第 17 卷 第 3 期
2003 年 9 月

高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 17, No. 3
Sept., 2003

**文章编号**：1000-5773(2003)03-0214-06

# 对爆轰 CJ 模型和 ZND 模型合理性的讨论*

胡绍鸣，李辰芳

（西安近代化学研究所，陕西西安 710065）

**摘要**：CJ 模型和 ZND 模型未充分考虑爆轰过程中由于热量瞬时释放所带来的本质变化，它们所确定的爆轰终点状态是所有可能状态中熵值最低的，实现的概率极小。终点状态应该由热力学确定，ZND 模型达不到热力学确定的平衡终态。爆轰模型应该同时符合流体力学定律和热力学定律。

**关键词**：爆轰；ZND 模型；CJ 模型；熵；热力学；流体力学

**中图分类号**：O381　　**文献标识码**：A

## 1 引 言

爆轰过程的基本理论是 CJ 模型以及 ZND 模型，在爆轰科学的发展中起了极重要的作用。然而百年来它的真实性一直受到怀疑，近年来争论并未平息。W. C. Davis 认为，爆轰科学尚未成熟[1]；李银成认为，用有统计力学基础的物态方程所作的检验表明，爆轰的 ZND 模型是成立的[2,3]；R. Cheret 认为，CJ 理论提出后的一百年是处在神话和真实之间的一个世纪，有必要重新改写[4]；著名爆轰学者 J. Kamlet在告别学术生涯时说，爆轰科学是由好的实验证据、轶事、真伪不明的报导，以及大量错误信息组成的杂烩[5]；C. O. Leiber 赞同 Kalmet 的意见，认为爆轰理论在本质上是错误的[6]。大多数学者认为，经典爆轰理论在一定程度上反映了客观存在，能满足工程计算的需要，但也还需要作进一步的完善。如孙锦山等认为："虽然已经证明 CJ 理论并不完全正确，但 CJ 理论仍在广泛使用"，其原因是"很可能通过状态方程的实验修正，已将 CJ 理论不正确的部分作了某种补偿，使计算结果非常令人满意"[7]，代表了爆轰界普遍的观点。

作者认为，经受过百年实践检验的爆轰理论必然有其合理的内核；另一方面，作为人类认识客观真理的一个具体阶段，CJ 模型和 ZND 模型（以下称为经典爆轰模型）只是相对真理而有待于深化。CJ 模型和 ZND 模型不是那种只关联了某些数量关系的经验模型，而是从守恒定律推导出来并力求反映爆轰过程本质的理论模型。探索自然的奥秘是科学永恒的主题。当理论模型的某些特征和自然过程不相符，或违背了某些自然规律时，就应分析这些矛盾，以进一步揭示爆轰过程的本质。本研究将讨论经典爆轰模型的以下问题：爆轰过程终态是所有可能状态中熵值最低的，实现的概率极小；等熵的稀疏波膨胀不合理；ZND 模型达不到热力学确定的平衡终态。

我们提出，爆轰是极快速的强放热过程，达到热力学平衡也极快，热力学平衡终态应该也是一个已知状态。以这两个已知状态为依据，研究爆轰过程的各个中间阶段，是一条可以探索的新思路。

## 2 经典爆轰模型的稀疏波和终态

本节将阐明，经典爆轰模型反应区终点 CJ 点熵值最低，通过等熵的稀疏波膨胀达到的爆轰终态 F

* **收稿日期**：2002-07-22；**修回日期**：2002-10-14

**作者简介**：胡绍鸣（1945—），男，硕士，副研究员.

点熵值也最低,这个终点状态实现的概率极小。

图 1 是一个典型的经典理论爆轰波构型[8],图 2 为爆轰过程中状态的变化[7~9]。按照经典理论,原始爆炸物受冲击波阵面压缩,系统的温度和压力在瞬间沿 Rayleigh 线跃升至 N 点状态,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点 F。

