

高压物理学报

混合物Hugoniot状态方程计算模型研究

杨刚 赵正洋 刘勋 胡家念 贾永胜

Hugoniot Equation of State Model for Mixtures

YANG Gang, ZHAO Zhengyang, LIU Xun, HU Jianian, JIA Yongsheng

引用本文:

杨刚, 赵正洋, 刘勋, 等. 混合物Hugoniot状态方程计算模型研究[J]. 高压物理学报, 2025, 39(11):110110. DOI: 10.11858/gywlb.20251120

YANG Gang, ZHAO Zhengyang, LIU Xun, et al. Hugoniot Equation of State Model for Mixtures[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2025, 39(11):110110. DOI: 10.11858/gywlb.20251120

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11858/gywlb.20251120>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

高温高压条件下聚合物的状态方程和相变

Polymers at High Pressures and High Temperatures: Advances in Equation of State and Phase Transition Investigations
高压物理学报. 2025, 39(2): 021301 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20240863>

C₃N₄热化学状态方程的研究及应用初探

Study and Preliminary Application of the Thermochemical Equation of State of C₃N₄
高压物理学报. 2025, 39(5): 052101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20251006>

水下爆炸气泡脉动周期的简便计算方法

Simple Method for the Calculation of Bubble Pulsation Period in Underwater Explosion
高压物理学报. 2022, 36(1): 015101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20210782>

自动校准的多相状态方程建模方法及其在锡中的应用

Automated Calibrated Modeling Method of Multiphase Equations of States: Applied to Tin
高压物理学报. 2023, 37(2): 021301 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20220709>

孔隙率对铌硅粉末混合物冲击反应的影响

Influence of Initial Porosity on Shock Chemical Reaction of Niobium-Silicon Powder Mixture
高压物理学报. 2020, 34(3): 034101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190851>

用于描述W-Cu粉末混合物冲击压缩行为的 $p-\alpha$ 与 $p-\lambda$ 模型适用性

$p-\alpha$ and $p-\lambda$ Model for Describing Shock Compressive Behavior of W-Cu Powder Mixture
高压物理学报. 2020, 34(1): 012101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190784>

DOI: 10.11858/gywlxb.20251120

混合物 Hugoniot 状态方程计算模型研究

杨 刚^{1,2}, 赵正洋¹, 刘 勋³, 胡家念^{1,2}, 贾永胜^{1,2}

(1. 江汉大学精细爆破全国重点实验室, 湖北 武汉 430056;

2. 江汉大学爆破工程湖北省重点实验室, 湖北 武汉 430056;

3. 武汉理工大学物理与力学学院, 湖北 武汉 430070)

摘要:高通量计算可显著提升材料的设计效率, 推动冲击荷载下材料物性的前沿研究。混合物 Hugoniot 状态方程计算模型作为材料动力学数值模拟和材料高通量计算的关键, 一直是研究热点。分别对体积可加模型和等温平均模型预估混合物 Hugoniot 状态方程的准确性进行了评估: 前者基于热力学平衡条件, 在计算混合物状态方程时并未考虑组分冲击压缩导致的温差效应; 后者则利用 0 K 等温线, 通过 Mie-Grüneisen 状态方程反推混合物 Hugoniot 冲击绝热线, 等温平均模型可消除混合物中各组分因冲击压缩导致的温差效应。利用体积可加模型和等温平均模型, 分别对二元合金、三元合金、二元混合物的 Hugoniot 状态方程进行预估, 并与实测数据进行比对。计算结果表明: 等温平均模型预估的混合物 Hugoniot 状态方程与实测数据的偏离度一般优于 10%, 准确度较体积可加模型更高; 同时, 两种模型都存在低压区预估准确性略差的现象。

关键词: 混合物; Hugoniot; 状态方程; 体积可加原则; 等温平均

中图分类号: O521.2

文献标志码: A

动态加载下的材料物性研究是科学与工业领域关注的焦点, 也是国防安全、先进制造等重点领域取得进一步突破的重要基石。Hugoniot 状态方程 (equation of state, EOS) 是描述高温、高压、高应变率等极端条件下物质密度、压强、温度和内能等状态变量之间关系的函数表达式, 它为研究物质的动态响应和物性提供了关键的理论基础^[1]。在实际应用中, 混合物和合金的使用场景远远超过单质材料, 混合物 Hugoniot 状态方程的用途也更为广泛: 在材料科学领域, 混合物 Hugoniot 状态方程用于研究新型复合材料在冲击载荷下的性能, 为材料的设计和优化提供理论依据^[2-4]; 在航空航天领域, 混合物 Hugoniot 状态方程可用于飞行器防护材料研究, 预测合金或复合材料在高速撞击下的响应, 从而迅速筛选出优异的防护材料^[5-6]。

