文章编号：1000-5773(2004)04-0345-08

爆轰模型熵问题的探讨*

胡绍鸣，李辰芳

（西安近代化学研究所，陕西西安 710065）

摘要：爆轰模型过程终点熵最低的问题长时间困扰着爆轰科学。牛顿力学对于时间 $t \to -t$ 反演不变，忽略热力学而只用力学方法研究不可逆爆轰过程可能产生不合理的结果。CJ 和 ZND 模型中的有序假设，即爆轰产物粒子朝着同一方向作有序运动的假设，决定了终点熵最低和不处于热力学平衡态。把 CJ 和 ZND 模型的某些结论绝对化，阻碍建立熵最高的爆轰模型。

关键词：爆轰；热力学；流体力学；熵；平衡；CJ 模型；ZND 模型

中图分类号：O381 **文献标识码**：A

1 引言：热力学平衡态——爆轰科学百年的的企望与无奈

现代爆轰科学的基本理论是 CJ 和 ZND 模型，CJ 模型将爆轰波和爆燃波简化成含化学反应的强间断面，ZND 模型将反应区结构和流体力学理论结合，从而奠定了爆轰科学的基础。通过状态方程的实验修正，用 CJ 和 ZND 模型计算的结果和实验吻合极好。百年来在爆轰科学领域，CJ 和 ZND 模型理论上起着指导性作用，在实践中也取得了巨大成功，证明它们在一定程度上反映了爆轰过程本质的客观真理。

然而，CJ 和 ZND 模型有一个与生俱来的缺陷，它们所描述的过程终点熵最低，反映不了趋向热力学平衡态这一客观规律。该问题困扰了爆轰界整整一个世纪。尽管瑕不掩瑜，CJ 和 ZND 模型还是显得美中不足。

平衡态在自然界具有特殊意义。热力学的一个重要基本现象是趋向平衡态[1]。任何体系，若是不受外界影响，总是单向地趋向平衡状态[2]。趋向平衡态对于物理学是如此的重要，第二定律应该是科学所认识的自然活动的最通用的原则[3]。有秩序的运动会自动地变为无秩序的运动，这是热力学第二定律的本质[2]。

根据热力学定义，熵最高和热力学平衡状态是相同的概念[2]。热力学理论具有高度的可靠性与普遍性[4]，爆轰这种典型的热力学过程必然趋向热力学平衡态，描述爆轰现象的模型应该反映这个事实。

1899 年，Chapman 提出 CJ 模型，他根据热力学推测爆轰“最小速度的条件等效于最高熵的条件”，“在这种条件下，爆轰气体的熵最高”[5]。然而 1917 年 Jouguet 指出，在 Hugoniot 线上 CJ 点的总熵实际上是极小值，尽管在 Rayleigh 线上它达到相对最高[6]。

过程终点熵最低与热力学基本理论相悖，成熟科学难以接受，爆轰界希望能找到一种解释，出现过多种未得到公认的说法。

1935 年，Scorah 证明熵沿着 Hugoniot 线在 CJ 点最低，他用“能量退化原理”(Principle of Degradation of Energy)来说明 CJ 点熵最低的合理性[7]。

1955 年，Duffey 把爆轰过程熵的性质与最小熵产生原理联系起来[8]，用不可逆过程热力学证明 CJ

* **收稿日期**：2003-09-01；**修回日期**：2003-12-12

作者简介：胡绍鸣(1945—)，男，硕士，副研究员. E-mail：hu_shaoming@yahoo.com.cn

点熵最低是合理的。但 Penner 指出该原理是在特定的约束条件下，从不可逆过程热力学的普遍原理导出来的，爆轰不符合这些条件[9]。

1960 年 Zelidovich 等认为不能以 CJ 点熵最低来解释 CJ 条件，Ostward 的熵最小增加原理(Entropy Least Increasing Principle)在此处不能用[10]。

1998 年，Brown 从 CJ 点在 Rayleigh 线上熵最高证出了 CJ 条件[11,12]。这样一来，既然可以从热力学理论推导出 CJ 条件，熵问题当然就不存在了。然而，早在 1958 年 Taylor 就指出了这种错误[13]。按照 CJ 和 ZND 模型，Rayleigh 线上 CJ 点熵最高，反过来当然可以从熵最高导出 CJ 条件。同样思路从 Hugoniot 线上熵最低也可导出 CJ 条件，也没有意义。