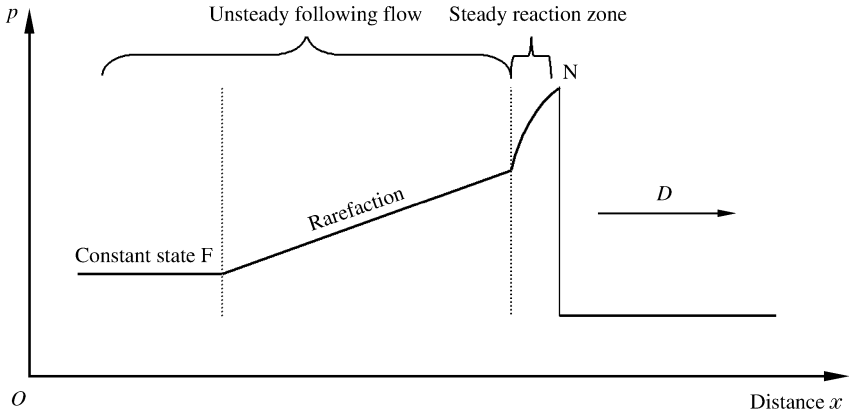



图 1　爆轰波构型

Fig. 1　Configuration of detonation wave

按照ZND模型,从状态冯-诺曼尖点N沿着Rayleigh线至CJ点状态是一个熵值不断增加的过程,CJ点是Rayleigh线上熵值极大点。同时,CJ点又是Hugoniot线上熵值的极小点。因为Hugoniot线是波后一切可能状态的集合,所以CJ点也就是一切可能状态中熵最低的一个状态点,从N点状态到CJ点状态是熵增加最慢的一条途径。按照不可逆过程热力学的理论,过程的发展方向应该沿着"亲合势"进行,熵的梯度是"亲合势"的一种形式,所以过程应该沿熵增加最快的方向进行(详见有关不可逆过程热力学专著,如文献[10]及所附参考资料)。自发过程不可能沿熵增加最慢的途径进行。

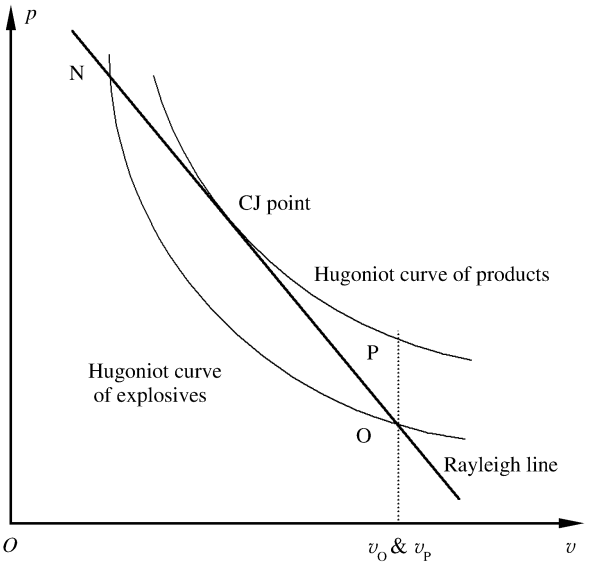



图 2　经典爆轰理论的 Hugoniot 线和 Rayleigh 线

Fig. 2　Hugoniot curve and Rayleigh line in classical detonation theory

过程沿 Rayleigh 线进行,是经典爆轰模型从守恒定律得出的结论,似乎除这条熵增加最慢的途径之外,没有其它路可走。而且沿此线熵虽然增加最慢,毕竟还是在增加,也还算有一定道理。但应注意到,所有这些结论都是在假设爆轰过程是一维层流的条件下得出的。层流是一种有序的方式,这种假设本身就决定了熵不可能最大。波阵面后的紊流现象早已为实验所证实,过程应该以紊流这种熵增加快的形式达到反应区终点状态。

