

凝聚介质的简化状态方程

李维新

(1982年10月19日收到)

文中导出了计算简化金属状态方程中系数 ν 的公式如下:

$$\nu = 4s - 2(1 - (\rho_0/\rho))s^2 - 1$$

式中 s 是冲击波速度和粒子速度线性关系的斜率, ρ_0 和 ρ 为冲击波前后的密度。这种简化状态方程是F. H. Harlow以前在计算高速射流时应用过的。文中并推导了相应的简化等熵状态方程和冲击波关系式, 并对Al和Fe进行了数值计算, 和通常从Grüneisen状态方程导出的等熵线相比, 符合得很好。

一、引言

关于凝聚介质热力学性质的研究, 目前仍是实验方法起重要作用。美国、苏联等国曾对一系列金属及其它凝聚介质进行了冲击压缩实验, 压力已达到几百万甚至千万巴。利用所得的数据, 建立了各种形式的, 半经验半理论的状态方程。这种状态方程可以有较好的精确度, 但在对流体力学问题进行解析研究时使用是不方便的。

当温度(T)不太高时, 一般可取两项式状态方程

$$p = p_c(V) + p_r(V, T), \quad e = e_c(V) + e_r(V, T)$$

其中 V 是比容, p_c 、 e_c 分别是冷压和冷能, 表示物质和原子间相互作用有关的弹性性质; p_r 、 e_r 是热压和热能, 表示物质受热后所出现的与原子的热运动有关的性质。常用的一种有代表性的方程是著名的Grüneisen状态方程

$$p = p_c(\rho) + \Gamma \rho (e - e_c) \quad (1)$$

其中 p 、 $\rho (= 1/V)$ 、 e 分别是压强、密度和比内能, Grüneisen系数 Γ 被假定只是 ρ 的函数 $\Gamma = \Gamma(\rho)$ 。现在还没有 $\Gamma(\rho)$ 的严格解析表达式, 目前, 在实际应用中经常使用如下关系式

$$\Gamma \rho = \Gamma_0 \rho_0 \quad (2)$$

其中下标“0”代表正常状态下的值。

通常, 可借助Hugoniot数据, 把Grüneisen状态方程表示为

$$p = p_H + \Gamma \rho (e - e_H) \quad (3)$$

其中下标“H”代表 Hugoniot 曲线上的值。利用冲击波的经验关系式

$$D = C_0 + su \quad (4)$$

我们有

$$p_H = \frac{\rho_0 C_0^2 (1 - \rho_0/\rho)}{[1 - s(1 - \rho_0/\rho)]^2} \quad (5)$$

$$e_H = \frac{1}{2} p_H \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) \quad (6)$$

将(5), (6)代入(3), 就会给出 $p = p(\rho, e)$ 。可以看到, 在对流体力学问题作解析研究时, 使用这个方程也是不方便的。此外, 用(2)式确定 Γ , 也尚未得到严格证明。

本文讨论的简化状态方程, 本质上是 Grüneisen 方程的一种线性近似, 其形式为

$$p = C_0^2 (\rho - \rho_0) + (\gamma - 1) \rho e \quad (7)$$

其中 C_0 是正常状态下的声速, γ 是参数。F. H. Harlow⁽¹⁾ 等人把这个方程叫作“稠密气体”状态方程, 曾把它用于高速金属射流的计算⁽²⁾, 对预估金属射流的定性性质是有效的。

这种状态方程形式简单, 使用方便, 并容易写出相应的等熵方程和声速的解析表达式。但是, 重要的问题是如何确定 γ 的值。Harlow 等人在计算射流时, 曾用尖劈绕流形成脱体冲击波时的尖劈顶角来类比其他不产生射流时金属平板的临界倾角, 得出铝的 $\gamma = 2.4$, 铁的 $\gamma = 2.9$ 。另外, 可以认为 $\gamma - 1 = \Gamma = C_0^2 a / C_V$, 其中 $a = (1/V)(\partial V / \partial T)$, 是体膨胀系数, C_V 是定容比热。他们还把它与 Los Alamos 实验室作数值计算时使用的一种多项式状态方程作对比, 给出一个求 γ 的公式, 例如铁的 $\gamma = 1 + 1.07[1 + 0.564(\rho - \rho_0)/\rho_0]$ 。但结果似乎都不理想。