传统材料的研发过程往往耗时费力, 需要通过大量实验筛选材料和优化性能。随着人工智能的迅猛发展, 机器学习和高通量技术正以前所未有的速度赋能各个领域^[7-8]。高通量计算作为一种先进的计算方法, 借助大规模并行计算技术, 能够在短时间内处理海量数据和执行大量计算任务, 显著提升了材料设计的效率, 推动了动载下材料物性的前沿研究^[9]。高通量计算的核心特征为高效性、可行性和预测性。混合物 Hugoniot 状态方程预估模型可作为材料物性高通量计算的重要组成部分。

混合物 Hugoniot 状态方程预估模型根据合理假设和理论推导各组分 Hugoniot 状态方程而构建。目前, 国内外对混合物 Hugoniot 状态方程预估模型的研究大多假设冲击加载过程中各组分之间处于等温等压状态, 然后采用体积可加性原理进行计算, 即混合物的体积和内能等于各组分的体积和内能之和。Jordan 等^[10]提出了一种用于复合材料冲击状态方程的混合模型, 其核心思想仍是体积可加性原

* 收稿日期: 2025-07-01; 修回日期: 2025-08-14

基金项目: 江汉大学基金 (PBSKL2023QD02, 2023JCYJ04)

作者简介: 杨 刚 (1989—), 男, 博士, 讲师, 主要从事冲击动力学研究. E-mail: g.yang@jhun.edu.cn

通信作者: 贾永胜 (1970—), 男, 博士, 教授级高级工程师, 从事爆炸力学研究. E-mail: jason03566@163.com

理, 该模型对状态方程的预测与实验数据的相对偏差在 5%~15% 之间。Kinelovskii 等^[11]、Bogachev^[12] 和 Meyers^[13] 利用等温线推导冲击 Hugoniot 绝热线, 预估的合金物质状态方程与实测数据匹配较好。王学容等^[14] 采用体积可加性原理, 基于混合物中各组分的温度和压强平衡条件, 利用压强-密度迭代的方法计算混合物状态方程。林华令等^[15] 采用热动力学有限元数值方法研究了混合物的冲击压缩过程, 获取的混合物状态方程与体积可加模型计算结果一致。周洪强等^[16] 提出了一种嵌入算法, 将待解的混合物状态方程和易解的混合物状态方程线性组合, 嵌入方程组的解由易解的混合物状态方程的解连续地变化为待解的混合物状态方程的解, 以铅锡合金为例验证了此算法的有效性。

综上所述, 目前混合物或合金 Hugoniot 状态方程预估常采用体积可加性原理或等温线推演法, 缺乏对两种预估模型准确性的对比评估。因此, 迫切需要对体积可加模型和等温平均模型开展深入和详细的对比研究, 以期得到一种可广泛使用的混合物 Hugoniot 状态方程预估模型。

1 混合状态方程计算模型

1.1 平面冲击波关系式

如图 1 所示, 介质中存在一右行冲击波, 冲击波速度为 D , 波阵面两侧的压强 p 、粒子速度 u 、内能 E 和密度 ρ 等物理量会发生突变。将压强、粒子速度、内能和密度的初始值分别定义为 p_0 、 u_0 、 E_0 和 ρ_0 , 根据质量守恒、动量守恒、能量守恒三大定律, 可以得到波阵面前后介质密度、压强和内能的变化关系^[1]

$$\rho_0(D - u_0) = \rho(D - u) \quad (1)$$

$$p - p_0 = \rho_0(D - u_0)(u - u_0) \quad (2)$$

$$pu - p_0u_0 = \rho_0(D - u_0) \left[\left(E + \frac{u^2}{2} \right) - \left(E_0 + \frac{u_0^2}{2} \right) \right] \quad (3)$$

由上述关系式可导出以下 3 个常用关系式

$$D - u_0 = V_0 \sqrt{\frac{p - p_0}{V_0 - V}} \quad (4)$$

$$u - u_0 = (V_0 - V) \sqrt{\frac{p - p_0}{V_0 - V}} \quad (5)$$

$$E - E_0 = \frac{1}{2} \rho_0(p + p_0)(V_0 - V) \quad (6)$$

式中: V_0 为初始状态下的比容, V 为混合物在冲击 Hugoniot 状态下的比容。式 (6) 为 Hugoniot 状态方程, 由它确定的 p - V 线称为冲击压缩线, 也称 Hugoniot 曲线或冲击绝热线。式 (4)~式 (6) 共有 5 个未知物理量, 相比于 p 、 E 和 ρ , D 和 u 更易测量。同时, 在比较广泛的冲击压力范围内, D 和 u 呈线性关系

$$D = C_0 + \lambda u \quad (7)$$

式中: C_0 和 λ 为 Hugoniot 参数。代入式 (6) 可得 Hugoniot 曲线

$$p = \rho \rho_0 C_0 \frac{\rho - \rho_0}{[\rho - \lambda(\rho - \rho_0)]^2} \quad (8)$$

