

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2019.03.008

炸药爆轰热力学数据非线性拟合方法研究^{*}

杜明燃 张金龙 梁琳娜 黄亮亮 韩体飞 刘 锋
安徽理工大学化学工程学院(安徽淮南,232001)

[摘 要] 利用最小二乘法拟合得到炸药爆轰产物热力学数据的非线性拟合方程。为了验证此方程的准确性,分别采用 Kast 平均热容法和非线性拟合法计算物质的焓变($H^T - H^{298}$),并与理论值比较。结果显示:非线性拟合法计算值最大误差为 0.5%;Kast 平均热容法的计算最小误差为 3.1%,最大误差为 12.5%。为实现爆轰参数的编程计算和验证非线性拟合法计算爆轰参数的可行性,根据前期研究成果,选取 BKW 状态方程作为爆轰产物的状态方程,利用最小自由能原理和 Hugoniot 关系,建立求解数学模型,分别结合 Kast 平均热容法和非线性拟合法,计算密度为 1.80 g/cm³ 的 RDX 和密度为 1.14 g/cm³ 的硝基甲烷的爆轰参数和爆轰产物组成,计算过程由自编程序完成。计算结果显示,非线性拟合法比 Kast 平均热容法计算的爆轰参数值更接近实验值;非线性拟合法计算 RDX 的爆温、爆压和爆速与实验值的误差分别为 3.3%、0.4% 和 0.3%。

[关键词] 爆炸;非线性拟合;数值模拟;爆轰参数;热力学性质

[分类号] TJ51;O381;O642

Nonlinear Fitting Method of Thermodynamic Data of Detonation Products and Its Application

DU Mingran, ZHANG Jinlong, LIANG Linna, HUANG Liangliang, HAN Tifei, LIU Feng
School of Chemical Engineering, Anhui University of Science and Technology (Anhui Huainan, 232001)

[ABSTRACT] Least squares method was used to establish nonlinear fitting equations about thermodynamic data of detonation products. In order to verify the accuracy of these equations, Kast average heat capacity and nonlinear fitting equations were applied to calculate the enthalpy change ($H^T - H^{298}$). Compared with the theoretical value, Results show that the maximum error of nonlinear fitting equations is 0.5%, the minimum and the maximum error of Kast average heat capacity are 3.1% and 12.5%, respectively. In order to accomplish the programming calculation of detonation parameters and verify the feasibility of nonlinear fitting equations, BKW equation of state was selected as the equation of state for detonation products, the principle of minimum free energy and the equation of Hugoniot were utilized, Kast average heat capacity and nonlinear fitting equations were used to obtain detonation temperature, respectively. Detonation parameters of RDX and nitromethane were calculated by self-made program, where the density of RDX is 1.80 g/cm³, the density of nitromethane is 1.14 g/cm³. Calculation results show that detonation parameters calculated by the nonlinear fitting equations are more close to the experimental values than Kast average heat capacity. The error of detonation temperature, pressure and velocity of RDX for nonlinear fitting equations is 3.3%, 0.4% and 0.3%, respectively.

[KEYWORDS] explosions; nonlinear fitting; numerical simulation; detonation parameters; thermodynamic properties

引言

研究炸药性能时,爆轰参数一直都是备受关注的课题,它是预测炸药性能和理论设计炸药的基础^[1]。为计算炸药爆轰参数,国内外学者提出了BKW、JWL、LJD、JCZ3 和 WCA 等物理模型^[2-7],并发展了相关计算程序,对理论研究爆轰参数作出了重大贡献。研究发现,利用 BKW^[3]、WCA 和 LJD 等状态方程计算爆轰参数时,爆轰参数的求解过程是一个反复迭代的过程,求解爆温的热力学参数若满足一种函数关系,对设计程序自循环求解爆轰参数具

^{*} 收稿日期:2019-03-20
基金项目:国家自然科学基金(51134012,51604009);安徽省自然科学基金(1908085QA33)
第一作者:杜明燃(1987-),男,博士,讲师。主要研究方向为炸药性能及应用。E-mail:dumingranaust@163.com

