第4卷 第3期
1984年7月
爆 炸 与 冲 击
EXPLOSION AND SHOCK WAVES
Vol.4,No.3
July.,1984

带有可调参数的状态方程

陈栋泉 李茂生

（1983年10月23日收到）

本文导出了一个带有可调参数的状态方程 利用该方程可以十分方便地研究状态方程变化对流体力学计算结果的影响。

一、引　言

目前，除极高压力区域外，物质的状态方程主要由动力压缩实验数据来确定。实测数据会有各种误差和不确定性。为了研究这种误差和不确定性对流体力学计算结果的影响，需要一种形式简单和使用方便的可调参数状态方程。

流体力学计算中，使用着两种形式的状态方程：(1) $P(E,\rho)$，(2) $P(T,\rho)$ 和 $E(T,\rho)$。动力压缩实验测量结果是Hugoniot曲线$P_H(\rho)$，各种因素所带来的误差和不确定性表现为$P_H(\rho)$的变化，如果引入可调参数α，则$\alpha P_H(\rho)$将反映这种变化。因此，为了导出可调参数状态方程，仅需研究当$P_H(\rho)$变化时，状态方程与α之间的关系。

二、可调参数状态方程P(E,ρ,α)

众所周知，Grüneisen状态方程为

$$P-P_c=\frac{\gamma}{V}(E-E_c) \tag{1}$$

如果以P_H和E_H分别代替P_c和E_c，上式成为

$$P-P_H=\frac{\gamma}{V}(E-E_H) \tag{2}$$

(1)和(2)式中，P 和E 分别是物质的总压和总能；P_c和E_c是物质的冷压和冷能；P_H和E_H是Hugoniot压力和能量。γ 是Grüneisen系数。$V=1/\rho$ 是物质的比容。

从(2)得到

$$P=\gamma\rho E+P_H-\gamma\rho E_H \tag{3}$$

由于P_H和E_H仅是物质密度的函数和假定γ仅依赖于物质密度，我们便得到了以ρ 和E 作自变量的状态方程$P(E,\rho)$。在流体力学计算中，为使用方便常将$\gamma\rho$ 和$P_H-\gamma\rho E_H$拟合成如下 形式的多项式：

$$\gamma\rho=A(\rho)=\sum_{i=0}^{n}a_i\rho^i \tag{4}$$

$$P_H-\gamma\rho E_H=B(\rho)=\sum_{j=0}^{m}b_j\rho_i \tag{5}$$

这样$P(E,\rho)$可以表示成

$$P(E,\rho)=A(\rho)E+B(\rho) \tag{6}$$

这就是我们在流体力学计算中使用的$P(E,\rho)$状态方程形式。

在低压下，Grüneisen系数γ通常由下面的关系式确定：

$$\gamma\rho=\gamma_0\rho_0 \tag{7}$$

γ_0是常态下物质的Grüneisen系数。在这种近似下γ将不随α而变化。实际上，由下面关于P_c随α变化性质的讨论可以知道，认为γ不随α变化是完全可以的。因为根据γ的一般定义：

$$\gamma_t=\frac{1}{3}(t-2)-\frac{V}{2}\frac{\frac{d^2}{dV^2}(P_cV^{2t/3})}{\frac{d}{dV}(P_cV^{2t/3})} \tag{8}$$

由于分母与分子中均含有冷压P_c的一次项，P_c随α变化的性质并不影响γ。这样，在γ不随α变化的情况下，从(3)式可以知道，为了导出状态方程$P(E,\rho)$的可调参数形式，只需要讨论$E_H(\rho)$随α的变化性质。

$E_H(\rho)$和$P_H(\rho)$满足Hugoniot关系：

$$E_H-E_0=\frac{1}{2}(P_H+P_0)(V_0-V)=\frac{1}{2}(P_H+P_0)\left(\frac{1}{\rho_0}-\frac{1}{\rho}\right) \tag{9}$$

这里ρ_0，E_0和P_0分别是物质的初始密度，初始能量和压力。通常取$P_0=0$，在这种情况下，当$P_H(\rho)$变成α$P_H(\rho)$时，若取E_0为αE_0，$E_H(\rho)$也将变成为α$E_H(\rho)$。这表示当$P_H(\rho)$变成α$P_H(\rho)$时，$B(\rho)$变成了α$B(\rho)$。这样，我们获得了可调参数状态方程$P(E,\rho;\alpha)$为

$$P(E,\rho;\alpha)=A(\rho)E+\alpha B(\rho) \tag{10}$$

$B(\rho)$不但可由拟合$P_H-\gamma\rho E_H$得到，也可从拟合$P_c-\gamma\rho E_c$得到，因为从(1)能得到与(3)相似的关系式：

$$P=\gamma\rho E+P_c-\gamma\rho E_c \tag{11}$$

当P_c和E_c换成等熵线上的P_s和E_s时，等式(11)也成立，因此

$$B(\rho)=P_H-\gamma\rho E_H=P_c-\gamma\rho E_c=P_s-\gamma\rho E_s \tag{12}$$

这表示$B(\rho)$不依赖具体过程。由此，我们得到P_c，E_c，P_s和E_s随α变化的性质。当$P_H(\rho)$变成为α$P_H(\rho)$时，P_c变成了αP_c，E_c，P_s和E_s都相应地变成αE_c，αP_s和αE_s。在这里，根据P_c随α的变化性质，从(8)可以知道γ将不随α而变化。关于P_c和E_c随α的变化性质将用来确定可调参数状态方程$P(T,\rho;\alpha)$和$E(T,\rho;\alpha)$。