1.2 体积可加模型 (Mod A)

体积可加模型的基本假设是理想混合物, 即冲击加载下混合物各组分之间不会发生化学反应, 冲

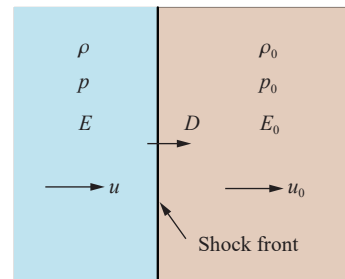


图 1 冲击波阵面前后介质物性参数的突变

Fig. 1 Sudden change in the physical parameters of the medium on either side of the shock front

击波后的各组分之间处于压力和温度平衡态, 此时混合物的体积等于各组分体积之和, 总能量等于各组分能量之和^[1,17]。假定混合物由 n 种组分构成, 第 i 组分的质量分数为 $x_i (i=1, 2, 3, \dots, n)$, 可得

$$V_0 = \sum_{i=1}^n x_i V_{0,i} \quad (9)$$

$$E = \sum_{i=1}^n x_i E_i \quad (10)$$

若混合物在冲击压缩下的压力为 p_A , 由于各组分之间处于热力学平衡态, 那么第 i 组分的压力 $p_{A,i}$ 与 p_A 一致。图 2 为混合物 p - V 线与各组分 p - V 线之间的关系, V 等于各组分比容的叠加

$$V = \sum_{i=1}^n x_i V_i \quad (11)$$

式中: $V_{0,i}$ 、 V_i 和 $V_{0,j}$ 、 V_j 分别为第 i 和第 j 组分在初始状态、冲击 Hugoniot 状态下的比容。根据式 (5), 混合物各组分粒子速度 u_i 满足

$$u_i^2 = p_A (V_{0,i} - V_i) \quad (12)$$

混合物粒子速度满足

$$u^2 = \sum_{i=1}^n x_i u_i^2 \quad (13)$$

根据式 (4), 各组分冲击波速度 D_i 满足以下关系式

$$V_{0,i}^2 \frac{p_A}{D_i^2} = V_{0,i} - V_i \quad (14)$$

混合物冲击波速度 D 满足以下关系式

$$\frac{V_0^2}{D^2} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i V_{0,i}^2}{D_i^2} \quad (15)$$

混合物第 i 组分的冲击波速度与粒子速度仍然满足线性关系式 (7)。根据式 (13) 和式 (15) 得到一系列混合物的 (D, u) 数据。可以认为, 混合物的冲击波速度与粒子速度仍满足线性关系, 利用最小二乘法可得混合物 D - u 的线性关系式。

1.3 等温平均模型 (Mod I)

冲击波在混合物中传播时, 不同组分之间的压力可迅速达到平衡态。但是, 不同组分之间的状态方程不同, 达到压力平衡时产生的内能不同, 从而导致不同组分之间的温度存在差异, 因此, 不能认为是严格的热力学平衡态。为解决温度的影响, 可通过计算组分之间的冷压线 (0 K 等温线) 消除不同组分之间的温差效应^[13]。根据 Mie-Grüneisen 状态方程, 可得 0 K 等温线与冲击 Hugoniot 绝热线之间的关系

$$p_H - p_{0K} = \frac{\gamma}{V} (E_H - E_{0K}) \quad (16)$$

式中: γ 为 Grüneisen 参数, p_H 和 p_{0K} 为相同比容下对应的冲击压力和冷压, E_H 和 E_{0K} 为冲击 Hugoniot 线和 0 K 等温线上相同比容对应的能量。对于每个 V , 都能找出一组 p_{0K} 、 E_{0K} 对应。沿 Hugoniot 冲击绝热线, 可得

$$\left(\frac{dp}{dV} \right)_H = \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_E + \left(\frac{\partial p}{\partial E} \right)_V \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_H \quad (17)$$

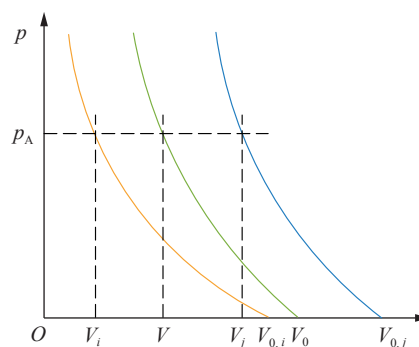


图 2 Mod A 的混合物 p - V 线与各组分 p - V 线
Fig. 2 p - V curves for mixture and its component based on Mod A