有重要意义。

以往研究者在研究爆温时多采用 Kast 平均热容法^[8-9],这种计算方法基于平均热容建立,在精确计算中存在不足,导致爆轰参数计算得不准确。从理论角度分析,能量守恒法^[9]计算爆温具有较高的精度,然而,由于理论数据的缺失,能量守恒最终确定的爆轰温度一般根据理论数据估算得出;同时,在编程计算中发现,爆轰产物一般十余种,若不对热力学参数进行处理,能量守恒法需要反复迭代大量数据,程序繁琐^[10]且容易出错。因此,利用拟合的方法确定一种函数关系变得非常必要,在此基础上再建立求解爆轰参数的数学模型,对求解爆轰参数及爆炸物品的应用具有一定参考意义。

本文中,采用非线性拟合的方法处理爆轰产物热力学数据,比较非线性拟合法与 Kast 平均热容法计算物质的焓变($H^T - H^{298}$)与理论值的差别。在保证非线性拟合方程精度的基础上,依据此非线性拟合方程建立求解爆轰参数的数学模型,模型选取 BKW 状态方程作为爆轰产物的状态方程,利用最小自由能原理和 Hugoniot 关系,最终编程实现此过程。利用此程序,求解 RDX 和硝基甲烷(CH_3NO_2)的爆温、爆压、爆速和爆轰产物组成,验证此方法的可行性。

1 炸药爆轰温度的确定方法

1.1 Kast 平均热容法

计算炸药爆轰温度常用的方法是爆轰产物平均热容法^[8]。爆轰产物平均热容法是利用在一定温度范围内物质的平均热容计算爆轰温度,物质的平均热容由经验公式确定。爆轰产物平均热容法的计算公式如下:

$$Q_V = \bar{c}_V(T - T_0) = \bar{c}_V t; \tag{1}$$

$$\bar{c}_V = A + Bt. \tag{2}$$

式中: Q_V 为炸药定容爆热, kJ/mol ; \bar{c}_V 为爆轰产物的平均热容; T 为爆温, K ; $T_0 = 298.15 \text{ K}$; t 为温差; A 、 B 为平均热容的线性系数。

1.2 能量守恒法

能量守恒法^[9]利用物质能量守恒确定爆温,能量守恒法满足如下计算公式:

$$E_0 = E_{\text{gas}} + E_{\text{cond}}; \tag{3}$$

$$E_{\text{gas}} = \sum_{i \text{ gas}} n_i E_i^0 = \sum_{i \text{ gas}} n_i [\Delta E_{fi}^{298} + (E^T - E^{298})_i]; \tag{4}$$

$$E^T - E^{298} = (H^T - H^{298})_i + R(T - 298); \tag{5}$$

$$E_{\text{cond}} = \sum_{j \text{ cond}} n_j E_j^0. \tag{6}$$

式中: E_0 、 E_{cond} 、 E_{gas} 、 E_i^0 、 ΔE_{fi}^{298} 、 E_j^0 、 $E^T - E^{298}$ 分别为炸药内能、固相产物内能、气相产物内能、第*i*种气相内能、第*i*种气相在 298 K 时的生成内能、第*j*种固相内能、物质在 298 K 至 T 时内能变化量, kJ/mol ; n_i 、 n_j 分别为第*i*种气体和第*j*种固态产物的物质的量, mol ; R 为热力学常数。

1.3 非线性拟合法

能量守恒法具有严格的理论依据,但能量守恒法与 Kast 平均热容法相比也具有一个重要缺陷:理论数据不足,导致部分计算只能停留在估算阶段,给爆温的确定带来误差,导致计算其他爆轰参数也出现误差。因此,依据能量守恒法建立模拟物质的热力学关系的方程变得十分必要。依据式(4)、式(5)和式(6),可以得出以下假设公式:

$$\sum_{i \text{ gas}} n_i \left[\Delta E_{fi}^{298.15} + (H^T - H^{298.15})_i + \frac{R(T - 298.15)}{1000} \right] = \sum_{i \text{ gas}} n_i \left[\Delta E_{fi}^{298.15} + (A_1 T^3 + A_2 T^2 + A_3 T + A_4)_i + \frac{R(T - 298.15)}{1000} \right]; \tag{7}$$

$$\sum_{j \text{ cond}} n_j [\Delta E_{fj}^{298.15} + (H^T - H^{298.15})_j] = \sum_{j \text{ cond}} n_j [\Delta E_{fj}^{298.15} + (A_1 T^3 + A_2 T^2 + A_3 T + A_4)_j]. \tag{8}$$

