



HAL
open science

Contribution à l'étude expérimentale et numérique du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes H₂, CH₄, C₂H₆-O₂ dilués ou non par N₂ ou Ar

Florent Viot

► **To cite this version:**

Florent Viot. Contribution à l'étude expérimentale et numérique du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes H₂, CH₄, C₂H₆-O₂ dilués ou non par N₂ ou Ar. Energie électrique. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2009. Français. NNT: . tel-00443884

HAL Id: tel-00443884

<https://theses.hal.science/tel-00443884>

Submitted on 4 Jan 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour l'obtention du Grade de
Docteur de l'ENSMA

Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique
(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale Sciences pour l'Ingénieur & Aéronautique

Secteur de Recherche : Energie, Thermique, Combustion

Présentée par

Florent VIROT

* * * * *

Contribution à l'étude expérimentale et numérique
du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes
 H_2 , CH_4 , $C_2H_6-O_2$ dilués ou non par N_2 ou Ar

* * * * *

Directeurs de thèse

H.N. PRESLES
D. DESBORDES

Laboratoire de Combustion et de Détonique

* * * * *

Soutenue le 31 mars 2009
devant la Commission d'Examen

~ JURY ~

B. ERMOLAEV	Directeur de Recherche à l'institut Chimie-Physique de Moscou
D. DESBORDES	Professeur à l'ENSMA, LCD – CNRS
B. KHASAINOV	Ingénieur de Recherche au LCD – CNRS
M. KUROSAKA	Professeur à l'Université de Washington
C. PAILLARD	Professeur à l'Université d'Orléans, LCSR – CNRS
H.N. PRESLES	Directeur de Recherche au LCD – CNRS
A. TROTSYUK	Directeur de Recherche à l'institut de Mécanique de Novosibirsk

... Notre conception du futur dépend de notre conception de l'histoire. Mais il y a deux manières de lire le temps : pour certains, celui-ci se dégrade et est en entropie permanente. Mais aujourd'hui, notamment avec les travaux d'un Ilya Prigogine, on saisit que le temps est construction. ...

Pascal Ide

Eppur, si muove !
Galileo Galilei

Avant propos

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ont été effectués au Laboratoire de Combustion et de Détonique (LCD UPR CNRS 9028) situé sur le site du Futuroscope. L'étude a été cofinancée par la région Poitou-Charentes et le Centre National de la Recherche Scientifique.

Je voudrais remercier particulièrement le Professeur Daniel Desbordes et le Directeur de Recherche Henri-Noël Presles qui m'ont accueilli au sein de l'équipe de détonation et m'ont accordé leur confiance tout au long de ce projet. Durant ces trois années, ils ont été mes directeurs de thèse, interlocuteurs indispensables. Ils ont su partager la passion pour l'enseignement et la recherche grâce à leurs précieux conseils et leurs expériences notoires.

Je voudrais également exprimer ma gratitude à Boris Khasainov, Ingénieur de Recherche, et saluer son dévouement. Il n'a pas hésité à partager ses connaissances et ses compétences sur les simulations numériques des détonations (entre autres).

J'ai réellement apprécié les échanges avec le Professeur Mitsuru Kurosaka de l'Université de Washington, d'abord à l'ENSMA pendant plusieurs mois où il était venu effectuer un séjour sabbatique, puis par téléphone via Internet. La collaboration a été très fructueuse.

Je remercie le Professeur Claude Paillard de l'Université d'Orléans et le Directeur de Recherche Boris Ermolaev de l'institut de Chimie-Physique de Moscou d'avoir bien voulu juger ce travail en étant les rapporteurs ainsi que le Docteur Anatoly Trotsyuk, Directeur de Recherche à l'institut de Mécanique de Novosibirsk, d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je suis également reconnaissant envers tout le personnel du laboratoire qui a consacré, en plus de l'attribution normale de ses tâches, du temps et de l'énergie pour effectuer un dépannage et/ou construire la confiance qui constitue la clé pour atteindre l'ambitieux objectif, en recherche, d'aller toujours de l'avant. Je reste persuadé de la contribution de chacun.

Non des moindres, la présence de mes parents, de mon frère ainsi que celle de mes amis a constitué un soutien important tout au long de la thèse. Je leur exprime toute ma reconnaissance.

Enfin je voudrais dédier l'ensemble de mon travail à mes deux grands parents Jean († 9 mars 2006) et Cécile († 16 juin 2007) qui n'ont pas pu, hélas, le voir achevé.

Table des matières

Table des matières	i
Notations	v
Table des figures	ix
Liste des tableaux	xvii
Introduction	1
1 Généralités sur les détonations	7
1.1 Théorie Chapman-Jouguet	7
1.1.1 Modélisation du problème	7
1.1.2 Etude au point CJ	8
1.1.3 Calcul de l'état CJ	9
1.1.4 Cas des gaz polytropiques	10
1.1.5 Relations approchées	11
1.2 Modèle Zeldovich-von Neumann-Döring	12
1.2.1 Description du modèle	12
1.2.2 Cas du gaz polytropique	13
1.2.3 Application du modèle ZND pour l'étude de l'évolution des paramètres thermodynamiques dans la zone de réaction d'une détonation stationnaire	14
1.3 Instabilité du front de détonation	20
1.3.1 Détonation multi-têtes, cellules de détonation	20
1.3.2 Détonations marginales et hélicoïdales	24
1.3.3 Théorie acoustique des détonations	26
1.3.4 Sous-structure, structure de bande, double structure	28
1.3.4.1 Sous-structure	29
1.3.4.2 Double structure	29

1.3.4.3	Structure de bande	29
2	Modélisation et simulations numériques des écoulements réactifs stationnaires et instationnaires pour les détonations	33
2.1	Ecoulements réactifs instationnaires	34
2.1.1	Système d'équations	34
2.1.2	Discrétisation du système d'équations, schéma numérique et condition de stabilité	35
2.1.3	Grille – Maillage	37
2.1.3.1	Type de grille	37
2.1.3.2	Conditions aux limites	37
2.1.3.3	Technique d'adaptation du maillage	38
2.1.4	Intégration par la méthode FCT (Flux Corrected Transport)	40
2.1.4.1	Principe de base	40
2.1.4.2	Condition sur l'entropie	41
2.1.5	Amorçage et propagation quasi-stationnaire de la détonation	41
2.1.6	Conditions initiales et paramètres d'entrée	43
2.1.7	Performances – Calcul parallèle	44
2.2	Ecoulements réactifs stationnaires	45
2.2.1	Système d'équations	45
2.2.2	Méthode d'intégration et paramètres d'entrée	46
2.2.3	Détermination des valeurs numériques des paramètres d'entrée	46
2.2.3.1	Détermination des paramètres thermodynamiques	46
2.2.3.2	Détermination des paramètres de cinétique chimique réduite	47
2.2.3.3	Application de la détermination des paramètres du modèle pour le mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$	49
2.2.3.4	Comparaison des détonations stationnaires et quasi-stationnaires	51
3	Etude numérique des détonations hélicoïdales dans les mélanges à une étape globale de libération d'énergie	55
3.1	Paramètres des simulations	55
3.2	Vue générale de la détonation hélicoïdale	56
3.2.1	Traces sur la paroi du tube	56
3.2.2	Profils instantanés de pression	57
3.3	Régime quasi-stationnaire	59
3.3.1	Etude du point de pression maximale	59
3.3.2	Evolution de l'aire des isosurfaces de la fraction massique des gaz brûlés	65

3.4	Détail du front de détonation quasi-stationnaire	67
3.4.1	Description détaillée du front sur la paroi du tube à détonation	67
3.4.2	Lignes de courant et capteurs en périphérie	69
3.4.3	Front de détonation au centre du tube	71
3.5	Mouvement contra-rotatif de l'écoulement quasi-stationnaire	74
3.6	Lignes de courant 3D	84
3.6.1	Description générale	84
3.6.2	Lignes de courant traversant la zone de très forte pression	85
3.6.3	Diagrammes pv le long des lignes de courant	86
4	Etude numérique des détonations dans les mélanges où la libération d'énergie s'effectue en deux étapes	91
4.1	Paramètres des simulations de ce chapitre	91
4.2	Traces à la surface du tube	92
4.3	Champs instantanés de pression	94
4.4	Profils instantanés à la surface du tube	96
4.5	Instabilité de l'onde transverse	98
4.6	Influence du diamètre du tube à détonation sur la structure et le régime de détonation	99
5	Dispositif expérimental	109
5.1	Vue générale du dispositif expérimental	109
5.2	Préparation des pré-mélanges	109
5.3	Métrologie	110
5.3.1	Capteurs de pression dynamique	110
5.3.2	Dispositif radar à effet Doppler	115
5.4	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques recouvertes de noir de carbone	121
6	Résultats expérimentaux	125
6.1	Etude des mélanges où H_2 est le combustible	125
6.1.1	Lois de libération d'énergie chimique	125
6.1.2	Cellules de détonation	127
6.1.3	Taille de cellules et célérité de détonation pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + \beta.X)$	132
6.2	Etude des mélanges où CH_4 est le combustible	134
6.2.1	Lois de libération d'énergie chimique	134
6.2.2	Cellules de détonation	134
6.2.3	Taille de cellules de détonation pour les mélanges avec CH_4	141

6.3	Etude des mélanges où C_2H_6 est le combustible	144
6.3.1	Lois de libération d'énergie chimique	144
6.3.2	Cellules de détonation	146
6.3.3	Taille de cellules et célérité de détonation pour les mélanges avec C_2H_6 . .	151
6.4	Discussion	153
	Conclusion et perspectives	155
	Annexes	159
	A Problème du tube à choc	161
	B Programme calculant la zone de réaction d'une détonation stationnaire	167
	C Scripts utiles pour la détermination des paramètres du modèle	175
	D Bride pour huit capteurs pression	179
	Références	181

Notations

Symbole	Signification	Dimension	Unité SI
B	Couple baroclinique	MT^{-2}	$N\ m^{-1}$
B	Champ Magnétique	$L^{-1}I$	$A\ m^{-1}$
c	Célérité du son	LT^{-1}	$m\ s^{-1}$
c_p	Capacité thermique massique à p constante	$L^2T^{-2}\Theta^{-1}$	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
c_v	Capacité thermique massique à v constant	$L^2T^{-2}\Theta^{-1}$	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
d	Diamètre du tube de détonation	L	m
D	Célérité de détonation	LT^{-1}	$m\ s^{-1}$
e	Energie interne massique	$L^2\ T^{-2}$	$J\ kg^{-1}$
E	Energie totale massique $E \equiv e + \frac{1}{2}V^2$	$L^2\ T^{-2}$	$J\ kg^{-1}$
E	Champ électrique	$MLT^{-3}I^{-1}$	$V\ m^{-1}$
E_a	Energie d'activation	$ML^2T^{-2}N^{-1}$	$J\ mol^{-1}$
f	Fréquence	T^{-1}	Hz
g	Enthalpie libre massique	L^2T^{-2}	$J\ kg^{-1}$
h	Enthalpie (absolue) massique	L^2T^{-2}	$J\ kg^{-1}$
\hat{h}	Enthalpie sensible massique $h = h^* + \hat{h}$	L^2T^{-2}	$J\ kg^{-1}$
L	Longueur du domaine de calcul	L	m
m	Masse	M	kg
\dot{m}	Débit masse	MT^{-1}	$kg\ s^{-1}$
M	Nombre de Mach	–	–
n_i	Ordre de la réaction i	–	–
N	Nombre de mailles	–	–
P	Pas de l'hélice	L	m
p	Pression	$L^{-1}MT^{-2}$	Pa
Q	Chaleur de réaction massique	L^2T^{-2}	$J\ kg^{-1}$
R	Constante des gaz parfaits	$L^2MT^{-2}\Theta^{-1}N^{-1}$	$J\ mol^{-1}K^{-1}$
r	Constante des gaz parfaits massique (R/W_m)	$L^2T^{-2}\Theta^{-1}$	$J\ kg^{-1}K^{-1}$
s	Entropie massique	$L^2T^{-2}\Theta^{-1}$	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
S	Entropie	$L^2MT^{-2}\Theta^{-1}$	$J\ K^{-1}$
t	Temps	T	s
T	Température absolue	Θ	K
v	Volume spécifique	L^3M^{-1}	m^3kg^{-1}
V	Vitesse absolue (par rapport au laboratoire)	$L\ T^{-1}$	$m\ s^{-1}$
W	Vitesse relative à la discontinuité	$L\ T^{-1}$	$m\ s^{-1}$
W_m	Masse molaire	MN^{-1}	$kg\ mol^{-1}$
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	L	m
x, r, θ	Coordonnées cylindriques	L	m
x_i	Concentration molaire de l'espèce i	N	mol
X_i	Fraction molaire de l'espèce i	–	–
y_i	Concentration massique de l'espèce i	M	kg
Y_i	Fraction massique de l'espèce i	–	–
\dot{Y}_i	Taux de production de l'espèce i	T^{-1}	s^{-1}
Z	Facteur pré-exponentiel	*	*

Symbole	Signification	Dimension	Unité SI
α	Angle entre la vitesse relative et l'axe du tube	–	rd
$\Delta_r g$	Enthalpie libre de réaction	$L^2 T^{-2}$	$J kg^{-1}$
$\Delta_r h$	Enthalpie de réaction	$L^2 T^{-2}$	$J kg^{-1}$
Δt	Pas de temps	T	s
Δx	Taille de maille dans la direction x	L	m
Δy	Taille de maille dans la direction y	L	m
Δz	Taille de maille dans la direction z	L	m
γ	Rapport des capacités calorifiques $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$	–	–
ρ	Masse volumique	$L^{-3}M$	$kg m^{-3}$
ϕ	Richesse	–	–
ω	taux de rotation	T^{-1}	s^{-1}
$\vec{\omega}$	Vorticité	T^{-1}	s^{-1}
σ	Thermicité $\sigma = \sum \left(\frac{\bar{W}_i}{\bar{W}_i} - \frac{h_i}{c_p T} \right) \dot{Y}_i$	T^{-1}	s^{-1}
λ	Largeur de la cellule de détonation	L	m
λ	Longueur d'onde	L	m
λ_b	Longueur d'onde de battement	L	m
λ_c	Longueur d'onde de coupure	L	m
λ_g	Longueur d'onde guidée	L	m
λ_i	Avancement de la réaction i	–	–
$\frac{\partial}{\partial t}$	Dérivée temporelle	T^{-1}	s^{-1}
$\frac{D}{Dt}$	Dérivée particulaire $\left(\frac{Db}{Dt} \equiv \frac{\partial b}{\partial t} + \vec{V} \cdot \overrightarrow{grad} b \right)$	T^{-1}	s^{-1}

Abbreviations

C	Crussard	FFT	Transformée de Fourier Rapide
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy	PE	Point d'explosion
CJ	Chapman-Jouguet	RM	Rayleigh-Mickelson
CT	Choc transverse	TDD	Transition Déflagration Détonation
CP	Choc plan	TZ	Taylor-Zeldovich
H	Hugoniot	ZND	Zeldovich-von Neumann-Döring

Indices et Exposants

$()_0$	Milieu amont
$()_{MID}$	Milieu intermédiaire
$()_1$	Milieu aval
$()_b$	Section motrice (booster)
$()_{CJ}$	Etat Chapman-Jouguet
$()_{ZND}$	Etat Zeldovich-von Neumann-Döring
$()_{BV}$	Etat basse vitesse
$()_e$	Etat à l'équilibre
$()_f$	Etat figé
$()^*$	Etat de référence ($p^*=10^5 Pa$, $T^*=298K$)
$()_x$	Composante selon la direction x
$()_y$	Composante selon la direction y
$()_z$	Composante selon la direction z
$()_{fine}$	Zone où la taille de maille est la plus petite
$()_{adapt}$	Zone où la taille de maille est adaptée

Table des figures

1.1	Systèmes de coordonnées liés par la relation $W = -(D - u)$	7
1.2	Droite de Rayleigh-Michelson et adiabatique de Crussard dans le plan (p, v)	9
1.3	Représentation des adiabatiques d'Hugoniot, de Crussard et de la droite de Rayleigh-Michelson dans les diagrammes (p, v) et (T, s) selon le modèle ZND pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $T_0=298K$ et $p_0=1atm$	13
1.4	Profils de température, vitesse matérielle, pression, densité, célérité du son et γ dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1atm$ et $T_0=298K$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique GRI 3.0 [Smith <i>et al.</i> , 1999].	16
1.5	Profils d'évolution de la masse molaire, du nombre de Mach, de l'entropie molaire, de thermicité et des espèces majoritaires dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1atm$ et $T_0=298K$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique GRI 3.0 [Smith <i>et al.</i> , 1999].	17
1.6	Profils de température, vitesse matérielle, pression, densité, célérité du son et γ dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2/NO_2, N_2O_4$ à $p_0 = 0.1bar$, $T_0=293K$ et $\phi = 1.5$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique de Konnov [2000 v0.5].	18
1.7	Profils d'évolution de la masse molaire, du nombre de Mach, de l'entropie molaire, de thermicité et des espèces majoritaires dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2/NO_2, N_2O_4$ à $p_0 = 0.1bar$, $T_0=293K$ et $\phi = 1.5$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique de Konnov [2000 v0.5].	19
1.8	Chronostriographies de la propagation d'une détonation dans le mélange $C_3H_8 + 5O_2 + 16N_2$ à $p_0=1atm$ et $T_0=293K$ [Brochet, 1966]. Le temps est enregistré sur l'axe vertical (de bas en haut) et la distance parcourue par l'onde de détonation est mesurable sur l'axe horizontal (de gauche à droite) ; la détonation se propage de gauche à droite.	20
1.9	Trajectoires des points triples d'une détonation multitétes.	21
1.10	Mesures du temps d'induction local et de la vitesse locale sur l'axe d'une cellule de détonation [Dormal <i>et al.</i> , 1979].	21
1.11	Variation de la taille de la cellule de détonation en fonction de la pression initiale pour des mélanges comprenant de l'hydrogène ou différents hydrocarbures en proportions stœchiométriques avec l'oxygène.	22
1.12	Variation de la taille de la cellule de détonation avec la richesse pour différents hydrocarbures mélangés avec de l'air [Knystautas <i>et al.</i> , 1984] et hydrogène mélangé avec de l'air [Guirao <i>et al.</i> , 1982] ($p_0=1atm$).	22

1.13	Schéma des divers types de régularité de la structure des ondes de détonation proposé par Libouton <i>et al.</i> [1981].	23
1.14	Traces d'une détonation hélicoïdale sur plaque enfumée ($C_2H_6 + 3, 5O_2 + 13, 16Ar$ à $p_0=35\text{mbar}$). La moitié de la circonférence du tube est représentée.	24
1.15	Structure instantanée du front de détonation à une seule tête dans un tube circulaire. Configuration simple de Mach.	25
1.16	Trois catégories de sous-structure cellulaire.	28
2.1	Représentation du maillage uniforme 2D en coordonnées cartésiennes et représentation eulérienne.	36
2.2	Maillage numérique 3D au niveau du front de détonation. Le tube est discrétisé dans l'espace cartésien. La section droite compte 40×40 mailles.	37
2.3	Technique d'adaptation de maillage pour l'étude de la propagation d'une détonation. Solution de la propagation instationnaire 1D avec le code EFAE pour le mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. Résolution dans la zone de réaction $\Delta x_{fine}=0.5\text{mm}$	39
2.4	Etapes de l'intégration du système différentiel modélisant l'écoulement réactif instationnaire non visqueux implémenté dans EFAE.	40
2.5	Evolution du pas de temps en fonction des conditions d'amorçage. TC=tube à choc ; PE=point d'explosion. Détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. Le nombre de Courant est fixé à $CFL=0.35$	42
2.6	Profils de vitesse matérielle et de pression obtenus après un amorçage type tube à choc. La distance derrière le point CJ (i.e. dans la détente de Taylor-Zeldovich) est adimensionnée par Dt . Détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. $CFL=0.35$, $\Delta x=0.5\text{mm}$ et $N_x=5000$	43
2.7	Variation du temps d'exécution en fonction du nombre de processeurs (calcul parallèle avec OPENMP) et de la taille du maillage. Calculs effectués avec le code EFAE sur une architecture x86_64 contenant deux quad-cores AMD 2352 64bits à 2.3GHz et 16Go de RAM.	44
2.8	Profils de température dans la zone de réaction lors de la propagation stationnaire de la détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. La vitesse du choc varie de 1800m/s à 3200m/s par pas de 50m/s.	49
2.9	Comparaison des profils dans la zone de réaction issus d'une cinétique détaillée et réduite. La détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$ se propage à la célérité CJ.	50
2.10	Comparaison des résultats de calculs de la zone de réaction d'une détonation stationnaire avec une chimie détaillée et réduite. Mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$	51
2.11	Diagrammes (p, v) des solutions instationnaires obtenues pour trois instants différents lors de la propagation de la détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$ avec le code EFAE.	52

3.1	Profils de pression, vitesse matérielle, fraction massique des gaz brûlés Y_B et nombre de Mach relatif au choc incident à la fin du calcul monodimensionnel ($x=0.1\text{m}$).	56
3.2	Traces enregistrées sur la paroi du tube à détonation à partir du début du calcul 3D.	58
3.3	Pour chaque instant $t \in \{122.2, 122.8, 123.5\} \mu\text{s}$ sont représentés : en haut, les vues de coté et face des isosurfaces de pression (avec transparence) ; en bas, le champ de pression sur la surface du tube de rayon R . $\tilde{R}=0.95R$, $\text{iso-}p \in \{0.6, 1.2, 1.8, 2, 3, 4, 5\} \text{bar}$	60
3.4	Même légende que la figure 3.3 pour les instants $t \in \{123.8, 124.3, 124.8\} \mu\text{s}$	61
3.5	Même légende que la figure 3.3 pour les instants $t \in \{125.3, 125.8\} \mu\text{s}$	62
3.6	Traces enregistrées sur la paroi du tube à détonation. Le domaine de représentation est identique à celui des figures 3.3–3.5.	62
3.7	Evolution de la pression maximale et de la vitesse de propagation longitudinale aux cours de la simulation numérique.	63
3.8	Signaux à traiter pour connaître la fréquence de rotation du front de détonation.	64
3.9	Formes et aires des isosurfaces de concentration de gaz brûlés Y_B	66
3.10	Fraction massique des gaz brûlés, pression, densité et saut d'entropie en proche paroi ($r=\tilde{R}$) pour $t=122.2\mu\text{s}$. La représentation 3D de droite permet d'apprécier les gradients.	68
3.11	A gauche, les <i>pseudo</i> lignes de courant superposées aux champs de fraction massique de gaz brûlés, pression, densité et saut d'entropie avec les mêmes échelles de valeurs que dans la figure 3.10. A droite, les signaux de trois capteurs fixes dans le repère du laboratoire dont les trajectoires sont indiquées par les lignes pointillées sur les champs de gauche. Les capteurs sont situés sur une même section droite, deux angles de $+90^\circ$ séparent les capteurs 3-2 et 2-1. Chaque graphique inclut un agrandissement au niveau du front de détonation.	70
3.12	Vitesse radiale u_r en proche paroi ($r=\tilde{R}$).	71
3.13	Profils de pression, densité, variation d'entropie, vitesses radiale et tangentielle sur trois isosurfaces de fraction massique de gaz brûlés : $Y_B=0.99$ (gauche), $Y_B=0.5$ (milieu) et $Y_B=0.01$ (droite). Pour cet instant ($t=122.2\mu\text{s}$) le point triple se situe vers midi.	72
3.14	Déviations des lignes de courant. Instant $t=122.2\mu\text{s}$, le point triple est situé vers midi.	74
3.15	Utilisation de la composante longitudinale de la vortacité ω_x pour décrire le mouvement tourbillonnant de l'écoulement dans une section droite S lors de la propagation de la détonation hélicoïdale.	75
3.16	Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vortacité pour la section du tube à détonation à $x=281.6\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).	76
3.17	Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vortacité pour la section du tube à détonation à $x=281.1\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).	77
3.18	Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vortacité pour la section du tube à détonation à $x=280.9\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).	78

3.19	Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticit� pour la section du tube � d�tonation � $x=280.4\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).	79
3.20	Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticit� pour la section du tube � d�tonation � $x=277.2\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).	80
3.21	Circulation Γ et couple baroclinique dans les sections droites le long du tube � d�tonation pour l'instant $t=122.2\mu\text{s}$	81
3.22	Repr�sentation physique de la cr�ation du couple baroclinique lorsque les isosurfaces de pression et de densit� se coupent.	82
3.23	Isosurfaces de vorticit� ($\omega_x \in \{-1, -0.5, 0.5, 1\} \times 10^6 \text{s}^{-1}$) et isosurfaces de pression ($p \in [0.03 : 2.5]\text{bar}$) pour l'instant $t=122.2\mu\text{s}$. M�canisme expliquant l'inversion du sens de rotation de l'�coulement.	83
3.24	Lignes de courant 3D color�es en fonction de la variation d'entropie.	84
3.25	Lignes de courant 3D color�es en fonction du rayon d'entr�e (en haut) et de l'angle d'entr�e (en bas).	85
3.26	Isosurfaces de pression ($p \in \{0.1, 0.6, 1, 2, 3, 4\}\text{bar}$) avec les lignes de courant traversant la zone de pression o� $p > 4\text{bar}$	86
3.27	Profils typiques de la pression et de la fraction massique des gaz brûlés le long des lignes de courant passant par la zone de forte pression ($p > 4\text{bar}$).	86
3.28	Diagramme pv des �tats thermodynamiques relev�s sur les lignes de courant ensemenc�es � $r=0.2R$ et $r=0.8R$. Instant $t=122.2\mu\text{s}$; le point triple se situe vers midi.	87
4.1	Profils moyens de pression et vitesse longitudinale dans les sections droites � la fin du calcul 2D servant � initialiser la simulation 3D.	92
4.2	Traces issues de la simulation num�rique r�v�lant la double structure cellulaire. L'onde transverse de la structure la plus large se propage de fa�on h�lico�dale pour $x > 3.3\text{m}$	93
4.3	Vue agrandie d'une partie de la figure 4.2.	94
4.4	Evolution du front de d�tonation sur une demi-p�riode de rotation de l'onde transverse de la structure secondaire.	95
4.5	Profils de fraction massique de gaz frais Y_A , de fraction massique de gaz brûlés Y_C , de densit�, de pression et de saut d'entropie en proche paroi ($\tilde{R} = 0.98R$) lorsque $t=1.293\text{ms}$	97
4.6	Instabilit� de l'onde transverse visualis�e � travers quatre instants successifs dans le rep�re li� � celle-ci. Dans le rep�re du laboratoire, l'onde transverse se d�place sur un demi-p�rim�tre de tube.	99
4.7	Traces num�riques laiss�es sur la paroi du tube � d�tonation. En fonction du diam�tre du tube d , plusieurs r�gimes sont observ�s : de la double structure cellulaire multi-t�tes (cas \mathcal{A}) � la simple structure avec une onde h�lico�dale (cas \mathcal{F}).	101
4.8	Isosurfaces de pression ($p \in \{1, 2, 3, 4\}\text{bar}$) vues de face r�v�lant les zones de fortes pressions � proximit� des points triple.	102