沿 0 K 等温线可得

$$\left(\frac{dp}{dV}\right)_{0K} = \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_E + \left(\frac{\partial p}{\partial E}\right)_V \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{0K} \quad (18)$$

式 (17) 与式 (18) 相减可得

$$\left(\frac{dp}{dV}\right)_H - \left(\frac{dp}{dV}\right)_{0K} = \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_V \left[\left(\frac{dE}{dV}\right)_H - \left(\frac{dE}{dV}\right)_{0K} \right] \quad (19)$$

Hugoniot 冲击绝热线还满足以下关系式

$$\left(\frac{dE}{dV}\right)_H = \frac{\gamma}{V} \quad (20)$$

$$\frac{\gamma}{V} = \frac{\gamma_0}{V_0} \quad (21)$$

0 K 等温线满足以下关系式

$$dE = -p_{0K} dV \quad (22)$$

$$\left(\frac{dE}{dV}\right)_{0K} = -p_{0K} \quad (23)$$

将式 (16)、式 (20)~式 (23) 代入式 (19), 即得 0 K 等温线与 Hugoniot 冲击绝热线的关系

$$\left(\frac{dp}{dV}\right)_{0K} + \frac{\gamma_0}{V_0} p_{0K} = \frac{\gamma_0}{2V_0} \left[\left(\frac{2V_0}{\gamma_0} + V - V_0\right) \left(\frac{dp}{dV}\right)_H + p_H \right] \quad (24)$$

利用数值积分求解式 (24), 可得每个组分的 0 K 等温线。再利用体积可加模型, 由各组分的 0 K 等温线计算获得混合物的 0 K 等温线。混合物的 Grüneisen 参数满足以下关系式

$$\frac{V_0}{\gamma_0} = \sum_{i=1}^n x_i \frac{V_{0,i}}{\gamma_{0,i}} \quad (25)$$

最后, 由混合物的 0 K 等温线反推混合物 Hugoniot 冲击绝热线, 便可以消除各组分中由于冲击压缩产生的温度效应

$$dp_H = \frac{\frac{2V_0}{\gamma_0} \left(dp_{0K} + \frac{\gamma_0}{V_0} p_{0K} dV \right) - p_H dV}{\frac{2V_0}{\gamma_0} + V - V_0} \quad (26)$$

2 算 例

为了评价体积可加模型 (Mod A) 和等温平均模型 (Mod I) 对混合物 Hugoniot 状态方程计算的准确性, 引用统计学中的偏离度 τ 和均方根 S_{RMSE} 作为评价参数

$$\tau = \frac{|p_{exp} - p_{cal}|}{p_{exp}} \quad (27)$$

$$S_{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (p_{cal} - p_{exp})^2} \quad (28)$$

式中: p_{cal} 为某一冲击压缩密度预估模型计算的冲击压力, p_{exp} 为同等冲击压缩密度下的实验测量数据。

利用 Mod A 和 Mod I 模型分别对钨铜烧结合金 (W 和 Cu 的质量分数分别为 76% 和 24%) 的 Hugoniot 状态方程状进行计算, 各组分物性参数列于表 1, 计算结果与实验数据的对比如图 3 所示。Mod A 的均方根 $S_{RMSE,A}$ 为 6.667, Mod I 的均方根 $S_{RMSE,I}$ 为 2.954, 明显小于 $S_{RMSE,A}$ 。由图 3(b) 可以看出, Mod A 的偏离度 τ_A 基本低于 20%, Mod I 的偏离度 τ_I 基本低于 15%。从偏离度的分布和模型计算的 S_{RMSE} 可以

得出, 等温平均模型的预估效果优于体积可加模型。两种模型的偏离度随着冲击压力的增加而逐渐减低, 表明两种模型对高压区的预估效果优于低压区。

表 1 钨铜烧结合金和黄铜组分的物性参数
Table 1 Physical parameters for tungsten-copper mixture and brass alloy

Material	$\rho_0/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	$C_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	λ	γ	Ref.
W	19.235	4.038	1.226	1.8	[18–19]
Cu	8.926	3.940	1.494	2.0	[18, 20]
Pb	11.345	2.042	1.469	2.8	[18]
Zn	7.139	3.039	1.542	2.1	[18]

