947$ 和 $R^2|_{F_2}=0.789$。可见后者的拟合优度不如前者。因此，对函数分段位置做适当调整，即令 $d=0.06$，对实验数据进行重新分段拟合，得到新的拟合系数为 $a=2.264$，$b=-1.528$，$c=0.264$，$m=112.5$，$n=-8.186$，从而拟合优度值达到 $R^2|_{F_1}=0.966\,9$ 和 $R^2|_{F_2}=0.901\,5$。图 1 为线性坐标和对数坐标下无量纲参数间关系曲线。

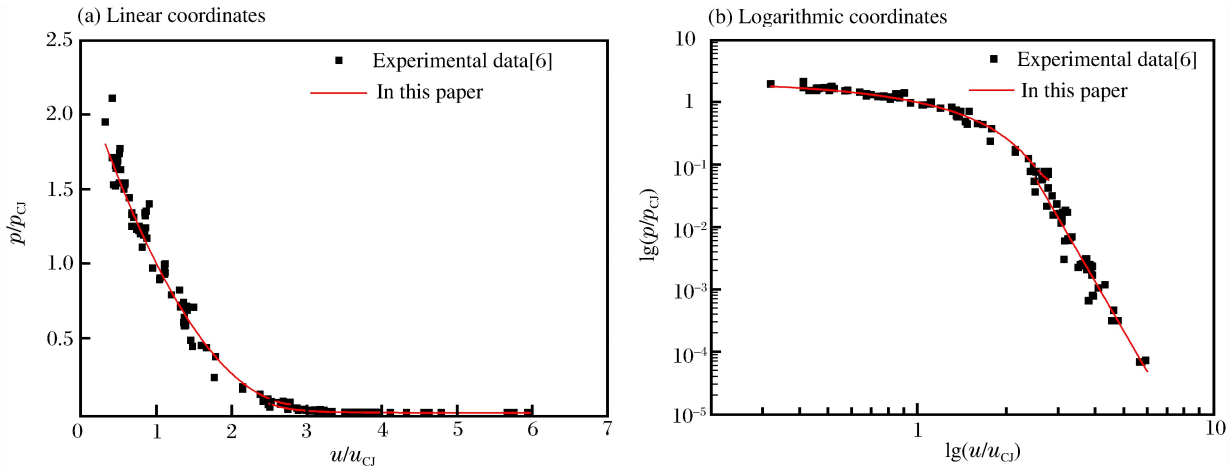


图 1　线性坐标和对数坐标下无量纲参数之间关系

Fig. 1　Relationship between dimensionless parameters in linear coordinates and logarithmic coordinates

1.2　爆轰产物等熵状态方程

利用式(1)推出爆轰产物等熵状态方程的过程如下：

$$f_i(p)=-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}u}\qquad i=1,2 \tag{2}$$

式中：$i=1,2$ 分别对应 $\dfrac{p}{p_{CJ}}>d$ 和 $\dfrac{p}{p_{CJ}}\leqslant d$ 的情况。根据式(1)有：

$$\begin{aligned}f_1(p)&=\left(\frac{p_{CJ}}{u_{CJ}}\right)\sqrt{4c\left(\frac{p}{p_{CJ}}\right)+b^2-4ac} && \frac{p}{p_{CJ}}>d\\ f_2(p)&=-mn\left(\frac{p_{CJ}}{u_{CJ}}\right)\left(\frac{p}{mp_{CJ}}\right)^{\left(1-\frac{1}{n}\right)} && \frac{p}{p_{CJ}}\leqslant d\end{aligned} \tag{3}$$

根据等熵线上的关系：

$$-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}u}=\rho c=\rho\sqrt{\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}u}\right)_{\mathrm{S}}} \tag{4}$$