按照经典爆轰理论,在 CJ 点之后的稀疏波膨胀阶段,熵不再增加,成了等熵过程。等熵过程是一种在接近平衡状态时才能发生的理想过程,速度无限慢[11]。爆轰以速度极快、功率极强为特征,在真实的爆轰波中不可能出现这样一个等熵过程。作这样的假设可使问题得到简化而易于处理,但这会产生多大偏差需要研究。

前已述及,CJ 状态点本身就是波后状态中熵最低的一个状态点,作了等熵假设后,稀疏波膨胀阶段熵不增加,爆轰产物最后达到的终点状态 F 点和 CJ 点一样,也是所有可能状态中熵值最低的。

自然界本身是一个和谐统一的整体,根据流体力学定律得出的结论也应该符合热力学定律。按照热力学第二定律,熵的大小是状态自发实现可能性的量度,熵越低的状态,实现的概率越小。任何自发过程终点状态的熵都会极大。从上述的分析可见,经典爆轰模型终态熵极小,是不可能实现的。退一步说,即使爆轰过程真能达到这个终态,熵值最低也不稳定。

## 3 稀疏波问题

除了熵以外,稀疏波还存在其它问题。

Chapman 和 Jouguet 认为,爆轰波实际上可以看作一种自激的冲击波[1],它们后部都应存在着稀疏波,这是用类推的方法做出的假设。若 CJ 理论正确并等熵条件成立,从流体力学方程组可解得爆轰波阵面后流场是 Taylor 波,这是在上述假设前提下,用数学方法得到的演绎结果。假说及其推论都需要经受实践的检验,不等于在实验中观察到了稀疏波的存在。笔者未曾查到证实稀疏波存在的直接实验证据。

按照经典爆轰理论,反应区之后是稀疏波区,稀疏波区前端以 CJ 面和反应区交界,此后的流场由一维等熵流体力学方程组描述[12]

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + u\dfrac{\partial \rho}{\partial x} + \rho\dfrac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \rho\dfrac{\partial u}{\partial t} + \rho u\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial p}{\partial x} = 0 \\ p = p(\rho) \end{cases}$$

Taylor 波是上述一维等熵流体力学方程组的解,若左边界条件确定,波后流场(Taylor 波和均匀区)完全决定于右边界条件 CJ 状态。孙承纬说“CJ 或 ZND 模型的产物流场是 Taylor 波”[9],清楚地阐明了它们之间的关系。所以在研究波后流场问题时,CJ 条件的正确性是 Taylor 波正确的必要条件(还不是充分条件!)。对 CJ 条件的疑点很多,本研究不拟一一引用。如果 CJ 条件不正确,上述方程组的解 Taylor 波就不可靠。

实验证明,反应区存在强烈紊流。目前普遍认为,爆轰波结构的紊流形式是横向波,其直接实验证据就是胞格结构。Dremin 认为,微爆炸产生横波,三波碰撞又产生新的微爆炸[13]。微元爆炸应该对各个方向都起作用,微爆炸对于前方和侧方的作用已为多数学者所认同,对于反方向的作用未见讨论。如果反方向存在压缩波,稀疏波就不会存在,因为压缩波和稀疏波不能共存。如果反方向不存在压缩波,那就要解释为何微爆炸只对前方和侧方起作用,理论上也很难讲通。

如果稀疏波不存在,爆轰波的真实构型就不是图 1 所示的那样,CJ 条件就无从谈起。以此为基础的爆轰参数计算,则只能算作数据拟合,无论计算得多么精确,也无法证明计算式在理论上的正确性。