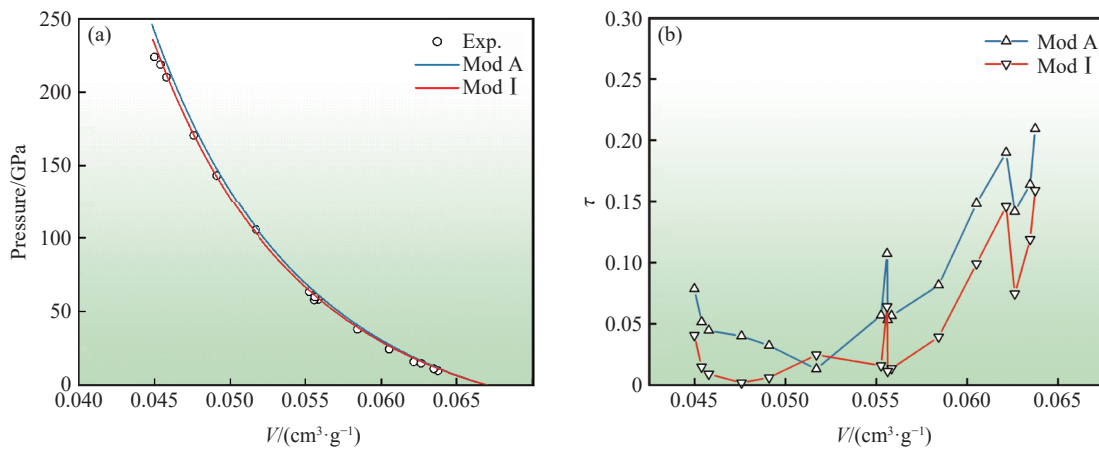


图 3 (a) Mod A 和 Mod I 预估钨铜烧结合金 Hugoniot 状态方程与实验数据的对比, (b) Mod A 和 Mod I 预估模型的偏离度
Fig. 3 (a) Comparison of the EOS of tungsten-copper alloy estimated by Mod A and Mod I with experimental data; (b) deviation degree of Mod A and Mod I

图 4 为黄铜(Cu、Zn、Pb 的质量分数分别为 61.5%、36.0% 和 2.5%) 的 Hugoniot 状态方程预估的计算结果与实验数据的对比。 $S_{RMSE, A}$ 为 10.761, $S_{RMSE, I}$ 为 4.099, $S_{RMSE, I}$ 明显小于 $S_{RMSE, A}$, τ_A 基本低于 15%, τ_I 基本低于 10%。从图 4 中偏离度的分布和模型预估的 S_{RMSE} 可以看出, 等温平均模型的计算效果优于体积可加模型。相比钨铜烧结合金, 体积可加模型和等温平均模型计算的黄铜状态方程的偏离度波动稍小, 两种模型对黄铜预估效果均优于钨铜烧结合金。

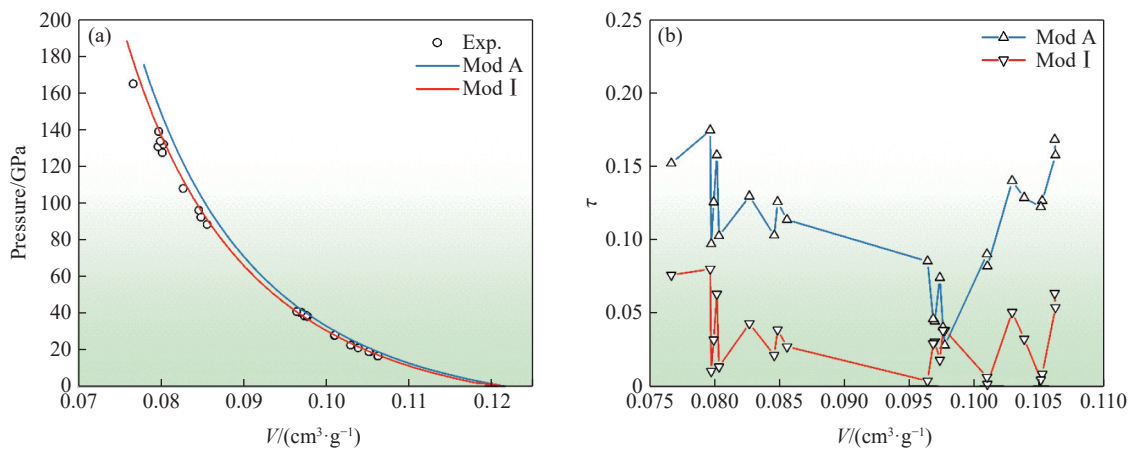


图 4 (a) Mod A 和 Mod I 预估黄铜 Hugoniot 状态方程与实验数据的对比, (b) Mod A 和 Mod I 预估模型的偏离度
Fig. 4 (a) Comparison of the EOS of brass estimated by Mod A and Mod I with experimental data; (b) deviation degree of Mod A and Mod I