式中: A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_4 为待拟合系数,可以根据最小二乘法编程计算得到,编程依据热化学参数可由文献^[11]获得。

式(7)、式(8)确定后,可以依据式(3)建立确定爆温的能量守恒公式。表 1 给出了爆轰产物对应系数的拟合结果,爆轰产物中的碳单质视为金刚石^[12-18]。表 1 适应范围为 298 ~ 5 000 K。为比较线性拟合法与平均热容法计算方法的准确度,分别利用 Kast 平均热容法和非线性拟合法计算 CO_2 、 H_2O 和 N_2 的焓变($H^T - H^{298}$),共 7 组数据。表 2 列出两种方法计算所得的 3 种主要产物的焓变($H^T - H^{298}$)与理论值^[11]。

表 2 显示,对于 CO_2 、 H_2O 和 N_2 ,Kast 平均热容法的计算误差远远大于本工作所采用的非线性拟合法。表 2 中,非线性拟合法的最大误差为 0.5%;Kast 平均热容法的计算最小误差为 3.1%,最大误差为 12.5%。

2 求解爆轰参数过程

2.1 BKW 状态方程

BKW 状态方程^[10]最初是由 Becker 提出的,后来经过 Kistiakowsky 和 Wilson 等的修正,最后确定

表 1 式(7)和式(8)系数的拟合值
Tab. 1 Fitting values of coefficient for Eq-7 and Eq-8

爆轰产物	A_1	A_2	A_3	A_4
CO ₂	$-5.206\ 0\times10^{-7}$	$5.811\ 1\times10^{-3}$	43.170 4	-14 428.998 0
H ₂ O	$-5.569\ 7\times10^{-7}$	$6.935\ 3\times10^{-3}$	39.537 6	-9 654.207 9
N ₂	$-2.172\ 0\times10^{-7}$	$2.449\ 2\times10^{-3}$	28.472 0	-8 981.807 9
CH ₄	$-6.206\ 4\times10^{-6}$	$3.867\ 3\times10^{-2}$	12.781 3	-7 086.315 7
CO	$-2.477\ 4\times10^{-7}$	$2.646\ 6\times10^{-3}$	28.484 8	-8 969.708 6
NO	$-5.478\ 1\times10^{-7}$	$4.019\ 3\times10^{-3}$	27.345 7	-8 543.594 6
H ₂	$-1.231\ 6\times10^{-7}$	$2.362\ 6\times10^{-3}$	26.205 0	7 855.541 3
O ₂	0	$9.233\ 7\times10^{-4}$	34.096 8	-12 586.660 0
NH ₃	0	$7.715\ 8\times10^{-3}$	40.586 6	-14 425.737 6
C(金刚石)	$-6.872\ 1\times10^{-6}$	$2.399\ 2\times10^{-2}$	-5.551 6	-310.766 9

表 2 焓变(H^T-H^{298})的计算与理论比较
Tab. 2 Calculation results and theoretical values of (H^T-H^{298}) kJ/mol

T/K	CO ₂			H ₂ O			N ₂		
	Kast	非线性 拟合法	理论值	Kast	非线性 拟合法	理论值	Kast	非线性 拟合法	理论值
2000	100.208	90.989	91.443	80.728	72.763	72.789	63.197	56.022	56.137
2200	111.298	103.130	103.566	92.759	83.119	83.151	70.345	63.198	63.361
2400	122.580	115.452	115.783	105.510	93.716	93.739	77.644	70.456	70.640
2500	128.295	121.680	121.921	112.153	99.093	99.107	81.350	74.112	74.296
2600	134.058	127.943	128.077	118.984	104.520	104.519	85.094	77.785	77.963
2800	145.729	140.571	140.437	133.170	115.481	115.463	92.694	85.517	85.323
3000	157.594	153.328	152.856	148.080	126.560	126.548	100.440	92.613	92.715

为以下形式:

$$\frac{pV}{RT}=\sigma(X)=1+Xe^{\beta X}。$$
 (9)