前已谈到,右边界条件 CJ 状态决定反应区后的稀疏波,而稀疏波又通过 CJ 条件 $D=U+C$ 决定 CJ 状态。这里是否犯有循环论证的逻辑错误,有待商榷。

## 4 热力学定律决定爆轰过程的终点

爆轰科学采取的是模型研究方法。倪光炯等对模型方法有一段精辟的论述:“模型的研究方法,实际上是一种抓主要矛盾的方法,任何复杂事物总包含很多矛盾,但在一定条件下,必有一个是主要的,把它突出出来暂时除去次要矛盾,便成为一个模型”[14]。自然界本身是一个和谐统一的整体,对同一过程根据流体力学定律得出的结论,也应该符合热力学定律,反之亦然。爆轰的基本特征是化学能转换成热能,推动冲击波阵面前进。CJ 模型和 ZND 模型考虑到了这一点,在波阵面后加入了这一部分热量,

体现在爆轰产物的 Hugoniot 线上。然而,这两个模型都没有抓住巨额热量瞬时释放这个主要矛盾,没有充分考虑瞬时功率高达 $10^{10}\sim10^{14}$ W 的放热量会带来本质性的变化,没有看到这些热量会影响、甚至根本改变冲击波的传播方式和过程的终点,它们描述的爆轰波一切仍按照冲击波的模式进行。

众所周知,在有限的空间和时间内,一切和热现象有关的物理过程和化学过程都具有一定的方向性,这个方向是由热力学第二定律决定的。对于爆轰这种极快速的强放热过程,热力学是主要矛盾,决定过程的方向和终点。当然流体力学同时也起作用,热力学和流体力学的规律都应遵守。

设想有一根无限长的理想药柱,从一端起爆,爆轰过程结束后产物呈稳定平衡态,状态不再与爆轰过程有关。过程进行极快,达到热力学平衡也极快。平衡时质点速度为零,体系体积与原始反应物相同。绝热等容过程中释放的化学能全部用来增加体系的内能。根据热力学第一定律,此时有

$$e_{\mathrm{P}}=e_0+Q_V$$

式中:$e$ 是内能,$Q_V$ 是定容反应热。从此式即能确定爆轰过程的终态 P 点。

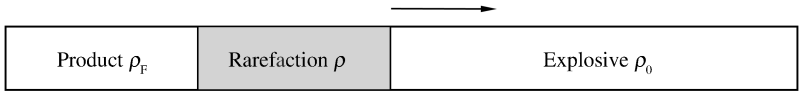
由图 2 可见,P 点是爆轰产物的 Hugoniot 线与直线 $v=v_0$ 的交点。已经证明,在 Hugoniot 线上 CJ 状态熵最低[7],比容愈大则距离 CJ 点愈远,熵也就愈高。但爆轰产物的比容最大只能等于原始炸药比容,不可能再大。所以,P 点状态是所有可能状态中离 CJ 状态最远、熵最大的一个状态(参见图 2)。从热力学第二定律看,P 点状态作为过程终态也是合理的。

形象地说,爆轰过程终结之后,得到的是一根几何尺寸与原始爆炸物相同、状态为 P 的爆轰产物“柱”。实验应该能证明这个结果。甚至单凭直觉,也能得出这个结论。只要是绝热等容过程,不论通过爆轰还是爆燃,或其它任何一种过程变为稳态产物后,都只能处于这个状态,没有其它可能性。

## 5　按经典爆轰模型通过稀疏波膨胀达不到热力学平衡终点

从图 2 可见,沿 Rayleigh 线从 CJ 状态不可能到热力学终点状态 P。由原点 $O$ 可以通过“定容爆轰”到达 P 点状态[12],但定容爆轰速度无限大,实际上不存在,是一条符合守恒定律却行不通的途径。所以,即使经典爆轰模型是正确的,按照它通过稳态过程不可能到达终点状态 P。以下将证明,按照经典爆轰模型设想的稀疏波膨胀,通过非稳态过程也不可能到达终点状态 P。

设在某个瞬间,药柱内部各个区域分布如下(反应区和波阵面尺寸较窄且恒定,图中未示出)