式中：下标 S 代表等熵状态量，c 为等熵声速，ρ 为产物密度。可以推出如下 Riemann 积分：

$$\int_{p_{\mathrm{CJ}}}^{p_{\mathrm{S}}} f_i^{-2}(p)\mathrm{d}p=\int_{\rho_{\mathrm{CJ}}}^{\rho}\rho^{-2}\mathrm{d}\rho=v_{\mathrm{CJ}}-v \qquad i=1,2 \tag{5}$$

式中：$v=1/\rho$ 为产物比容。将式(3)代入式(5)，并考虑约束条件 $a+b+c=1$ 和 $b+2c=1$，整理得：

$$p_{\mathrm{S}}(V)=\begin{cases}\dfrac{p_{\mathrm{CJ}}\left\{\exp\left[\dfrac{4c(v_{\mathrm{CJ}}-v_0V)p_{\mathrm{CJ}}}{u_{\mathrm{CJ}}^2}\right]+4c-1\right\}}{4c} & p/p_{\mathrm{CJ}}>d\\ p_{\mathrm{CJ}}\left[\dfrac{1+n(2-n)m^{2/n}(v_{\mathrm{CJ}}-v_0V)p_{\mathrm{CJ}}}{u_{\mathrm{CJ}}^2}\right]^{\frac{n}{2-n}} & p/p_{\mathrm{CJ}}\leqslant d\end{cases} \tag{6}$$

式(6)即为提出的爆轰产物等熵状态方程的具体形式。式中：v_0 是炸药初始比容，$V=v/v_0$ 是相对比容，c、m 和 n 均为 1.1 节中给出的爆轰产物在 p-u 平面上的 Hugoniot 经验关系拟合系数，是与具体炸药性能无关的常数，因此不需要针对特定炸药进行实验标定。另外可以看到，方程参数仅为炸药的初始比容 v_0 和爆轰产物 C-J 点的状态量即 p_{CJ}、u_{CJ} 和 v_{CJ}，其中 v_0 和 p_{CJ} 可分别通过简单的密度测量实验和爆压测量实验获得，u_{CJ} 和 v_{CJ} 则可以利用下式进行估算：

$$u_{\mathrm{CJ}}=\frac{v_0p_{\mathrm{CJ}}}{D} \qquad v_{\mathrm{CJ}}=\frac{v_0(D-u_{\mathrm{CJ}})}{D} \tag{7}$$

式中：D 为爆速，通过简单的爆速测量实验即可获得。这些实验与传统的爆轰产物状态方程标定实验相比，成本显著降低；另外，由于不需要利用实验数据拟合经验参数，从而节约了计算成本。

将本文中得到的拟合系数，即 $c=0.264$，$m=112.5$，$n=-8.186$ 代入式(6)，进一步化简得：

$$p_{\mathrm{S}}(V)=\begin{cases}\dfrac{p_{\mathrm{CJ}}\left\{\exp\left[\dfrac{1.056(v_{\mathrm{CJ}}-v_0V)p_{\mathrm{CJ}}}{u_{\mathrm{CJ}}^2}\right]+0.056\right\}}{1.056} & p/p_{\mathrm{CJ}}>0.06\\ p_{\mathrm{CJ}}\left[\dfrac{1-26.299(v_{\mathrm{CJ}}-v_0V)p_{\mathrm{CJ}}}{u_{\mathrm{CJ}}^2}\right]^{-0.8036} & p/p_{\mathrm{CJ}}\leqslant 0.06\end{cases} \tag{8}$$

为了在模型验证中进行对比分析，这里将 Lanterman[7] 的拟合系数，即 $c=0.2585$，$m=206.5$，$n=-8.62$，代入式(6)，得到等熵状态方程：

$$p_{\mathrm{S}}(V)=\begin{cases}\dfrac{p_{\mathrm{CJ}}\left\{\exp\left[\dfrac{1.034(v_{\mathrm{CJ}}-v_0V)p_{\mathrm{CJ}}}{u_{\mathrm{CJ}}^2}\right]+0.034\right\}}{1.034} & p/p_{\mathrm{CJ}}>0.1\\ p_{\mathrm{CJ}}\left[\dfrac{1-26.578(v_{\mathrm{CJ}}-v_0V)p_{\mathrm{CJ}}}{u_{\mathrm{CJ}}^2}\right]^{-0.8117} & p/p_{\mathrm{CJ}}\leqslant 0.1\end{cases} \tag{9}$$