式中: p 为爆轰压力,Pa; β 为常数; $X=\kappa\sum x_ik_i/V(T+\theta)^\alpha$; V 为爆轰气体摩尔体积, κ 、 α 、 θ 为经验常数, k_i 为第 i 种物质的余容, x_i 为这种物质的摩尔分数。

2.2 求解爆轰参数的数学模型及模拟算法

利用最小自由能原理建立非线性方程组。根据质量守恒和物质自由能公式,再运用拉格朗日乘数法把条件极值转化为非条件极值,可以得出与爆轰产物系统具有相同极值条件的公式:

$$G(n,\lambda_k)=\sum_{i=1}^m(\frac{g_i^0}{RT}+\ln p+\ln \frac{n_{ig}}{n_g})n_{ig}+\sum_{j=1}^n\frac{g_j^0}{RT}n_{js}+\sum_{k=1}^l\lambda_k(N_k-\sum_{i=1}^ma_{ik}n_{ig}-\sum_{j=1}^na_{jk}n_{js})。$$
 (10)

式中: G 、 g 、 g^0 分别为爆轰体系自由能、物质自由能和标准状况下自由能,kJ/mol; N_k 为 1 kg 爆炸产物含有第 k 种元素的物质的量; λ 为拉格朗日因子; k 为第 k 种元素序号; λ_k 为第 k 种元素的拉格朗日因子; i 为第 i 种气体产物序号; j 为第 j 种固体产物序

号; a_{ik} 为每摩尔第 i 种气相组分含有 k 元素的物质的量, mol; a_{jk} 为每摩尔第 j 种凝聚相组分含有 k 元素的物质的量, mol; n_g 为气体产物总物质的量; n_{ig} 为第 i 种气体的物质的量; n_{js} 为第 j 种固体的物质的量; l 为炸药所含元素的种类数; m 和 n 分别为气体和固体的种类。

式(10)对应极值条件的方程组为非线性方程组,为求解此方程组,根据本小组研究的牛顿迭代法求解非线性方程组的思路^[19],利用以下模型求解爆轰参数和爆轰产物组成。

首先,需要把 $\partial G(n,\lambda_k)/\partial n_{ig}$ 、 $\partial G(n,\lambda_k)/\partial n_{js}$ 和 $\partial G(n,\lambda_k)/\partial \lambda_k$ 看作是关于 n_{ig} 、 n_{js} 和 λ_k 的方程组,令

$$\boldsymbol{x}=(n_{1g},\cdots,n_{ig},\cdots,n_{mg},n_{1s},\cdots,n_{js},\cdots,n_{ns},\lambda_1,\cdots,\lambda_k,\cdots,\lambda_l)^T；$$
 (11)

$$f_i(n,\lambda_k)=\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{ig}},i=1,\cdots,m；$$
 (12)

$$f_{j+m}(n,\lambda_k)=\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{js}},j=1,\cdots,n；$$
 (13)

$$f_{k+m+n}(n,\lambda_k)=\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial \lambda_k},k=1,\cdots,l;$$
$$F=[\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{1g}},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{ig}},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{mg}},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{1s}},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{js}},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial n_{ns}},\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial \lambda_1},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial \lambda_l},\cdots,\frac{\partial G(n,\lambda_k)}{\partial \lambda_l}]^T;$$

(14)

(15)

$$F'(x)=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_1(x)}{\partial n_{1g}}&\cdots&\frac{\partial f_1(x)}{\partial n_{mg}}&\frac{\partial f_1(x)}{\partial n_{1s}}&\cdots&\frac{\partial f_1(x)}{\partial n_{ns}}&\frac{\partial f_1(x)}{\partial \lambda_1}&\cdots&\frac{\partial f_1(x)}{\partial \lambda_l}\\\frac{\partial f_2(x)}{\partial n_{1g}}&\cdots&\frac{\partial f_2(x)}{\partial n_{mg}}&\frac{\partial f_2(x)}{\partial n_{1s}}&\cdots&\frac{\partial f_2(x)}{\partial n_{ns}}&\frac{\partial f_2(x)}{\partial \lambda_1}&\cdots&\frac{\partial f_2(x)}{\partial \lambda_l}\\\vdots&&\vdots&\vdots&&\vdots&\vdots&&\vdots\\\frac{\partial f_{m+n+l}(x)}{\partial n_{1g}}&\cdots&\frac{\partial f_{m+n+l}(x)}{\partial n_{mg}}&\frac{\partial f_{m+n+l}(x)}{\partial n_{1s}}&\cdots&\frac{\partial f_{m+n+l}(x)}{\partial n_{ns}}&\frac{\partial f_{m+n+l}(x)}{\partial \lambda_1}&\cdots&\frac{\partial f_{m+n+l}(x)}{\partial \lambda_l}\end{bmatrix}。$$