此外,与合金组分性质截然不同的混合物——环氧树脂-方镁石混合物(环氧树脂和方镁石的质量分数分别为 60% 和 40%)的计算结果与实验数据的对比如图 5 和表 2 所示。 $S_{RMSE,A}$ 为 4.515, $S_{RMSE,I}$ 为 2.329, $S_{RMSE,I}$ 同样小于 $S_{RMSE,A}$ 。由图 5(b) 偏离度的分布和模型预估的 S_{RMSE} 可以看出, Mod I 的预估效果优于 Mod A。同时,偏离度随着冲击压力的增加迅速降低,说明两种模型对高压区的预估效果优于低压区。相比于钨铜烧结合金和黄铜,两种计算模型预估环氧树脂-方镁石混合物的效果略差,特别是低压区的预估数值与实测数据偏离较大。

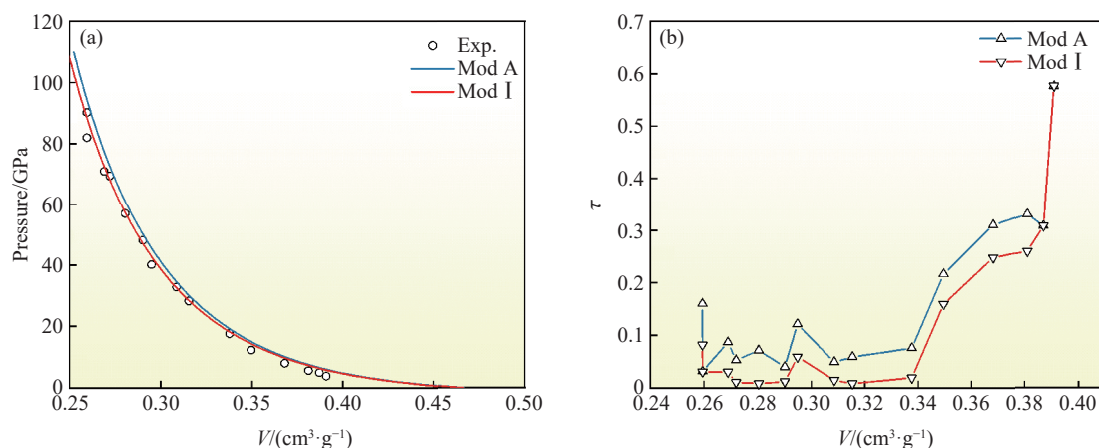


图 5 (a) Mod A 和 Mod I 预估的环氧树脂-方镁石混合物的 Hugoniot 状态方程与实验数据的对比, (b) Mod A 和 Mod I 预估模型的偏离度

Fig. 5 (a) Comparison of the EOS of epoxy-periclase mixture estimated by Mod A and Mod I with experimental data; (b) deviation degree of Mod A and Mod I

表 2 环氧树脂-方镁石和石蜡-方镁石混合物组分的物性参数

Table 2 Physical parameters for epoxy-periclase and paraffin-periclase mixture

Material	$\rho_0/(g \cdot cm^{-3})$	$C_0/(km \cdot s^{-1})$	λ	γ	Ref.
Epoxy	1.185	3.085	1.297	1.0	[21]
Periclase	3.584	6.602	1.367	1.4	[18]
Paraffin	0.917	3.106	1.471	1.9	[18–19]

石蜡-方镁石混合物(石蜡和方镁石的质量分数分别为 15.8% 和 84.2%)的计算结果与实验数据对比如图 6 所示。 $S_{RMSE,A}$ 为 6.573, $S_{RMSE,I}$ 仅为 0.936, $S_{RMSE,I}$ 明显小于 $S_{RMSE,A}$ 。从图 6(b) 可以看出, τ_I 基本