4.9	Régimes de détonation observés dans un tube en fonction du diamètre ou de la pression initiale (<i>M.T.</i> et <i>Héli.</i> sont respectivement les abréviations de Multi-Têtes et Hélicoïdal).	103
4.10	Profils de fractions massiques de gaz frais Y_A , de gaz brûlés Y_C et de pression p selon une coupe longitudinale passant par le diamètre du tube à détonation (plan d'équation $z=0$). Cas \mathcal{B} à $t=3.411$ ms. La représentation schématique du champ de pression montre l'interaction des ondes transverses de la première étape avec l'onde transverse de la seconde étape.	104
4.11	Profils de fractions massiques de gaz frais Y_A , de gaz brûlés Y_C et de pression p selon une coupe longitudinale passant par le diamètre du tube à détonation (plan d'équation $z=0$). Cas \mathcal{C} à $t=2.550$ ms.	105
4.12	Profils de fractions massiques de gaz frais Y_A , de gaz brûlés Y_C et de pression p selon une coupe longitudinale passant par le diamètre du tube à détonation (plan d'équation $z=0$). Cas \mathcal{F} à $t=2.450$ ms.	105
5.1	Schéma du dispositif expérimental.	109
5.2	Répartition des capteurs le long du tube à détonation (tronçon) ou dans une même section (tourelle). Les supports capteurs sont blancs.	110
5.3	Exemple de signaux de pression obtenus sur un tronçon de capteurs pour une détonation multitêtes ($C_2H_4 + 3O_2$, $p_0=0.5$ bar; capteurs espacés de 25cm; pour ces conditions, $\lambda \approx 2-3$ mm).	111
5.4	Enregistrements de pression pour $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ à $p_0=40$ mbar (détonation hélicoïdale). Une couleur est attribuée pour chaque capteur; le sens de rotation de la détonation hélicoïdale dans l'expérience 5.4(a) est contraire à celui de l'expérience 5.4(b). Les signaux de pression des deux expériences sont mis en correspondance.	113
5.5	Enregistrements de pression pour $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ à $p_0=40$ mbar (détonation hélicoïdale). Une couleur est attribuée pour chaque capteur; le sens de rotation de la détonation hélicoïdale dans l'expérience 5.5(a) est donc inversé par rapport à celui de l'expérience 5.5(b). Le saut de pression visible sur la figure 5.5(b) vers $t=1.5$ ms est l'effet de la réflexion au fond du tube à détonation.	114
5.6	Détermination de la forme du front de choc à partir des huit signaux de pression pour $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ à $p_0=40$ mbar. $D=1443$ m/s et $\Delta t=10\mu s$	114
5.7	Analyse d'un signal Doppler obtenu avec le mélange $C_2H_4 + 3O_2$ à $p_0=75$ mbar. L'amplitude du signal Doppler est beaucoup plus importante lors du régime de détonation que lors de la transition déflagration détonation (TDD).	118
5.8	Analyse d'un signal Doppler obtenu avec un filtre actif (passe haut) pour le mélange $C_2H_4 + 3O_2$ à $p_0=0.3$ bar. Les parasites engendrés par le filtre empêchent son utilisation pour des signaux de faible amplitude.	118
5.9	Signaux Doppler obtenus avec les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ (rouge) et $H_2 + \frac{1}{2}O_2 + 0.015C_2H_4$ (bleu) pour $p_0=50$ mbar ($\lambda = \pi d/2$). Pour ces mélanges, la célérité de détonation est respectivement $D_{C,J}=2677$ m.s ⁻¹ et $D_{C,J}=2703$ m.s ⁻¹ ; les propriétés de détonation sont très légèrement modifiées par l'ajout d'éthylène en faible quantité.	119
5.10	Intégration des signaux doppler pour le mélange $C_2H_6+3.5O_2+13.16Ar$ à $p_0=75$ mbar montrant l'effet de la pression initiale du mélange de la section motrice.	120

5.11	Types de plaques enfumées utilisées pour enregistrer les cellules de détonation.	121
6.1	Pour trois mélanges (a) $H_2 + \frac{1}{2}O_2$, (b) $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$, (c) $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$: à gauche, évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour plusieurs valeurs de pression initiale ; à droite, évolution des espèces dans la zone de réaction pour $p_0=40$ mbar. Les calculs sont obtenus avec le mécanisme de cinétique détaillée GRI 3.0 [Smith <i>et al.</i> , 1999].	126
6.2	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}O_2$	128
6.3	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$	128
6.4	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$	129
6.5	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$	130
6.6	Tailles de cellules et célérités de détonation pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + \beta N_2)$ en fonction de la pression initiale p_0 . Les données collectées dans la littérature se rapportent aux mélanges H_2/O_2 et H_2/Air	133
6.7	Pour trois mélanges (a) $CH_4 + 2O_2$, (b) $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$, (c) $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$: à gauche, évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour plusieurs valeurs de la pression initiale ; à droite, évolution des espèces dans la zone de réaction. Les calculs sont obtenus avec le mécanisme de cinétique détaillée GRI 3.0 [Smith <i>et al.</i> , 1999].	135
6.8	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2O_2$	136
6.9	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$	138
6.10	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$	139
6.11	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2(O_2 + X.Ar)$	140
6.12	Taille des cellules de détonation pour les mélanges contenant CH_4	142
6.13	Légende page suivante.	144
6.13	Pour quatre mélanges (a) $C_2H_6 + 3.5O_2$, (b) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$, (b) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$, (d) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$: à gauche, évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour plusieurs valeurs de pression initiale ; à droite, évolution des espèces dans la zone de réaction. Les calculs sont obtenus avec le mécanisme de cinétique détaillée GRI 3.0 [Smith <i>et al.</i> , 1999].	145
6.14	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5O_2$	147
6.15	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$	148

6.16	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$	149
6.17	Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$	150
6.18	Taille des cellules et célérité de détonation pour les mélanges où C_2H_6 est le combustible.	152
A.1	Représentation schématique d'un tube à choc à l'instant initial et à l'instant $t > 0$	163
A.2	Différents profils concernant le problème du tube à choc dans les conditions Sod1. Simulations avec EFAE.	164
A.3	Différents profils concernant le problème du tube à choc dans les conditions Sod2. Simulations avec EFAE.	165
A.4	Différents profils concernant le problème du tube à choc dans les conditions Sod3 (Conditions Sod2 avec un nombre Courant plus faible). Simulations avec EFAE.	166
D.1	Reproduction du plan de conception de la bride supportant jusqu'à huit capteurs pression dans la même section.	179

Liste des tableaux

1.1	Caractéristiques CJ obtenues avec le code thermodynamique TDS pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1\text{atm}$ et $T_0=298\text{K}$. Les indices e et f se rapportent respectivement aux valeurs à l'équilibre et figée.	10
1.2	Caractéristiques de détonation CJ pour le gaz idéal à capacité calorifique constante et relations approchées dans l'hypothèse du choc fort.	12
1.3	Caractéristiques de l'état ZND pour le gaz polytropique et relations approchées sous l'hypothèse de choc fort. ($M_0 = \frac{D}{c_0}$).	13
4.1	Paramètres des simulations montrant l'influence du diamètre du tube d sur la structure et le régime de détonation et quelques résultats de calcul : N_1 correspond au nombre de cellules de taille λ_1 produites dans le diamètre d par la première libération d'énergie. L'astérisque (*) indique que les cellules de la petite structure n'ont pas de taille fixe lorsque la double structure est présente.	100
5.1	Modes de propagation des ondes stationnaires dans un tube à détonation de diamètre 36mm. λ_c , λ_g , λ_b sont respectivement les longueurs d'ondes de coupure, guidée et de battement avec TE_{11} . Extrait de la thèse de Pelhate [1966].	116
6.1	Tableau récapitulatif des valeurs de k et n de la loi $\lambda = kp_0^n$ et des pas des traces de l'onde hélicoïdale pour les mélanges où H_2 est le combustible. p_0 , $\lambda = kp_0^n$ et $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.	132
6.2	Tableau récapitulatif de k et n de la loi $\lambda = kp_0^n$ et pas des traces de l'onde hélicoïdale pour les mélanges où CH_4 est le combustible. p_0 , $\lambda = kp_0^n$ et $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.	143
6.3	Tableau récapitulatif des valeurs de k et n de la loi $\lambda = kp_0^n$ et des pas des traces de l'onde hélicoïdale pour les mélanges où H_2 est le combustible. p_0 , $\lambda = kp_0^n$ et $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.	151
A.1	Conditions des problèmes de Riemann (Sod1–Sod3), paramètres supplémentaires pour le code EFAE et valeurs théoriques/simulées de p_1' , V et C . CFL et ν_{num} sont respectivement le nombre de Courant et la viscosité numérique.	163

Introduction

Depuis la découverte du phénomène de détonation [Berthelot, 1881; Mallard et Le Châtelier, 1881; Berthelot et Vieille, 1882], les scientifiques n'ont cessé de rechercher les mécanismes fondamentaux responsables de son initiation, de sa propagation et de son extinction.

La compréhension du phénomène a d'abord été marquée par les observations de Vieille [1900], la théorie expliquant le régime de propagation stationnaire et autonome proposée par Chapman [1899] et Jouguet [1905] puis la modélisation de la structure de l'onde par Zel'dovich [1940], von Neuman [1942] et Döring [1943]. L'amélioration des techniques expérimentales a ensuite permis de mettre en évidence et de déterminer la forme tridimensionnelle du front de détonation [Denisov et Troshin, 1959; Oppenheim, 1965; Schott, 1965; Voitsekhovskii *et al.*, 1969] et d'extraire une échelle géométrique caractéristique : la largeur de la cellule de détonation λ .

Le régime limite de propagation stationnaire de la détonation dans un tube de diamètre d , appelé régime hélicoïdal, a été historiquement mis en évidence par Campbell et Woodhead [1927]. Les théories acoustiques établies par Manson [1946], Fay [1952] puis Chu [1956] ont aidé plus tard à montrer que, dans ce cas particulier, λ avoisine la taille du confinement et que typiquement $\lambda = \pi d$.

Alors que les premiers travaux fondateurs de Zel'dovich *et al.* [1956] établissent un critère de la détonabilité d'un mélange gazeux grâce à l'énergie d'amorçage E_c ou au diamètre critique de transmission de la détonation en espace libre d_c tous deux liés à la longueur d'induction des processus chimiques L_i ($E_c \propto L_i^3$ et $d_c = 15L_i$), Shchelkin et Troshin [1963a] montrent que λ est intimement liée à L_i par la loi $\lambda = kL_i$ dont le coefficient k n'est pas universel. λ constitue alors une échelle pour quantifier la détonabilité d'un mélange confirmée par Mitrofanov et Soloukhin [1965] pour les diamètres critiques ($d_c = 13\lambda$).

Dès lors, le rôle fondamental de la loi de libération de l'énergie chimique dans les processus de propagation des détonations est confirmé par les constatations expérimentales analysées à la lumière des calculs de la zone de réaction utilisant des mécanismes détaillés de cinétique chimique.

En particulier dans les mélanges gazeux C_nH_m/O_2 ($n \geq 0$), l'énergie chimique est libérée derrière le choc de tête après une période d'induction en une seule étape réactionnelle globale

généralement brutale, alors que les mélanges C_nH_m/O_2 ($n \geq 0$) fortement dilués par un gaz inerte ou C_nH_m/NO_2 ($n \geq 0$) présentent une loi de libération d'énergie chimique non monotone constituée au moins de deux étapes réactionnelles globales (l'une similaire aux mélanges C_nH_m/O_2 suivie d'une autre étape retardée et de durée plus longue). Lorsque deux longueurs chimiques caractéristiques se distinguent, une double structure cellulaire (λ_1, λ_2) est observée dans les expériences [Presles *et al.*, 1996; Joubert, 2001; Lamoureux *et al.*, 2001].

L'objectif de ce travail est donc de comprendre l'influence de la loi de libération d'énergie chimique sur les régimes marginaux de propagation stationnaire des détonations dans les tubes. Afin d'être en mesure de répondre à ce problème, deux études (numérique et expérimentale) sont conjointement menées :

- Les écoulements réactifs tridimensionnels et instationnaires sont résolus au moyen du code de calcul développé au laboratoire pour simuler la propagation des détonations dans un tube de section circulaire. Jusqu'ici utilisé dans des configurations 1D et 2D uniquement, le code est d'abord testé sur des mélanges dont la libération d'énergie chimique s'effectue en une seule étape réactionnelle avant d'entreprendre les mélanges à double libération d'énergie. A partir des données numériques, le mécanisme particulier mettant en rotation le fluide est décrit.

Les simulations numériques des détonations des mélanges possédant une loi de production chimique marquée par deux longueurs caractéristiques sont ensuite mises en oeuvre. Aux paramètres cinétiques fixés, l'effet de la taille du confinement est étudié et les résultats numériques sont comparés aux expériences. Ces travaux, envisageables seulement avec un code et des architectures parallèles, poursuivent en quelque sorte l'étude bidimensionnelle initiée par Guilly [2007].

- L'étude expérimentale caractérise les détonations stationnaires et autonomes se propageant dans les tubes pour les mélanges stœchiométriques contenant O_2 avec l'un des trois combustibles usuels (H_2 , CH_4 et C_2H_6) particulièrement dans les conditions critiques d'existence des détonations stationnaires dans les tubes (régime hélicoïdal). L'effet de la dilution par Ar ou N_2 est analysé et la proportion avec l'air est systématiquement traitée. Bien que le choix des combustibles puisse immédiatement intéresser les secteurs de l'énergie qui utilisent ces compositions, leurs caractéristiques sont intéressantes d'un point de vue fondamental car la complexité de leur mécanisme cinétique s'accroît tout en étant inclus les uns dans les autres. Ces mélanges réactifs dilués présentent généralement une loi de libération d'énergie en deux étapes globales sans toutefois produire une double structure cellulaire.

Ce mémoire est organisé autour de six chapitres :

Le chapitre 1 rappelle les notions générales des détonations à travers une étude bibliographique. Les diverses notations employées dans la suite du mémoire sont progressivement introduites et quelques exemples illustrent le propos. La théorie de Chapman-Jouguet, le modèle de Zel'dovich-von Neuman-Döring et la manifestation des instabilités du front par la structure cellulaire de détonation sont successivement traités.

Le chapitre 2 décrit les méthodes numériques et les modélisations utilisées pour résoudre les écoulements réactifs instationnaires ainsi que la procédure pour obtenir les paramètres d'entrée à partir de simulations d'écoulements réactifs stationnaires monodimensionnels.

Le troisième chapitre présente les résultats numériques relatifs aux calculs instationnaires des détonations hélicoïdales dont la loi de libération d'énergie chimique est constituée d'une seule étape globale. Les calculs, nécessairement 3D, sont confrontés aux représentations actuelles et analysés du point de vue de la mécanique des fluides.

Le quatrième chapitre, également numérique, présente les résultats des calculs instationnaires des détonations dont la loi de libération d'énergie chimique est caractérisée par deux étapes exothermiques globales successives, irréversibles et de temps caractéristiques distincts conduisant à l'observation d'une double structure cellulaire. En fonction du diamètre de tube, différents régimes de détonation sont observés.

Le chapitre 5 décrit le dispositif expérimental et les techniques d'analyse associées i.e. capteur de pression, radar Doppler et traces sur plaques enfumées.

Le chapitre 6 détaille les résultats expérimentaux obtenus avec les pré-mélanges constitués d'un combustible (H_2 , CH_4 ou C_2H_6) avec O_2 dans les proportions stœchiométriques dilués ou non par un gaz inerte (N_2 ou Ar). Les résultats sont commentés à l'aide des lois de libération d'énergie issus de calculs de la zone de réaction avec un mécanisme détaillé de cinétique chimique (modèle ZND).

Enfin, le chapitre de conclusion fournit une synthèse des résultats numériques et expérimentaux et propose quelques perspectives pour poursuivre cette étude.

CHAPITRE 1

Généralités sur les détonations

Chapitre 1

Généralités sur les détonations

1.1 Théorie Chapman-Jouguet

1.1.1 Modélisation du problème [Chapman, 1899; Jouguet, 1905]

Dans le cadre de cette théorie, la détonation est assimilée à une discontinuité plane totalement réactive qui se propage à la célérité D (figure 1.1). W (respectivement u) est la vitesse matérielle dans le repère lié à la discontinuité réactive (respectivement lié au laboratoire).

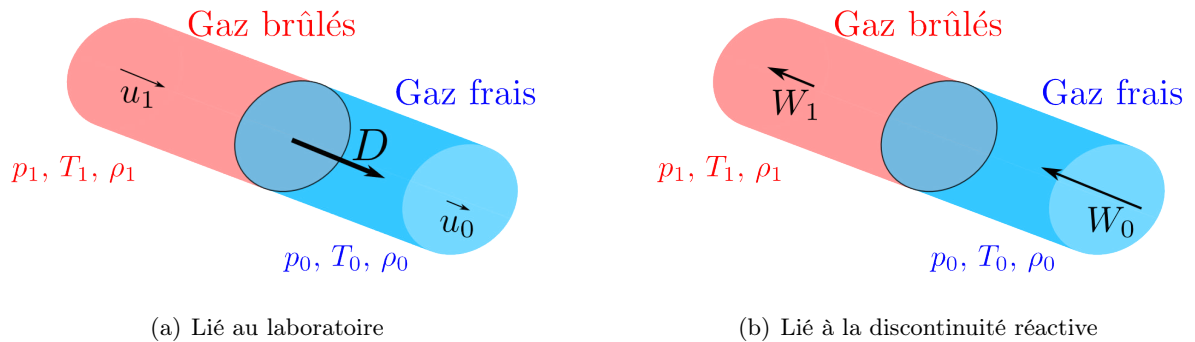


FIG. 1.1 – Systèmes de coordonnées liés par la relation $W = -(D - u)$.

Les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie donnent dans le repère lié à la discontinuité réactive :

$$\rho_1 W_1 = \rho_0 W_0 \quad (1.1a)$$

$$p_1 + \rho_1 W_1^2 = p_0 + \rho_0 W_0^2 \quad (1.1b)$$

$$h_1 + \frac{W_1^2}{2} = h_0 + \frac{W_0^2}{2} \quad (1.1c)$$

où ρ , p et h sont respectivement la densité, la pression et l'enthalpie absolue. Les indices $_0$ et $_1$ se rapportent respectivement au fluide avant et après la discontinuité réactive. Il est inutile de représenter les effets dissipatifs (viscosité, conduction) dans cette approche [Kuo, 1986, p. 235].

L'étude de l'existence de solutions physiques au système (1.1) est détaillée dans de nombreux ouvrages [Stanukovich, 1960; Kuo, 1986; Glassman, 1987] et peut être illustrée par la représentation commode dans le plan (p, v) .

Les équations (1.1a) et (1.1b) se combinent pour donner les vitesses relatives à la discontinuité réactive :

$$W_0 = v_0 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \quad (1.2a)$$

$$W_1 = v_1 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \quad (1.2b)$$

où $v = \frac{1}{\rho}$ est le volume spécifique. L'expression (1.2a) permet d'obtenir l'équation de la droite de Rayleigh-Michelson dans le plan (p, v) :

$$p_1 = -\dot{m}^2(v_1 - v_0) + p_0 \quad (\text{où } \dot{m} = \rho_0 W_0 \text{ est le débit masse}) \quad (1.3)$$

La substitution de (1.2a) et (1.2b) dans l'équation de bilan d'énergie (1.1c) permet d'obtenir l'équation de l'adiabatique de Crussard dans le plan (p, v) :

$$h_1 - h_0 = \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1) \quad (1.4)$$

La chaleur de réaction $Q_{PT} = -\Delta_r h^* = h_0^* - h_1^*$, constante du problème, peut également être introduite en écrivant l'enthalpie absolue h comme la somme des enthalpies de référence à T^* (h^*) et sensible ($\hat{h} = h - h^*$) :

$$\hat{h}_1 - \hat{h}_0 - Q_{PT} = \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1) \quad (1.5)$$

Pour un mélange réactif et des conditions initiales donnés, l'adiabatique de Crussard et la droite de Rayleigh-Michelson sont donc déterminées et trois cas de figure peuvent se produire (cf. fig. 1.2) :

- La droite de Rayleigh-Michelson ne coupe pas la courbe de Crussard : il n'y a pas de solution pour la propagation de la détonation.
- La droite de Rayleigh-Michelson tangente la courbe de Crussard : la solution correspond à la célérité minimale de la détonation ; ce point est appelé Chapman-Jouguet.
- La droite de Rayleigh-Michelson coupe la courbe de Crussard en deux points : seul le cas où $p > p_{CJ}$ (branche des détonations fortes) est observé expérimentalement.

1.1.2 Etude au point CJ

Comme h_0 , p_0 et v_0 sont constants, l'équation (1.4) se différencie en :

$$dh_1 = T_1 ds_1 + v_1 dp_1 = \frac{1}{2}[dp_1(v_0 + v_1) + dv_1(p_1 - p_0)] \quad (1.6)$$

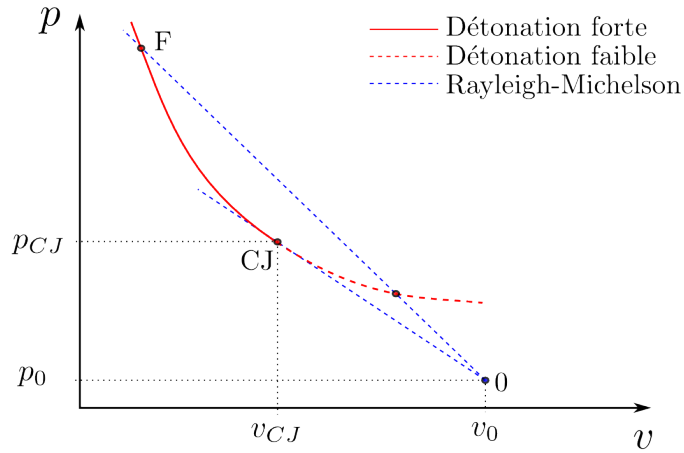


FIG. 1.2 – Droite de Rayleigh-Michelson et adiabatique de Crussard dans le plan (p,v) .

et la condition de tangence entre la droite de Rayleigh-Michelson et l'adiabatique de Crussard s'obtient lorsque $ds_1 = 0$:

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial v} \right)_s = \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} (= c_1) \quad (1.7)$$

De plus, en travaillant avec l'expression (1.6) on peut obtenir :

$$\frac{d^2 s_1}{dv_1^2} = \frac{v_0 - v_1}{2T_1} \frac{d^2 p_1}{dv_1^2} + \frac{1}{2T_1} \frac{d^2 p_1}{dv_1^2} > 0 \quad (1.8)$$

qui signifie que l'état Chapman-Jouguet correspond à un minimum d'entropie et qui permet d'établir la condition de sonicité au point de tangence :

$$2T_1 \frac{ds_1}{dv_1} \frac{v_1^2}{v_0 - v_1} = \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} v_1^2 + \frac{\partial p_1}{\partial v} v_1^2 = 0 = u_1 - c_1 \quad (1.9)$$

Par ailleurs, $D - u_0 = u_1 + c_1$ au point de tangence.

1.1.3 Calcul de l'état CJ

Les codes thermodynamiques (STANJAN [Reynolds, 1986], GASEQ [Morley, 2005], TDS [Victorov *et al.*, 2001], SDTOOLBOX [Browne *et al.*, 2007]...) disposent des grandeurs thermodynamiques pour chaque espèce tabulée par des polynômes (base de donnée JANAF [Chase *et al.*, 1985]) et résolvent les équations de bilan (1.1) par une méthode itérative de type Newton-Raphson en considérant plusieurs espèces dans les produits de réaction.

A titre d'exemple, le tableau 1.1 présente les caractéristiques *CJ* correspondant au mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1\text{atm}$ et $T_0=298\text{K}$ calculées à l'aide du code thermodynamique TDS et signale la différence qui peut exister entre les paramètres figés et équilibres.

	ρ_0	γ_0	D_{CJ}	u_{CJ}	p_{CJ}	T_{CJ}	ρ_{CJ}
Unités	kg/m ³	–	m/s	m/s	bar	K	kg/m ³
	0.491	1.401	2841.6	1296.1	19.6	3682	1.108

c_e	c_f	$c_{p,e}$	$c_{p,f}$	$\gamma_e = \frac{c_{p,e}}{c_{v,e}}$	$\gamma_f = \frac{c_{p,f}}{c_{v,f}}$	$-\left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln v}\right)_s$
m/s	m/s	J/(kg.K)	J/(kg.K)	–	–	–
1545	1605	16500	3200	1.222	1.218	1.129

TAB. 1.1 – Caractéristiques CJ obtenues avec le code thermodynamique TDS pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1\text{atm}$ et $T_0=298\text{K}$. Les indices e et f se rapportent respectivement aux valeurs à l'équilibre et figée.

Les deux célérités du son (figée et équilibre) sont liées par la relation (1.10) :

$$\begin{aligned}
c_e^2 &= \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{s,\Delta_r G=0} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{s,x_i} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial p}{\partial x_i}\right)_{\rho,s,\Delta_r G=0} \left(\frac{\partial x_i}{\partial \rho}\right)_{s,\Delta_r G=0} \\
&= c_f^2 + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial p}{\partial x_i}\right)_{\rho,s,\Delta_r G=0} \left(\frac{\partial x_i}{\partial \rho}\right)_{s,\Delta_r G=0}
\end{aligned} \tag{1.10}$$

qui souligne l'importance des équilibres chimiques (notamment les dissociations) dans l'expression de la célérité du son c_e (x_i est la quantité de matière de l'espèce i). Il faut donc distinguer la vitesse du son à l'équilibre c_e (lorsque les taux de réaction chimique sont infinis) de la vitesse du son c qui peut dépendre des temps de relaxation, des taux de réaction chimique ou d'autres phénomènes. On se réfère à la célérité du son figée c_f chaque fois que l'on fixe la composition chimique (i.e. les taux de réaction chimique sont considérés comme très faibles). La condition de sonicité de la théorie CJ utilise c_e .

1.1.4 Cas des gaz polytropiques

Le gaz polytropique est un gaz qui obéit à la loi d'état des gaz parfait $pv = rT$ et qui vérifie la relation $pv^\gamma = cst$ avec $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ le rapport des chaleurs massiques et $r = \frac{R}{W_m}$ où W_m représente la masse molaire. Sous cette propriété, de nombreuses simplifications apparaissent. L'enthalpie s'écrivant dorénavant $h = c_p T = \frac{\gamma p v}{\gamma - 1}$ est définie à une constante près : la chaleur Q libérée par la réaction chimique relie h_0 et h_1 . Le système (1.1) obtenu précédemment s'écrit :

$$|W_0| = D - u_0 = v_0 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \tag{1.11}$$

$$|W_0| - |W_1| = u_1 - u_0 = \sqrt{(p_1 - p_0)(v_0 + v_1)} \tag{1.12}$$

$$\gamma_1 \frac{p_1 v_1}{\gamma_1 - 1} - \gamma_0 \frac{p_0 v_0}{\gamma_0 - 1} - Q = \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1) \tag{1.13}$$

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial v}\right)_{s_1} = \frac{\gamma_1 p_1}{v_1} = \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} \quad (1.14)$$

Les valeurs de γ_0 et γ_1 peuvent être très différentes lorsqu'il y a une forte libération d'énergie (cf. tableau 1.1).

A partir de (1.13), on peut écrire :

$$\frac{p_1}{p_0} = \frac{\frac{\gamma_0+1}{\gamma_0-1} - \frac{\rho_0}{\rho_1} + 2Q\frac{\rho_0}{p_0}}{\frac{\gamma_1+1}{\gamma_1-1} \frac{\rho_0}{\rho_1} - 1} \quad (1.15)$$

En éliminant v_1 dans les équations (1.11) et (1.12), on obtient

$$(D - u_0)^2 = \frac{(p_1 - p_0) \left(\frac{\gamma_1+1}{\gamma_1-1} p_1 + p_0 \right)}{\rho_0 \left[\frac{2}{\gamma_1-1} p_1 - \frac{2}{\gamma_0-1} p_0 - 2\rho_0 Q \right]} \quad (1.16)$$

La condition de tangence (1.14) donne :

$$\frac{v_1}{v_0} = \frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{\gamma_1 \frac{p_1}{p_0}}{(\gamma_1 + 1) \frac{p_1}{p_0} - 1} \quad (1.17)$$

qui peut encore s'écrire

$$v_0 - v_1 = v_0 \frac{p_1 - p_0}{p_1(\gamma_1 + 1) - p_0} \quad (1.18)$$

d'où grâce à (1.11)

$$\rho_0(D - u_0)^2 = (\gamma_1 + 1)p_1 - p_0 \quad (1.19)$$

qui sert à éliminer p_1 dans l'expression (1.16) et enfin obtenir

$$\left(\frac{D - u_0}{c_0}\right)^4 - 2\left(\frac{D - u_0}{c_0}\right)^2 \left[\frac{\gamma_1^2 - \gamma_0}{(\gamma_0 - 1)\gamma_0} + \frac{(\gamma_1^2 - 1)Q}{c_0^2} \right] + \frac{\gamma_1^2}{\gamma_0^2} = 0 \quad (1.20)$$

La solution de cette équation, pour le cas des détonations, fournit [Stanukovich, 1960] :

$$\frac{D - u_0}{c_0} = \sqrt{\frac{\gamma_1 - 1}{2} \left[(\gamma_1 + 1) \frac{Q}{c_0^2} + \frac{\gamma_0 + \gamma_1}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right]} + \sqrt{\frac{\gamma_1 + 1}{2} \left[(\gamma_1 - 1) \frac{Q}{c_0^2} - \frac{\gamma_0 - \gamma_1}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right]} \quad (1.21)$$

On utilise également la version inversée pour déterminer Q :

$$Q = \frac{c_0^2}{\gamma_1^2 - 1} \left(\frac{\left(\frac{D - u_0}{c_0}\right)^4 + \frac{\gamma_1^2}{\gamma_0^2}}{2\left(\frac{D - u_0}{c_0}\right)^2} - \frac{\gamma_1^2 - \gamma_0}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right) \quad (1.22)$$

Malheureusement, la chaleur libérée Q issue de la modélisation des gaz polytropiques n'est pas identiquement égale à la chaleur de la réaction globale de combustion Q_{PT} .