2 模型验证

为验证模型的合理性，分别采用式(8)、(9)给出的等熵状态方程以及 JWL 等熵状态方程在 p-V 平面上绘制了 Comp-B、HMX、PETN、ANFO、TNT 以及 LX-14 这 6 种爆轰性能有明显差异的炸药爆轰产物等熵膨胀曲线，如图 2 所示。这里采用 JWL 等熵状态方程进行对比，是因为该方程能够比较精确的描述爆轰产物的等熵膨胀过程。炸药组分质量比、初始密度、C-J 爆速和爆压等参数可参阅文献[8]。

描述 p-V 关系的 JWL 等熵状态方程的形式[5]为：

$$p_{\mathrm{S}}(V)=A\exp(-R_1V)+B\exp(-R_2V)+CV^{-(\omega+1)} \tag{10}$$

式中：A、B、C、R_1、R_2 和 ω 是经验参数，需要通过拟合圆筒实验数据确定；这 6 种炸药的 JWL 状态方程经验参数值列于表 1[8]。

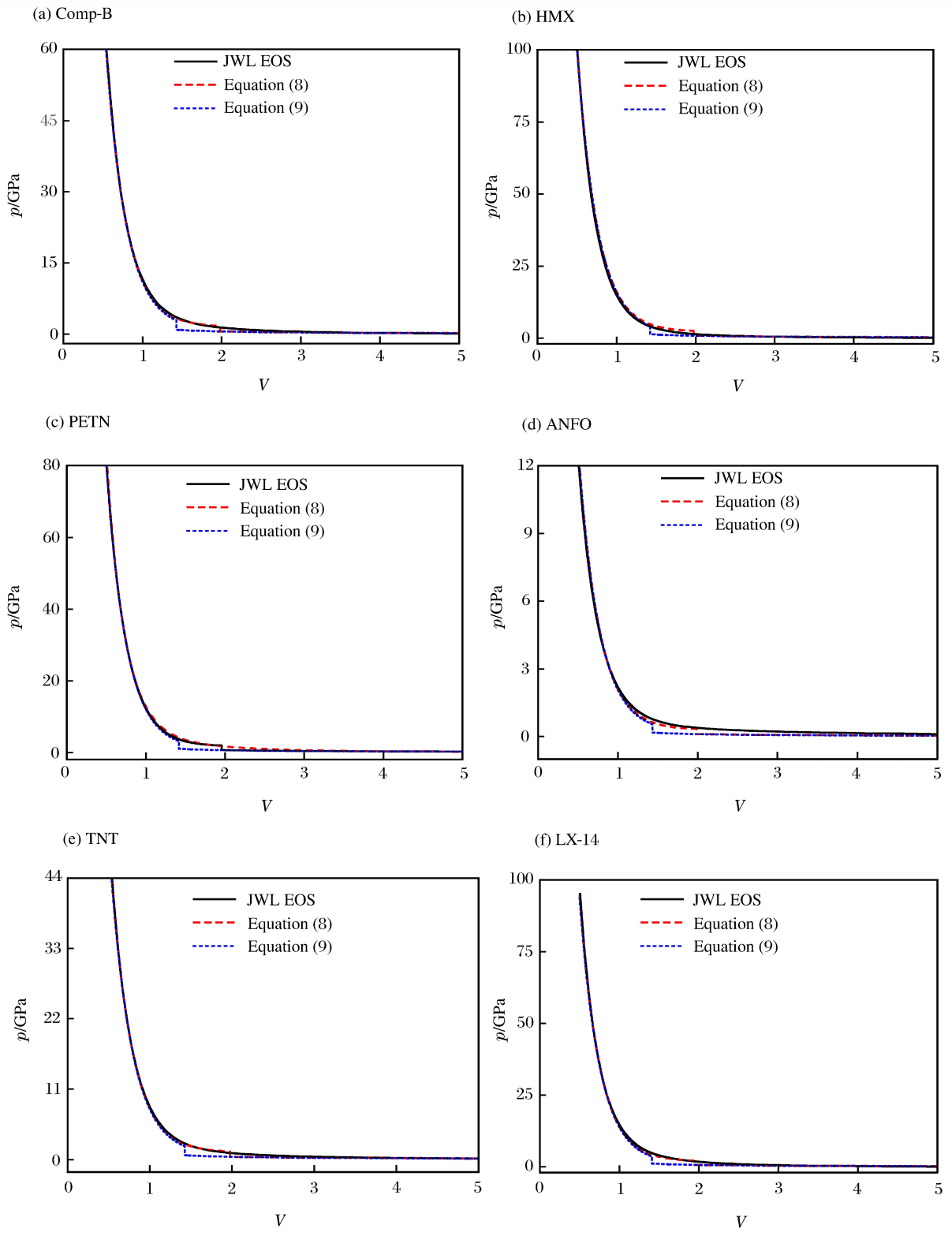


图 2　爆轰产物等熵状态方程对比

Fig. 2　Comparison of isentropic equations of state of detonation products

从图 2 中可以看到，不同于 JWL 状态方程描述的连续光滑膨胀曲线，式(8)～(9)给出的状态方程所描述的膨胀曲线分别在 $p/p_{CJ}=0.06$ 和 $p/p_{CJ}=0.1$(或 $V\approx2$ 和 $V\approx1.5$)位置处出现分段，这很有可能是在拟合分段函数形式的产物 Hugoniot 经验关系时，未考虑分段位置处的连续性造成的。另外，与

式(9)给出状态方程曲线相比,式(8)给出状态方程曲线的连续性以及与 JWL 等熵状态方程曲线的符合程度均更好,这说明在拟合 Hugoniot 关系曲线时,将分段位置从 $d=0.1$ 调整为 $d=0.06$,不仅提高了 Hugoniot 关系曲线的拟合优度,还使在此基础上推出的等熵状态方程更符合实际情况,因此应优先选用式(8)给出的等熵状态方程。