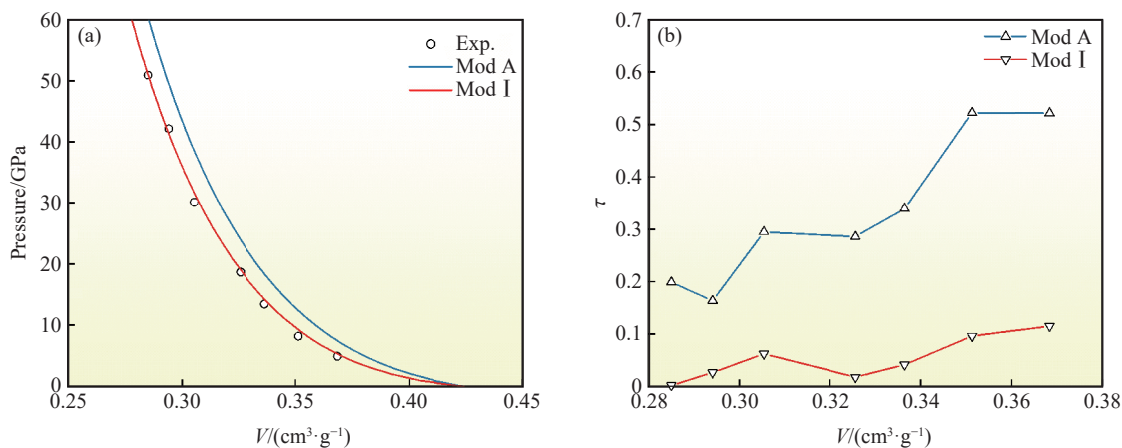


图 6 (a) Mod A 和 Mod I 预估的石蜡-方镁石混合物的 Hugoniot 状态方程与实验数据的对比, (b) Mod A 和 Mod I 预估模型的偏离度

Fig. 6 (a) Comparison of the EOS of paraffin-periclase mixture estimated by Mod A and Mod I with experimental data; (b) deviation degree of Mod A and Mod I

低于 10%, 明显小于 τ_A 。从图 6(b) 中偏离度的分布和模型预估的 S_{RMSE} 可以看出, Mod I 的预估效果优于 Mod A。相比于环氧树脂-方镁石混合物, Mod I 计算石蜡-方镁石混合物 Hugoniot 状态方程的准确性更高。因此, 预估与石蜡及方镁石类似组分性质的混合物状态方程时, 等温平均模型的预测效果更好。

3 结 论

本研究对体积可加模型和等温平均模型计算混合物 Hugoniot 状态的准确性进行了科学评价。体积可加模型基于热力学平衡条件, 在计算混合物状态方程时并未考虑各组分冲击压缩导致的温差效应。等温平均模型则利用 Mie-Grüneisen 状态方程, 由各组分的 Hugoniot 冲击绝热线获得 0 K 等温线, 然后利用体积可加模型获得混合物的 0 K 等温线, 最后再通过 Mie-Grüneisen 状态方程由混合物的 0 K 等温线反推混合物的 Hugoniot 冲击绝热线。等温平均模型正是通过这“一去一回”的方式成功消除了混合物各组分由于冲击压缩导致的温差效应。利用体积可加模型和等温平均模型对二元合金-钨铜烧结合金、三元合金-黄铜、二元混合物-环氧树脂-方镁石混合物及石蜡-方镁石混合物的 Hugoniot 状态方程进行计算, 并与实测数据进行对比。计算结果表明, 利用等温平均模型计算的混合物 Hugoniot 状态方程与实测数据的偏离度一般优于 10%, 准确度较体积可加模型更高, 同时, 两种模型都存在对低压区的预估准确性略差的现象。

参考文献:

- [1] 经福谦. 实验物态方程导引 [M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 1999: 81–88.
JING F Q. Experimental guide for the equation of state [M]. 2nd ed. Beijing: Science Press, 1999: 81–88.
- [2] WEN P, DU C X, TAO G, et al. Effect of Mn element on shock response in CoCrFeNiMn_x high entropy alloys [J]. *Chinese Physics B*, 2024, 33(11): 116103.
- [3] ZHOU W Y, LI H R, CAO L X, et al. Shock hugoniot calculations of newly designed thermoplastic elastomers and comparison with classical binder estane [J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 2024, 128(11): 2831–2840.
- [4] 李刚, 陈正汉, 谢云. 波在分层材料中的传播及防冲击波分层材料的设计 [J]. *振动与冲击*, 2005, 24(2): 89–91, 105.
LI G, CHEN Z H, XIE Y. Wave propagation in sandwich materials and design of anti-shockwave sandwich structure [J]. *Journal of Vibration and Shock*, 2005, 24(2): 89–91, 105.
- [5] 梁汉良, 罗宁, 周嘉楠, 等. 多层金属复合材料界面微观结构特征数值计算研究 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2025, 54(1): 134–46.
LIANG H L, LUO N, ZHOU J N, et al. Numerical calculation study on interfacial microstructure characteristics of multilayer metal composite materials [J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2025, 54(1): 134–46.
- [6] 高发光, 李永池, 王志海, 等. 新型聚酯材料状态方程的研究 [J]. *功能材料*, 2012, 43(3): 287–289.
GAO G F, LI Y C, WANG Z H, et al. Equations of state for a new type polyester material [J]. *Journal of Functional Materials*, 2012, 43(3): 287–289.
- [7] 王世杰, 杨杰, 马硕, 等. 机器学习在功能梯度材料设计-制备中的应用综述 [J]. *材料导报*, 2023, 37(21): 107–115.
WANG S J, YANG J, MA S, et al. A review: applications of machine learning in design-fabrication of functionally graded materials [J]. *Materials Reports*, 2023, 37(21): 107–115.
- [8] 戚兴怡, 胡耀峰, 王若愚, 等. 机器学习在新材料筛选方面的应用进展 [J]. *化学学报*, 2023, 81(2): 158–174.
QI X Y, HU Y F, WANG R Y, et al. Recent advance of machine learning in selecting new materials [J]. *Acta Chimica Sinica*, 2023, 81(2): 158–174.
- [9] 张聪, 刘杰, 解树一, 等. 高通量计算与机器学习驱动高熵合金的研究进展 [J]. *材料工程*, 2023, 51(3): 1–16.
ZHANG C, LIU J, XIE S Y, et al. Research progress in high-entropy alloys driven by high throughput computation and machine learning [J]. *Journal of Materials Engineering*, 2023, 51(3): 1–16.
- [10] JORDAN J L, BAER M R. Mixture model for determination of shock equation of state [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(8): 083516.