Courant 等在 1948 年说，在爆轰科学的发展史上人们期望能有一个熵最高的爆轰模型，这种期望甚至使得某些作者误认为 CJ 点熵最高[14]。又过去了半个世纪，现在人们仍然尴尬而无奈地面对着熵最低的 CJ 和 ZND 模型。熵最低是始终萦绕着爆轰科学的一块挥之不去的心病。现今科学高度发展，从宇宙之大到基本粒子之小都有精确的描述，爆轰科学为何就建立不起一个熵最高的模型？

我们认为，CJ 和 ZND 模型熵最低的问题是由研究方法造成的。爆轰是一种极为典型的不可逆过程，只依靠时间可逆的牛顿力学来研究可能产生热力学不合理的结果。建立模型时所作的有序假设，即所有爆轰产物粒子朝着同一方向作有序运动的假设决定了模型熵最低。把 CJ 和 ZND 模型绝对化，甚至把 CJ 和 ZND 模型当作就是客观爆轰过程本身，阻碍建立以热力学平衡态为终点的爆轰模型。

2 CJ 和 ZND 模型的终点状态

图 1 是 CJ 和 ZND 模型所描述的爆轰波构型[15]，原始爆炸物受冲击波阵面压缩，系统的温度和压力瞬间沿 Rayleigh 线跃升至 N 状态，再沿 Rayleigh 线至反应区终态 CJ 点，随后在稀疏波区进行等熵膨胀，最后达到爆轰过程终态 F。除没有反应区外，CJ 模型与 ZND 模型相同。

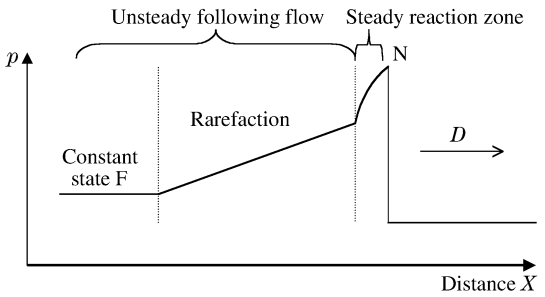


图 1 ZND 模型爆轰波构型

Fig. 1 Configuration of detonation wave in ZND model

既然存在熵问题，对爆轰产物状态就有不同说法。对反应区的状态无异议，都认为是局域热力学平衡[15~17]。对 CJ 面及其后的反应产物的状态看法则不一致。文献[16,18~20]认为在 CJ 面完成了化学反应，转变为热力学平衡的爆轰产物，ZND 模型的反应区之后是完全反应的热力学平衡的产物流动区[16]。按照傅鹰先生的定义，热力学平衡是孤立体系最后所达到的静止状态，熵最大[2]。一个热力学系统必须同时达到热平衡、力学平衡、相平衡和化学平衡，才能算是处于热力学平衡状态[21]。图 1 所示的爆轰波构型在 CJ 面是稀疏波不稳定流动，各热力学量都处于不平衡状态，存在温度、浓度、速度和密度分布[15]。说 CJ 面后是热力学平衡态显然欠妥。

文献[15,22]认为波阵面后的反应产物是热化学平衡(Thermochemical Equilibrium)。Fickett 说，作这种假设就可以用热力学状态方程来计算间断面上各热力学量[15]。按照 Prigogine 的定义，局域热力学平衡指在非平衡系统中的一个小局域范围内，可以不考虑整个系统存在梯度分布，仍然用平衡状态方程来计算各热力学变量[23]。所以 Fickett 实际认为间断面及其后的反应产物都是局域热力学平衡，而不是热力学平衡。

有趣的是，Tarver 在不同时期持不同看法。他提出非平衡 ZND 模型(NEZND)，认为在反应区存在压缩－激励－快速链式反应－弛豫膨胀等不可逆阶段，在 CJ 点实现了化学平衡而达到了热力学平衡态[24]。后来改变了观点，认为达到的是热和化学平衡态(Thermal and Chemical Equilibrium)[25]。Tarver 的这个改动不很引人注意，在某些介绍 NEZND 的著述中，Tarver 的前后两种说法同时存在。

CJ 点状态处于热力学平衡明显不对，而处于局域热力学平衡也会产生问题。首先，局域热力学平衡状态是非平衡状态，那自然要问爆轰过程的平衡态在何处，如何达到平衡态。这恰恰是 CJ 和 ZND 模型回答不了且不能回避，而本文又想深究的问题。趋向平衡态毕竟是公认的普遍真理，一个处于非平衡