经过一段时间后变为




随爆轰波传播,稀疏波区域的长度不断增加,稀疏波的密度 $\rho$ 大于炸药密度 $\rho_0$ 和产物密度 $\rho_{\mathrm{F}}$。要保证质量守恒即总质量不变,必须有 $\rho_{\mathrm{F}}<\rho_0$。在第 4 节中已提到,热力学平衡终点的密度 $\rho_{\mathrm{P}}$ 与炸药 $\rho_0$ 相等,也就是 $\rho_{\mathrm{P}}=\rho_0$。所以 $\rho_{\mathrm{P}}\neq\rho_{\mathrm{F}}$,也就是说,稀疏波膨胀结果达不到热力学终态。

这样,经典爆轰模型就得出了很奇特的结果:最强烈的放热过程终态熵最低,最快速的过程永远达不到热力学平衡终态。这是经典爆轰模型本身的缺陷,研究并解决它将有助于爆轰科学的发展。

## 6　讨　论

### 6.1　流体力学确定的过程达不到热力学确定的平衡终点

自然界是一个和谐的整体,描述自然过程的模型应该同时符合所有的自然定律,流体力学和热力学

的结果应该一致。

不能怀疑热力学和流体力学基本定律的正确性，只应检查是否正确运用了这些基本定律。

傅鹰先生说，“在严格导出的热力学结论中没有任何假想的成分，因此结论无可怀疑”[11]，热力学确定的平衡终态应该是可靠的。

在用流体力学方法研究爆轰过程时作了很多假设：层流、稀疏波、CJ 条件、爆轰波构型、等熵流动，等等。最重要的是未考虑巨额热量瞬时释放所造成的本质变化。其中只要有一个假设不合理，即使推导时正确地运用了守恒定律和数学方法，结论也会偏离实际。

### 6.2 研究爆轰模型的新思路

爆轰过程的终态没有太多实用研究意义，绝大部分有用的能量都已经在波阵面处放出了。然而由此可探讨研究爆轰科学的新思路。

由于爆轰现象的特殊性，人们至今认为能可靠掌握的只是原始炸药的性质。经典爆轰科学就是从这个已知起始状态出发，设想经过反应区-CJ 状态-稀疏波各个中间阶段，运用自然定律和数学方法得到 ZND 模型。在 ZND 模型中，爆轰终态不是已知的，是通过若干个假设的中间阶段，根据流体力学一步步推出来的结果。本文已详细讨论了反应区和稀疏波这些中间阶段的问题，中间阶段问题的累积误差必然体现在终态点上。

现在换一个思路。爆轰波反应区存在强烈紊流，孙锦山等认为：“湍流中最重要的现象是由这种随机运动引起的动量、热量和质量的传递，其传递速率比层流高好几个数量级”[7]。高强度传递的结果必然是均匀混合，而混合最大、最均匀、最混乱的状态，熵也最大，这正是热力学平衡状态 P[11]。所以爆轰过程会迅速达到热力学平衡，热力学平衡终态也是一个已知状态。起始态和终态是两个已知状态，从这两个已知状态出发，假设存在着不同的中间阶段，探讨各种可能的历程，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。按照这种从两头研究中间的思路，作者曾提出一种共轭爆轰模型[15]。该模型的基本设想是，热量瞬时释放形成紊流，混乱中极快达到热力学平衡。具体的模式是假设微爆炸使炸药微元分成两部分，生成“共轭对”；然后共轭对因膨胀消失而达到热力学平衡终点。模型符合热力学定律和流体力学定律。用该模型计算了 $H_2$-$O_2$ 系统的爆轰参数，与实验结果吻合尚好。模型还很粗糙，只是沿这种思路的初步尝试。紊流可以有很多种描述形式，也完全可以设想种种不同的历程。共轭爆轰模型本身并不重要，只要认同应该达到熵最大的热力学平衡终态，按照这种从两头研究中间的思路，定可提出更好的爆轰模型来。

## 7 结 论

爆轰过程应该同时遵守流体力学定律和热力学定律。经典爆轰模型没有抓住巨额热量瞬时释放这一本质特征，因而存在明显的缺陷和不足。在现有理论内部的问题中孕育着创新和进步，是科学发展的普遍现象。认识并解决这一问题，对爆轰理论工作者是一种挑战和机遇。

## References:

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

[2] Li Y C. Equation of State of Detonation Product (Ⅱ)—Does ZND Theory of Detonation Fail? (A) [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1999, 13(4): 247－254. (in Chinese)
李银成. 爆轰产物物态方程(Ⅱ)——爆轰的 ZND 模型不成立吗？(上) [J]. 高压物理学报, 1999, 13(4): 247－254.