(16)

把式(11)、式(12)、式(13)和式(14)代入式(16),可求得 $F'(x)$,进一步求得 $F'(x)^{-1}$,并记解为 $x^{(k+1)}$,对应牛顿迭代法公式: $x^{(k+1)}=x^k-F'(x^k)^{-1}F(x^k)$,求解上述公式要先假设一组爆温 T' 和爆压 p' ,此温度和压力可以根据一般经验计算值确定,再取经验计算所得爆炸产物组分量并作一定变换后,作为初始近似根 x^1 ,设置计算精度 $\varepsilon=0.000\ 001$,即 x^k 和 $x^{(k+1)}$ 对应元素的误差绝对值。

炸药爆轰气相产物分子体系必须满足 Hugoniot 关系^[10,20]:

$$E_1-E_0=\frac{(p_H+p_0)(V_0-V_H)}{2}。$$

(17)

爆速表达式为

$$D=V_0(\frac{p_H-p_0}{V_0-V_H})^{\frac{1}{2}}。$$

(18)

根据 BKW 状态方程、以上求解模型和本文中设计的爆轰产物非线性拟合方程,计算爆温 T 和爆压 p ,与假设爆温 T' 和爆压 p' 比较,反复修正,直到满足假设值与计算所得值相同。

以上求解爆轰参数的数学模型利用自编程序实现,计算过程详见本课题组前期研究工作^[19],其程序算法框图见图1。

3 爆轰参数计算结果与分析

利用非线性拟合方法求得密度为 1.80 g/cm³ 的 RDX 和密度为 1.14 g/cm³ 的 CH₃NO₂ 的爆轰产物组成,如表3所示,爆轰参数如表4所示。

计算过程 BKW 状态方程参数^[10]α取0.5,β取0.16,θ取400,κ取10.91。碳的单质生成物为金刚石^[12-18]。RDX 和 CH₃NO₂ 的生成热分别是 -70.66

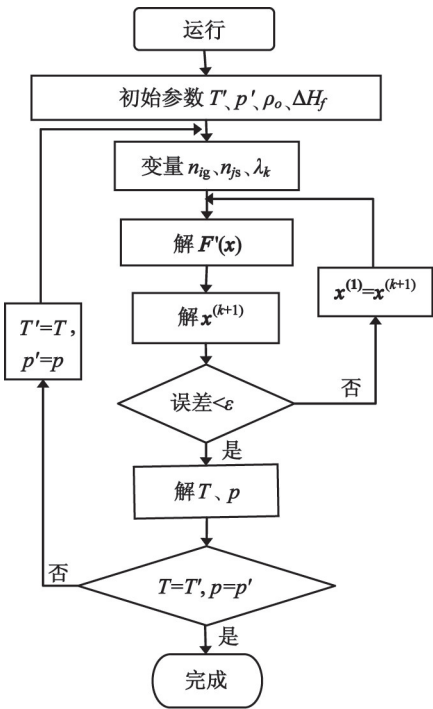


图1 计算模拟程序图

Fig.1 Computer simulation program chart

kJ/mol 和 113.09 kJ/mol。

为对比本文中计算方法的精确性,表4还分别给出爆轰参数的实验结果和依据 Kast 计算爆温所得结果。

表4显示,采用非线性拟合法作为计算爆温的方法计算爆轰参数,比使用 Kast 平均热容法计算的数值更加接近实验值。

对于 RDX,非线性拟合法计算爆温、爆压和爆速与实验值的误差分别为 3.3%、0.4% 和 0.3%;Kast 平均热容法计算爆温、爆压和爆速与实验值的误差分别为 6.4%、3.4% 和 2.0%。