态的孤立系统若不趋向平衡态不可思议。其次，既然认为是局域热力学平衡状态，就必然处于不可逆的变化之中，熵就该增加。而经典爆轰理论假设稀疏波膨胀是等熵过程，这是矛盾的。但假设为非等熵膨胀过程则会违反热力学原理，因为 CJ 点虽处于非平衡态，却已具有平衡态的熵的全部特征

$$S = S_{\max}$$
$$\mathrm{d}S/\mathrm{d}t = 0$$
$$\mathrm{d}^2S/\mathrm{d}t^2 \leqslant 0$$

按照热力学，发生于一个系统内的不可逆过程总是使熵产生降低[26]。既然熵产生在 CJ 点已经降到零，它就不可能再增加。受此约束，稀疏波膨胀只能假设为等熵过程，否则就要违背热力学原理。所以从表面上看，假设稀疏波为等熵膨胀过程是为了简化，实则是出于无奈。

CJ 和 ZND 模型处于这样的状况，说不清波阵面后爆轰产物处于什么状态，说它处于任何状态都难以自圆其说，都和热力学基本概念相矛盾。陷入如此困境，只能怀疑 CJ 和 ZND 模型本身存在缺陷。

3　描述可逆过程的流体力学

平衡态处于一种很特殊的地位，自然界特别喜欢平衡态。一个孤立体系总是优先地选择平衡态，并且一旦到达平衡态后便不愿离开[27]。爱因斯坦说:“熵理论对于整个自然科学来说是第一法则”[28]。用 CJ 和 ZND 模型计算数据无论拟合得多么精确，不符合这个第一法则总是一块心病。人们不禁要问，牛顿力学是自然界基本定律，严格用流体力学方法得出的结果为何会与热力学相悖呢?

Prigogine 指出[26]，如果改变方程中时间变量的符号时方程不变，则所描述的过程是可逆的，否则就是不可逆的。如波动方程

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

作时间变换 $t \to -t$ 后方程不变，它描述的是可逆过程。而对于热传导方程

$$\frac{1}{\alpha}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

因为热不可能自动由低温传向高温，作时间变换 $t \to -t$ 后方程无意义，它描述的就是不可逆过程。

根据上述原则，牛顿力学描述的过程都是时间可逆的[29]。只用力学方法无法反映过程的不可逆性，鸡蛋孵成小鸡和小鸡变回鸡蛋全符合守恒定律，苹果落地和重新跳回树梢都不违背力学法则。

在建立苹果运动模型之前，常识就会告诉我们苹果跳不回去。热力学则从理论上证明，苹果和空气摩擦再与地面撞击都要产生热，是一个不可逆过程。所以我们首先根据热力学判断苹果肯定从树梢掉到地上，然后再根据动力学去写运动方程。如果一个人从未见过苹果落地且又不懂热力学，他很有可能会写出力学方程来描述苹果跳回树梢。虽然力学方程正确，对过程的描述却是错误的。

简单的苹果落地尚且如此，爆轰是放热极强极快的复杂不可逆过程，我们至今对其细节知之甚少，和没见过苹果落地的人差不多，忽略热力学而只用可逆的流体力学方法来研究，就有可能出现偏差。Prigogine说，动力学和热力学是自然界两种互为补充的解释[30]。自然界是一个统一和谐的整体，单靠动力学判断不了苹果应该何去何从，单靠热力学也无法描述苹果落地的运动规律，只有两者的结合才能准确地描述自然现象。(牛顿力学、相对论力学和量子力学都是时间可逆的，P. Coveney 在科普读物《时间之箭》中作了形象通俗的描述。该书有中译本，湖南教育出版社 2002 年出版。)

也许有人说，虽然 CJ 和 ZND 模型是用流体力学方法导出，但无论如何，沿 Rayleigh 线的膨胀反应过程熵增加，并于 CJ 点达到相对极大，满足 $\mathrm{d}S \geqslant 0$ 不就说明该模型是热力学正确的吗? 这种说法对热力学缺乏了解，混淆了可能与存在的关系，有点自己骗自己的味道。$\mathrm{d}S \geqslant 0$ 只说明没有违背热力学第二定律，不足以证明它一定是客观存在。可看下面一个例子。

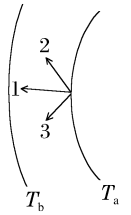


图 2　热传递方向

Fig. 2　Direction of heat transfer

热力学第二定律按照克劳修斯的说法是，热不可能从低温自行流向高温。T_a 和 T_b 是等温面，当 $T_a > T_b$ 时，如图 2，热量沿 1、2、3 三个途径传递都是由高