1.1.5 Relations approchées

Le tableau 1.2 rassemble les formules pour calculer les caractéristiques de l'état CJ pour un gaz polytropique avec γ constant et les expressions approchées sous les hypothèses de chocs forts ($D^2 \gg c_0^2$).

Gaz idéal c_p constant	Gaz idéal c_p constant $u_0 = 0$ et $D^2 \gg c_0^2$
$\frac{D - u_0}{c_0} = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)\frac{Q}{c_0^2} + 1} + \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{2}\frac{Q}{c_0^2}} \quad (1.23a)$	$D = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q} \quad (1.24a)$
$\frac{p_1}{p_0} = \frac{1}{\gamma + 1} \left((D - u_0)^2 \frac{\rho_0}{p_0} + 1 \right) \quad (1.23b)$	$p_1 = \frac{\rho_0 D^2}{\gamma + 1} \quad (1.24b)$
$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{v_0}{v_1} = \frac{\gamma + 1}{\gamma} + \frac{p_0}{\gamma p_1} \quad (1.23c)$	$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\gamma + 1}{\gamma} \quad (1.24c)$
$\frac{T_1}{T_0} = \frac{p_1 v_1}{p_0 v_0} \quad (1.23d)$	$\frac{T_1}{T_0} = \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1} \right)^2 \frac{D^2}{c_0^2} \quad (1.24d)$
$W_1 = c_1 = \sqrt{\gamma r T_1} \quad (1.23e)$	$c_1 = \frac{\gamma D}{\gamma + 1} \quad (1.24e)$
$u_1 + c_1 = D - u_0 \quad (1.23f)$	$u_1 = \frac{D}{\gamma + 1} \quad (1.24f)$

TAB. 1.2 – Caractéristiques de détonation CJ pour le gaz idéal à capacité calorifique constante et relations approchées dans l’hypothèse du choc fort.

1.2 Modèle Zeldovich-von Neumann-Döring

Ce modèle établi indépendamment par Zel’dovich [1940], von Neuman [1942] et Döring [1943] décrit l’évolution du système réactif entre l’état initial (gaz non choqué) jusqu’à l’état final (point Chapman-Jouguet). Il s’appuie sur la description physique d’une onde de détonation pensée par Vieille [1900].

1.2.1 Description du modèle

Considérant la propagation monodimensionnelle, plane et stationnaire d’une onde de détonation, le modèle ZND consiste à scinder la zone de réaction en deux parties : un choc considéré comme inerte comprime le mélange de façon adiabatique qui se retrouve à haute température (point von Neuman noté ZND sur la figure 1.3) suivi d’une zone de combustion amorcée par auto-allumage. L’ensemble se déplace de manière couplée, l’énergie libérée par la combustion permettant d’entretenir l’onde de choc.

Les caractéristiques ZND sont obtenues à l’intersection de la droite de Rayleigh-Michelson avec l’adiabatique d’Hugoniot.

Wood a montré l’existence d’une structure de type ZND lorsque les effets de transport, de viscosité et de conduction thermique sont pris en compte [Wood, 1961, 1963]. L’hypothèse d’un écoulement non visqueux et adiabatique dans la zone de réaction reste toutefois une bonne

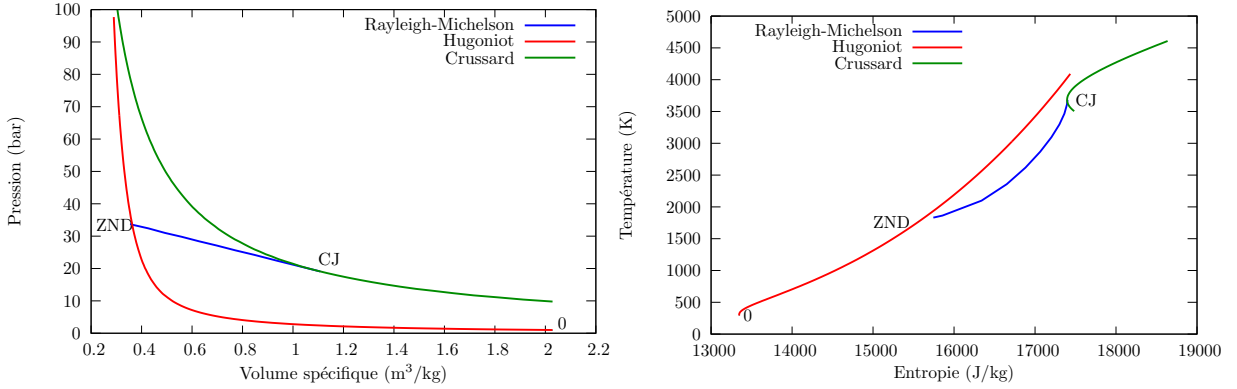


FIG. 1.3 – Représentation des adiabatiques d’Hugoniot, de Crussard et de la droite de Rayleigh-Michelson dans les diagrammes (p,v) et (T,s) selon le modèle ZND pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $T_0=298K$ et $p_0=1atm$.

approximation car la viscosité et la conduction agissent avant tout dans les zones où les gradients de vitesse et de température sont importants (i.e. dans l’épaisseur du choc considérée infiniment fine). D’autre part, le modèle suppose que l’équilibre collisionnel (équirépartition de l’énergie des modes de translation, rotation et vibration) est atteint avant que les réactions chimiques se manifestent.

1.2.2 Cas du gaz polytropique

Le tableau 1.3 rassemble les caractéristiques de l’état ZND pour le gaz polytropique.

Gaz ideal c_p constant	Gaz ideal c_p constant $u_0 = 0$ et $D^2 \gg c_0^2$
$\frac{\rho_{ZND}}{\rho_0} = \frac{(\gamma_0 - 1)M_0^2 + 2}{(\gamma_0 + 1)M_0^2}$ (1.25a)	$\frac{\rho_{ZND}}{\rho_0} \approx \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} \frac{\rho_{ZND}}{\rho_0} \approx \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1}$ (1.26a)
$\frac{p_{ZND}}{p_0} = \frac{2\gamma_0 M_0^2 - \gamma_0 + 1}{\gamma_0 + 1}$ (1.25b)	$p_{ZND} \approx \frac{2\gamma_0 M_0^2}{\gamma_0 + 1} \approx 2p_{CJ}$ (1.26b)
$\frac{T_{ZND}}{T_0} = \frac{p_{ZND}}{p_0} \frac{\rho_0}{\rho_{ZND}}$ (1.25c)	$T_{ZND} \approx \frac{2\gamma_0(\gamma_0 - 1)}{(\gamma_0 + 1)^2} = \frac{2(\gamma_1 - 1)}{\gamma_1} T_{CJ}$ (1.26c)
$u_{ZND} = \frac{2W_0}{\gamma_0 + 1} \left(1 - \frac{1}{M_0^2}\right)$ (1.25d)	$u_{ZND} \approx \frac{2W_0}{\gamma_0 + 1} \approx 2u_{CJ}$ (1.26d)

TAB. 1.3 – Caractéristiques de l’état ZND pour le gaz polytropique et relations approchées sous l’hypothèse de choc fort. ($M_0 = \frac{D}{c_0}$).

1.2.3 Application du modèle ZND pour l'étude de l'évolution des paramètres thermodynamiques dans la zone de réaction d'une détonation stationnaire

Pour obtenir les profils d'évolution des paramètres thermodynamiques et de la composition chimique dans la zone de réaction lors de la propagation stationnaire d'une détonation, il faut ajouter aux hypothèses du modèle ZND les lois de cinétiques chimiques qui gouvernent cette évolution. Plus le nombre d'espèces prises en compte est grand, plus le schéma cinétique (ensemble d'équations modélisant les réactions élémentaires) est complexe. Par exemple, le mécanisme d'oxydation du nitrométhane gazeux inclut 67 espèces et 365 réactions [Djebaili-Chaumeix *et al.*, 1997]. Vasil'iev attire l'attention sur le fait que les domaines de validation des schémas détaillés sont souvent hors des zones d'étude des détonations [Vasil'ev, 2007, 2008].

Les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et des espèces s'écrivent dans le repère lié au laboratoire (x, t) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho u) \quad (1.27a)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -\nabla(\rho u u) - \nabla p \quad (1.27b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\nabla(\rho E u) - \nabla(pu) \quad (1.27c)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} = -\nabla(\rho Y_k u) + \rho \dot{Y}_k \quad \text{pour } k \in \{1, \dots, N-1\} \quad (1.27d)$$

$$\sum_{k=1}^{N-1} Y_k = 1 \quad (1.27e)$$

où ρ représente la densité, t le temps, u la vitesse matérielle des particules dans le repère absolu, E l'énergie totale ($E = e + \frac{1}{2}u^2$), p la pression, Y_k la fraction massique de l'espèce k , \dot{Y}_k le taux de production de l'espèce k et N le nombre d'espèces considérées.

Dans le cas de la propagation stationnaire (i.e. $D = \text{constante}$), ces équations sont généralement écrites dans le repère relatif au choc (χ, τ) . Les deux repères, absolu et relatif, sont liés par la relations $\chi = Dt - x$ et les relations de passage sont :

$$\begin{cases} \frac{\partial \cdot}{\partial t} = \frac{\partial \cdot}{\partial \tau} + D \frac{\partial \cdot}{\partial \chi} \\ \frac{\partial \cdot}{\partial x} = -\frac{\partial \cdot}{\partial \chi} \end{cases} \quad (1.28)$$

Chaque équation se simplifie par la relation :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla A u = \frac{\partial A}{\partial \tau} + D \frac{\partial A}{\partial \chi} - \frac{\partial A u}{\partial \chi} = \frac{\partial A(D - u)}{\partial \chi} = \frac{dA w}{d\chi} \quad (1.29)$$

et le système (1.27) s'écrit finalement dans le repère lié au choc :

$$\frac{dw}{d\chi} = -\frac{w}{\rho} \frac{d\rho}{d\chi} \quad (1.30a)$$

$$\frac{dp}{d\chi} = w^2 \frac{d\rho}{d\chi} \quad (1.30b)$$

$$\rho w \frac{de}{d\chi} = -p \frac{dw}{d\chi} \quad (1.30c)$$

$$\frac{dY_k}{d\chi} = \frac{\dot{Y}_k}{w} \quad (1.30d)$$

La résolution de ce système d'équations ordinaires couplées nécessite en plus l'expression d'une équation d'état. Pour les gaz parfaits, on utilise :

$$p = \rho r T \quad (1.31)$$

où r est, comme à la section précédente, le rapport de la constante des gaz parfaits R avec la masse molaire du gaz.

Il existe actuellement deux programmes pour calculer la zone de réaction selon le modèle ZND. La première version, développée par Shepherd dans les années 80, utilise la librairie Chemkin [Kee *et al.*, 1989] tandis que la version la plus récente maintenue par Browne *et al.* [2007] utilise la librairie Cantera [Goodwin, 2002]. Les deux versions considèrent les paramètres thermodynamiques figés dans la zone de réaction. Par conséquent le Mach indiqué doit être corrigé par le rapport des célérités du son figée et équilibre pour obtenir un nombre de Mach final unitaire lorsque les réactions sont terminées.

A titre d'exemple, les calculs de la zone de réaction de la détonation sont présentés pour deux mélanges :

- le mélange H_2/O_2 à richesse $\phi = 1$ présente globalement une loi de libération d'énergie en une étape (fig. 1.4 et 1.5).
- le mélange $H_2/(NO_2, N_2O_4)$ à richesse $\phi = 1.5$ présente globalement une loi de libération d'énergie en deux étapes exothermiques successives (fig. 1.6 et 1.7) : une première étape, rapide, convertit le NO_2 en NO ($NO_2 + H \longrightarrow NO + OH$) et est suivie par une seconde étape, retardée par rapport à la première, correspondant à la consommation du NO .

D'après les figures 1.4 à 1.7, le solveur utilisé dans la version la plus récente de ZND [Brown *et al.*, 2006 v2.3] est beaucoup plus robuste à proximité du point CJ et donne des valeurs finales beaucoup plus proche de CJ : un écart maximum de 0.2% est observé avec les fractions molaires des espèces calculées avec un code thermodynamique.

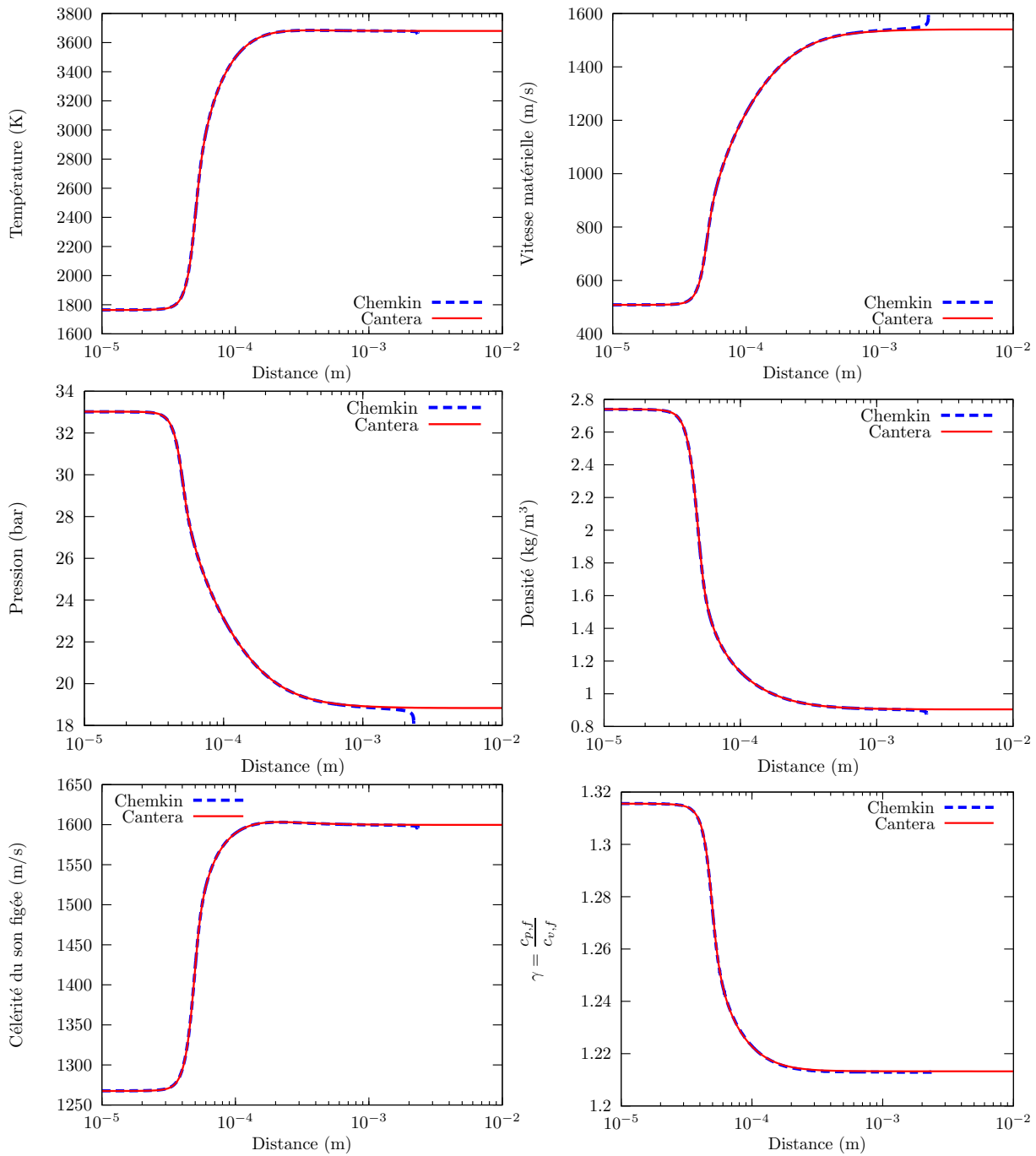


FIG. 1.4 – Profils de température, vitesse matérielle, pression, densité, célérité du son et γ dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1\text{atm}$ et $T_0=298\text{K}$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique GRI 3.0 [Smith *et al.*, 1999].

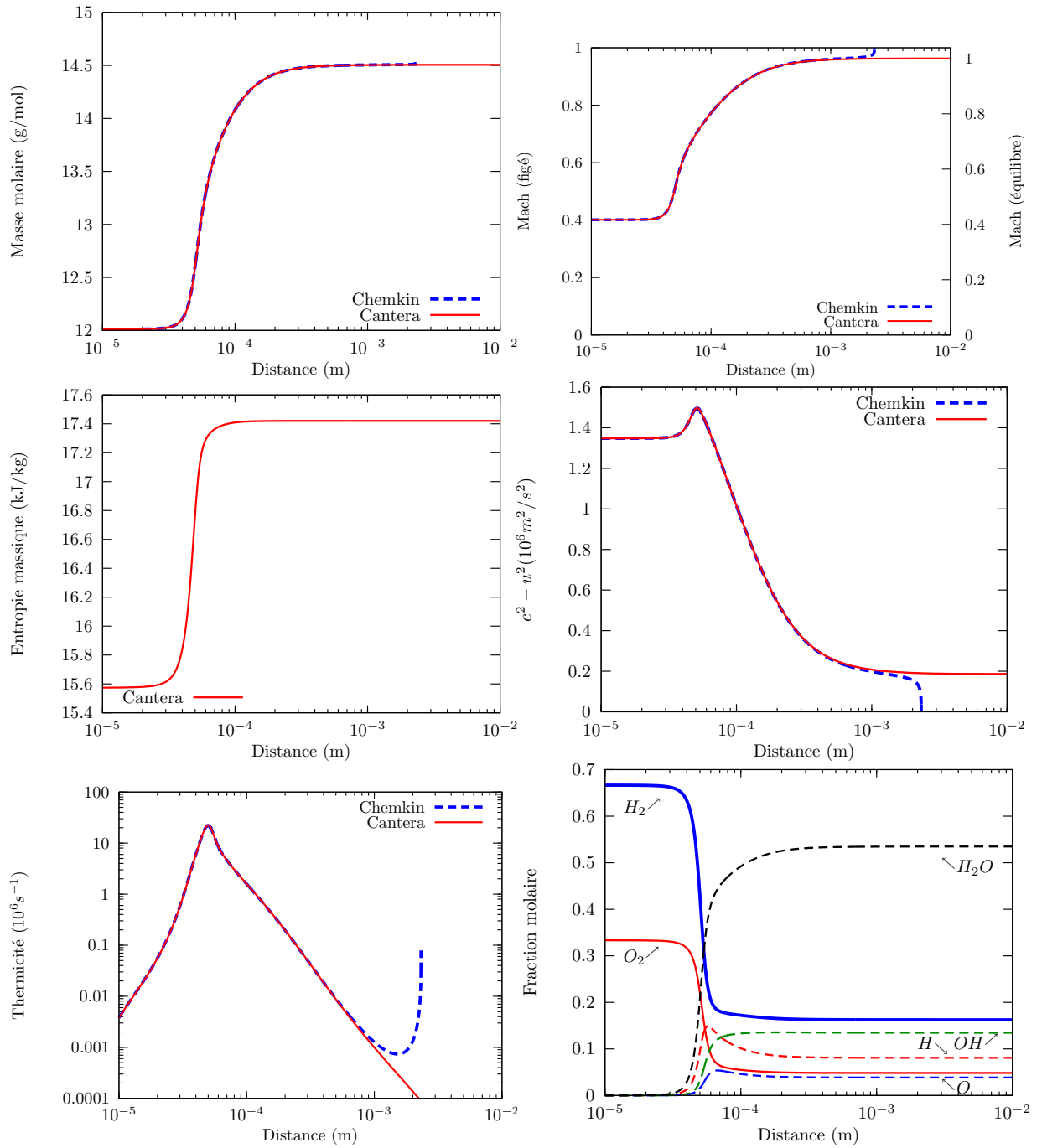


FIG. 1.5 – Profils d'évolution de la masse molaire, du nombre de Mach, de l'entropie massique, de thermicité et des espèces majoritaires dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ à $p_0=1\text{atm}$ et $T_0=298\text{K}$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique GRI 3.0 [Smith *et al.*, 1999].

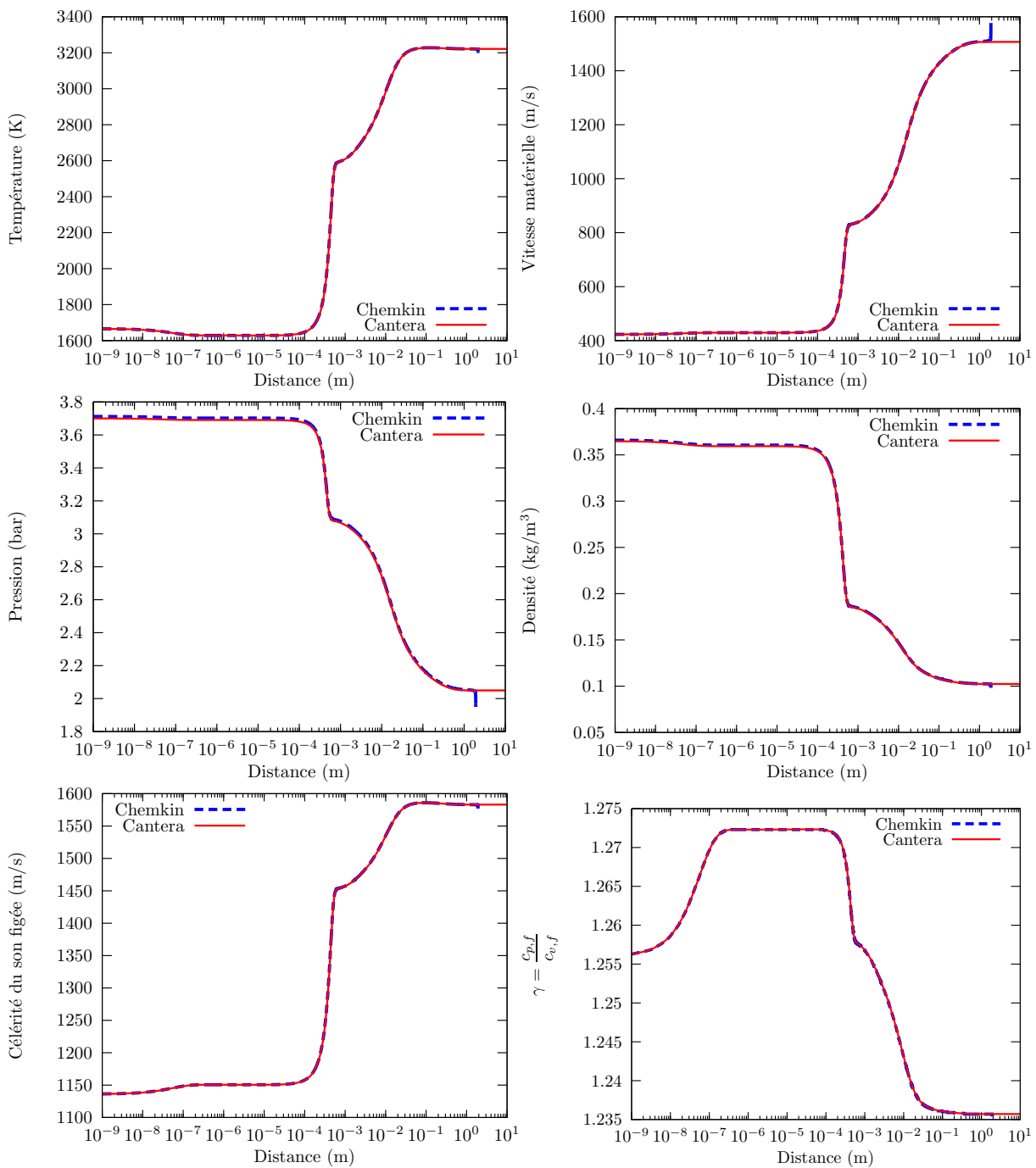


FIG. 1.6 – Profils de température, vitesse matérielle, pression, densité, célérité du son et γ dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2/NO_2, N_2O_4$ à $p_0 = 0.1\text{bar}$, $T_0 = 293\text{K}$ et $\phi = 1.5$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique de Konnov [2000 v0.5].