表 3 每摩尔炸药 CJ 点爆轰产物组成
Tab.3 Detonation products of explosives at CJ point

炸药	mol									
	CO ₂	CO	N ₂	O ₂	H ₂	H ₂ O	NH ₃	NO	CH ₄	C
RDX	1.316	0.368	2.999	9.488 × 10 ⁻⁵	1.179 × 10 ⁻⁴	2.999	4.260 × 10 ⁻⁸	5.004 × 10 ⁻⁶	1.338 × 10 ⁻⁶	1.316
CH ₃ NO ₂	0.029	0.442	0.499	2.298 × 10 ⁻⁶	4.735 × 10 ⁻⁵	1.499	1.665 × 10 ⁻⁸	6.953 × 10 ⁻⁷	1.316 × 10 ⁻⁶	0.529

表 4 RDX 和 CH₃NO₂ 的爆温、爆压和爆速
Tab.4 Detonation temperature, pressure and velocity of RDX and CH₃NO₂

	RDX($\rho = 1.80 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$)			CH ₃ NO ₂ ($\rho = 1.14 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$)		
	<i>T</i> /K	<i>p</i> /GPa	<i>D</i> /($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	<i>T</i> /K	<i>p</i> /GPa	<i>D</i> /($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)
实验值 ^[10,20-21]	3 700	34.70	8 750	3 700		
非线性拟合法	3 822	34.57	8 724	3 508	17.45	7 235
Kast 平均热容法	3 935	35.87	8 928	3 252	17.32	7 209

对于 CH₃NO₂, 非线性拟合计算的爆温值也比 Kast 平均热容法更接近实验值。

4 结 论

1) 采用最小二乘法得到爆轰产物热力学参数的非线性拟合方程, 与 Kast 平均热容法比较, 非线性拟合法在计算物质焓变($H^T - H^{298}$)时显示出更好的计算精确性。

2) 在此基础上, 利用自编程序实现爆轰产物组成、爆压、爆温和爆速的计算。密度为 1.80 g/cm³ 的 RDX 和密度为 1.14 g/cm³ 的 CH₃NO₂ 的爆轰参数计算结果显示, 采取非线性拟合法计算的爆轰参数比采用 Kast 平均热容法计算的结果更加接近实验值, 显示出更好的应用前景, 对炸药爆轰性能预测具有一定参考价值。

参 考 文 献

[1] 汪旭光. 乳化炸药[M]. 2 版. 北京: 冶金工业出版社, 2008.
WANG X G. Emulsion explosives[M]. 2nd ed. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2008.

[2] CHIRAT R, PITTION-ROSSILLON G. A new equation of state for detonation products [J]. Journal of Chemical Physics, 1981, 74(8): 4634-4645.

[3] MADER C L. Numerical modeling of detonation [M]. Berkeley, Los Angeles: University of California Press, 1979.

[4] THIEL M V, REE F H. Nonequilibrium effects of slow diffusion controlled reactions on the properties of explo-

sives [C]//Ninth Symposium (International) on Detonation. Portland, Oregon, 1991: 743-750.

[5] WU X. BKW equation of state for detonation products [C]//Eighth Symposium (International) on Detonation. Portland, Oregon, 1985: 438.

[6] 赵艳红, 刘海风, 张弓木. PETN 炸药爆轰产物状态方程的理论研究[J]. 高压物理学报, 2009, 23(2): 143-149.
ZHAO Y H, LIU H F, ZHANG G M. Equation of state of detonation products for PETN explosive [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2009, 23(2): 143-149.

[7] 赵铮, 陶钢, 杜长星. 爆轰产物 JWL 状态方程应用研究[J]. 高压物理学报, 2009, 23(4): 277-282.
ZHAO Z, TAO G, DU C X. Application research on JWL equation of state of detonation products [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2009, 23(4): 277-282.

[8] 王军, 景梅, 张晓玉, 等. 硝基二唑炸药爆炸参数的经验计算(Ⅱ)[J]. 含能材料, 2013, 21(5): 609-611.
WANG J, JING M, ZHANG X Y, et al. Empirical calculation of the explosion parameters of nitrodiazole explosives(Ⅱ) [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2013, 21(5): 609-611.