我们利用冲击波的 Hugoniot 关系式, 导出了一个确定 γ 的公式。使用这种 γ 值的简化状态方程, 计算了一些金属的冲击波的有关参量及等熵曲线, 所得结果与 R. G. McQueen⁽³⁾ 等人使用 Grüneisen 状态方程所得的结果符合甚好。

二、系数 γ 的确定

当取上述简化状态方程(7)时, Hugoniot 关系式可写为

$$p = \frac{2\rho_0 C_0^2 (\rho - \rho_0)}{(\gamma + 1)\rho_0 - (\gamma - 1)\rho} \quad (8)$$

另一方面, 当利用 $D = C_0 + su$ 关系式时, Hugoniot 关系式可写为(5)式。这两式应恒等, 因此, 下式应成立:

$$\frac{\gamma + 1}{2} \rho_0 - \frac{\gamma - 1}{2} \rho = \rho [1 - s(1 - \frac{\rho_0}{\rho})]^2 \quad (9)$$

由(9)式求得

$$\gamma = 4s - 2(1 - \frac{\rho_0}{\rho})s^2 - 1 \quad (10)$$

(10)式就是欲求的 γ 关系式。该式表明, γ 不仅依赖于物质的固有性质 s 参量, 而且还依赖于物质的密度 ρ 。这里 γ 反比于 ρ , 这与Grüneisen系数的关系式(2)是一致的

在极限情况 $\rho \rightarrow \rho_0$ 时, (10)式给出

$$\gamma = \gamma_{max} = 4s - 1 \quad (11)$$

在强冲击波极限情况下, 由(8)式得到 $\rho_{max} = \rho_0(\gamma + 1)/(\gamma - 1)$, 从而由(10)式给出

$$\gamma = \gamma_{min} = 2s - 1 \quad (12)$$

用另外的方法也容易得到以上结果。采用状态方程(7)时, 还可将冲击波关系式表示为

$$D = C_0 + \frac{\gamma + 1}{4} u + \frac{(\gamma + 1)^2}{32} \frac{u^2}{C_0} + \dots \quad (13)$$

对弱冲击波, 略去 u/C_0 的二阶以上项, 再与(4)相比较, 就得到(11)另外, 由质量守恒方程及(4)式, 可得强冲击波的极限压缩比 $\rho_{max} = \rho_0 s/(s - 1)$, 用它与(8)式得出的 ρ_{max} 相比较, 就可得到(12)式。

关系式(10)是根据Hugoniot关系式导出的, 故该式中的 ρ 实际是 ρ_H , 计算实践表明, 若将该式的 ρ_H 推广为任意的 ρ , 即将状态方程(7)化为 $p = C_0^2(\rho - \rho_0) + 2(s^2\rho_0 - (s - 1)^2\rho)e$, 则计算结果并不好。我们发现, 在计算冲击波经过后的等熵过程时, 保持由该冲击波的 ρ_H 定出的 γ 不变, 计算结果却很满意。这说明, γ 值实际可视为熵的函数。

在等熵过程中 γ 不变, 于是, 对一些彼此熵值相差不大的过程, 也就可将它们的 γ 值近似取为同一常数。我们知道, 在冲击波阵面上熵增量是比容增量的三阶小量, 所以, 在一定的冲击波强度范围内, 可近似认为 γ 为常数。

下面, 我们给出一种近似确定 γ 值的方法。当 γ 为常数时, 简化状态方程对应的声速为

$$C^2 = \gamma \frac{p}{\rho} + C_0^2 \frac{\rho_0}{\rho} = \gamma A \rho^{\gamma-1} \quad (14)$$