表 1 炸药爆轰产物等熵 JWL 状态方程参数[8]

Table 1 JWL parameter for explosives[8]

炸药	A/GPa	B/GPa	C/GPa	R_1	R_2	ω
Comp-B	524.229	7.678 3	1.081 8	4.20	1.10	0.34
HMX	778.280	7.071 4	0.643 0	4.20	1.00	0.30
PETN	796.530	19.241 0	0.665 1	4.80	1.20	0.25
ANFO	75.180	−0.817 5	1.170 0	4.10	1.25	0.44
TNT	371.213	3.230 6	1.045 3	4.15	0.95	0.30
LX-14	826.100	17.240 0	0.129 6	4.55	1.32	0.38

现比较分析式(8)给出的状态方程与 JWL 状态方程。可以看到,从总体上看,这 2 个状态方程描述的等熵膨胀曲线符合较好,特别是在高压阶段($p/p_{CJ}>0.06$),两者基本重合。在低压阶段($p/p_{CJ}\leqslant 0.06$)特别是接近函数分段位置处存在一定差异,可能的原因是:(1)在拟合确定低压阶段爆轰产物 Hugoniot 经验关系时,采用的实验数据样本不足;(2)从在产物 Hugoniot 经验关系基础上推出的新状态方程形式上看,高压段时,方程为指数函数形式(见式(8)),这与 JWL 状态方程高压阶段起主要作用的方程形式类似(见式(10)等号右边第 1 项),而在低压段时,方程为幂函数形式(见式(8)),而 JWL 状态方程在这个压力范围内(对应于 JWL 方程的中压段)起主要作用的方程形式为指数函数和幂函数之和的形式(见式(10)等号右边第 2 和第 3 项),依此可以判断,采用的低压段 Hugoniot 经验关系的函数形式可能不是很合理,需要进一步改进。