- [11] KINELOVSKII S A, MAEVSKII K K. Model of the behavior of the mixture with different properties of the species under high dynamic loads [J]. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2013, 54(4): 524–530.
- [12] BOGACHEV G A. Calculation of the shock-wave adiabatics for some heterogeneous mixtures [J]. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 1973, 14(4): 546–552.
- [13] MEYERS M A. Dynamic behavior of materials [M]. New York: Wiley, 1994: 135–141.
- [14] 王学容, 王建国. 混合物物态方程的计算 [J]. *强激光与粒子束*, 2011, 23(8): 2083–2089.
WANG X R, WANG J G. Calculation of equation of state of material mixture [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2011, 23(8): 2083–2089.
- [15] 林华令, 黄风雷, 于万瑞. 混合物冲击温度的数值模拟 [J]. *高压物理学报*, 2002, 16(1): 46–56.
LIN H L, HUANG F L, YU W R. Numerical simulation of shock temperature of mixtures during shock loading [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2002, 16(1): 46–56.
- [16] 周洪强, 于明, 孙海权, 等. 混合物状态方程的计算 [J]. *物理学报*, 2015, 64(6): 064702.
ZHOU H Q, YU M, SUN H Q, et al. Calculation of equation of state of a material mixture [J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(6): 064702.
- [17] 谭华. 实验冲击波物理 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2018: 40–47.
TAN H. Experimental shock wave physics [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2018: 40–47.
- [18] MARSH S P. LASL shock Hugoniot data [M]. Berkeley: University of California Press, 1980.
- [19] MCQUEEN R G, MARSH S P, TAYLOR J W, et al. Chapter VII—the equation of state of solids from shock wave studies [M]// KINSLOW R. High-Velocity Impact Phenomena. New York: Academic Press, 1970: 293–417.
- [20] MITCHELL A C, NELLIS W J. Shock compression of aluminum, copper, and tantalum [J]. *Journal of Applied Physics*, 1981, 52(5): 3363–3374.
- [21] MILLETT J C F, BOURNE N K, BARNES N R. The behavior of an epoxy resin under one-dimensional shock loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2002, 92(11): 6590–6594.

Hugoniot Equation of State Model for Mixtures

YANG Gang^{1,2}, ZHAO Zhengyang¹, LIU Xun³, HU Jianian^{1,2}, JIA Yongsheng^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Precision Blasting, Jiangnan University, Wuhan 430056, Hubei, China;

2. Hubei Key Laboratory of Blasting Engineering, Jiangnan University, Wuhan 430056, Hubei, China;

3. School of Physics and Mechanics, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, Hubei, China)

Abstract: High-throughput computing has become a cornerstone of modern materials design and is driving new advances in the study of shock-compressed matter. Central to these efforts is an accurate Hugoniot equation of state (EOS) for mixtures, yet existing mixture models continue to show sizeable scatter. Here we benchmarked two widely used schemes—the volume-additive model (Mod A) and the isothermal-average model (Mod I)—against experimental Hugoniot data for binary alloys, ternary alloys and granular mixtures. The Mod A model assumes full thermodynamic equilibrium and neglects the temperature rise of individual constituents under shock compression. The Mod I model, by contrast, removes this thermal contribution by deriving the mixture Hugoniot from 0 K isotherms via the Mie-Grüneisen EOS. Systematic comparison between the predicted Hugoniot EOS of binary alloy, ternary alloy, granular mixtures and the experimental data reveals that the Mod I model reproduces measured Hugoniot states within about 10% error across the entire pressure range studied, outperforming the Mod A model in both accuracy and robustness. Both approaches exhibit moderately larger discrepancies at low shock pressures, where thermal effects are most pronounced.

Keywords: mixture; Hugoniot; equation of state; principle of volume additivity; isothermal average