其中 A 是熵的函数。设有一个右行的弱冲击波, 穿过波阵面时, C -特征线上的黎曼不变量 β 不变。考虑到(14), 容易得 $\beta = u - \int \frac{dp}{\rho C} = u - \frac{2}{\gamma-1} C$ 。若冲击波波前状态为 $u_0 = p_0 = e_0 = 0$, 则波面上有

$$u - \frac{2}{\gamma-1} C = -\frac{2}{\gamma-1} C_0$$

现把上式及(14)代入冲击波关系式 $D - u = p/\rho u$ 的右端, 经一定演算后得

$$D = \frac{(\gamma+1)^2}{4\gamma} u + (1+\eta) \frac{\gamma-1}{\gamma} C_0 \quad (15)$$

其中

$$\eta = \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) \left[2 \left\{\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1/2} - 1\right\}\right]$$

η 是 ρ 的单调函数。当 $\rho \rightarrow \rho_0$ 时, $\eta \rightarrow 1/(\gamma-1)$; 当 $\rho \rightarrow \infty$ 时, $\eta \rightarrow 0$ 。故 η 的变化范围不大。现将 ρ 表为 $\rho = \rho_0 + \rho'$, 其中 ρ' 与 ρ_0 相比是小量。将上式按 ρ' 展开, 略去 ρ'/ρ_0 二阶以上的项

则得

$$\eta = \frac{1}{\gamma - 1}$$

将它代入(15), 得

$$D = C_0 + \frac{(\gamma + 1)^2}{4\gamma} u \quad (16)$$

这就导出了冲击波的 $D-u$ 线性关系式。与实验关系式(4)相比较, 说明该式中的常数 C_0 近似是介质的未扰动声速, 系数 s 为

$$s = (\gamma + 1)^2 / 4\gamma \quad (17)$$

由此可得只依赖于 s 的 γ 值, 将它记作 γ_* , 得

$$\gamma_* = 2s - 1 + \sqrt{(2s - 1)^2 - 1} \quad (18)$$

不难看出, $\gamma_{max} > \gamma_* > \gamma_{min}$ 。以上结果说明, 在冲击波强度不大, 波后密度增加不多的情况下, 可将 γ 近似取为常数。

表1 不同物质不同 ρ 时的 γ 值

ρ/ρ_0	Al	Fe	Cu	W	U-Mo
1.0	4.352	5.320	4.956	3.948	5.124
1.4	3.329	3.893	3.689	3.074	3.785
1.8	2.761	3.101	2.985	2.588	3.040
2.0	2.562	2.824	2.739	2.418	2.780
2.4	2.263	2.408	2.369	2.136	2.389
γ_{min}	1.676	2.160	1.978	1.474	2.062
γ_*	3.021	4.075	3.685	2.557	3.865
s	1.338	1.580	1.489	1.237	1.531
C_0 (千米/秒)	5.328	3.800	3.940	4.029	2.565

表1列出了部分物质的冲击波实验数据 s 及 C_0 , 以及(10)式算出的 γ 值。可以看到, 用(18)式计算的 γ_* 值相当于 $\rho_H/\rho_0 \sim 1.4$ 附近所对应的 γ 值。

三、等熵方程

简化状态方程(7)所对应的等熵方程, 形式也很简单。根据热力学第一定律, 等熵方程的一般形式可写为

$$\frac{de}{d\rho} = \frac{p}{\rho^2}$$

将(7)式代入上式, 并认为在熵不变时 γ 也不变, 则积分可得到

$$\left. \begin{aligned} e &= K\rho^{\gamma-1} - C_0^2 \left(\frac{1}{\gamma-1} - \frac{\rho_0}{\gamma\rho} \right) \\ p &= A\rho^\gamma - \frac{1}{\gamma} \rho_0 C_0^2 \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