[3] Li Y C. Equation of State of Detonation Product (Ⅱ)—Does ZND Theory of Detonation Fail? (B) [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(1): 6－15. (in Chinese)

李银成. 爆轰产物物态方程(Ⅱ)——爆轰的 ZND 模型不成立吗?(下)[J]. 高压物理学报,2000,14(1):6－15.

[4] Cheret R. Chapman-Jouguet Hypothesis 1899－1999: One Century between Myth and Reality [J]. Shock Waves, 1999,9:295－299.

[5] Kamlet M J. Lectures on Detonation Chemistry [R]. Dahlgren VA, Silver Spring ML, USA: Naval Surface Weapons Center, 1986.

[6] Leiber Carl-Otto. Physical Model of Explosion Phenomena-Physical Substantiation of Kamler's Complaint [J]. Propellant, Explosives & Pyrotechnics, 2001, 26:302－310.

[7] Sun J S, Zhu J S. Theory of Detonation Physics [M]. Beijing: Defense Industry Press, 1995. 42; 102; 121; 149. (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. 42;102;121;149.

[8] Fickett W, Davis W C. Detonation [M]. Berkeley, Los Angeles: University of California Press, 1979. 14;19.

[9] Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K. Applied Detonation Physics [M]. Beijing: Defense Industry Press, 2000. 3; 85. (in Chinese)
孙承纬,卫玉章,周之奎. 应用爆轰物理 [M]. 北京:国防工业出版社,2000. 3;85.

[10] Prigogine I. Introduction to Thermodynamics of Irreversible Process(Third Edition) [M]. New York · London · Sydney: Interscience Publishers, A Division of John Wiley & Sons. 1967. 40－47.

[11] Fu Y. An Introduction to Chemical Thermodynamics [M]. Beijing: Science Press, 1963. 2; 66; 90. (in Chinese)
傅　鹰. 化学热力学导论 [M]. 北京:科学出版社,1963. 2;66;90.

[12] Zhou Y L. One-Dimensional Unsteady Fluid Mechanics [M]. Beijing: Science Press, 1998. 61; 247. (in Chinese)
周毓麟. 一维非定常流体力学 [M]. 北京:科学出版社,1998. 61;247.

[13] Dremin A N. Discoveries in Detonation of Molecular Condensed Explosives in the 20th Century [J]. Combustion, Explosion and Shock Waves, 2000, 36(6): 704－715.

[14] Ni G J. Physics Changing the World [M]. Shanghai: Fudan University Press, 1998. 20. (in Chinese)
倪光炯. 改变世界的物理学 [M]. 上海:复旦大学出版社;1998. 20.

[15] Hu S M. Wave Configuration in Conjugate Detonation Theory [A]. Proceedings of the 28th International Pyrotechnics Seminar [C]. Adelaide: Defense Science and Technology Organization, 2001. 353－364.

# Comments on the Unjustification of CJ and ZND Model in Detonation

HU Shao-Ming, LI Chen-Fang

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

**Abstract**: The essential change caused by sudden heat energy release in a detonation process is not fully considered by the CJ and ZND model. In these classical detonation theories, the entropy at the final detonation point is the lowest one among all possible states, and the probability is the lowest . The final detonation point shall be decided by the thermodynamics, which can not be achieved through the ZND model. The fluid mechanics and thermodynamics laws must be satisfied in a goog detonation model.

**Key words**: detonation; CJ model; ZND model; entropy; thermodynamics; fluid mechanics