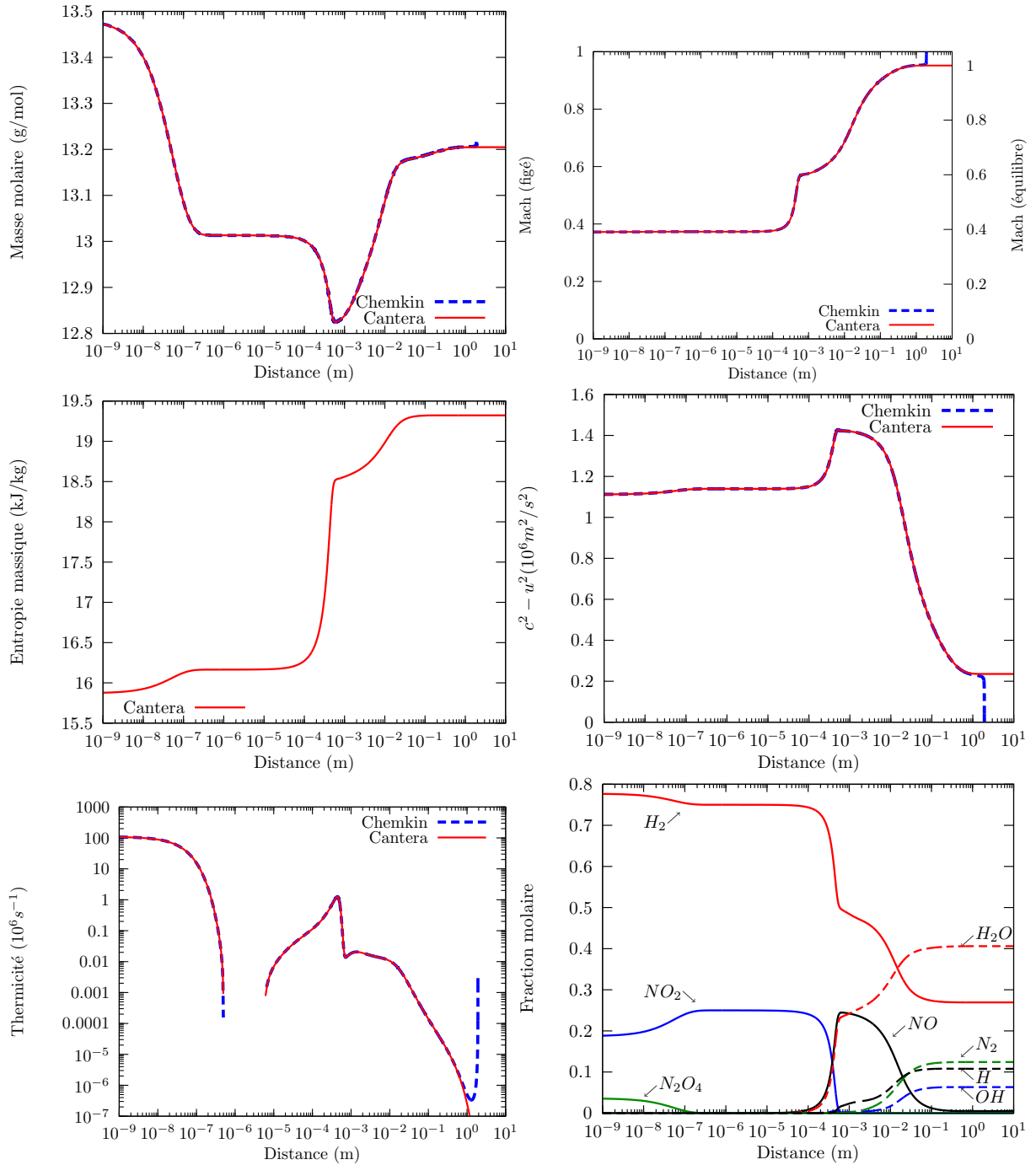
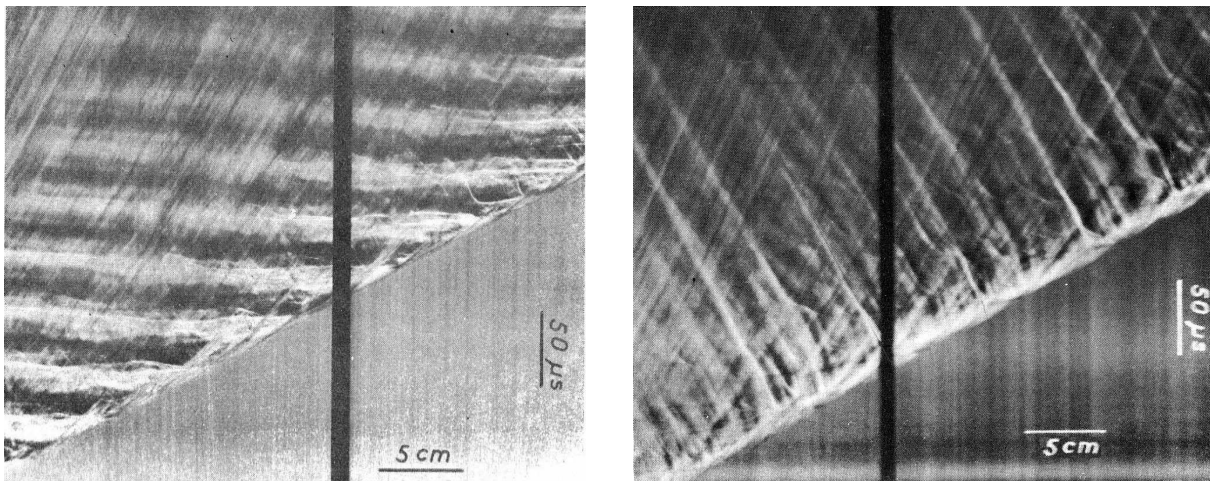


FIG. 1.7 – Profils d'évolution de la masse molaire, du nombre de Mach, de l'entropie massique, de thermicité et des espèces majoritaires dans la zone de réaction (ZND) pour le mélange $H_2/NO_2, N_2O_4$ à $p_0 = 0.1\text{bar}$, $T_0 = 293\text{K}$ et $\phi = 1.5$. Les deux solveurs ZND utilisent le schéma cinétique de Konnov [2000 v0.5].

1.3 Instabilité du front de détonation

Les caractéristiques de détonation données par la théorie CJ (et ZND) sont en bon accord avec les observations expérimentales. Toutefois, ces modèles ne rendent pas compte de la structure réelle locale du front de détonation.

Campbell et Woodhead ont remarqué pour la première fois en 1927 une forme ondulatoire de l'onde de détonation [Campbell et Woodhead, 1927] sur des enregistrements chronostrioscopiques semblables à ceux de la figure 1.8. Ces enregistrements indiquent que la structure réelle du front de détonation est tridimensionnelle et instationnaire.



(a) Couteau horizontal

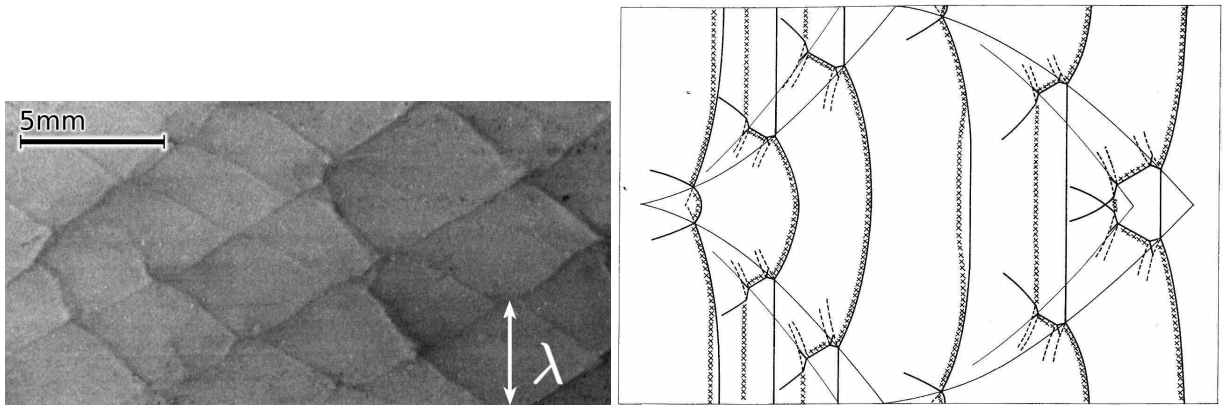
(b) Couteau vertical

FIG. 1.8 – Chronostriographies de la propagation d'une détonation dans le mélange $C_3H_8 + 5O_2 + 16N_2$ à $p_0=1\text{atm}$ et $T_0=293\text{K}$ [Brochet, 1966]. Le temps est enregistré sur l'axe vertical (de bas en haut) et la distance parcourue par l'onde de détonation est mesurable sur l'axe horizontal (de gauche à droite) ; la détonation se propage de gauche à droite.

1.3.1 Détonation multi-têtes, cellules de détonation

Denisov et Troshin ont étudié l'interaction des ondes de choc dans le front de détonation grâce à la technique des traces sur des plaques recouvertes de noir de carbone [Antolik, 1875] placés à l'intérieur du tube à détonation parallèlement à l'écoulement [Denisov et Troshin, 1959, 1962]. Un enregistrement typique est reporté sur la figure 1.9(a) où une structure cellulaire périodique, bien organisée apparaît et dont la largeur caractéristique est notée λ . Chaque trace coïncide avec la trajectoire d'un point triple issu de l'intersection de trois ondes de chocs dans la configuration simple de Mach.

Le processus de formation de cette structure est présenté sur la figure 1.9(b) : la collision des ondes transverses de deux points triples voisins est génératrice d'une explosion locale sous la forme



(a) Traces du passage d'une détonation sur plaque enfumée ($2H_2 + O_2$, $p_0 = 0.3\text{bar}$, $T_0 = 298\text{K}$).

(b) Processus de formation d'une cellule de détonation d'après Strehlow et Crooker [1974].

FIG. 1.9 – Trajectoires des points triples d'une détonation multitêtes.

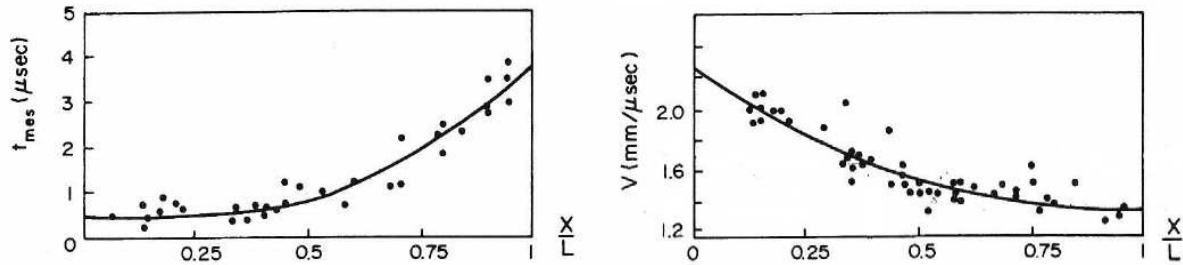


FIG. 1.10 – Mesures du temps d'induction local et de la vitesse locale sur l'axe d'une cellule de détonation [Dormal *et al.*, 1979].

d'une détonation forte ($D \approx 1.3 - 1.8D_{CJ}$) qui s'amortit progressivement jusqu'au réamorçage produisant la cellule suivante. A partir du milieu de la cellule où $D \approx D_{CJ}$ jusqu'à la fin où $D \approx 0.6 - 0.8D_{CJ}$, la zone de réaction est découplée progressivement du choc incident (fig. 1.9(b) et 1.10). Les traces sur plaques enfumées apparaissent uniquement lors de la propagation d'une détonation, aucune trace n'est observée lorsque le choc et la zone de combustion (flamme) sont découplés [Oppenheim, 1965].

L'existence d'une corrélation entre la taille de la cellule de détonation λ et l'épaisseur monodimensionnelle plane de la longueur d'induction L_i de la réaction globale a été proposée par Shchelkin et Troshin [1963a,b] :

$$\lambda = kL_i \quad (1.32)$$

Les figures 1.11 et 1.12 rassemblent quelques résultats expérimentaux montrant la variation de λ avec la pression initiale et la richesse. Même si la constante k n'est pas universelle, la taille de la cellule λ constitue une bonne échelle pour qualifier la détonabilité d'un mélange réactif.

De nombreux auteurs ont tenté d'élaborer des modèles monodimensionnels pour étudier la stabilité de l'onde transverse dans la zone de réaction [Strehlow *et al.*, 1969; Strehlow et Engel,

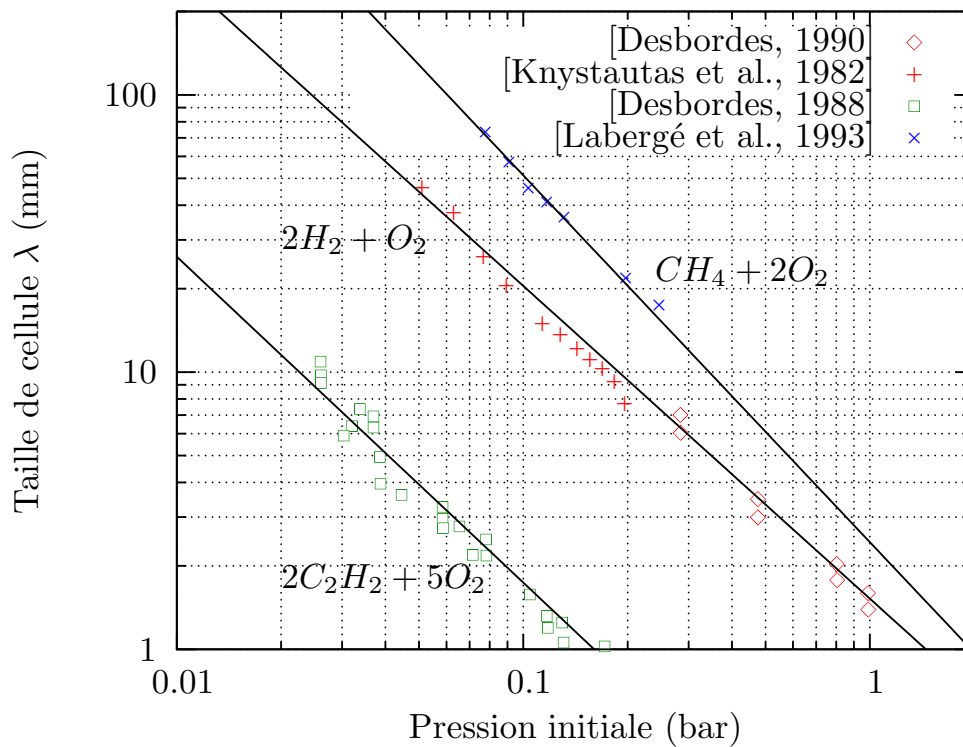


FIG. 1.11 – Variation de la taille de la cellule de détonation en fonction de la pression initiale pour des mélanges comprenant de l'hydrogène ou différents hydrocarbures en proportions stœchiométriques avec l'oxygène.

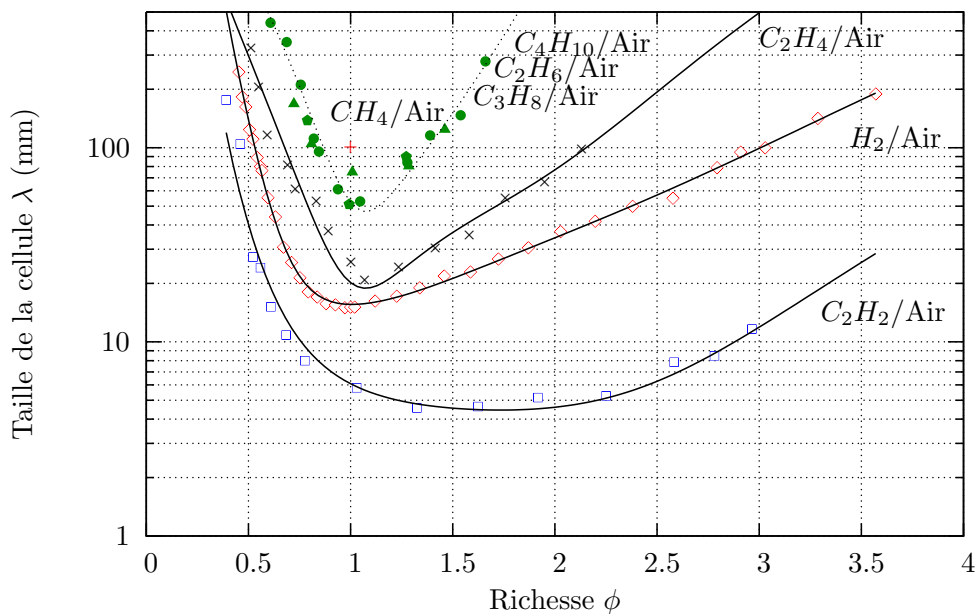


FIG. 1.12 – Variation de la taille de la cellule de détonation avec la richesse pour différents hydrocarbures mélangés avec de l'air [Knystautas *et al.*, 1984] et hydrogène mélangé avec de l'air [Guirao *et al.*, 1982] ($p_0=1atm$).

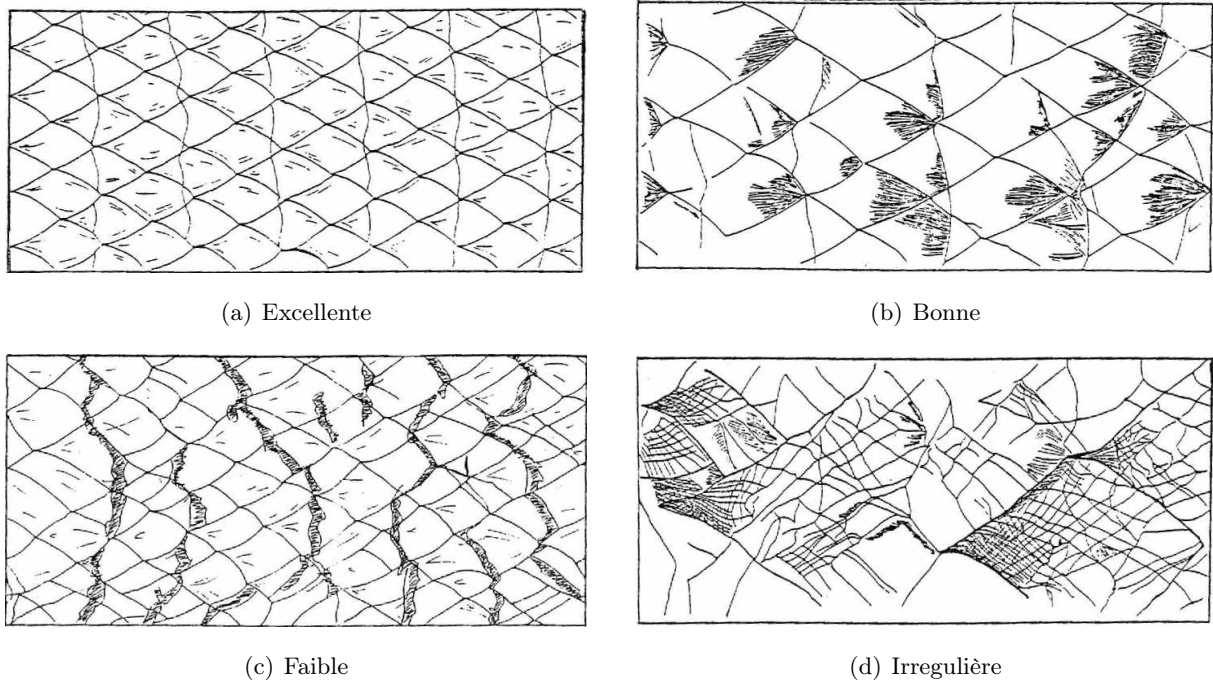


FIG. 1.13 – Schéma des divers types de régularité de la structure des ondes de détonation proposé par Libouton *et al.* [1981].

1969; Bartel et Strehlow, 1966; Kasimov et Stewart, 2002]. En effet, la structure cellulaire est plus ou moins régulière en fonction du mélange réactif utilisé. Strehlow *et al.* avaient proposé une classification car ils avaient noté que la régularité dépendait d'une part de la géométrie du tube et d'autre part de la capacité calorifique du gaz : elle est meilleure dans les tubes carrés ou rectangulaires et pour les gaz à faible capacité calorifique [Strehlow *et al.*, 1967].

Plus tard, Libouton *et al.* [1981] (parmi d'autres) ont démontré que l'irrégularité est intimement liée à la valeur de l'énergie d'activation réduite ($\frac{Ea}{RT_{ZND}}$) de la réaction de décomposition. Pour les mélanges dont l'énergie d'activation réduite est faible, le processus le plus lent est celui de ramification des chaînes. La dilution par un gaz monoatomique rend la structure de détonation plus régulière pour deux raisons : d'une part l'efficacité des réactions de recombinaisons est réduite à cause du caractère monoatomique des molécules, et d'autre part les réactions de ramification sont favorisées à cause de la chaleur spécifique réduite du diluant qui contribue à augmenter la température au point ZND. Une classification est proposée sur la figure 1.13.

Si aucun modèle ne permet de prévoir la taille de la cellule de détonation aujourd'hui, les études analytiques et numériques sur la stabilité du front d'une détonation plane permettent de dire que la formation des ondes transverses est d'origine acoustique [He et Clavin, 1994; Stewart *et al.*, 1996; Clavin, 2004; Yungster et Radhakrishnan, 2005]. Selon Bartel et Strehlow [1966], pour qu'une onde acoustique puisse se développer il faut qu'un couplage existe et persiste entre l'onde et une source d'énergie (i.e. la libération d'énergie chimique par les réactions pour le cas

des détonations).

La puissance des calculateurs permet depuis quelques années d'étudier la structure cellulaire par des calculs hydrodynamiques [Taki et Fujiwara, 1978; Oran *et al.*, 1982; Lefebvre *et al.*, 1992; Khasainov et Veyssière, 1996; Gamezo *et al.*, 1999; Sharpe et Falle, 2000; Hu *et al.*, 2004, 2005; Guilly *et al.*, 2006; Sharpe et Quirk, 2008, ...].

Le caractère fortement non uniforme (et pulsé) de l'écoulement entraîne une surface de Chapman-Jouguet non plane. D'après les expériences de Vasil'ev *et al.* [1972a,b], cette surface se trouve à $3.5-10 \lambda$ derrière le front de choc de la détonation.

1.3.2 Détonations marginales et hélicoïdales

Lorsque le front de détonation est composé d'un seul point triple, la détonation est dite *marginale* ou à une seule tête. Le terme détonation hélicoïdale est quant à lui réservé aux détonations marginales qui se propagent dans les tubes circulaires. Le régime marginal de détonation est observé lorsque la taille du confinement d et la taille de la cellule de détonation λ sont semblables ; celui-ci constitue donc le régime limite de propagation de la détonation, la propagation ne peut pas s'opérer de manière stationnaire si $d \ll \lambda$.

La figure 1.14 visualise les traces laissées par une détonation hélicoïdale. Les caractéristiques de cette structure sont : le pas P qui est la distance axiale entre les deux motifs, l'épaisseur de bande e dans laquelle une structure fine peut être observée et l'angle α qui mesure l'inclinaison des bandes par rapport à l'axe du tube.

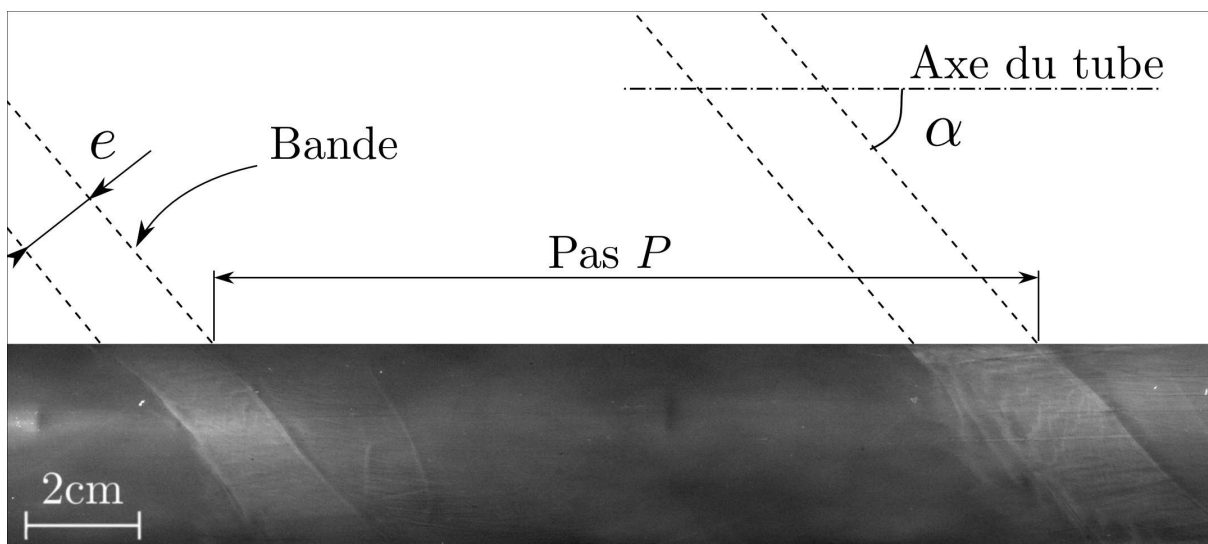
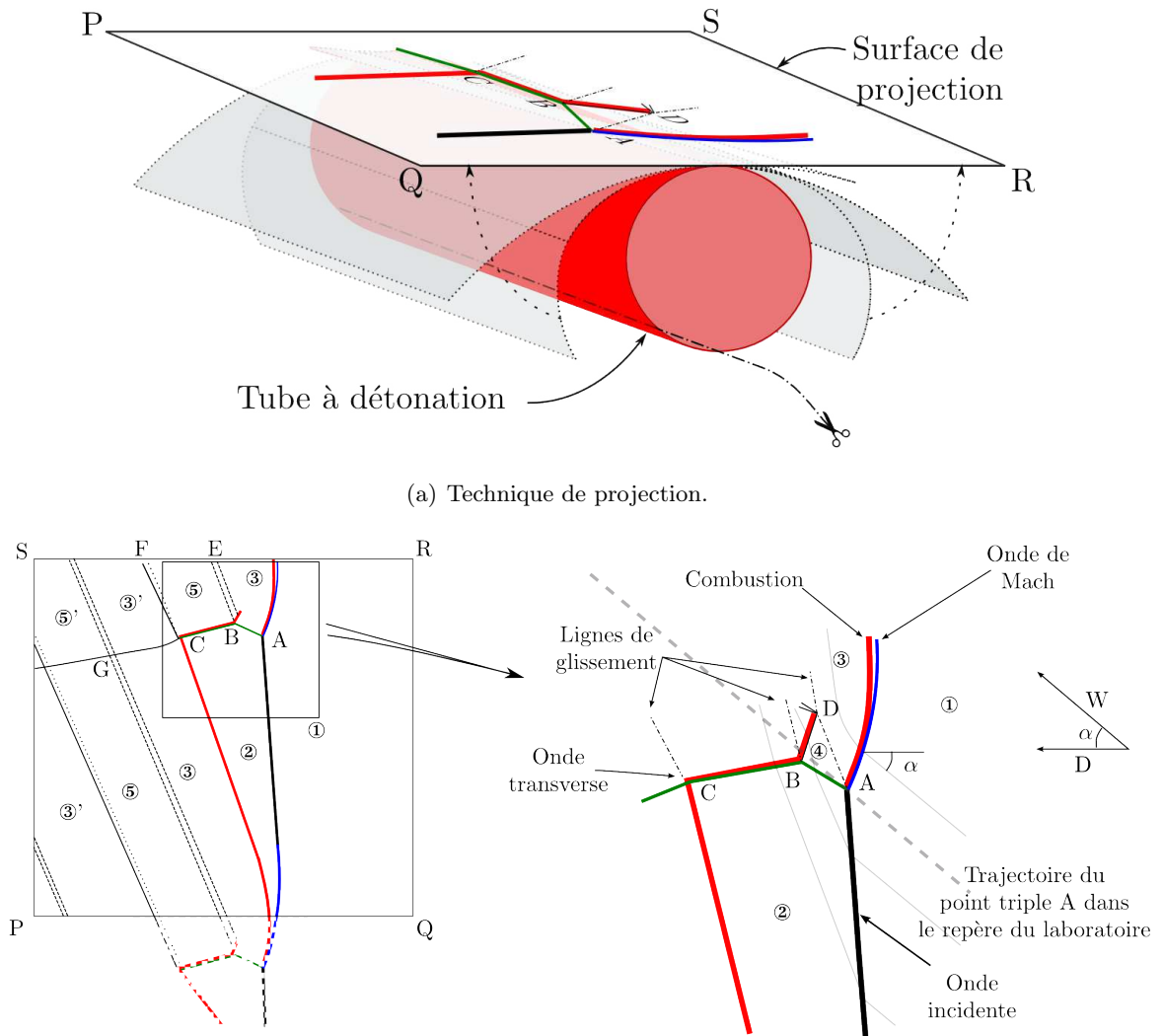


FIG. 1.14 – Traces d'une détonation hélicoïdale sur plaque enfumée ($C_2H_6 + 3,5O_2 + 13,16Ar$ à $p_0=35\text{mbar}$). La moitié de la circonférence du tube est représentée.

Le régime de propagation hélicoïdal, observé sur une plage de pression plus ou moins im-

portante [Gordon *et al.*, 1958], a fait l'objet d'importantes études expérimentales [Campbell et Woodhead, 1927; Manson, 1946; Duff, 1961; Dove et Wagner, 1962; Schott, 1965; Voitsekhovskii *et al.*, 1969; Nikolaev *et al.*, 1978, ...] et numériques [Washizu et Fujiwara, 1993; Tsuboi *et al.*, 2005, 2007]. Ce régime permet d'observer, à taille de confinement donnée, la cellule de détonation sous sa forme la plus large et donc d'en analyser les moindres détails. Il a ainsi été possible de restituer précisément la forme du front de détonation qui est schématisé sur la figure 1.15.



(b) Interaction des ondes de choc sur la surface du tube d'après Schott [1965] et Voitsekhovskii *et al.* [1969].

FIG. 1.15 – Structure instantanée du front de détonation à une seule tête dans un tube circulaire. Configuration simple de Mach.

Les conditions thermodynamiques des différentes zones numérotées ① à ⑤' de la figure 1.15(b) peuvent être calculées en appliquant les relations de choc (inerte et/ou réactif) ou en utilisant la technique des polaires [Macpherson, 1969a,b; Oppenheim *et al.*, 1968; Nikolaev *et al.*, 1978; Huang *et al.*, 2000].

La zone entre ① et ③ à proximité du point triple A est une détonation forte. La vitesse normale est quasiment égale à la vitesse relative $W = D/\cos(\alpha)$. Ce choc est plus intense comparativement à celui situé entre la région ① et ② et par conséquent la zone d'induction est plus courte. La combustion instantanée derrière le front BC est nécessairement assurée par un choc (onde transverse). La moitié du flux total passe par la zone ② [Schott, 1965].