其中 K 是积分常数，是熵的函数， $A = (\gamma - 1)K$ 。

沿等熵线 γ 不变，但对不同的等熵线， γ 是不同的。在研究冲击波经过后的等熵运动时，则可根据该冲击波的 ρ_H 按(10)式确定相应的 γ 值。

在表2中列出了一些计算结果，为了作比较，我们同时对Grüneisen方程所对应的等熵方程作了计算。后者只能作数值计算。等熵线的差分方程为

$$e_i = e_{i-1} - \frac{1}{2}(p_i + p_{i-1}) \cdot \Delta V$$

而由Grüneisen方程，在 i 点有

$$e_i = e_H - (p_i - p_H) / \left(\frac{\Gamma}{V} \right)_i$$

其中 e_H 及 p_H 是Hugoniot曲线上 $V = V_i$ 所对应的值。由以上两式得等熵线差分方程

$$p_i = \frac{p_H - (\Gamma/V)_i (p_{i-1} \Delta V / 2 + e_H - e_{i-1})}{1 + (\Gamma/V)_i \Delta V / 2} \quad (20)$$

图1是计算(20)式用的示意图，通过逐次计算可得到等熵线。

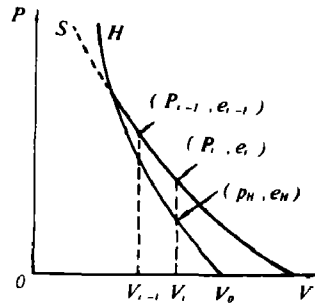


图1 等熵线计算示意图

表2 等熵线的数据

p_H (百万巴)	铝				铁			
	γ	$\frac{\rho}{\rho_0}$	p (百万巴)		γ	$\frac{\rho}{\rho_0}$	p (百万巴)	
			(19)式	(20)式			(19)式	(20)式
0.4	3.505	1.000	0.017	0.022	4.419	1.000	0.016	0.020
		1.134	0.152	0.149		1.127	0.206	0.199
		1.216	0.256	0.255		1.220	0.400	0.400
		1.310	0.400	0.400		1.291	0.587	0.598
		1.420	0.604	0.604		1.371	0.843	0.876
		1.550	0.903	0.897		1.461	1.201	1.280
		1.760	1.354	1.334		1.511	1.433	1.553
		1.892	2.068	2.029		1.564	1.713	1.893
0.8	3.191	1.000	0.052	0.064	4.054	1.000	0.050	0.024
		1.102	0.161	0.155		1.105	0.215	0.190
		1.227	0.329	0.322		1.188	0.384	0.359
		1.385	0.600	0.597		1.285	0.633	0.618
		1.480	0.800	0.800		1.340	0.800	0.800
		1.589	1.067	1.072		1.399	1.008	1.034
		1.715	1.430	1.446		1.464	1.267	1.340
		1.863	1.937	1.982		1.535	1.596	1.749
		2.039	2.666	2.795		1.614	2.017	2.313

从表2列出的结果看到, 解析式(19)与差分方程(20)的结果符合得很好。例如, 对于铝, 在 $p_H = 80$ 万巴, $\rho_H/\rho_0 = 1.48$ 的冲击波过后, 再等熵压缩到 $\rho/\rho_0 = 2.039$, 压力为二百多万巴时, 两种方程算出的压力相差小于5%, 内能只差2%左右。但铁的结果是我们所算过的十多种物质中相差较大的一种材料。这可能是因为铁的 S 和 Γ_0 取得不协调所致, Γ_0 取自(3), 那里用 $D = 3.574 + 1.92u - 0.0068u^2$, 我们计算中则取 $D = 3.8 + 1.58u^2$, 显然不同的 s 值将给出不同的 γ 值。

此外, 在表3中列出了物质从不同状态等熵膨胀到零压时的密度 ρ_f 及自由面速度 u_f 的计算数据, 取简化状态方程(7)时, 容易得到

$$u_f = u_H + \frac{2}{\gamma - 1} (C_H - C_0) \quad (21)$$

$$\frac{\rho_f}{\rho_H} = \left[\frac{\rho_0 C_0^2}{\gamma p_H + \rho_0 C_0^2} \right]^{\frac{1}{\gamma}} \quad (22)$$