[9] 欧育湘. 炸药分析[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1994.
OU Y X. Explosive analysis [M]. Beijing: Ordnance Industry Press, 1994.

[10] 李德华, 程新路, 杨向东, 等. PETN、RDX 和 HMX 炸药爆轰参数的数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2005, 25(4): 325-328.
LI D H, CHENG X L, YANG X D, et al. Numerical simulation of detonation parameters for PETN, RDX and HMX explosives [J]. Explosion and Shock Waves, 2005, 25(4): 325-328.

[11] BARIN I. Thermochemical data of pure substances [M]. 3rd ed. New York: VCR, 1995.

[12] 赵艳红, 刘海风, 张弓木. 基于统计物理的爆轰产物物态方程研究 [J]. 物理学报, 2007, 56 (8): 4791-4797.
ZHAO Y H, LIU H F, ZHANG G M. Equation of state of detonation products based on statistical mechanical theory [J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56 (8): 4791-4797.

[13] FRIED L E, HOWARD W M. Explicit Gibbs free energy equation of state applied to the carbon phase diagram [J]. Physical Review B, 2000, 61 (13): 8734-8743.

[14] 龙新平, 何碧, 蒋小华, 等. 论 VLW 状态方程 [J]. 高压物理学报, 2003, 17 (4): 247-254.
LONG X P, HE B, JIANG X H, et al. Discussions on the VLW equation of state [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2003, 17 (4): 247-254.

[15] 吴雄. 新型爆轰产物物态方程 [J]. 高压物理学报, 1991, 5 (2): 98-103.
WU X. A new equation of state for detonation products [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1991, 5 (2): 98-103.

[16] 魏贤凤, 龙新平, 韩勇. VLWR 程序计算 CHNO 炸药爆轰性能碳相态的选择 [J]. 含能材料, 2013, 21 (5): 604-608.
WEI X F, LONG X P, HAN Y. Selection of carbon phase in calculation of detonation performance by VLWR program for CHNO explosives [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2013, 21 (5): 604-608.

[17] GOKIEN N A, CHANG E T, POSTON T M. Determination of graphite/liquid/vapor triple point by laser heating [J]. High Temperature Science, 1976, 8: 89-91.

[18] TOGAYA M, SUGIGAMA S, MIZUBARA E. Melting of graphite [C] // High Pressure Science and Technology. New York: AIP Press, 1993.

[19] 杜明燃, 汪旭光, 郭子如, 等. 爆轰产物组成和爆轰参数计算方法的理论研究 [J]. 爆炸与冲击, 2015, 35 (4): 449-453.
DU M R, WANG X G, GUO Z R, et al. Theoretical studies for calculating the detonation products and properties of explosives [J]. Explosion and Shock Waves, 2015, 35 (4): 449-453.

[20] 欧育湘. 炸药学 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2006.
OU Y X. Explosive [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 2006.

[21] 张立. 爆破器材性能与爆炸效应测试 [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2006.
ZHANG L. Blasting equipment performance and explosion effect test [M]. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2006.

(上接第 37 页)

air flames in a duct using large eddy simulation [J]. Process Safety and Environmental Protection, 2018, 120: 45-46.

[12] XIAO H H, WANG Q S, HE X C, et al. Experimental study on the behaviors and shape changes of premixed hydrogen-air flames propagating in horizontal duct [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2011, 36 (10): 6325-6336.

[13] MA C, WANG Z R, CUI Y Y, et al. Effect of ignition position on methane explosion in spherical vessel with a pipe [J]. Procedia Engineering, 2018, 211: 538-545.

[14] 曹勇, 郭进, 胡坤伦, 等. 点火位置对氢气-空气预混气体泄爆过程的影响 [J]. 爆炸与冲击, 2016, 36 (6): 847-852.
CAO Y, GUO J, HU K L, et al. Effect of ignition locations on vented explosion of premixed hydrogen-air mixtures [J]. Explosion and Shock Waves, 2016, 36 (6): 847-852.

[15] 王志荣, 蒋军成, 郑杨艳. 连通容器气体爆炸流场的 CFD 模拟 [J]. 化工学报, 2007, 58 (4): 854-861.
WANG Z R, JIANG J C, ZHENG Y Y. CFD simulation on gas explosion field in linked vessels [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 2007, 58 (4): 854-861.