温到低温，都满足 $dS\geqslant 0$，都不违反第二定律。

然而傅利叶定律告诉我们，热循着温度梯度的方向传递

$$Q=-\lambda\nabla T$$

这是温度下降最快的方向。只有 1 是实际途径。

途径 2 和途径 3 都满足 $dS\geqslant 0$，仅说明它们是可能的，但却不是实际存在的自发过程。可能的状态不一定都存在。从统计力学的观点看，空气分子全跑到房间另外半边的可能性也存在，但我们用不着担心会被憋死，因为这种可能性实在太小，只有 $10^{-300\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000}$。

那么，在诸多可能实现的热力学途径中，哪一条是实际存在的呢？不可逆过程热力学有明确解答。不可逆过程热力学认为存在热力学势，Prigogine 认为内能 E、熵 S、热焓 H 、赫姆霍兹自由能 F、吉布斯自由能 G 等都是热力学势[23]。其梯度便是相应的“广义力”(Generalized Force)，按梯度定义它是变化率（方向导数）最大的方向。

熵产生可以写成“广义力”或亲合势与相应的速率的乘积之和[26]

$$\frac{dS}{dt}=\sum_k J_k X_i>0$$

式中 X_i 是“力”，而过程的方向是由所有“力”的共同作用决定，不可逆过程热力学明确给出了过程的方向和终点。

在上述的热力学势中，熵与“力”X_i 的数学关系为

$$X=\partial(\Delta S)/\partial a_i$$

式中：ΔS 是熵偏离其平衡值的数值，$a_i=A_i-A_i^0$ 是状态参数偏离平衡值的数值。

所以，自发过程沿着熵增加最快且趋向平衡态的途径进行。该方向是热力学“力”，即热力学“势”的梯度的方向，沿着它热力学“势”下降最快。很明显，CJ 和 ZND 模型描述的爆轰过程不符合这一规律。

众人皆知 Hugoniot 线是所有可能终态的集合，没人说它是过程线。问题是在所有可能的状态中，为何 CJ 和 ZND 模型偏偏要选择可能性最小的一个作为自己的终点。在诸多可能的途径中沿着熵增加最慢的一条，到达所有可能状态中熵最低的一个点，这和热沿着小可能性的途径 2 和途径 3(见图 2)传递完全一样，得出这种结果只能是研究方法的失误。

4 有序假设注定了熵最低

在用流体力学方法研究爆轰过程时，如果我们知道“苹果一定落地”，作出符合热力学的相应假定，用动力学也可得到正确的结果。然而，经典爆轰理论假定所有的粒子都作有序运动，不符合波阵面处存在强烈扰动的客观事实，最终导致熵最低的错误。

爆轰过程的数学模型由以下 5 个方程组成[15~17]

$$\rho_0 D=\rho(D-u) \tag{1}$$

$$p_0+\rho_0 D^2=p+\rho(D-u)^2 \tag{2}$$

$$E(p_0,V_0,\lambda=0)+p_0V_0+1/2D^2=E(p,V,\lambda=1)+pV+1/2(D-u)^2 \tag{3}$$

$$c=D-u \tag{4}$$

$$f(p,V,T)=0 \tag{5}$$

CJ 和 ZND 模型的重要结论都是从这 5 个方程推出来的。其中(1)式、(2)式、(3)式是质量，动量和能量守恒方程式，这三个守恒定律是自然界基本定律。(5)式是状态方程，作为物性数据是客观存在。(4)式 CJ 条件有争议，但不会造成方向性的热力学问题。

在列出这几个方程时作了下述假设：一维流动，阵面是不连续的阶跃，所有热力学变量处于(局域)热力学平衡[15]。不知是有意还是无心，Fickett 把它们称为明确的假设(Explicit Assumption)[15]。

仔细审视方程(1)式～(4)式就可发现，这几个方程中都有$(D-u)$项，所以实际还包含一个隐喻的假设(Implicit Assumption)：阵面速度 D 和粒子速度 u 方向一致，亦即所有的粒子都朝同一个方向运动，数学模型中明确体现出这一点。朝一个方向运动是一种有序行为，我们称之为有序假设。它可以形