表中同时列出(3)给出的相应数据, 它们是按Grüneisen方程计算的。两种结果在很大范围内都符合得很好, 这也为我们使用简化状态方程提供了依据。

表3 冲击波参数及卸载等熵线数据

物 质	冲击波参数			卸载等熵线 ($p = 0$)			
	P (兆巴)	C (千米/秒)		ρ_f/ρ_0		u_f (千米/秒)	
		本方法	取自(3)	(22)式	取自(3)	(22)式	取自(3)
铝	0.2	6.843	6.85	0.994	0.995	2.151	2.13
	0.4	7.754	7.77	0.979	0.981	3.779	3.72
	0.6	8.440	8.48	0.961	0.961	5.168	5.07
	0.8	9.007	9.07	0.942	0.938	6.410	6.27
	1.0	9.496	9.59	0.923	0.912	7.549	7.37
	1.2	9.931	10.06	0.905	0.885	8.610	8.40
铁	0.2	4.837	4.99	0.996	0.997	1.102	1.11
	0.4	5.504	5.88	0.986	0.989	1.955	1.92
	0.6	6.020	6.56	0.974	0.976	2.688	2.60
	0.8	6.451	7.11	0.960	0.959	3.344	3.22
	1.0	6.828	7.57	0.946	0.940	3.945	3.78
	1.2	7.165	7.95	0.933	0.919	4.506	4.32
铀 钼 合金	0.2	3.203	3.22	0.997	0.998	0.704	0.70
	0.4	3.620	3.67	0.988	0.991	1.257	1.24
	0.6	3.944	4.02	0.977	0.981	1.733	1.70
	0.8	4.215	4.33	0.964	0.968	2.161	2.12
	1.0	4.452	4.60	0.952	0.953	2.554	2.50
	1.2	4.663	4.85	0.939	0.937	2.921	2.85

四、冲击波关系式

当采用简化状态方程时,可以把冲击波关系式采取下列形式:

$$\left. \begin{aligned} \frac{u}{C_0} &= \frac{2}{\gamma+1} \left(\frac{D}{C_0} - \frac{C_0}{D} \right) \\ \frac{\rho}{\rho_0} &= \frac{(\gamma+1)D^2}{(\gamma-1)D^2 + 2C_0^2} \\ \frac{p}{\rho_0 C_0^2} &= \frac{2}{\gamma+1} \left(\frac{D^2}{C_0^2} - 1 \right) \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

这与理想气体的冲击波关系式非常相似。这时, (10)式可相应地用 D 表出:

$$\gamma = 2 \left(1 + \frac{C_0}{D} \right) S - 1 \quad (24)$$

一旦冲击波速度 D 给定时,由(23)式就可以求出冲击波阵面上的其它参量。计算结果与实验结果 $D = su + C_0$ 及其相应的数据完全一致,当将 γ 近似取为 γ_0 时,所得的 $p-u$, $p-\rho$ 关系与实验结果也基本相符,只是 $D-u$ 关系符合较差,特别在压力较低时,相差可达10% (见图2和图3)。

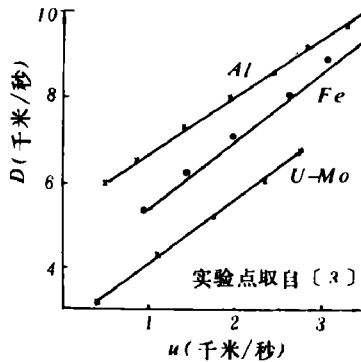


图 2 冲击波的 $D-u$ 直线

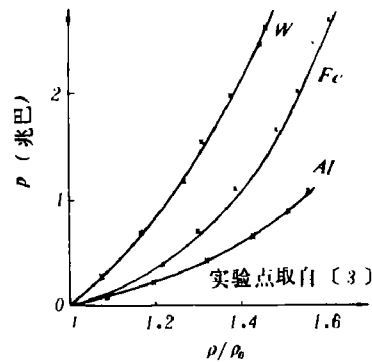


图 3 冲击波的 $p-\rho$ 曲线

二次冲击的冲击波关系式为

$$\left. \begin{aligned} p_2 &= \frac{2}{\gamma+1} \rho_1 \left[(D_2 - u_1)^2 - C_1^2 \right] + p_1 \\ \rho_2 &= \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \rho_1 \left[1 + \frac{2}{\gamma-1} \frac{C_1^2}{(D_2 - u_1)^2} \right]^{-1} \\ u_2 &= \frac{2}{\gamma+1} \left[(D_2 - u_1) - \frac{C_1^2}{D_2 - u_1} \right] + u_1 \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