Dans le cas d'une détonation hélicoïdale, la forme de l'onde est stationnaire par rapport au point triple et l'angle α entre l'axe du tube et les lignes de courant vaut approximativement 45° . Au contraire, dans la propagation des détonations marginales dans les géométries parallélépipédiques, cet angle n'est pas constant au cours du temps. Les détonations marginales ont été étudiées par de nombreux auteurs [Edwards *et al.*, 1966; Edwards et Parry, 1969; Gamezo *et al.*, 2000].

1.3.3 Théorie acoustique des détonations

Les enregistrements chronophotographiques et chronostrioscopiques qui ont historiquement alimenté les premières études du régime hélicoïdal de détonation montrent que, d'une part, un mouvement ondulatoire du front de détonation se superpose à un mouvement uniforme et, d'autre part, l'alternance de l'éclairement des gaz brûlés (stries) est synchronisée avec ces ondulations. Les enregistrements suggèrent qu'un volume de gaz à haute température tourne à une certaine fréquence.

En analysant attentivement les clichés chronostrioscopiques de la figure 1.8 (p. 20), deux familles de courbes s'esquissent : l'une correspond au parcours des particules dans les gaz brûlés ; l'autre, incliné vers l'arrière, se déplace à une vitesse proche de celle du son en quittant le front de détonation et représente les ondes de pressions générées par le front de détonation.

Manson attribue pour la première fois l'existence de ces phénomènes aux vibrations transverses des gaz brûlés [Manson, 1946]. Un mécanisme expliquant l'origine de ces vibrations a ensuite été proposé [Fay, 1952; Chu, 1956].

Pour étudier les vibrations tridimensionnelles dans l'écoulement des gaz brûlés d'une détonation, on se place dans le repère cylindrique attaché aux gaz brûlés (x, r, θ) ; l'onde de détonation se déplace à la vitesse W_1 et sa position est donnée par l'équation : $x = W_1 t$.

Les équations de conservations s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{W} = 0 \quad (1.33a)$$

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + (\vec{W} \cdot \vec{\nabla}) \vec{q} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p \quad (1.33b)$$

$$\frac{1}{p} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + (\vec{W} \cdot \vec{\nabla}) p \right] = \frac{\gamma}{\rho} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\vec{W} \cdot \vec{\nabla}) \rho \right] \quad (1.33c)$$

$$p = \rho RT \quad (1.33d)$$

où \vec{W} représente le vecteur vitesse de composantes (w_x, w_r, w_θ)

En supposant l'existence de petites perturbations, $p = p_1 + \delta p$, $\rho = \rho_1 + \delta \rho$, $T = T_1 + \delta T$, $\vec{W} = \delta \vec{W}$, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta \rho}{\rho_1} \right) + \vec{\nabla} \cdot \delta \vec{W} = 0 \quad (1.34a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta \vec{W}) = -\frac{1}{\rho_1} \vec{\nabla} \delta p \quad (1.34b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta p}{p_1} \right) = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta \rho}{\rho_1} \right) \quad (1.34c)$$

$$\frac{\delta p}{p_1} = \frac{\delta \rho}{\rho_1} + \frac{\delta T}{T_1} \quad (1.34d)$$

Le système (1.34) permet d'obtenir l'équation d'onde suivante :

$$\frac{1}{c_1^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) - \vec{\nabla}^2 \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) = 0 \quad (1.35)$$

En particulier, le système (1.34) et l'équation d'ondes (1.35) s'écrivent dans les coordonnées cylindriques :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta \rho}{\rho_1} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \delta u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\delta v) + \frac{\partial}{\partial z} (\delta w) = 0 \quad (1.36a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta w_x) + c_1^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) = 0 \quad (1.36b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta w_r) + c_1^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) = 0 \quad (1.36c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta w_\theta) + \frac{c_1^2}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) = 0 \quad (1.36d)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta \rho}{\rho_1} \right) = 0 \quad (1.36e)$$

$$\frac{1}{c_1^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} \right) \quad (1.37)$$

Les vibrations engendrées par une source de chaleur rotative entraînent la déformation du front fixant la condition limite au front [Chu, 1956]. La seconde condition limite est donnée par l'annulation de la vitesse normale au mur (l'admittance de parois est négligée).

Si les gaz brûlés sont entraînés par une source de chaleur rotative de pulsation ω_1 dans un tube de rayon r_0 alors le système d'équations (1.34) muni des conditions aux limites précédentes a la solution d'onde de pression progressive hélicoïdale de la forme [Chu, 1956] :

$$\frac{\delta p}{\gamma_1 p_1} = \sum_m \sum_n A_{mn} e^{i(m\theta - \omega_1 t + k_1 z)} J_m \left(\lambda_{mn} \frac{r}{r_0} \right) \quad (1.38)$$

où J_m est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre m et λ_{mn} la $n^{\text{ième}}$ plus petite racine positive de l'équation $J'_m(\lambda) = 0$. Pour la fréquence fondamentale ($m=1$) $\lambda_{11}=1.84$. Les pulsations correspondant aux modes transversal et longitudinal, définies respectivement par $\omega_r = \frac{\lambda_{mn}c_1}{r_0}$ et $\omega_x = c_1 k_1$, sont liées par la relation [Bruneau, 1998, ch 6] :

$$\omega_1^2 = \omega_r^2 + \omega_x^2 \quad (1.39)$$

L'onde de pression solution rattrape le front si $M_1 < 1$. Les théories acoustiques de Manson, Fay ou Chu sont établies lorsqu'il n'y a pas de surface sonique dans l'écoulement (i.e. dans le cas des détonations fortes). La validité de ces théories est incertaine lorsqu'une surface sonique existe comme dans le cas des détonations stationnaires autonomes. Les prédictions des fréquences de rotation pour la propagation des détonations trouvent toutefois un bon accord avec les observations expérimentales lorsque le mode fondamental seul est excité. Dans ce cas, la détonation est dite hélicoïdale et le mouvement est purement transversal de fréquence ν donnée par :

$$\nu = \frac{\omega_r}{2\pi} = \frac{\lambda_{mn}c_1}{2\pi r_0} \quad (1.40)$$

Le rapport P/d (où P est le pas défini comme le rapport entre la vitesse de propagation de la détonation et la fréquence de rotation de l'onde transverse et où d est le diamètre du tube) a une valeur constante :

$$\frac{P}{d} = \frac{D}{d\nu} = \frac{\pi D}{c_1 \lambda_{11}} \quad (1.41)$$

D'après l'expression de c_1 dans l'hypothèse de choc fort (1.24e),

$$\frac{P}{d} = \frac{\gamma + 1}{\gamma} \frac{\pi}{\lambda_{11}} \quad (1.42)$$

Le rapport P/d est souvent pris égal à π car habituellement γ est voisin de 1.2 dans les gaz brûlés. Pendant la rotation complète de la structure de l'onde hélicoïdale dans un tube de diamètre d , la détonation parcourt une distance égale à πd .

1.3.4 Sous-structure, structure de bande, double structure

Les trois grandes catégories de sous-structures sont schématisées sur la figure 1.16.

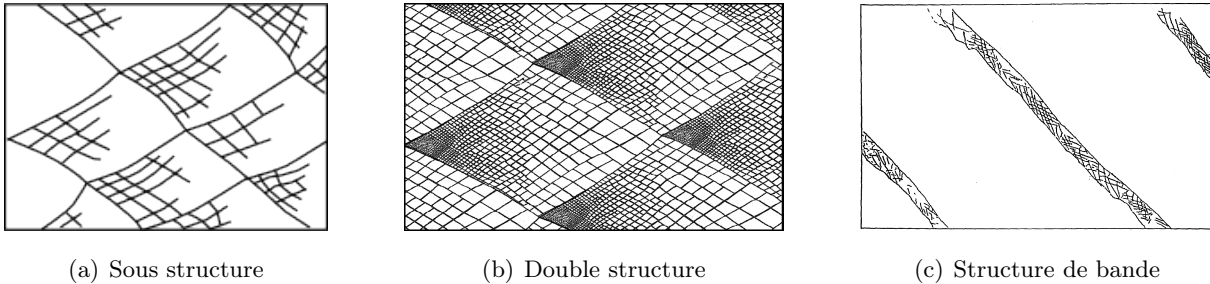


FIG. 1.16 – Trois catégories de sous-structure cellulaire.

1.3.4.1 Sous-structure

Cette sous-structure, visible uniquement dans la première moitié de la cellule, apparaît lorsque le rapport $\beta = \frac{E_a}{RT_{ZND}} > 6.5$ [Manzhalei, 1977].

L'établissement de ce critère par Manzhalei repose sur les hypothèses (fortes) suivantes :

- la largeur de la cellule est donnée par $\lambda \approx 1/\rho_{ZND} \exp(\beta/RT)$
- la température dépend du taux de force selon $T \approx T_{ZND}(D/D_{CJ})^2$
- la trajectoire de l'onde transverse est donnée par $x \approx 0.3y + 0.6y^2/b$ où b est la longueur de la cellule
- la vitesse matérielle dans la cellule de détonation vaut $D \approx 1.3D_{CJ}(1 - 0.423y/b)$

Ce critère s'applique également pour les détonations hélicoïdales avec la valeur de $\beta = 6-7$.

1.3.4.2 Double structure

La figure 1.16(b) présente le motif particulier de la double structure cellulaire observée pour la première fois par Presles *et al.* [1996] dans la détonation des mélanges riches nitrométhane/oxygène gazeux. Des cellules de taille λ_2 quasiment constante (structure secondaire) sont remplies complètement par des cellules plus petites (structure primaire) dont la taille λ_1 augmente continuellement du début à la fin de chaque cellule. Des travaux ultérieurs ont montré que la détonation de mélanges riches où l'oxydant est le dioxyde d'azote NO_2/N_2O_4 présente également une double structure cellulaire [Joubert, 2001; Joubert *et al.*, 2008].

Des calculs stationnaires de la zone de réaction avec le schéma détaillé de cinétique chimique de Djebaïli-Chaumeix *et al.* [1997] permettent d'attribuer à chaque structure cellulaire (λ_1, λ_2) un temps caractéristique (τ_{i_1}, τ_{i_2}) repéré par un pic de thermicité [Lamoureux *et al.*, 2001; Sturtzer *et al.*, 2005]. Lorsqu'une seule structure est visible expérimentalement malgré une libération d'énergie non monotone, les calculs confirment qu'un seul pic de thermicité est présent [Desbordes *et al.*, 2004].

1.3.4.3 Structure de bande

Cette structure cellulaire est celle de l'onde de détonation transverse représentée par le segment BC de la figure 1.15(b). Elle disparaît à l'approche des limites de propagation de la détonation hélicoïdale [Denisov et Troshin, 1971; Manzhalei et Mitrofanov, 1973; Topchian et Ul'yanski, 1976].

La taille de la structure cellulaire de l'onde transverse a été étudiée expérimentalement et analytiquement pour le régime de détonation hélicoïdal par Huang et Van Tiggelen [1992]. Les auteurs ont montré que la taille des cellules de l'onde transverse diminue lorsque p_0 augmente et qu'une loi de dépendance du type $\lambda_{bande} \propto p_0^{-a}$ peut être établie.

CHAPITRE 2

Modélisation numérique des écoulements réactifs stationnaires et instationnaires

Chapitre 2

Modélisation et simulations numériques des écoulements réactifs stationnaires et instationnaires pour les détonations

L'écoulement généré par une détonation est très rapide, instationnaire et non-uniforme. Il comporte des discontinuités (ondes de choc, surfaces de contact) et interagit avec les parois et l'acoustique de la géométrie. La résolution d'un tel écoulement au moyen des équations de Navier-Stokes les plus générales en incorporant les mécanismes détaillés de cinétiques chimiques reste encore hors de portée des possibilités de calcul actuelles.

Inversement, la résolution la plus simple possible (comme par exemple la résolution des équations d'advection avec des schémas numériques du premier ordre) ne permet pas d'obtenir de résultat. La résolution de fonctions continues (par morceaux) est loin d'être évidente sur un support discret. L'utilisation concrète des méthodes numériques est possible grâce aux progrès des techniques d'analyse numérique d'une part et de la puissance des calculateurs d'autre part. Parmi les nombreuses techniques existantes plus ou moins précises et pratiques, ce chapitre va présenter celle qui a été utilisée dans ce travail.

Sans perdre le caractère général de l'étude de la propagation autonome d'une détonation, l'esprit de la modélisation se rapproche du cadre expérimental : on s'intéresse donc plus particulièrement à simuler la propagation d'une détonation dans un tube cylindrique, semi-infini selon l'axe \vec{x} , de diamètre d et fermé à son origine (en $x=0$), lieu de l'amorçage. La propagation s'effectue selon les x croissants.

2.1 Ecoulements réactifs instationnaires

Ces écoulements sont résolus grâce au code EFAE développé au laboratoire par Khasainov [1996, 2001, 2005].

2.1.1 Système d'équations

Les effets des transports conductifs, diffusifs et de viscosité étant négligés, les équations se réduisent pour la partie hydrodynamique aux équations d'Euler (2.4a–2.4c).

Concernant les réactions chimiques, la modélisation simple à une étape irréversible exothermique ou à deux étapes successives irréversibles exothermiques est retenue en supposant les gaz parfaits et polytropiques. Dans la suite, pour unifier les systèmes d'équations relatifs aux modélisations à une étape réactionnelle et deux étapes réactionnelles, les expressions associées à la deuxième étape réactionnelle sont écrites entre crochets.

Les lois de production s'écrivent pour la réaction $A \longrightarrow B$ [$\longrightarrow C$] (les coefficients stoechiométriques unitaires sont massiques) :

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{dY_A}{dt} = Z_1 \rho^{n_1} (1 - \lambda_1)^{n_1} \exp\left(-\frac{Ea_1}{RT}\right) \quad (2.1a)$$

$$\left[\frac{d\lambda_2}{dt} = \frac{dY_C}{dt} = Z_2 \rho^{n_2} (\lambda_1 - \lambda_2)^{n_2} \exp\left(-\frac{Ea_2}{RT}\right) \right] \quad (2.1b)$$

$$Y_A + Y_B [+Y_C] = 1 \quad (2.1c)$$

où Y_k est la fraction massique de l'espèce k et, pour la réaction i , Z_i est le facteur pré-exponentiel, n_i l'ordre, Ea_i l'énergie d'activation et λ_i la variable d'avancement de la réaction i .

La différentiation de l'équation (2.1c) fournit l'équation redondante :

$$\frac{dY_B}{dt} = \frac{d\lambda_1}{dt} \left[-\frac{d\lambda_2}{dt} \right] \quad (2.2)$$

L'expression suivante, déduite de la conservation de la masse, permet d'obtenir l'expression de la masse molaire W_m du mélange :

$$\frac{1}{W_m} = \frac{Y_A}{W_{m,A}} + \frac{Y_B}{W_{m,B}} \left[+\frac{Y_C}{W_{m,C}} \right] \quad (2.3)$$

où $W_{m,I}$ est la masse molaire du constituant I .

Le système d'équations couplées suivant, écrit sous la forme conservative, traite donc des

écoulements instationnaires réactifs non visqueux :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{V}) = 0 \quad (2.4a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{V} \otimes \vec{V} + p \vec{I}) = 0 \quad (2.4b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + p) \vec{V}) = 0 \quad (2.4c)$$

$$\frac{\partial \rho \lambda_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \lambda_1 \vec{V}) = \rho Z_1 \rho^{n_1} (1 - \lambda_1)^{n_1} \exp\left(-\frac{E a_1}{RT}\right) \quad (2.4d)$$

$$\left[\frac{\partial \rho \lambda_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \lambda_2 \vec{V}) = \rho Z_2 \rho^{n_2} (\lambda_1 - \lambda_2)^{n_2} \exp\left(-\frac{E a_2}{RT}\right) \right] \quad (2.4e)$$

Pour un mélange de gaz parfaits, l'énergie totale massique E est la somme des énergies potentielles $Q = \lambda_1 Q_1 [+ \lambda_2 Q_2]$ d'origines chimiques, interne e et cinétique $\frac{1}{2} V^2$

$$E = Q + e + \frac{V^2}{2} \quad (2.5)$$

L'énergie interne massique e est une fonction d'état. L'énergie interne du système est la somme des énergies internes de chaque espèce pondérée par les fractions massiques. Pour chaque espèce k pure, l'énergie interne vaut $c_{v,k} T$. La valeur du c_v du mélange est alors défini :

$$c_v = c_{v,A} Y_A + c_{v,B} Y_B [+ c_{v,C} Y_C] \quad (2.6)$$

2.1.2 Discrétisation du système d'équations, schéma numérique et condition de stabilité

Parmi les trois grandes familles de discrétisation (différences finies, éléments finis, volumes finis), EFAE utilise les différences finies avec la représentation d'Euler : les points de la grille sont fixes ; le fluide est convecté à travers les cellules. Contrairement à la représentation Lagrangienne, de très petites quantités de particules peuvent se déplacer d'une cellule à l'autre à des vitesses non physique par le phénomène de diffusion numérique. Les grandeurs scalaires (pression, densité, température, concentrations des espèces) sont définies au centre de chaque cellule et représentent la valeur moyenne de cette grandeur à l'intérieur de la cellule (fig. 2.1). Les vitesses sont définies sur les interfaces et sont rapportées au centre de chaque maille.

EFAE utilise un schéma de discrétisation entièrement explicite (chaque grandeur est calculée uniquement en fonction des valeurs provenant du pas de temps précédent). Contrairement aux méthodes implicites qui sont réputées pour leur stabilité, la stabilité est conditionnée par le critère de Courant-Friedrichs-Lewy [Hirsch, 1988a, p. 308–310] :

$$\text{CFL} = \left\| \left\| \frac{v \Delta t}{\delta x} \right\| \right\|_{\max} < 1 \quad (2.7)$$

où CFL est le nombre de Courant, v la vitesse des particules, Δt le pas de temps et Δx la taille de la cellule numérique. Dans la pratique, le nombre de Courant est fixé au départ et limite le pas de temps.

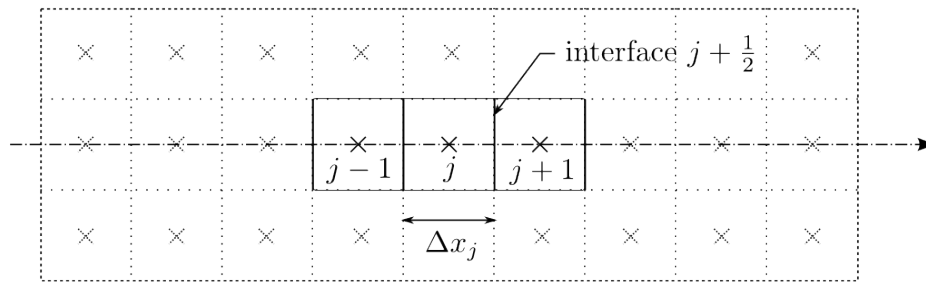


FIG. 2.1 – Représentation du maillage uniforme 2D en coordonnées cartésiennes et représentation eulérienne.

La discrétisation et l'implémentation du système d'équations (2.4) avec les différences finies produisent quatre types d'erreur [Oran et Boris, 2001, p. 79-81] :

- Les erreurs locales sont liées à la précision de l'échantillonnage des variables (par exemple le stockage d'une grandeur en simple ou double précision),
- Les erreurs d'amplitude sont le plus souvent attribuées à la diffusion numérique qui lissent et amortissent le profil d'une grandeur au cours du temps,
- Les erreurs de phase subviennent lorsque la vitesse de propagation d'une grandeur est mal évaluée déviant la solution de sa position théorique,
- Les erreurs de Gibbs proviennent de l'incertitude spatiale de la représentation discrète d'une fonction continue. Elles apparaissent concrètement dans les régions de forts gradients par des creux et des dépassements.

Ces erreurs, incontournables, peuvent toutefois être réduites en travaillant sur les schémas pour améliorer les erreurs de phase et d'amplitude, ou en améliorant la résolution du maillage pour agir sur les erreurs de Gibbs¹.

Un schéma est sélectionné en fonction de sa capacité à être :

- conservatif,
- causal (contraintes physiques qui limitent la transmission des informations comme par exemple dans le blocage sonique),
- positif ou monotone (la convection seule ne peut créer de nouveau minima ou maxima),
- stable.

Les schémas aux différences finies d'ordre 2 (par exemple Lax-Wendroff) réduisent la diffusion numérique mais au détriment de la positivité. Seules les techniques non linéaires comme les algorithmes FCT (Flux-Corrected Transport), PPM (Piecewise-Parabolic Method), HOG (High-Order Gudonov) et TVD (Total-Variation Diminishing) permettent d'allier au mieux les quatre propriétés précitées [Hirsch, 1988b, vol II, p. 518-519].

¹ En améliorant la précision, les creux et les dépassements sont toujours présents mais leur étendue spatiale est plus faible.

2.1.3 Grille – Maillage

2.1.3.1 Type de grille

Le code de calcul est employé avec les géométries planes 1D, 2D ou 3D. Un maillage rectilinéaire est donc utilisé. Pour rendre compte de la propagation de la détonation dans un tube circulaire, le tube est discrétisé dans l'espace cartésien (fig. 2.2).

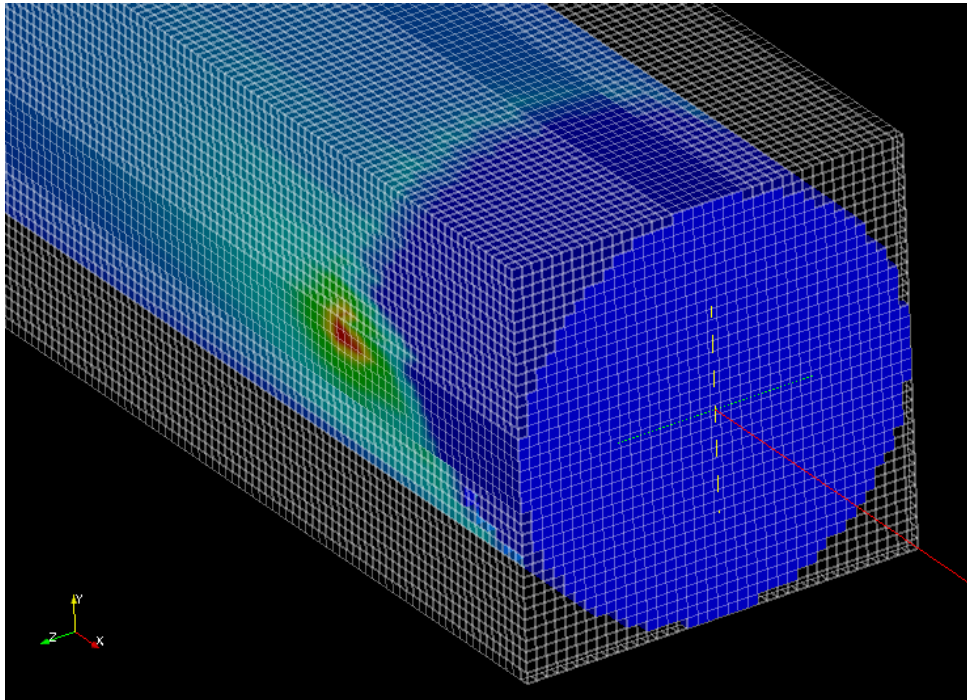


FIG. 2.2 – Maillage numérique 3D au niveau du front de détonation. Le tube est discrétisé dans l'espace cartésien. La section droite compte 40×40 mailles.

Contrairement à une géométrie cylindrique qui semble naturellement plus adaptée à la modélisation spatiale d'un tube cylindrique, cette représentation a l'avantage d'imposer une résolution constante dans toute la section droite et évite le point pathologique central. De plus, dans le cas des détonations hélicoïdales, la zone où se situe le point triple (i.e. proche de la paroi) doit être la mieux résolue. Cette représentation choisie présente toutefois l'inconvénient d'avoir un périmètre mouillé de tube égal à $4d$ (où d est le diamètre du tube inscrit dans la boîte de côté d) au lieu de πd .

2.1.3.2 Conditions aux limites

Deux grandes possibilités existent pour l'étude de la propagation autonome de la détonation dans un tube semi-infini :

1. Le domaine de calcul est réduit à la tête de l'onde de détonation (front de détonation

et zone de réaction chimique uniquement). La grille est fixe dans le repère lié au « choc moyen » : en amont, les gaz frais entrent dans le domaine de calcul à une vitesse égale à $W_0 = D_{CJ}$, à la pression p_0 et à la température T_0 et ressortent, en aval, à la vitesse W_{CJ} , à la pression p_{CJ} et à la température T_{CJ} .

Cette méthode est simple à mettre en oeuvre car le domaine de calcul est réduit et a une longueur constante. Toutefois, elle modélise plutôt une détonation supportée par un piston se propageant à u_{CJ} , ce qui est physiquement différent de la propagation autonome. Les auteurs qui utilisent cette méthode ont beaucoup de difficultés à trouver les bonnes conditions aux limites à la sortie [Tsuboi *et al.*, 2005].

2. Le domaine de calcul comprend le tube entier dont l'extrémité gauche est fermée². La grille est liée au repère du laboratoire : en amont, les gaz frais sont au repos à la pression p_0 et à la température T_0 ; en aval, la vitesse matérielle est nulle à l'extrémité fixe du tube.

C'est cette méthode qui est mise en oeuvre.

Les parois sont assimilées à des obstacles indéformables et parfaitement glissants.

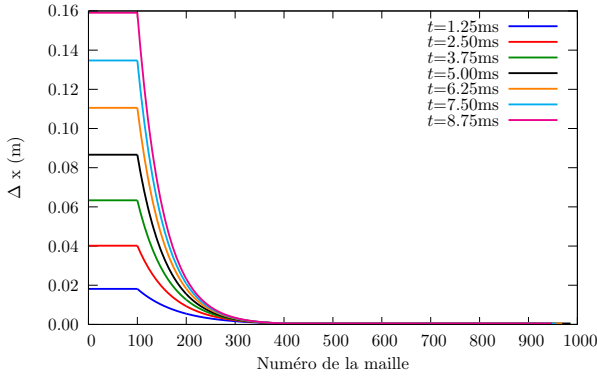
2.1.3.3 Technique d'adaptation du maillage

Il est difficile de mailler uniformément le domaine de calcul à cause de la vitesse de propagation des détonations (de l'ordre de $2\text{mm}/\mu\text{s}$), de la distance de relaxation au régime autonome de propagation après l'amorçage (cf. section 2.1.5) et de la résolution du maillage pour résoudre les échelles imposées par les réactions chimiques (environ $10\mu\text{m}$). Pour représenter un tube de 4m, il faudrait 400000 mailles le long de l'axe x . Cela est encore possible pour les simulations monodimensionnelles mais les simulations 2D et 3D doivent nécessairement avoir recourt à une technique d'adaptation de la taille des mailles en fonction des phénomènes à résoudre.

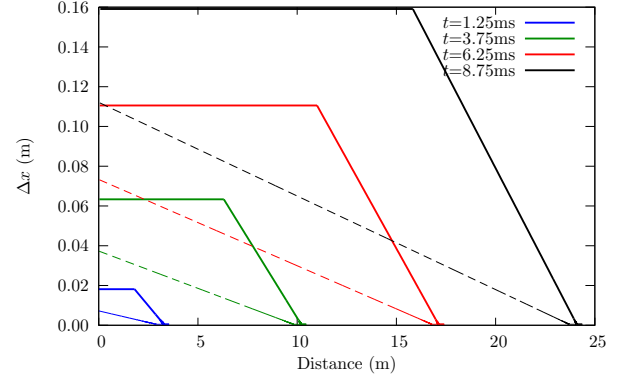
La zone où se déroulent les réactions chimiques nécessite une résolution beaucoup plus fine que la zone de détente qui la suit et s'étend avec le temps comme $Dt/2$ pour une propagation quasi-stationnaire. Dans le cadre de notre étude sur la propagation des détonations dans un tube de diamètre d , la difficulté se rencontre uniquement pour la coordonnée le long de l'axe du tube. C'est pourquoi, dans la direction de propagation, une quantité constante de mailles N_{fine} est allouée à la tête de l'onde de détonation ; la résolution y est la plus fine, isotrope ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$) et constante au cours du temps. Les mailles restantes $N_{adapt} = N_x - N_{fine}$ servent à représenter la solution entre l'origine du tube de détonation et la zone précédemment décrite. La taille de la maille augmente selon une progression géométrique à mesure que la position par rapport au front de détonation augmente, jusqu'à la valeur maximale correspondant à $Dt/100$. Les figures 2.3(a) et 2.3(b) montrent les variations de la résolution selon l'axe de propagation et les évolutions au

² On pourrait choisir une autre condition mais celle-ci est représentative de la façon dont les études expérimentales sont effectuées.