象地用图 3 表示。

为显示粒子方向的一致和速度的差异,图中粒子间隔不表示粒子间真正的距离,按照方程(1)速度越大粒子密度越大。

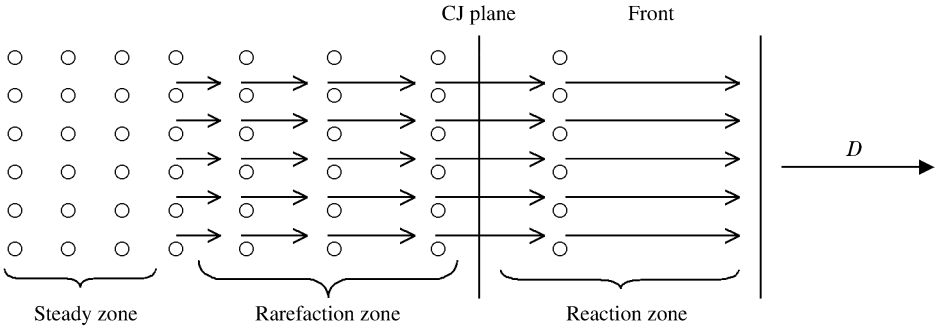


图 3　CJ 和 ZND 模型的有序假设

Fig. 3　Order assumption in CJ and ZND model

适当的假设可使问题简化以突出主要矛盾,但假设不能掩盖事物的本质。冲击波中没有化学能转变的热能扰动,没有微爆炸,流体动力学起主要作用,有序假设基本是合理的。爆轰波阵面后的紊流现象已为大量实验所证实,化学能量的急剧释放是爆轰波与冲击波的根本区别。微爆炸产生强烈扰动,无序运动的粒子不断地互相碰撞掺混,而有序假设实际上规定只要粒子有速度,它就必定朝着同一个方向互不干扰,没有互相碰撞扩散掺混,明显偏离实际太远。

假设和模型是否合理都需要经受实践检验,要看它是否能正确描述客观现象,不能臆断假设合理,就认可模型的结论。譬如搅动水和酒精,设粒子作有序运动可使问题简化,但若模型描述的终点还是水和酒精粒子,我们就该怀疑假设的正确性。不考虑粒子的宏观无序运动和互相作用,当然得不到分子的微观均匀混合溶液。

无序运动十分复杂,若再考虑粘性、扩散混合等诸多因素,大量水与酒精粒子的行为很难用流体力学方程精确描述。然而粒子的宏观激烈碰撞掺混,会促成分子的微观均匀混合,乱到极点就是熵最高,问题反而简单了。搅动水和酒精肯定得到热力学平衡态的乙醇溶液,不会再有水和酒精粒子存在,任何人不会怀疑这一点。所以,爆轰产物粒子的无序运动一时搞不清楚,不妨先承认它的结果。确定爆轰过程的终点是熵最高的热力学平衡态,和原始炸药作为起点一共就有两个已知点。从这两个已知点出发,假设存在着不同的中间阶段,探讨各种可能的历程和模式,运用自然定律和数学方法,建立起爆轰模型,最后通过实验来检验模型的正确性。这是一种从两头研究中间的思路[31],用这种方法作者曾提出一种共轭模型[32],简介如下。

Dremin 认为,阵面附近的胞格结构是大量微爆炸互相碰撞的结果[33]。Davis 认为,爆轰产物可能会分成比反应区尺度更小的两股流体(Two Distinct Fluids)[34]。受上述观念启发,将每两个粒子看成一个“共轭对”,在微爆炸作用下分别向前后运动,向前运动的粒子驱动波阵面前进,向后运动的粒子与上一个微爆炸互相作用,膨胀变成处于热力学平衡态的爆轰产物。在此基础上,微爆炸和爆轰参数可以用守恒定律关联,建立起一个简单的爆轰模型。由于受一维条件限制粒子只能前后运动,只是有限程度地体现出无序和混乱的观念。

用共轭模型计算了 H_2+O_2 系统的爆轰参数,与实验结果吻合尚好[32]。用该模型计算理想气体的爆轰参数,结果和 CJ 和 ZND 模型相近。“共轭对”的假设是否合理有待实践检验,模型还十分粗糙,只是沿这种思路的初步尝试

多维模型粒子可以朝四面八方运动,有更多的自由度。作出合适的无序假设,应能更好地描述爆轰过程。

5　“定容爆轰”的概念阻碍达到正确认识

模型是客观事实的科学抽象,CJ 和 ZND 模型在一定程度上反映了爆轰过程的本质,但它们毕竟是

用流体力学方法在有序假设的前提下建立起来的模型，是人们在一定历史阶段认识的产物，有待完善和改进。把 CJ 和 ZND 模型的某些结论绝对化，甚至把 CJ 和 ZND 模型当作客观爆轰过程本身，阻碍正确认识爆轰过程。对“定容爆轰”的错误理解，封闭了通向热力学平衡态的大门。