3 结 论

本文中基于拟合得到的爆轰产物 Hugoniot 经验关系,提出一种新的爆轰产物等熵状态方程,该方程不包含需要实验标定的经验参数,方程参数仅为炸药的初始比容 v_0 和爆轰产物 C-J 点状态量,这些参数的测量实验与传统的经验爆轰产物等熵状态方程参数的标定实验相比,成本显著降低;另外,由于不需要拟合方程经验参数,极大地节约了计算成本。

采用该状态方程给出了 Comp-B、HMX、PETN、ANFO、TNT 以及 LX-14 炸药的爆轰产物等熵膨胀曲线,与 JWL 状态方程描述的等熵膨胀曲线进行比较,发现两类曲线符合较好,尤其是在高压阶段,两者高度重合。

参考文献:

[1] SUCESKA M, ANG H G, CHAN S, et al. Study of the effect of covolumes in BKW equation of state on detonation properties of CHNO explosives[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2013,38(1):103-112.

[2] HOBBS M L, BRUNDAGE A, YARRINGTON C. JCZS2i: An improved JCZ database for EOS calculations at high temperatures and pressures[R]. SAND2014-19288PE 540872. Sandia National Laboratories, Albuquerque, New mexico, United States, 2014.

[3] BRAITHWAITE M, SHARPE G J. Reduced, chemistry implicit, equations of state for explosion and detonation products[C]// Proceedings of 15th International Detonation Symposium. San Francisco, California, United States, 2014:869-877.

[4] 孙承纬,赵锋,文尚刚,等.一般物态方程形式下爆轰产物的一维等熵流动[J].爆炸与冲击,2003,23(6):481-487.
SUN Chengwei, ZHAO Feng, WEN Shanggang, et al. One dimensional isentropic flow of detonation products

with general equation of state[J]. Explosion and Shock Waves, 2003,23(6):481-487.

[5] WANG H, GAO J, LUO Y, et al. Metal accelerating ability and JWL EOS of DNTF/HMX explosive[J]. Ordnance Industry Automation, 2014(7):64-66.

[6] COOPER P W. Shock behavior of explosives about the C-J (Chapman-Juget) point[C]// Proceedings of 9th International Symposium on Detonation. Portland, Oregon, United States, 1989:379-387.

[7] LANTERMAN D D. An improved empirical fit of the detonation product isentrope near the CJ point[C]// Proceedings of 15th International Detonation Symposium. San Francisco, California, United States, 2014:466-470.

[8] HORNBERG H. Determination of fume state parameters from expansion measurements of metal tubes[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 1986,11(1):23-31.

An isentropic equation of state of detonation product based on a Hugoniot relationship of detonation product

LIU Yiru, HU Xiaomian

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing* 100088, *China*)

Abstract: First, an empirical fit of the detonation product Hugoniot relationship through the C-J (Chapman Jouget) point was obtained by fitting 136 sets of the pressure-particle velocity experimental data of different explosives. Then, by Riemann integrating this relationship, an isentropic EOS (equation of state) of the detonation product, which describes the relationship between the pressure and the relative volume of the detonation product, was proposed. Unlike the traditional and empirical isentropic EOS, the new EOS requires no calibration by specific experiment because the parameters in it are just the initial specific volume and the C-J status variables of the explosive, thereby saving the cost of the calibration experiment and computing. For verification, the isentropic expansion curves of the detonation product of the Comp-B, HMX, PETN, ANFO, TNT and LX-14 explosives were plotted in the p-V space by adopting this new isentropic EOS and found to be in good agreement with the corresponding curves plotted by adopting the JWL isentropic EOS.

Keywords: isentropic EOS; Riemann integral; detonation product; Hugoniot relationship

（责任编辑　王易难）