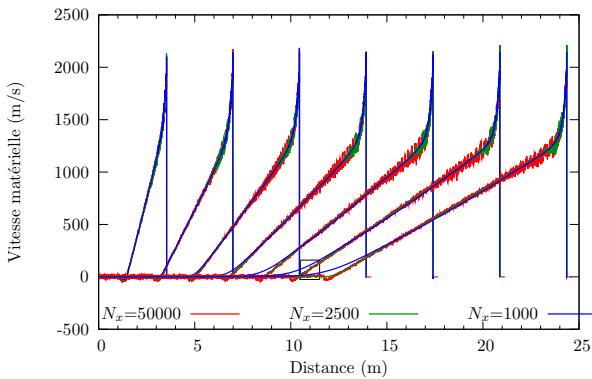
cours du temps.



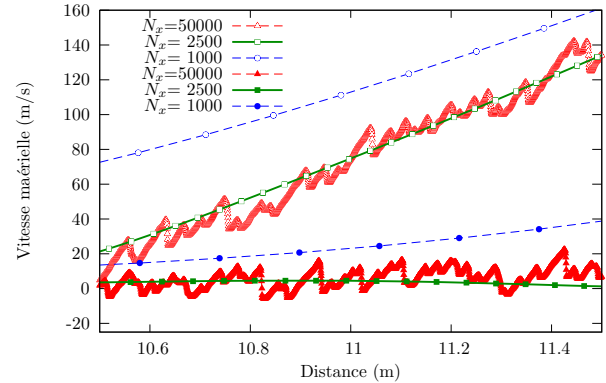
(a) Evolution et variation en fonction de l'indice de maille de la résolution du maillage.



(b) Evolution et variation en fonction de la distance de propagation de la résolution du maillage. $N_x = 1000$ traits pleins; $N_x = 2500$ traits pointillés.



(c) Evolution des profils de vitesse matérielle le long de la direction de propagation. $t \in \{1.25, 2.5, 3.75, 5, 6.25, 7.5, 8.75\}$ ms. La solution est calculée sans adaptation pour $N_x=50000$.



(d) Détail de la figure 2.3(c). Evolution des profils dans l'éventail de détente. $t=7.5$ ms symboles creux; $t=8.75$ ms symboles pleins.

FIG. 2.3 – Technique d'adaptation de maillage pour l'étude de la propagation d'une détonation. Solution de la propagation instationnaire 1D avec le code EFAE pour le mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1$ bar, $T_0=293$ K et $\phi=1.5$. Résolution dans la zone de réaction $\Delta x_{fine}=0.5$ mm.

La figure 2.3(c) indique qu'il y n'a pas de modification de la vitesse de propagation de la détonation ou d'allure des profils moyens lors de l'utilisation de l'adaptation. Il est cependant normal de constater un lissage de l'information dans les régions où la taille de maille est la plus grande, voire même un écart avec la solution sans adaptation si le nombre de mailles n'est pas suffisant (fig. 2.3(d)).

2.1.4 Intégration par la méthode FCT (Flux Corrected Transport)

2.1.4.1 Principe de base

Le principe de base est d'ajuster les flux à chaque interface en se basant sur des contraintes physiques. L'algorithme FCT utilise la méthode des temps fractionnés (algorithme saute-mouton : préévaluation des grandeurs sur le premier demi pas de temps) ce qui fournit une précision d'ordre 2 en temps. Le stencil à trois points, intégré grâce à l'algorithme précédent est connu pour fournir une précision sur la phase du 4^{ème} ordre et produire le minimum de diffusion numérique [Boris *et al.*, 1993, p. 7].

L'organigramme de la figure 2.4 présente les différentes étapes successives à la résolution du système différentiel (2.4).

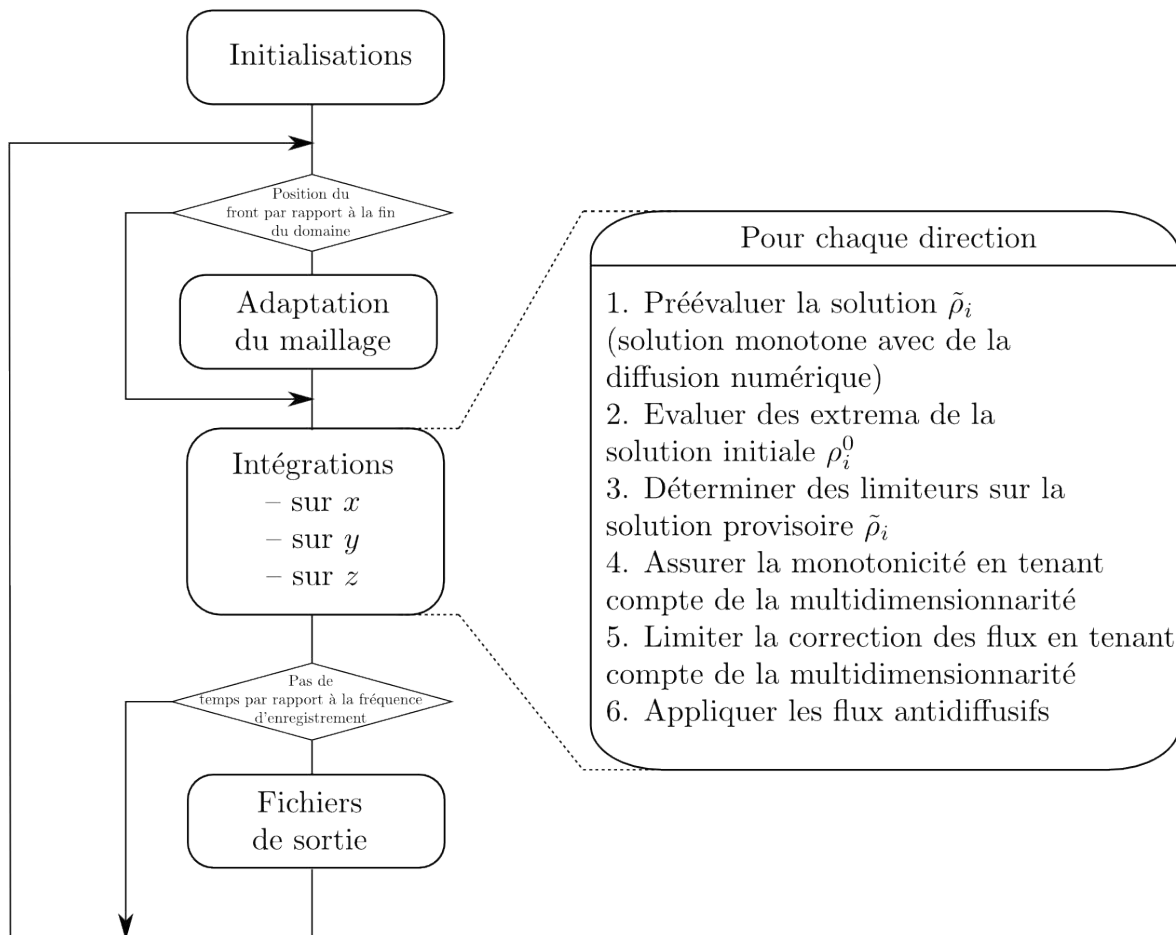


FIG. 2.4 – Etapes de l'intégration du système différentiel modélisant l'écoulement réactif instationnaire non visqueux implémenté dans EFAE.

2.1.4.2 Condition sur l'entropie

D'après les auteurs de la technique FCT, aucun travail n'a été publié concernant le respect ou non de la condition d'entropie pour cette technique. La condition d'entropie a été mise en défaut sur certains schémas qui utilisent des solveurs de Riemann (TVD, TVD-MacCormack, TVD-MUSCL) et où une condition supplémentaire doit être appliquée [Hirsch, 1988b, p. 519-527].

La technique FCT classique n'utilise pas de solveur de Riemann. L'idée est d'ajouter à une solution monotone du 1^{er} ordre, une quantité limitée de la différence de flux entre les schémas du 1^{er} et du 2^{ème} ordre. La correction de ce flux anti-diffusif s'applique de façon non linéaire : elle est quasi inexistante dans les régions de faibles gradients. Le schéma équivaut alors à un schéma du 1^{er} ordre (avec la précision tout à fait acceptable) et où la condition d'entropie n'est pas mise en défaut.

Pour s'assurer du bon comportement du code EFAE vis-à-vis de l'entropie, le problème du tube à choc a été résolu pour deux conditions initiales différentes. Ce problème test dont la solution théorique est connue, est assez difficile à résoudre numériquement car le code doit simultanément résoudre une onde de choc, une surface de contact et une onde de détente. Les résultats sont reportés dans l'annexe A.

2.1.5 Amorçage et propagation quasi-stationnaire de la détonation

L'étude de l'amorçage pourrait sembler inutile étant donné que l'on s'intéresse au régime quasi-stationnaire de la détonation pour lequel les effets de l'amorçage sont oubliés. Toutefois, le temps nécessaire pour atteindre ce régime est à prendre en compte et l'efficacité des différentes techniques d'amorçage n'est pas identique. L'amorçage direct par choc est préféré à l'amorçage par accélération de flamme (i.e. transition déflagration-détonation) car la physique mise en jeu est plus simple.

Les critères recherchés pour comparer les méthodes d'amorçage sont d'une part le faible coût de calcul et d'autre part la courte distance de relaxation au régime quasi-stationnaire. La « souplesse » de l'amorçage (expliquée plus tard et liée aux critères précédents) constitue également un bon indicateur.

Dans le cas instationnaire, deux méthodes d'initiation des détonations sont comparées :

- l'amorçage classique par explosion ponctuelle consiste à ajouter une énergie importante dans une ou plusieurs mailles à $t=0$.
- l'amorçage par effet tube à choc permet de générer un choc dans le milieu d'étude grâce à une section à haute pression.

L'avantage de la méthode classique est, par son action ponctuelle, de réduire au maximum la zone perturbée. Néanmoins, dans le cas des mélanges réactifs où un grand nombre de mailles doit

composer la zone de réaction (mélanges à deux étapes réactionnelles de temps caractéristiques distincts, mélanges avec une forte énergie d'activation réduite, ...), la discontinuité extrêmement forte créée par l'explosion ponctuelle induit d'une part des pas d'intégration temporels très faibles au début des simulations et d'autre part des oscillations (erreurs de Gibbs) importantes responsables de perturbations qui s'amortissent très faiblement³ – c'est en ce sens que la méthode classique n'est pas souple. Au contraire, en répartissant cette énergie sur une certaine distance (longueur de la section motrice du tube à choc), la détonation s'amorce plus rapidement et doucement. Les paramètres de la section motrice sont déterminés empiriquement et, en pratique, les deux techniques sont utilisées simultanément.

L'analyse de l'évolution du pas de temps est assez instructive pour évaluer, à nombre de Courant fixé, le taux de relaxation au régime stationnaire et le coût numérique de la procédure d'amorçage. En effet d'après la définition du nombre de Courant, les vitesses caractéristiques du système demeurent bornées dès lors que le pas de temps reste constant. Bien entendu, ceci constitue une condition nécessaire mais non suffisante. Les graphiques de la figure 2.5 montrent l'évolution du pas de temps dans le cas de la simulation de la propagation de la détonation avec les paramètres du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$.

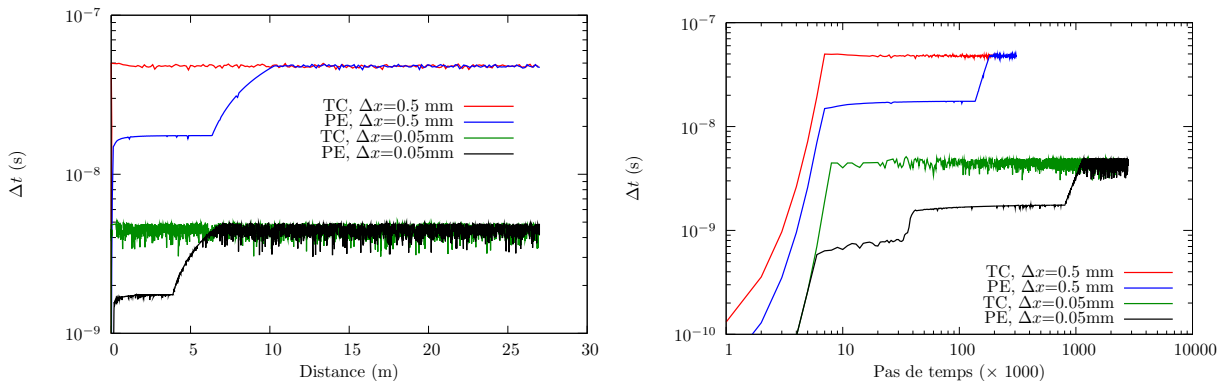


FIG. 2.5 – Evolution du pas de temps en fonction des conditions d'amorçage. TC=tube à choc ; PE=point d'explosion. Détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. Le nombre de Courant est fixé à $CFL=0.35$.

La quasi-stationnarité de la solution peut être vérifiée en analysant les profils très caractéristiques de la pression et de la vitesse matérielle de la détente (fig. 2.6) : dans la détente de Taylor-Zeldovich, la vitesse matérielle est nulle dans la première moitié de la distance parcourue par la détonation (noyau) et linéaire dans la seconde moitié ; la pression est constante dans le noyau et vaut $\left(\frac{\gamma+1}{2\gamma}\right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} p_{CJ}$ (i.e. $0.36p_{CJ}$) [Stanukovich, 1960, p. 335]. Le calcul est tout de même instationnaire : la longueur de la zone de réaction varie autour d'une valeur moyenne en accord avec les calculs stationnaires (fig. 2.6).

³ En pratique, c'est la technique d'adaptation qui, quand elle est mise en oeuvre, lisse ces oscillations.

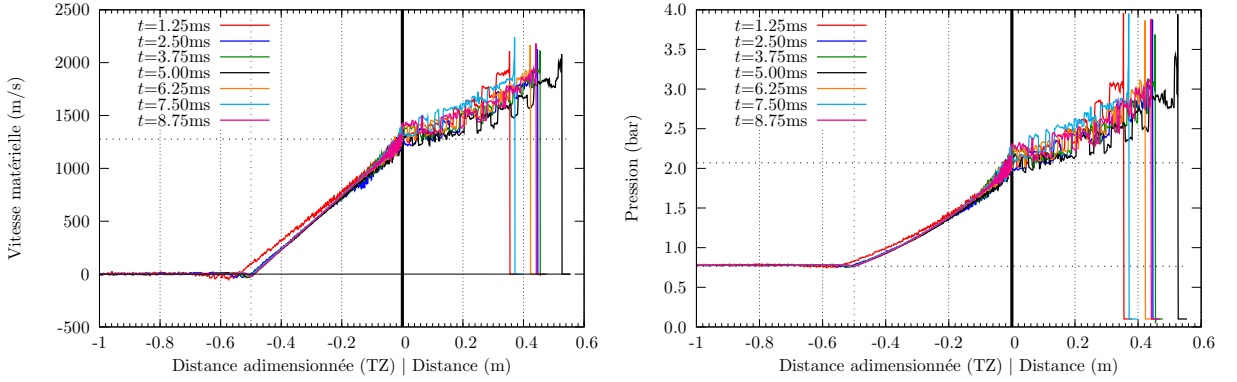


FIG. 2.6 – Profils de vitesse matérielle et de pression obtenus après un amorçage type tube à choc. La distance derrière le point CJ (i.e. dans la détente de Taylor-Zeldovich) est adimensionnée par Dt . Détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. $CFL=0.35$, $\Delta x=0.5\text{mm}$ et $N_x=5000$.

2.1.6 Conditions initiales et paramètres d'entrée

Le système initial (hors section motrice) est constitué uniquement de gaz frais A à la pression p_0 et à la température T_0 i.e. $Y_{A,0}=1$, $Y_{B,0}=0$ et $Y_{C,0}=0$.

Les fractions massiques des espèces se déduisent alors de l'avancement des réactions par les relations :

$$Y_A = Y_{A,0} - \lambda_1 = 1 - \lambda_1 \quad (2.8a)$$

$$Y_B = Y_{B,0} + \lambda_1[-\lambda_2] = \lambda_1[-\lambda_2] \quad (2.8b)$$

$$[Y_C = Y_{C,0} + \lambda_2 = \lambda_2] \quad (2.8c)$$

Parmi de nombreuses possibilités offertes par le code de calcul EFAE, les données qui paramètrent les simulations numériques peuvent être regroupées dans les catégories suivantes (les données entre crochets sont renseignées uniquement pour les réactions à deux étapes) :

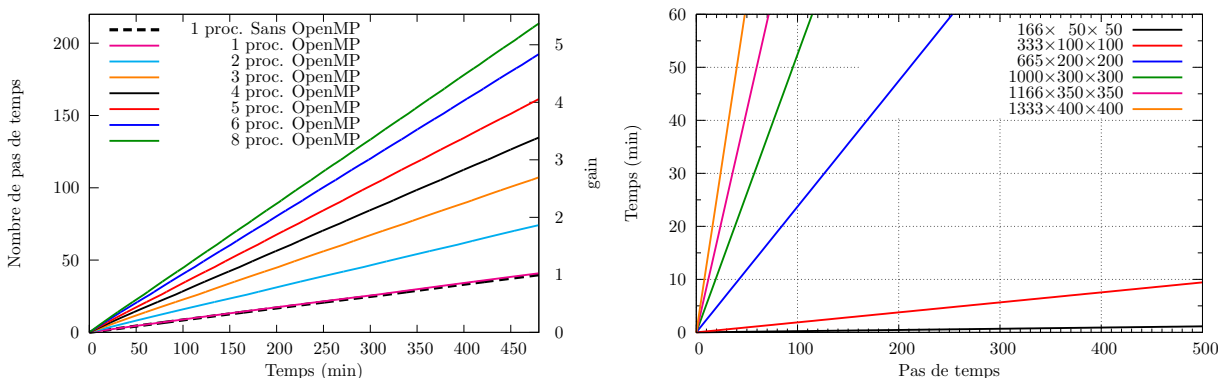
- Propriétés des gaz :
 - Pression et température initiales : p_0 , T_0 .
 - Thermodynamique : γ_A , $W_{m,A}$; γ_B , $W_{m,B}$, Q_1 ; [γ_C , $W_{m,C}$, Q_2].
 - Lois de cinétique chimique : Z_1 , E_{a_1} , n_1 ; [Z_2 , E_{a_2} , n_2].
- Paramètres de la résolution
 - Tailles du domaine : L_x , L_y , L_z .
 - Nombres de mailles : N_x , N_y , N_z .
 - Nombre de mailles de la zone la mieux résolue N_{fine} .
- Paramètres de l'intégrateur : CFL , ν_{num} .
- Amorçage :

- Energie et position du point d'explosion : E_{PE} , x_{PE} .
- Pression, température et longueur de la section motrice (booster) : p_b , T_b , L_b .

La section 2.2.3 détaille la méthode utilisée pour déterminer les valeurs numériques correspondant aux paramètres thermodynamiques et cinétique chimique des gaz à partir des propriétés physiques.

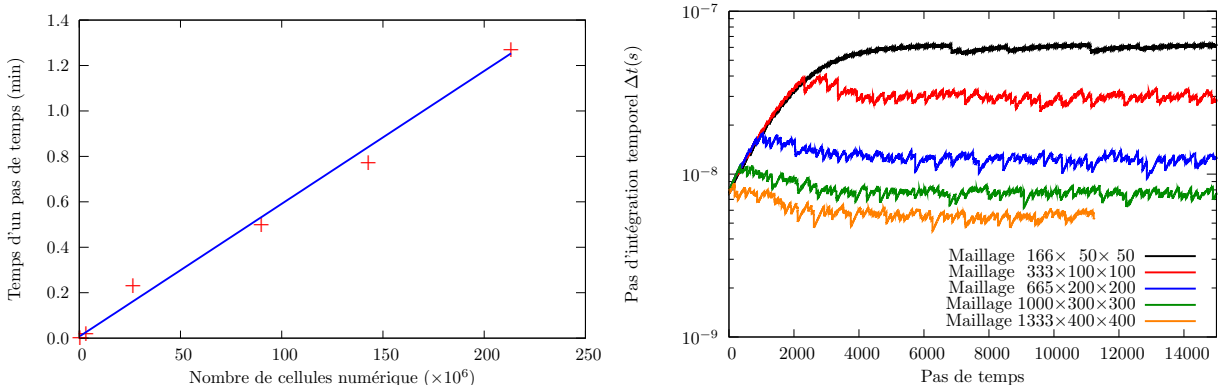
2.1.7 Performances – Calcul parallèle

La version parallèle du code EFAE a été fonctionnelle fin 2008. Elle utilise la librairie OPENMP qui distribue le travail sur plusieurs processus légers (threads) pouvant s'exécuter parallèlement sur des processeurs ou cœurs pointant vers un espace mémoire commun (contrairement à la



(a) Gain de performance en fonction du nombre de processeurs utilisés pour une simulation contenant $665 \times 200 \times 200$ mailles.

(b) Evolution du temps d'exécution pour différentes tailles de maillage. Les simulations utilisent 8 processeurs.



(c) Temps d'exécution d'un pas de temps en fonction de la taille du maillage. Les simulations utilisent 8 processeurs.

(d) Evolution du pas d'intégration Δt pour différentes résolutions. Démarrage d'un calcul 3D à partir d'une simulation 2D de 1300×400 mailles.

FIG. 2.7 – Variation du temps d'exécution en fonction du nombre de processeurs (calcul parallèle avec OPENMP) et de la taille du maillage. Calculs effectués avec le code EFAE sur une architecture x86_64 contenant deux quad-cores AMD 2352 64bits à 2.3GHz et 16Go de RAM.

librairie MPI où chaque processus dispose de sa propre zone mémoire).

La figure 2.7 rassemble les résultats des tests effectués sur un noeud de cluster comportant deux quad-cores AMD 2352 64bits à 2.3GHz et 16Go de RAM. Le code EFAE est utilisé pour résoudre le problème de la propagation d'une détonation 3D dans un tube carré avec une chimie à deux étapes. Le nombre de Courant est fixé à 0.75.

La figure 2.7(a) indique un gain de performance par rapport à une exécution séquentielle (speed up) de 5.3 lors d'un calcul utilisant 8 processeurs. Le gain obtenu, déjà satisfaisant, peut être amélioré en réduisant au maximum le temps d'exécution des parties séquentielles et le nombre de création/destruction de zones parallèles dans la boucle principale.

D'après les figures 2.7(b) et 2.7(c), le temps d'exécution d'une intégration temporelle est approximativement proportionnel au nombre de mailles. Si le nombre de mailles est doublé, le temps d'exécution de la boucle principale est doublé mais simultanément le pas d'intégration temporel est réduit d'environ une moitié (fig. 2.7(d)). Par conséquent le temps d'exécution d'un calcul 3D (à distance de propagation équivalente) est multiplié par 4 lorsque le nombre de mailles est augmenté de 26% dans chaque direction.

2.2 Ecoulements réactifs stationnaires

2.2.1 Système d'équations

En utilisant le même formalisme que celui présenté à la section précédente, le système (2.4) s'écrit dans le cas stationnaire et dans le repère lié au choc (en utilisant la relation de passage (1.28)) :

$$\frac{dw}{d\chi} = \frac{\gamma - 1}{\gamma p} \frac{\rho w \left(Q_1 \frac{d\lambda_1}{d\chi} \left[+ Q_2 \frac{d\lambda_2}{d\chi} \right] \right) - \frac{p W_m w}{R} \frac{dc_v}{d\chi} + \frac{W_m^2 p w c_v}{R} \frac{d(1/W_m)}{d\chi}}{1 - M^2} \quad (2.9a)$$

$$\frac{d\rho}{d\chi} = - \frac{\rho}{w} \frac{dw}{d\chi} \quad (2.9b)$$

$$\frac{dp}{d\chi} = - \rho w \frac{dw}{d\chi} \quad (2.9c)$$

avec

$$\frac{dc_v}{d\chi} = - \frac{d\lambda_1}{d\chi} c_{v,A} + \left(\frac{d\lambda_1}{d\chi} \left[- \frac{d\lambda_2}{d\chi} \right] \right) c_{v,B} \left[+ \frac{d\lambda_2}{d\chi} c_{v,C} \right] \quad (2.10a)$$

$$\frac{d(1/W_m)}{d\chi} = - \frac{d\lambda_1}{d\chi} / W_{m,A} + \left(\frac{d\lambda_1}{d\chi} \left[- \frac{d\lambda_2}{d\chi} \right] \right) / W_{m,B} \left[+ \frac{d\lambda_2}{d\chi} / W_{m,C} \right] \quad (2.10b)$$

$$M^2 = \frac{\rho w^2}{\gamma p} \text{ et } \gamma = 1 + \frac{R}{W_m c_v} \quad (2.10c)$$

Le système (2.9) est singulier au point CJ : le numérateur et le dénominateur s'annulent simultanément.

2.2.2 Méthode d'intégration et paramètres d'entrée

Un programme écrit en langage C++ permet l'intégration de ce système d'équations ordinaires du premier ordre grâce aux fonctions de la bibliothèque GSL [Galassi et al., 2008]. Les algorithmes d'intégration offerts par cette librairie sont à choisir parmi les Runge-Kutta à différents ordres, les Gears, ... Quelque soit l'algorithme, le pas de temps est ajusté pour obtenir la précision désirée sur la solution. Le listing du programme est donné à l'annexe B.

Les paramètres d'entrée se limitent uniquement aux propriétés des gaz et sont identiques à ceux renseignés dans le code EFAE :

- Pression et température initiales : p_0, T_0
- Thermodynamiques : $\gamma_A, W_{m,A}; \gamma_B, W_{m,B}, Q_1; [\gamma_C, W_{m,C}, Q_2]$
- Cinétique chimique : $Z_1, E_{a_1}, n_1; [Z_2, E_{a_2}, n_2]$

2.2.3 Détermination des valeurs numériques des paramètres d'entrée

2.2.3.1 Détermination des paramètres thermodynamiques

La méthode peut se décomposer en quatre étapes :

1. **Obtenir les caractéristiques CJ de détonation** à l'aide d'un code thermodynamique pour le mélange désiré relatif aux conditions p_0 et T_0 : $p_{CJ}, v_{CJ}, D_{CJ}, W_{m,CJ}$.

La pente de la droite de Rayleigh-Michelson détermine γ_{CJ} grâce à la relation (1.14).

$$\gamma_{CJ} = \frac{1 - p_0/p_{CJ}}{v_0/v_{CJ} - 1} \quad (2.11)$$

2. **Obtenir les conditions ZND** à l'aide d'un code thermodynamique : p_{ZND}, ρ_{ZND} . Comme le modèle suppose γ constant pour chaque espèce, $\gamma_0 = \gamma_{ZND}$. Afin que la température de choc soit correctement évaluée pour les paramètres cinétiques, γ_0 doit respecter la condition suivante [Stanukovich, 1960, p. 221] :

$$\gamma_0 = \frac{\frac{p_{ZND} - p_0}{\rho_{ZND} - \rho_0}}{\frac{p_{ZND} + p_0}{\rho_{ZND} + \rho_0}} \quad (2.12)$$

La chaleur massique Q dégagée par réaction entre l'état 0 et CJ peut être désormais déterminée grâce à la relation (1.22).

À ce stade, tous les paramètres thermodynamiques sont précisés pour une modélisation à une étape réactionnelle. Il reste donc à établir, pour les modélisations à deux étapes réactionnelles, l'état thermodynamique intermédiaire.

3. **Obtenir les paramètres de l'état intermédiaire** à l'aide d'un calcul stationnaire dans la zone de réaction en utilisant une cinétique détaillée : $p_{MID}, v_{MID}, W_{m,MID}$. L'état intermédiaire peut être repéré manuellement ou en recherchant l'extremum d'une concentration d'une espèce clé (typiquement, CO ou NO).