共轭模型认为，产物 Hugoniot 线上 P 状态的粒子处于静止状态，熵最高是热力学平衡态，应该是爆轰过程的终态(见图 4)[32]。CJ 和 ZND 模型认为这是错的，因为 P 状态是 CJ 和 ZND 模型中所谓“定容爆轰”的终态。CJ 和 ZND 模型认为，垂直的 Rayleigh线 MP 对应于无限大的传播速度[15]，无限大的速度不可能存在，P 状态不可能是爆轰过程终态。

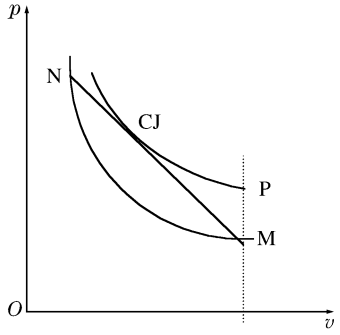


图 4 热力学平衡态与“定容爆轰”

Fig. 4 Thermodynamic equilibrium and “Constant volume detonation”

这种思维方式把 CJ 和 ZND 模型绝对化了，它用达不到热力学平衡态的 CJ 和 ZND 模型，去证明爆轰过程不应该达到热力学平衡态。世上只有不完美的模型，怎会有不合理的客观存在！其实，还有很多现象也被 CJ 和 ZND 模型判定为不可能。当爆速低于 CJ 爆速时，Hugoniot 线和 Rayleigh 线没有交点，方程组无解，低速爆轰(LVD)不应该存在。在 Hugoniot 线的第一象限上，爆燃段和爆轰段之间对应的爆速是虚数，爆燃转爆轰(DDT)不可能实现。然而 LVD 和 DDT 都是客观存在，都没有违背守恒定律，是有缺陷的 CJ 和 ZND 模型无法描述它们。

这种思维方式错误地认为，CJ 和 ZND 模型是用守恒定律导出的，违背它的结论就是违背守恒定律。热力学平衡态 P 于是成了爆轰科学的禁区，一提到热力学平衡态 P 就联想到“定容爆轰”，马上断定它是不可能的，自然就放弃了朝着这个方向的任何努力。这种思维定式排除了熵最高的热力学平衡态，当然无法建立熵最高的爆轰模型。

“定容爆轰”证明 P 不可能达到，也使 CJ 和 ZND 模型本身处于很尴尬的境地。如果说 P 是热力学平衡态，就得承认 CJ 和 ZND 模型有缺陷；如果说 P 不是热力学平衡态，那就该指出何处是热力学平衡态。这些都涉及经典热力学的基本原理，都是 CJ 和 ZND 模型解不开的难题。

6 争论将推动爆轰科学发展

Chapman 推测爆轰模型熵最高[5]，Jouguet 指出实际熵最低[6]，Zelidovich 认为熵最低不好解释[10]，Courant 期望有熵最高的爆轰模型[14]。这些学术泰斗们不愧大家风范，在爆轰模型熵的问题上丝毫不护短。爆轰科学发展到今天，熵问题没解决有种种原因，但不该放弃建立新模型的努力，更不能消磨掉前辈们正视问题的科学精神。

应该打破爆轰科学在热力学基本问题上的沉闷局面，大声疾呼 CJ 和 ZND 模型存在热力学问题，真正把不可逆过程热力学的观念和方法引入爆轰科学研究。要鼓励建立熵最高的爆轰模型。与终点熵最低的理论模型相比，趋向热力学平衡态的经验模型也是一种进步，大方向毕竟比细节更重要。应该用实践和科学基本定律来评价新模型，不能用 CJ 和 ZND 模型和它们的某些结论作为检验标准。

如果确信不存在热力学问题，当然可以为 CJ 和 ZND 模型辩护。可以如同文献[7,8,11,12]那样，提出或运用某个原理去证明熵最低的模型是合理的。或者去证明爆轰是一个不趋向热力学平衡态的热力学过程。如果认为 CJ 面及其后的不稳定状态是热力学平衡态，无妨从热力学定义给予说明。若不同意热力学平衡态 P 是爆轰过程的终态，可以另提出一个来。如此等等。但无论如何，对于爆轰这个热力学现象该不该趋向热力学平衡态，爆轰模型该不该反映这个事实，何处是热力学平衡态等一系列基本问题，成熟的科学应该有个说法。希望看到并愿意讨论这些意见。