在计算二次冲击波时可认为 γ 不变，特别是对反射冲击波，一般可视为弱冲击波，熵增量很小，所以上式中的 γ 值可以取第一次冲击波的值。

二次冲击波的 Hugoniot 关系式可写为

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{(\gamma+1)V_1 - (\gamma-1)V_2 + 2\rho_0 C_0^2 (V_1 - V_2) / p_1}{(\gamma+1)V_2 - (\gamma-1)V_1} \quad (26)$$

相应地，采用 Grüneisen 状态方程时的二次冲击波的 Hugoniot 关系式是

$$p_2 = \frac{p_H - (\Gamma/V)_2 [(p_H - p_1)(V_0 - V_1)/2]}{1 - (\Gamma/V)_2 (V_1 - V_2)/2} \quad (27)$$

其中 p_H 是第一次冲击波的 Hugoniot 曲线上 $V = V_2$ 所对应的 p 值。

为了检验以上公式，我们计算了冲击波在固壁上反射的问题。这时 $u_2 = 0$ ，由 (25) 式得

$$D_2 - u_1 = \frac{1}{2} \left(-\frac{\gamma+1}{2} u_1 - \sqrt{\left(\frac{\gamma+1}{2} u_1\right)^2 + 4C_1^2} \right) \quad (28)$$

反射冲击波的压力为

$$p_2 = p_1 - \rho_1 u_1 (D_2 - u_1) \quad (29)$$

用本文的公式和用公式(27)所作计算的部分结果示于图4。结果表明：当反射冲击波压力 p_2 在100万巴以内时，两种结果符合得很好；当 p_2 增加到高达300万巴左右时，对多数物质两者的差别仍小于5%，仅铁的差别最大，高达15%左右。

从我们对一系列金属所计算的冲击波、反射冲击波和等熵线的结果来看，简化状态方程在一定压力范围内都给出了较好的结果，所以，该方程及由它得到的有关公式，有一定的实用价值。

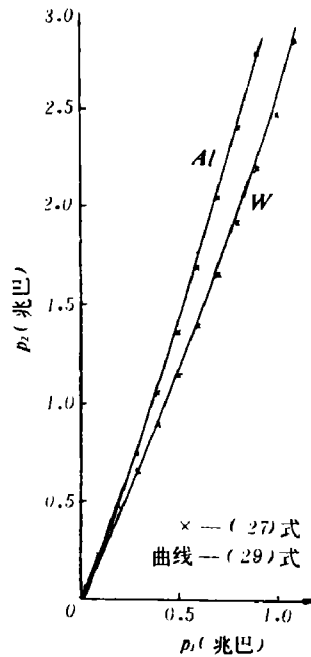


图4 二次冲击压力与一次压力的关系比较

参 考 文 献

(1) Harlow, F. H., Amsdan, A. A., LA-4700, (1971).
 (2) Harlow, F. H., Marsh, W. E., Phys. Fluid, 9 (10), (1966).
 (3) McQueen, R. G., Marsh, S. P., et al., High-velocity Impact Phenomena, Acad. Press, New York and London, (1970).
 (4) Баум, Ф. А. и др., Физика Взрывов, Наука, Москва, (1975).

A SIMPLIFIED EQUATION OF STATE IN CONDENSED MEDIUM

Li Weixin

Abstract

The formular of determing the coefficient γ in a simplified equation of state of metal, which was formerly used by F. H. Harlow in high velocity jet calculations, is derived as follows:

$$\gamma = 4s - 2\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right)s^2 - 1$$

where s is the slope of the linear relation between shock velocity and particle velocity, ρ_0 and ρ are the densities before and after shock respectively. The correponding simplified isentropic equation of state and shock wave relations are also derived, and numerical calculations for Al and Fe are made. Comparing with the usual isentropic derived from Grüneisen's, it is in good accord.