Pour l'état MID situé sur la droite de Rayleigh-Michelson, l'équation d'énergie (1.13) fournit la relation :

$$h_{MID} - h_0 - Q_{MID} = \frac{\gamma_{MID} p_{MID} v_{MID}}{\gamma_{MID} - 1} - \frac{\gamma_0 p_0 v_0}{\gamma_0 - 1} - Q_{MID} = \frac{1}{2}(p_{MID} - p_0)(v_{MID} + v_0) \quad (2.13)$$

Les informations recueillies ne suffisent pas à déterminer d'une manière unique le couple (γ_{MID}, Q_{MID}) .

4. **Déterminer le régime de détonation basse vitesse (BV)** à l'aide de calculs stationnaires dans la zone de réaction en utilisant une cinétique détaillée. La détonation qui se propage en régime basse vitesse est uniquement soutenue par la libération de l'énergie chimique de la première étape réactionnelle. Expérimentalement, c'est la présence de pertes qui provoque l'apparition de ce régime. Dans notre cas, les détonations stationnaires ne présentent pas d'extremum local de libération d'énergie car aucune perte n'est prise en compte. Par conséquent, les calculs de la zone de réaction stationnaire pour une vitesse $D < D_{CJ}$ se terminent toujours par un blocage sonique ($M=1$). Le régime BV est déterminé approximativement lorsque le blocage sonique intervient à la fin de la première étape réactionnelle : dans cette situation, seule l'énergie de la première étape est libérée pour assurer la propagation de la détonation. Etant donné que cet état se trouve sur une autre droite de Rayleigh-Michelson que celle de l'état CJ, les conditions sont différentes de l'état MID. Néanmoins, on suppose que la chaleur de réaction et le γ qui rentrent en jeu sont les mêmes. L'expression (1.22) écrite pour ce régime basse vitesse donne :

$$Q_{MID} = \frac{c_0^2}{\gamma_{MID}^2 - 1} \left(\frac{\left(\frac{D_{BV}}{c_0}\right)^4 + \frac{\gamma_{MID}^2}{\gamma_0^2}}{2 \left(\frac{D_{BV}}{c_0}\right)^2} - \frac{\gamma_{MID}^2 - \gamma_0}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right) \quad (2.14)$$

qui, compte tenu de l'équation (2.13) et des hypothèses précédentes, fournit la relation implicite pour γ_{MID} :

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_{MID} p_{MID} v_{MID}}{\gamma_{MID} - 1} - \frac{\gamma_0 p_0 v_0}{\gamma_0 - 1} - \frac{c_0^2}{\gamma_{MID}^2 - 1} \left(\frac{\left(\frac{D_{BV}}{c_0}\right)^4 + \frac{\gamma_{MID}^2}{\gamma_0^2}}{2 \left(\frac{D_{BV}}{c_0}\right)^2} - \frac{\gamma_{MID}^2 - \gamma_0}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right) \\ = \frac{1}{2}(p_{MID} - p_0)(v_{MID} + v_0) \end{aligned} \quad (2.15)$$

En analysant empiriquement l'expression précédente, il apparaît que plus le régime de détonation basse vitesse est faible, plus γ_{MID} est élevé et par conséquent la chaleur de réaction associée à la première étape est faible par rapport à la chaleur de réaction totale. Le modèle peut être amélioré en considérant une dépendance à la température pour γ .

2.2.3.2 Détermination des paramètres de cinétique chimique réduite

Plusieurs techniques existent pour choisir correctement les paramètres globaux de cinétique chimique déterminant l'évolution des espèces et des paramètres thermodynamiques dans la zone

de réaction. Les paramètres thermodynamiques étant connus, il reste à déterminer pour chaque étape réactionnelle les valeurs du facteur préexponentiel et de l'énergie d'activation. Si les étapes réactionnelles ont des temps caractéristiques très distincts alors la détermination de Z_i et E_{a_i} de l'étape i est indépendante des autres étapes $j \neq i$

- Méthode manuelle : l'allure des profils obtenus avec une cinétique détaillée d'une part et réduite en une ou deux étapes d'autre part est comparée. Les valeurs du modèle sont estimées dans un premier temps. En augmentant E_a , les profils deviennent plus raides. En augmentant Z , la réaction devient plus rapide ; le profil est translaté le long de l'axe des abscisses. Un résultat convenable peut être obtenu rapidement au bout de quelques itérations.
- Une technique plus mathématique consiste à utiliser l'approche de Franck-Kamenetskii [1955]. Dans la zone d'induction, la vitesse matérielle, la densité, la capacité calorifique à volume constant et l'avancement de la réaction sont quasiment constants ; l'évolution de la température est régie par l'équation suivante :

$$\begin{cases} \rho c_v \frac{dT}{dt} = QZ\rho^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \\ T(t=0) = T_{ZND} \end{cases} \quad (2.16)$$

qui s'écrit encore en utilisant le changement de variable $\theta = \frac{T}{T_{ZND}} - 1$:

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = \frac{QZ}{c_v T_{ZND}} \rho_{ZND}^{n-1} \exp\left(-\frac{E_a}{RT_{ZND}(1+\theta)}\right) \\ \theta(t=0) = 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

En linéarisant la température $-\frac{E_a}{RT_{ZND}(\theta+1)} \sim -\frac{E_a}{RT_{ZND}}(1-\theta)$, l'équation (2.17) devient :

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = K \exp(\beta\theta) \\ \theta(t=0) = 0 \end{cases} \quad (2.18)$$

avec $\beta = \frac{E_a}{RT}$ et $K = \frac{QZ\rho_{ZND}^{n-1}}{c_v T_{ZND}} \exp\left(-\frac{E_a}{RT_{ZND}}\right)$

Ce système différentiel s'intègre :

$$\theta = \frac{-1}{\beta} \ln(1 - \beta K t) \quad (2.19)$$

et donne une estimation du temps d'induction : $\tau = (\beta K)^{-1}$.

Comme

$$\ln\left(\frac{\tau \rho_{ZND}^{n-1}}{T_{ZND}^2}\right) = \ln\left(\frac{R c_v}{E_a Q Z}\right) + \frac{E_a}{R T_{ZND}} \quad (2.20)$$

quelques calculs de la zone de réaction d'une détonation stationnaire avec une chimie détaillée suffisent (par exemple en faisant varier la célérité du choc entre $0.9D_{CJ}$ et $1.4D_{CJ}$) à tracer la droite de $\ln\left(\frac{\tau \rho_{ZND}^{n-1}}{T_{ZND}^2}\right)$ en fonction de $1/T_{ZND}$ et d'en déduire E_a/R en calculant la pente de cette droite.

2.2.3.3 Application de la détermination des paramètres du modèle pour le mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$

Les étapes 1 et 2 sont entièrement automatisées et réalisées par un script écrit en PYTHON (script1.py à l'annexe C). Le résultat de son exécution donne :

```

1 P0= 10000.0 Pa
2 T0= 293.0 K
3 gamma0= 1.28705097782
4 cv0= 2148.45475856
5 Wm0= 0.0134810828175 kg/mol
6 gammaCJ= 1.12648492452
7 cvCJ= 4977.33812603
8 WmCJ= 0.0132060856466 kg/mol
9 c0= 482.252298633 m/s
10 Qstanu= 14502440.191 J/kg
11 DCJ= 2788.06324043 m/s

```

La détermination du régime basse vitesse de la détonation (étape 4) est grandement simplifiée par script2.sh (cf. annexe C) qui lance en parallèle une série de calculs de zone de réaction (modèle ZND) pour différentes célérités de choc. Les courbes intégrales tracées sur la figure 2.8 mettent en évidence le régime basse vitesse à environ $D_{BV}=2230\text{m/s}$ (i.e. $0.8D_{CJ}$).

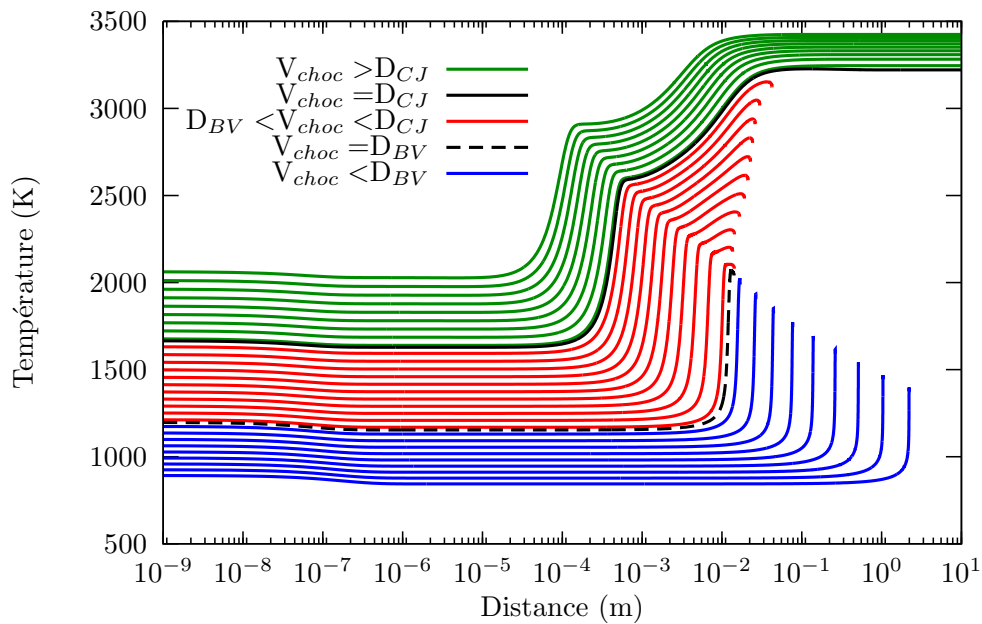


FIG. 2.8 – Profils de température dans la zone de réaction lors de la propagation stationnaire de la détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$. La vitesse du choc varie de 1800m/s à 3200m/s par pas de 50m/s .

Lorsque $D = D_{CJ}$, l'analyse des profils issus du calcul de la zone de réaction donne l'état MID en recherchant le pic de concentration de NO ($p_{MID}=3.08\text{bar}$, $\rho_{MID}=0.185\text{kg/m}^3$ et $T_{MID}=2595\text{K}$). Grâce à la relation (2.13), script3.py permet d'évaluer $\gamma_{MID}=1.239$.

Les paramètres cinétiques sont déterminés empiriquement. En quelques itérations, on obtient $Z_1 = 10^{12} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-1}$, $E_{a_1}=2 \cdot 10^5 \text{ J mol}^{-1}$, $Z_2=2 \cdot 10^8 \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-1}$, $E_{a_2}=1.5 \cdot 10^5 \text{ J mol}^{-1}$ et $n=1$.

La figure 2.9 permet d'apprécier la similitude des profils de pression, température, vitesse matérielle, masse molaire et nombre de Mach entre les calculs avec une cinétique détaillée et réduite.

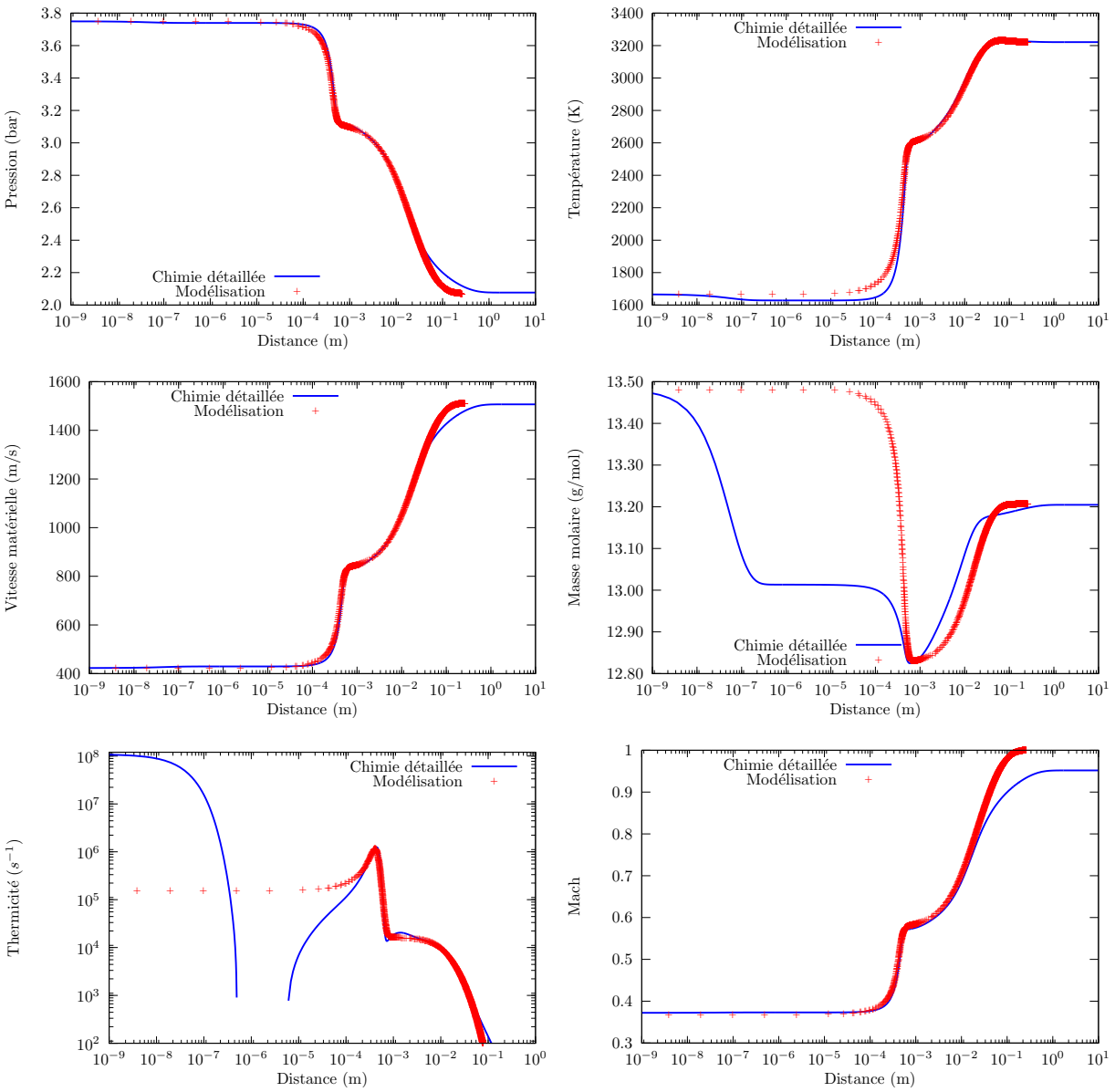
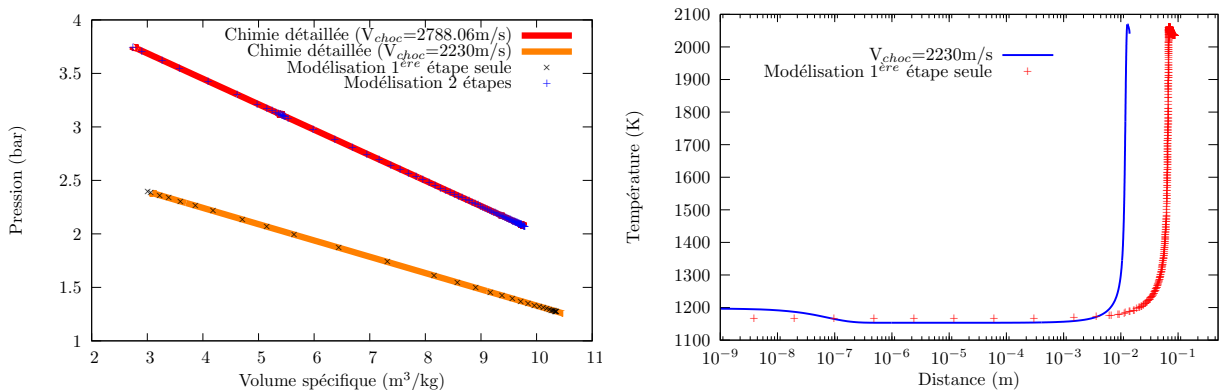


FIG. 2.9 – Comparaison des profils dans la zone de réaction issus d'une cinétique détaillée et réduite. La détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$ se propage à la célérité CJ.

Quelques commentaires sur ces graphiques doivent être formulés :

1. Aucun effort n'a été engagé pour rendre compte de la réaction de dissociation $N_2O_4 \rightarrow NO_2$ qui est complète au delà de $1\mu\text{m}$. Cette réaction étant extrêmement rapide, il n'est pas raisonnable de l'inclure dans un code hydrodynamique.
2. Les états ZND, MID et CJ (imposés par la construction du modèle) coïncident avec ceux calculés par la cinétique détaillée.
3. Le nombre de Mach final pour le profil issu de la chimie réduite tend vers l'unité, celui de la chimie détaillée doit être corrigé par l'écart existant entre la célérité du son figée et d'équilibre.

La figure 2.10(a) présente les droites de Rayleigh-Michelson CJ et BV respectivement associées aux régimes qui les déterminent. Puisque le modèle est construit sur la Rayleigh-Michelson CJ, un excellent accord est trouvé pour les paramètres calculés sur cette droite. Concernant la droite de Rayleigh-Michelson BV, l'accord moins évident a priori est également très bon. Toutefois, étant donné que la valeur de γ_0 est ajustée pour la droite de Rayleigh-Michelson CJ, la valeur de la température du choc sur la droite de Rayleigh-Michelson BV est mal évaluée, ce qui explique la différence des temps d'induction indiqués sur la figure 2.10(b). En prenant en compte la dépendance de la température de γ_0 , l'accord entre les profils de la figure 2.10(b) pourra être amélioré.



(a) Droites de Rayleigh-Michelson associées aux régimes de détonation normal et basse vitesse.

(b) Profils de température correspondant à la détonation basse vitesse.

FIG. 2.10 – Comparaison des résultats de calculs de la zone de réaction d'une détonation stationnaire avec une chimie détaillée et réduite. Mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$.

2.2.3.4 Comparaison rapide des détonations stationnaires et quasi-stationnaires

A partir de la figure 2.6, la longueur de la zone de réaction lors de la propagation instationnaire de la détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$ est estimée entre

0.38m et 0.52m ce qui est en accord raisonnable avec la distance donnée par le modèle stationnaire (0.28m) compte tenu des incertitudes avec lesquelles on peut les déterminer.

Enfin, les figures 2.10(a) et 2.11 peuvent être mises en correspondance. Dans les simulations numériques instationnaires, contrairement au modèle stationnaire idéal de ZND, les gaz frais subissent une compression non adiabatique : la viscosité du schéma numérique au niveau du choc ainsi que la rapidité des réactions chimiques « court-circuitent » le passage du point Von Neuman à la manière des détonations décrites par Wood qui tiennent compte des effets de transport [Wood, 1963]. Toutefois, au cours de l'avancement de la réaction, les états thermodynamiques se regroupent le long de la droite de Rayleigh-Michelson.

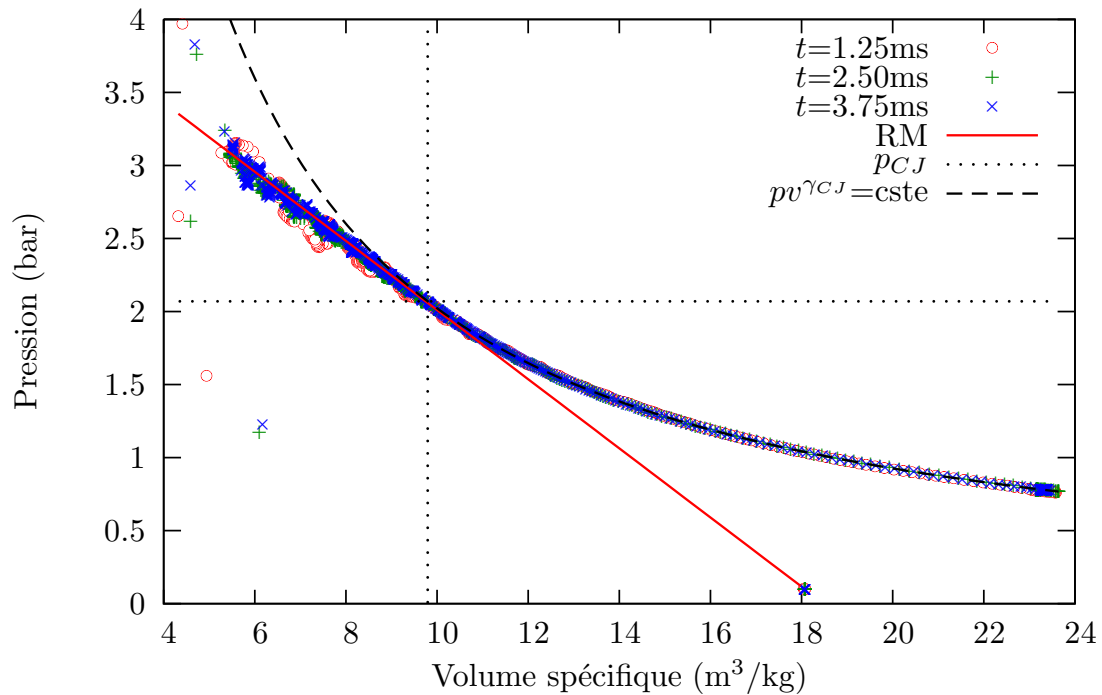


FIG. 2.11 – Diagrammes (p, v) des solutions instationnaires obtenues pour trois instants différents lors de la propagation de la détonation du mélange $H_2/NO_2 - N_2O_4$ à $p_0=0.1\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$ et $\phi=1.5$ avec le code EFAE.

CHAPITRE 3

Etude numérique des détonations
hélicoïdales dans les mélanges à
une étape globale de libération
d'énergie

Chapitre 3

Etude numérique des détonations hélicoïdales dans les mélanges à une étape globale de libération d'énergie

3.1 Paramètres des simulations

Dans ce chapitre, sauf mention contraire, les simulations numériques utilisent les paramètres décrits ci-dessous :

- Propriétés des gaz : (gaz idéal)
 - Pression et température initiales : $p_0=0.02\text{bar}$, $T_0=293\text{K}$
 - Thermodynamique : $\gamma_A=\gamma_B=1.133$ et $W_{m,A}=W_{m,B}=30.2958\text{g/mol}$, $Q_1=8.635\text{MJ/kg}$
 - Loi de cinétique chimique : $Z=300(\text{m}^3/\text{kg})^{1.1}\text{s}^{-1}$, $E_a=25\text{kcal/mol}$, $n=1.1$
- Paramètres liés à la résolution du maillage :
 - Tailles du domaine : $L_x, L_y=2\text{mm}$, $L_z=2\text{mm}$ (tube de diamètre $d = 2R = L_z$)
 - Nombres de mailles : $N_x=2000$, $N_y=40$, $N_z=40$
 - Nombre de mailles de la zone la mieux résolue $N_{fine}=1000$ (i.e. $\Delta x=\Delta y=\Delta z=0.05\text{mm}$)
- Paramètres de l'intégrateur : $\text{CFL}=0.1$, $\nu_{num}=0.99$
- Amorçage : Energie et position de l'explosion ponctuelle : $E_{PE}=2\text{ kJ/m}^2$ à $x_{PE}=0$

Ces paramètres conduisent aux propriétés CJ et ZND suivantes :

$D_{CJ}=2253.81\text{m/s}$, $p_{CJ}=0.6017\text{bar}$, $T_{CJ}=4756\text{K}$, $\rho_{CJ}=0.06096\text{kg/m}^3$, $c_{CJ}=1216.12\text{m/s}$.
 $p_{ZND}=1.1834\text{bar}$, $T_{ZND}=1372\text{K}$, $\rho_{ZND}=0.31416\text{kg/m}^3$.

Avant de commencer les simulations 3D, l'écoulement monodimensionnel est déterminé jusqu'à ce que la détonation atteigne la distance $x=0.1\text{m}$. A cet instant, la célérité de détonation mesurée par le code EFAE est de 2253m/s (exactement D_{CJ}) et les allures des profils de pression,

de vitesse matérielle dans le repère du laboratoire, d'avancement de la réaction (via la fraction massique des gaz brûlés Y_B) et de nombre de Mach relatif au choc incident sont décrits sur la figure 3.1. Sur cette figure, le nombre de Mach relatif au choc est écrêté pour le milieu initial, sa valeur étant de 7.47.

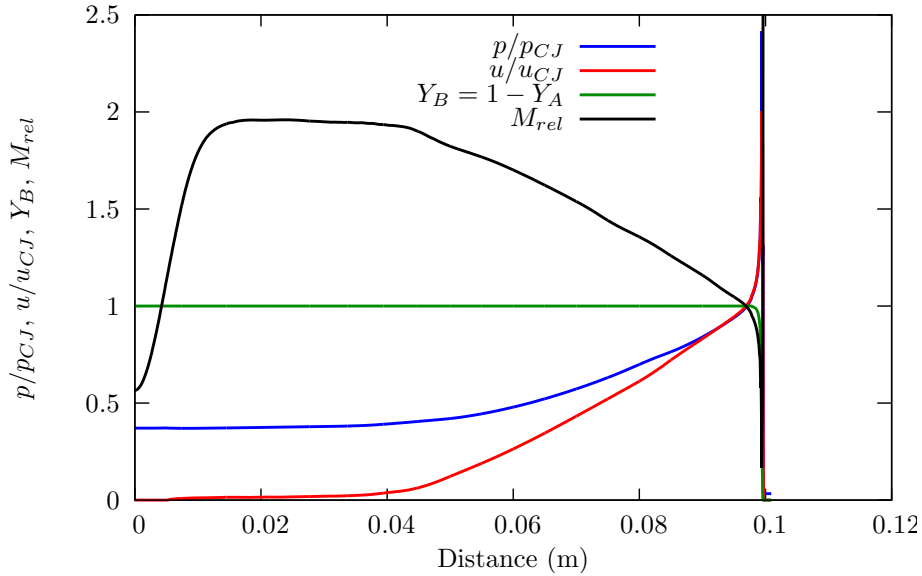


FIG. 3.1 – Profils de pression, vitesse matérielle, fraction massique des gaz brûlés Y_B et nombre de Mach relatif au choc incident à la fin du calcul monodimensionnel ($x=0.1\text{m}$).

Etant donné l'ajout d'énergie provoqué avec l'amorçage par explosion ponctuelle, la zone située à l'origine est marquée par des températures très élevées donc des grandes vitesses du son expliquant la diminution du nombre de Mach à cet endroit. Néanmoins, la globalité des profils est correcte et, en particulier, la pression et la vitesse matérielle prennent les valeurs CJ lorsque le nombre Mach et l'avancement de la réaction atteignent l'unité.

La vitesse de propagation de la détonation et l'allure des profils de la figure 3.1 ($u \approx 0$ pour $x < Dt/2$) indiquent que la propagation de la détonation est proche du régime quasi-stationnaire autonome lorsque $x=0.1\text{m}$, c'est pourquoi à ce moment, la solution 1D est clonée sur un domaine 3D, uniformément selon les directions y et z . Le calcul se poursuit alors en 3D.

3.2 Vue générale de la détonation hélicoïdale

3.2.1 Traces sur la paroi du tube

La figure 3.2 montre l'évolution du régime de détonation jusqu'à l'obtention du régime hélicoïdal grâce aux traces des pressions maximales observées en chaque point de la surface du tube.

La détonation se propage globalement de façon monodimensionnelle jusqu'à la distance

$x=0.137\text{m}$; aucune trace n'est laissée sur la paroi du tube ($p_{ZND} \approx 1.1\text{bar}$ correspond aux niveaux de pression forcés), la pression maximale au niveau de la surface du tube est d'environ 1.5bar . Néanmoins, quelques perturbations « naturelles » d'origine numérique (bruit numérique) donnent naissance à des points chauds : les réactions chimiques localement plus rapides favorisent la multiplication et l'accroissement des points de chocs triples qui déforment le choc incident. Ces perturbations deviennent visibles avec l'échelle choisie lorsque $x>0.137\text{m}$.