熵问题困扰爆轰界整整一百年，在科学高速发展的今天看来未免长了点。和爆轰模型熵最低问题几乎同时的“以太零漂移”问题，早就导致了狭义相对论的建立，而熵问题至今仍骨鲠在喉般地困扰着爆

轰界。拖得时间越长，离新理论诞生就越近。随着人们对宏观和微观世界的理解日益深入，目前可能正是诞生爆轰新理论的前夜，这对爆轰工作者是挑战和机遇。

7　结论:爆轰科学呼唤进步

“在任何绝热变化中,熵都不可能减少,它趋向于最大”,“爆轰气体的熵最高”[5]。确认热力学平衡态是爆轰过程终态,是建立爆轰模型的关键。应该且必定能建立熵最大且又符合流体力学的的爆轰模型。

后记

我们是在对爆轰界前辈和老师充满崇敬的心情下评论他们的工作的。他们多为国内外著名学者,人品学问为爆轰界共识,是他们的杰出才华和卓越贡献缔造了爆轰理论大厦。我们在引用文献时始终怀着深深的敬意,是这些著述把我们带入爆轰科学领域。但这并不妨碍我们对经典爆轰理论提出质疑,追求真理是对学界前辈的最大尊重。文字中倘有不敬之处,请多多鉴谅为盼。

References:

[1] Chinese Encyclopedia(Physics) [C]. Beijing:Chinese Encyclopedia Press,1987. 880. (in Chinese)
中国大百科全书《物理》卷 [C]. 北京:中国大百科全书出版社,1987. 880.

[2] Fu Y. An Introduction to Chemical Thermodynamics [M]. Beijing:Science Press,1963. 60,90,91. (in Chinese)
傅　鹰. 化学热力学导论 [M]. 北京:科学出版社,1963. 60,90,91.

[3] The New Encyclopaedia Britannica(15th ed) [C]. Chicago:Encyclopaedia Britannica. 1985. 11:702.

[4] Wang Z X. An Introduction to Statistical Physics(2nd ed) [M]. Beijing:National Education Press,1965. 1. (in Chinese)
王竹溪. 统计物理学导论(第 2 版) [M]. 北京:人民教育出版社,1965. 1.

[5] Chapman D L. On the Rate of Explosion in Gases [J]. Philos Mag,1899,47:90－104.

[6] Jouguet E. Mechanique des Explosifs [M]. Paris:Octave Doin et Fils,1917.

[7] Scorah R L. On the Thermodynamic Theory of Detonation [J]. J Chem Phys,1935,3:425－430.

[8] Duffey G H. Detonation Wave and the Principle of Minimum Entropy Production [J]. J Chem Phys,1955,23:401.

[9] Penner S S,Mullins B P. Explosions,Detonations,Flammability and Ignition [M]. London:Pergamon Press,1959. 53.

[10] Zeldovich I B,Kompaneets A S. Theory of Detonation [M]. New York:Academic Press,1960. 82.

[11] Brown W B. Maximum Entropy of Effective Reaction Criterion for Steady Detonation [J]. Chem Phys Reports,1998,17(1-2):173－184.

[12] Brown W B. Thermodynamic Theory of Non-Ideal Detonation and Failure [A]. The 12th International Detonation Symposium [C]. San Diego,2002.

[13] Emmons H W. Fundamentals of Gas Dynamics. High Speed Aerodynamics and Jet Propulsion(Vol III) [M]. Princeton University Press,1958. 637.

[14] Courant R,Friedirichs K O. Supersonic Flow and Shock Waves [M]. New York:Interscience,1948. 213.

[15] Fickett W,Davis W C. Detonation [M]. California:Berkeley,1979. 14,16,17,42.

[16] Sun C W,Wei Y Z,Zhou Z K. Applied Detonation Physics [M]. Beijing:Defense Industry Press,2000. 1～3,19,30. (in Chinese)
孙承纬,卫玉章,周之奎. 应用爆轰物理 [M]. 北京:国防工业处版社,2000. 1～3,19,30.

[17] Sun J S,Zhu J S. Theory of Detonation Physics [M]. Beijing:Defense Industry Press,1995. 89,144,145. (in Chinese)
孙锦山,朱建士. 理论爆轰物理 [M]. 北京: 国防工业出版社,1995. 89,144,145.