三、状态方程P(T,ρ;α)和E(T,ρ;α)

带温度的状态方程一般表示成：

$$P(T,\rho)=P_c(\rho)+P_n(T,\rho)+P_e(T,\rho) \tag{13}$$

$$E(T,\rho)=E_c(\rho)+E_n(T,\rho)+E_e(T,\rho) \tag{14}$$

其中

$$P_n(T,\rho)=\gamma\rho C_V T$$

$$E_n(T,\rho)=C_V T$$

$$P_e(T,\rho)=\frac{1}{4}\rho_0\beta_0(\rho/\rho_0)^{1/2}T^2$$

$$E_e(T,\rho)=\frac{1}{2}\beta_0(\rho_0/\rho)^{1/2}T^2$$

以上式中$P_n(T,\rho)$,$E_n(T,\rho)$分别是晶格振动的压力和能量。$P_e(T,\rho)$,$E_e(T,\rho)$分别是电子热压和热能。C_V是晶格比热，β_0是电子比热系数。

在P_H小于百万大气压的情况下，电子对状态方程的贡献可以略去，在这种情况下，由Hugoniot关系(9)不难得到Hugoniot温度为

$$T_H=\frac{E_c-E_0-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\rho_0}-\frac{1}{\rho}\right)P_c}{C_V\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\rho_0}-\frac{1}{\rho}\right)\gamma\rho-1\right]} \tag{15}$$

从上式可知，在E_0取为αE_0的情况下，当$P_H(\rho)$变成$\alpha P_H(\rho)$时，由于E_c和P_c也作相应的变化，T_H将自动地变化α倍。这表示在不考虑电子贡献的情况下，凡含有温度的项，将自动地随α而变化。考虑到这一情况，并利用P_c和E_c随α的变化性质，$P(T,\rho)$和$E(T,\rho)$的可调参数形式为

$$P(T,\rho;\alpha)=\alpha P_c+\gamma\rho C_V T \tag{16}$$

$$E(T,\rho;\alpha)=\alpha E_c+C_V T \tag{17}$$

如果将电子项的贡献考虑进去，由于千万大气压以下，电子的贡献总是不大的，因此我们可以认为在千万大气压以下范围内加入电子项后，它不改变P_c、E_c和T随α的变化性质。这样就有

$$P(T,\rho;\alpha)=\alpha P_c+\gamma\rho C_V T+\frac{1}{4\alpha}\rho_0\beta_0(\rho/\rho_0)^{1/2}T^2 \tag{18}$$

$$E(T,\rho;\alpha)=\alpha E_c+C_V T+\frac{1}{2\alpha}\beta_0(\rho_0/\rho)^{1/2}T^2 \tag{19}$$

这就是考虑电子项的贡献，适用于千万大气压以下的$P(T,\rho)$和$E(T,\rho)$的可调参数形式。

对于考虑电子贡献的情况，不难得到，$P(E,\rho)$的可调参数形式为

$$P(E,\rho;\alpha)=A(\rho)E+\alpha B(\rho)+[\alpha X(\rho)E+\alpha^2 Y(\rho)]^{1/2} \tag{20}$$

其中

$$A(\rho)=\frac{1}{2}\rho$$

$$B(\rho)=P_c-\frac{1}{2}\rho E_c-(\gamma-\frac{1}{2})\beta_0^{-1}\rho_0(\rho/\rho_0)^{3/2}C_V^2$$

$$X(\rho)=2\beta_0^{-1}(\rho/\rho_0)^{5/2}[(\gamma-\frac{1}{2})\rho_0C_V]^2$$

$$Y(\rho)=[(\gamma-\frac{1}{2})\rho_0\beta_0^{-1}(\rho/\rho_0)^{3/2}C_V]^2[C_V^2-2\beta_0(\rho_0/\rho)^{1/2}E_c]$$

这是从（18）和（19）两式中消去温度T以后得到的，还利用了P_c、E_c和β_0随α的变化性质。在实际使用中常将$A(\rho)$,$B(\rho)$、$X(\rho)$和$Y(\rho)$分别拟合成形式如（4）和（5）的多项式形式。

将可调参数状态方程（10）或（20），以及（16），（17）或（18），（19）应用于流体力学计算，将能十分方便地研究由于$P_H(\rho)$的不确定性所带来的影响。

徐锡申和张万箱两位同志审阅了本文，在此表示感谢。

AN EQUATION OF STATE WITH AN ADJUSTABLE PARAMETER

Chen Dongquan Li Maosheng

Abstract

An equation of state with an adjustable parameter, which describes the change of Hugoniot curves, is derived in this paper. This equation of state can be used to study its effect on the fluid dynamic calculation results.