[18] 德列明. 凝聚介质中的爆轰波 [M]. 沈金华译. 北京:原子能出版社,1986. 11.

[19] Zhang J X,Liu G L. Explosion and Its Applied Technology [M]. Beijing:Ordinance Industry Press,1988. 74. (in Chinese)
张俊秀,刘光烈. 爆炸及其应用技术 [M]. 北京:兵器工业出版社,1998. 74.

[20] Hui J M,Chen T Y. Detonation Theory of Explosive [M]. Nanjing:Jiangsu Science and Technology Press,1995.

92.(in Chinese)惠君明,陈天云.炸药爆炸理论[M].南京:江苏科学技术出版社,1995.92.

[21] Chinese Encyclopedia(Chemistry). Beijing:Chinese Encyclopedia Press,1985.855.(in Chinese)
中国大百科全书《化学》卷[C].北京:中国大百科全书出版社,1985.855.

[22] Zhang J Y. Basis of Shock Wave and Detonation [M]. Beijing:Beijing Institute of Science and Technology,1993.54.(in Chinese)
张锦云.冲击波与爆轰学基础[M].北京:北京理工大学,1993.54.

[23] Glasdorff P,Prigogine I. Thermodynamic Theory of Structure,Stability and Fluctuations [M]. London-New York-Sydney-Toronto:John Wiley & Sons Ltd,1971.14,20.

[24] Tarver C M. Chemical Energy Release in One-Dimensional Detonation Waves in Gaseous Explosives [J]. Combust & Flame,1982,46:111－133.

[25] Tarver C M. Multiple Roles of Highly Vibrationally Excited Molecules in the Reaction Zones of Detonation Waves [J]. J Phys Chem A,1997,101(27):4845－4851.

[26] Prigogine I. Introduction to Thermodynamics of Irreversible Process(3rd ed) [M]. New York-London-Sydney:John Wiley & Sons Ltd,1967.14,40,81.

[27] Li R S. Non-Equilibrium Thermodynamics and Dissipative Structure [M]. Beijing:Tsinghua University Press,1986.11.(in Chinese)
李如生.非平衡态热力学和耗散结构[M].北京:清华大学出版社,1986.11.

[28] 转引自:韦 群.物理.28(11):679. Albert Einstein,Letters to Maurice Solovine,1956,114－115.

[29] Prigogine I.确定性的终结——时间、混沌与新自然法则[M].湛 敏译.上海:上海科技教育出版社,1998.2,9,14.

[30] Zhan K H,Shen X F. Prigogine and Dissipative Structure Theory(2nd ed) [M]. Xi′an:Shaanxi Science & Technology Press,1998.15.(in Chinese)
湛垦华,沈小峰.普里高津与耗散结构理论(第二版)[M].西安:陕西科学技术出版社,1998.15.

[31] Hu S M,Li C F. Comments on the Unjustification of CJ and ZND Model in Detonation [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2003,17(3):214－219.(in Chinese)
胡绍鸣,李辰芳.对爆轰CJ和ZND模型和理性的讨论[J].高压物理学报,2003,17(3):214－219.

[32] Hu S M. Wave Configuration in Conjugate Detonation Theory [A]. Proceedings of the 28th International Pyrotechnics Seminar [C]. Adelaide,Australia:The International Pyrotechnical Society,2001.353－364.

[33] Dremin A N. Critical Phenomena in the Detonation of Liquid Explosives [A]. The Twelfth Symposium (International) on Combustion [C]. 1968.691－698.

[34] Davis W C. The Detonation of Explosives [J]. Sci Am,1987,256(5):106－112.

An Investigation on the Entropy Argument in Detonation Models

HU Shao-Ming,LI Chen-Fang

(*Xi′an Modern Chemistry Research Institute*,*Xi′an* 710065,*China*)

Abstract:Detonation science has been annoyed for a long time with the argument that the entropy has a minimum at the process end of detonation models. Neglecting thermodynamics,Newton mechanics that is invariant for the substitution $t \rightarrow -t$ may create thermodynamic mistake in describing detonation phenomena. The order assumption in CJ and ZND models,which considers all particles of detonation products march orderly in one direction,implies low entropy and thermodynamic non-equilibrium. Overstating CJ and ZND model,or even treating them as the objective reality of detonation process itself hinders the development of detonation science.

Key words:detonation;thermodynamics;hydrodynamics;entropy;equilibrium;CJ model;ZND models