Une courte période transitoire est visible sur la distance $0.137\text{m}<x<0.160\text{m}$: deux points triples évoluent dans le diamètre du tube esquissant une cellule de détonation entière. Au delà de la distance $x>0.16\text{m}$, un seul point triple se propage dans le tube. Les traces laissées par ce point triple sur la paroi du tube à détonation sont régulières avec un pas d'environ $7\text{-}8\text{mm}$ ($3.5\text{-}4$ diamètres de tube d) et un angle d'environ 45° .

Le sens de rotation de la détonation hélicoïdale n'est pas connu a priori. Les simulations numériques produisent aléatoirement des détonations dont l'onde transverse se propage selon le sens trigonométrique positif (anti-horaire) et, inversement, selon le sens trigonométrique négatif (horaire). Toutefois, par souci de commodité, les résultats de ce mémoire présentent uniquement des détonations hélicoïdales dont l'onde transverse se propage positivement selon le sens trigonométrique ; une symétrie horizontale selon le plan $z = 0$ est appliquée aux solutions numériques qui ont un déplacement horaire de l'onde transverse afin d'obtenir un déplacement anti-horaire. Dans le repère direct cartésien (x, y, z) ou cylindrique (x, r, θ) , le sens de rotation trigonométrique signifie que l'observateur placé du côté des gaz frais et regardant arriver la détonation hélicoïdale sur lui voit celle-ci tourner dans le sens inverse des aiguilles d'une montre.

3.2.2 Profils instantanés de pression

Les figures 3.3 à 3.5 présentent l'évolution du front de détonation sur un pas d'hélice entier. Pour chacun des huit instants sélectionnés, les deux vues supérieures montrent avec transparence les isosurfaces de pression ($p \in \{0.6, 1.2, 1.8, 2, 3, 4, 5\}\text{bar}$) selon deux angles de vue différents (côté et face) tandis que la vue inférieure représente la distribution de pression sur la surface du tube à détonation.

D'après les isosurfaces de pression vues de côté, la zone où les gradients de pression sont les plus forts (zone de réaction et chocs incident/transverse) a une épaisseur au plus égale à $2\text{-}3\text{mm}$ selon la direction de propagation x . Derrière cette zone, la pression est inférieure à 1.2bar et non uniforme dans une section droite : seule l'isosurface correspondant à $p=0.6\text{bar}$ est visible. Cette isosurface apparaît vrillée avec un pas qui augmente à mesure que la distance au front de détonation augmente.

L'interaction des ondes de choc incidente, transverse et de Mach induit localement une zone de forte pression (i.e. $p>2\text{bar}$) dont les niveaux sont presque deux fois supérieurs à p_{ZND} . Cette

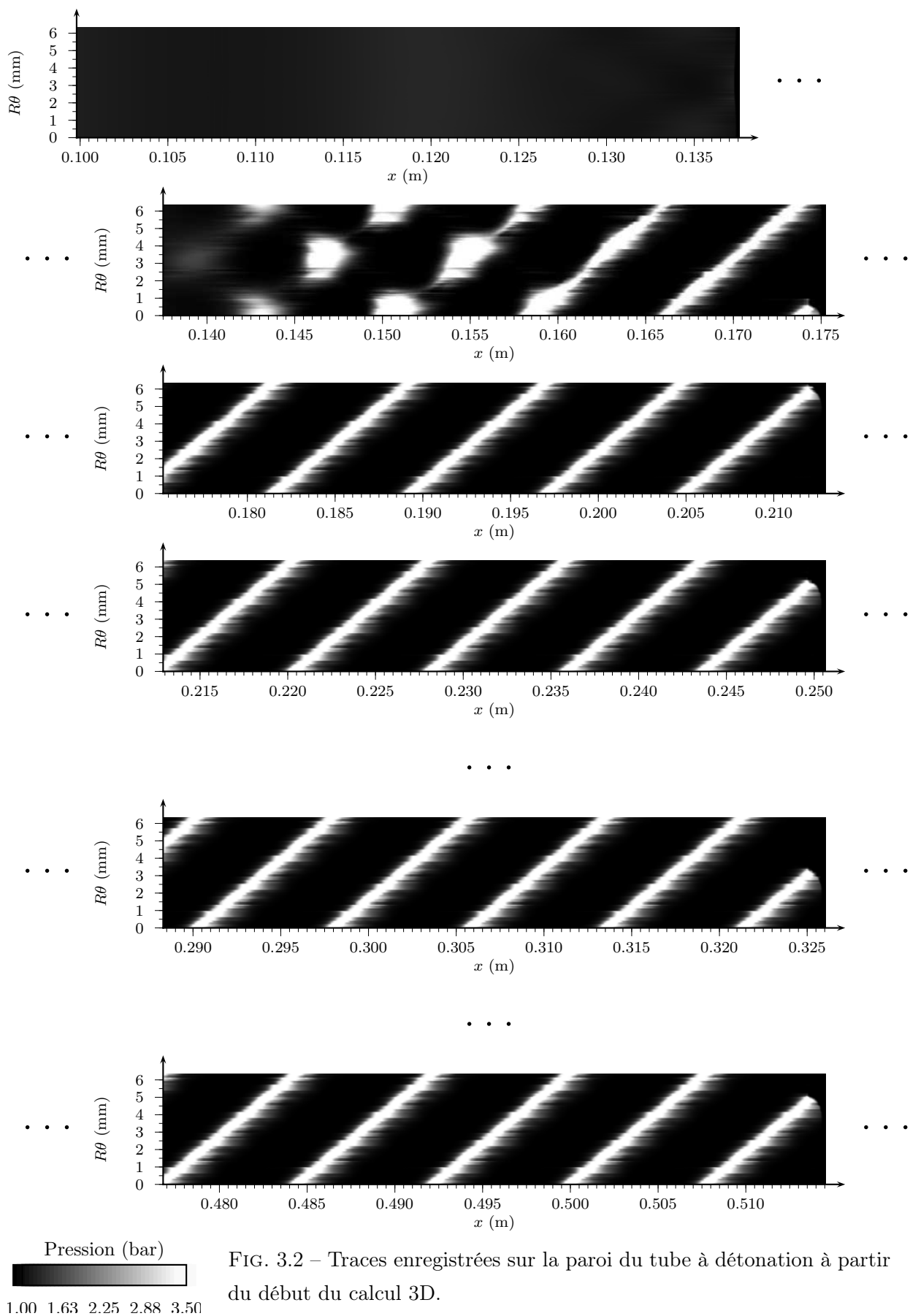


FIG. 3.2 – Traces enregistrées sur la paroi du tube à détonation à partir du début du calcul 3D.

zone véritablement liée à l'onde transverse tourne dans le sens trigonométrique, s'étend sur un secteur angulaire compris entre 45° et 90° et sur la périphérie du tube $r > \frac{R}{2}$ (cf. vues de face).

L'allure des champs de pression instantanés à la surface du tube est très proche des représentations empiriques établies par Schott [1965] et Voitsekhovskii *et al.* [1969] rappelées dans le chapitre 1 (cf. figure 1.15(b) p. 25). En particulier, on remarque que l'angle entre l'onde de Mach et l'axe du tube au niveau du point triple est voisin de 45° , que l'onde de pression notée CG sur la figure 1.15(b) est identifiable par la traînée verte accrochée à l'onde transverse. La propagation se décompose en deux mouvements, axial et transverse.

La superposition des champs de pression obtenus à chaque pas de calcul sur la surface du tube compose les plaques de pression maximale enregistrées au cours de la propagation. La figure 3.6 représente le champ de pression maximale correspondant au domaine de représentation des figures 3.3–3.5. Les parties du front de détonation qui participent à l'établissement de ces plaques sont les trois ondes : incidente, transverse et de Mach.

La grande similitude des champs de pression au cours des différents instants laisse penser à une propagation stationnaire ou quasi-stationnaire de la détonation. La section suivante va apprécier la stationnarité du phénomène.

3.3 Régime quasi-stationnaire

Déterminer les caractéristiques du régime stationnaire est important à double titre : cela permet d'une part, d'apprécier si la détonation se propage à un régime proche de celui théorique de Chapman-Jouguet (propagation stationnaire et autonome) et, d'autre part, de *figer* le phénomène pour en faciliter son étude.

Il suffit de regarder l'évolution de la pression maximale (fig. 3.7(a) et 3.7(b)) pour réfuter l'hypothèse de la parfaite stationnarité du phénomène. Toutefois, même si une pulsation des grandeurs physiques est visible, une périodicité du phénomène existe justifiant l'état quasi-stationnaire de la propagation.

3.3.1 Etude du point de pression maximale

Pulsation de la pression maximale

L'analyse des figures 3.7(b) et 3.7(c) montre que l'évolution de la pression maximale est périodique avec une période quatre fois plus petite que la période de rotation de l'onde transverse. Il semble que la discrétisation de la surface du tube dans l'espace cartésien soit en partie responsable des pulsations de pression maximale : en effet, d'après la figure 3.7(b), le niveau de pression (maximale) situé dans la cellule précédant la *première marche* ($\theta \in \{6^\circ, 96^\circ, 186^\circ, 276^\circ\}$ au niveau de la surface du tube) est le plus élevé.

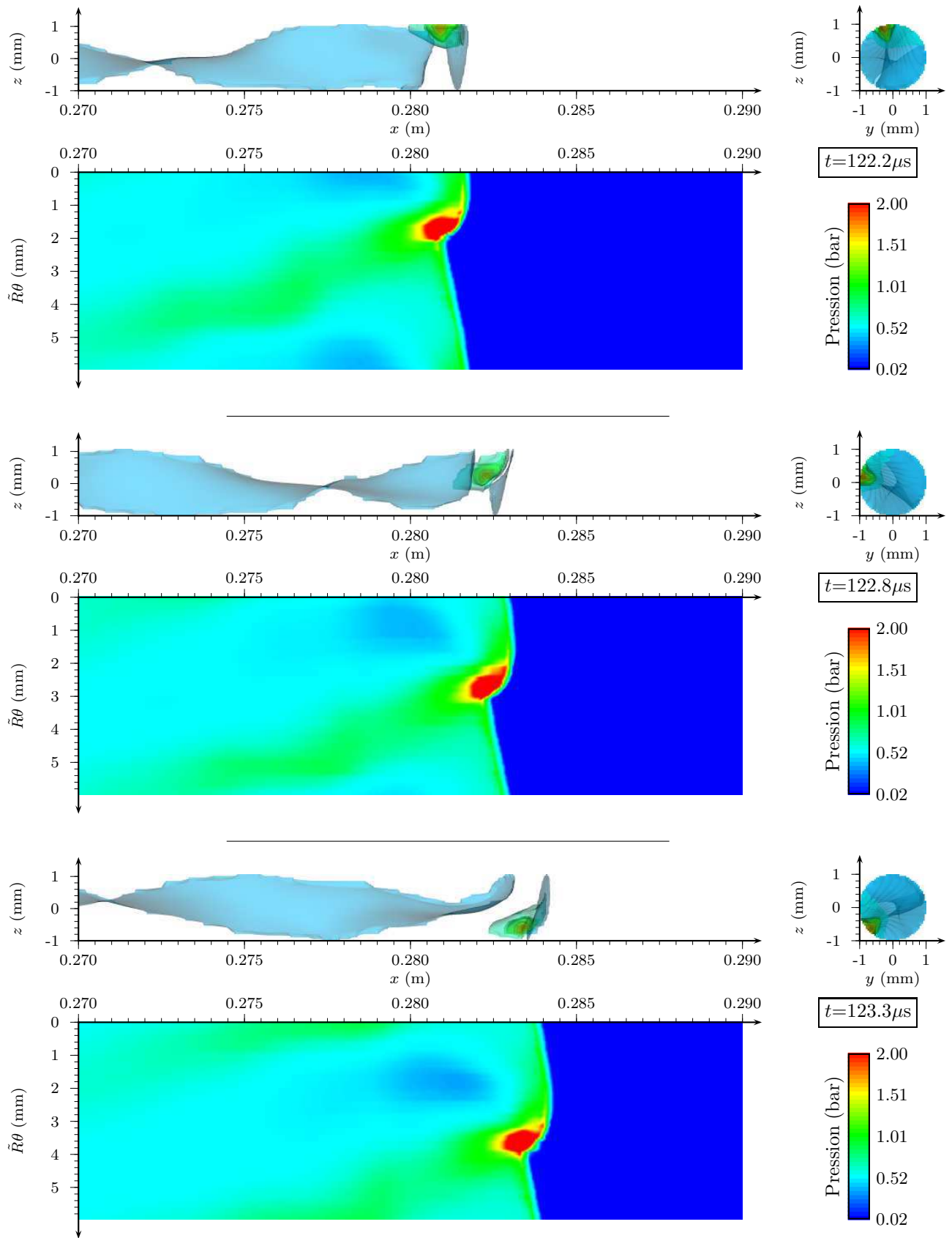


FIG. 3.3 – Pour chaque instant $t \in \{122.2, 122.8, 123.5\} \mu\text{s}$ sont représentés : en haut, les vues de coté et face des isosurfaces de pression (avec transparence) ; en bas, le champ de pression sur la surface du tube de rayon R . $\tilde{R} = 0.95R$, $\text{iso-}p \in \{0.6, 1.2, 1.8, 2, 3, 4, 5\} \text{bar}$.

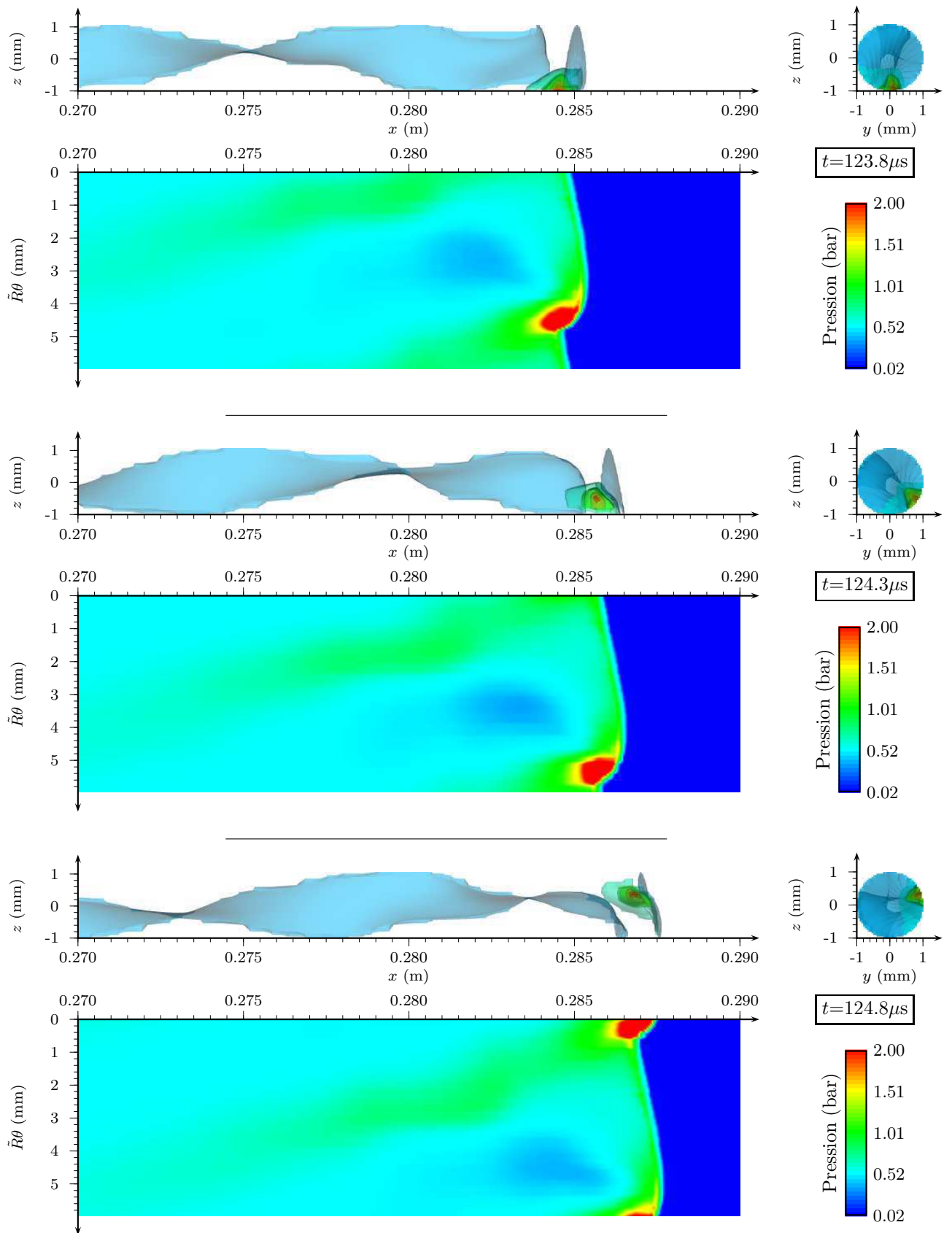


FIG. 3.4 – Même légende que la figure 3.3 pour les instants $t \in \{123.8, 124.3, 124.8\} \mu\text{s}$.

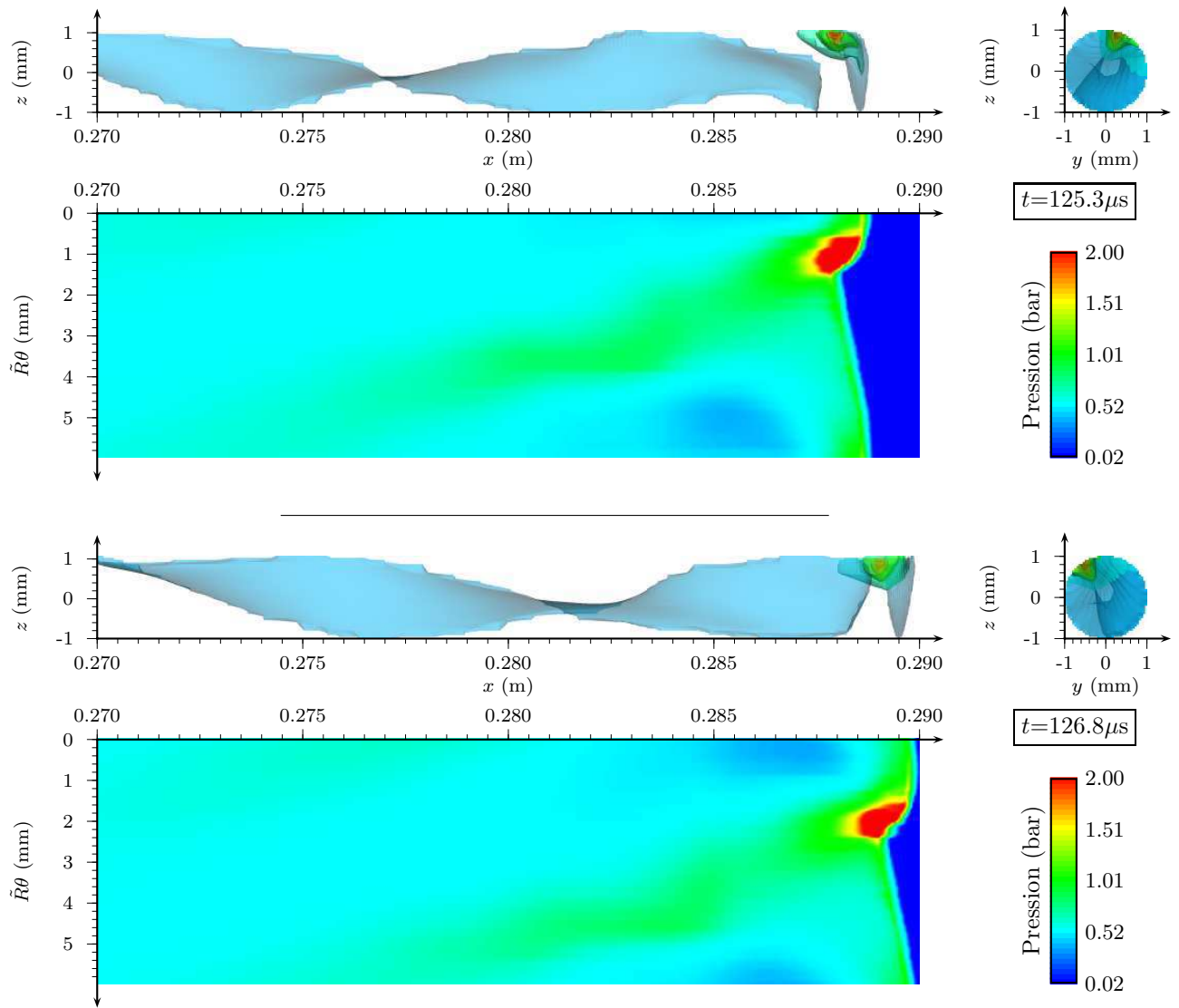


FIG. 3.5 – Même légende que la figure 3.3 pour les instants $t \in \{125.3, 125.8\} \mu\text{s}$.

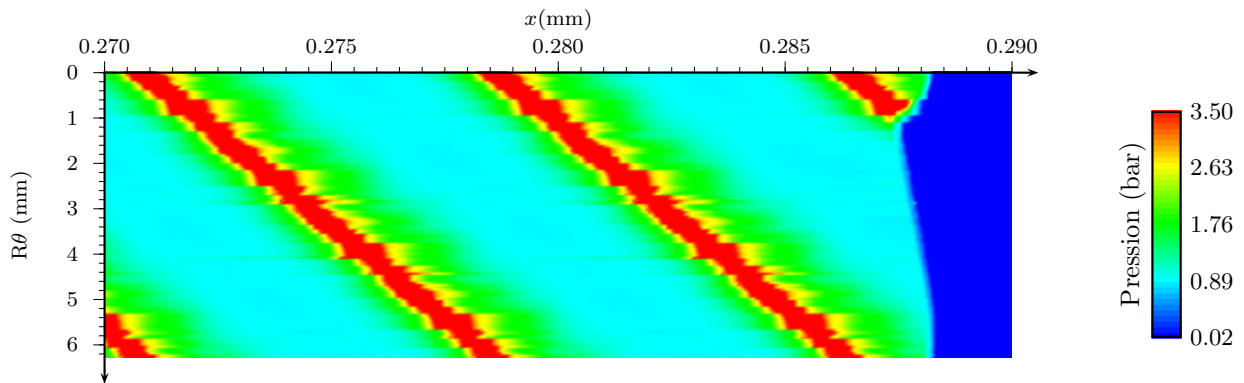
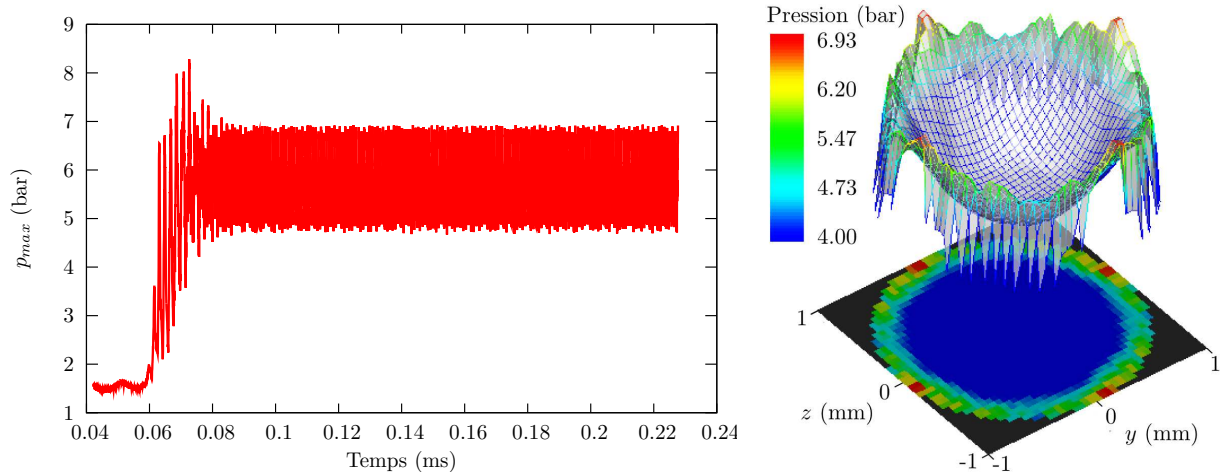
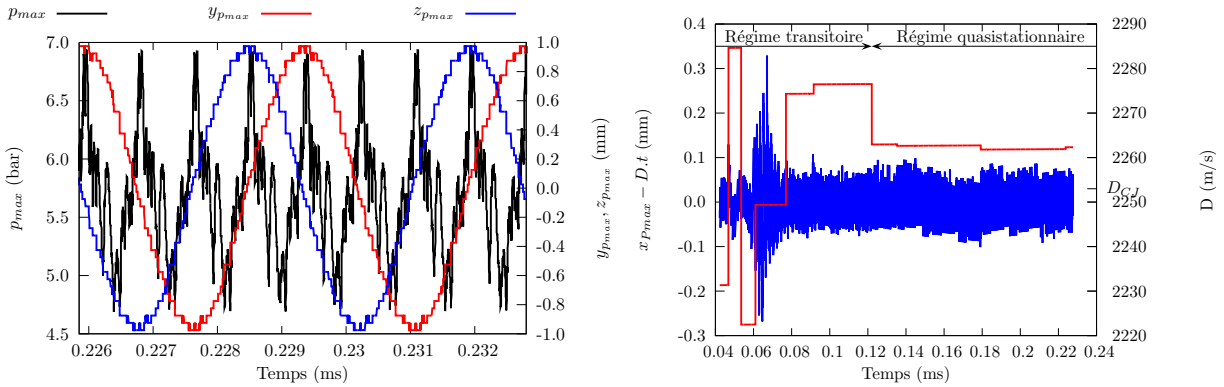


FIG. 3.6 – Traces enregistrées sur la paroi du tube à détonation. Le domaine de représentation est identique à celui des figures 3.3–3.5.

(a) Evolution de p_{max} au cours de la simulation numérique.(b) Superposition des p_{max} dans le plan yz pour $t > 0.12$ ms.(c) Détail de l'évolution de p_{max} pendant deux périodes de rotation de l'onde transverse ($226\mu s < t < 232\mu s$)

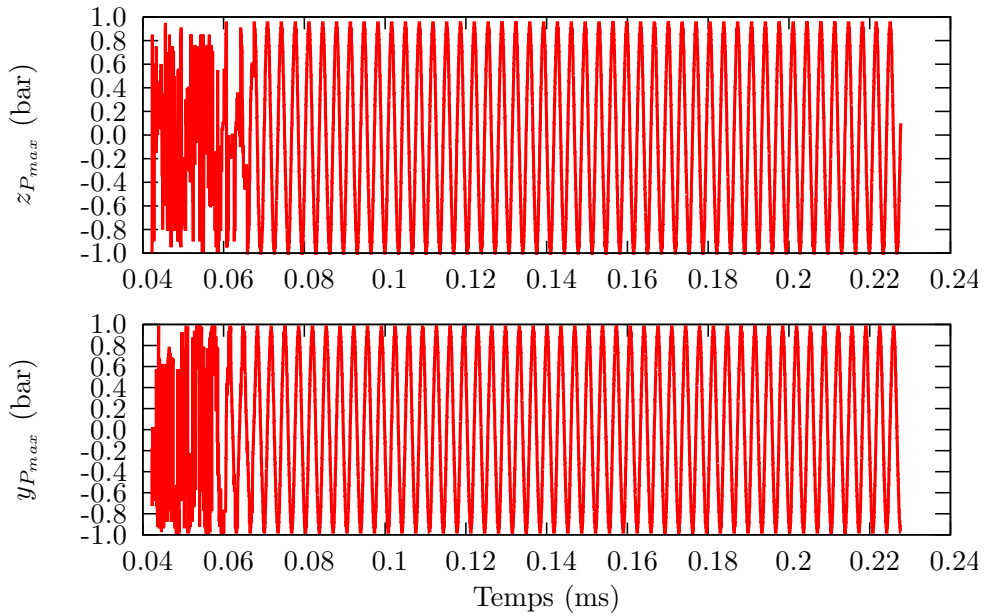
(d) Evolution de la vitesse de détonation au cours de la simulation 3D (rouge). Incertitude de position (bleu).

FIG. 3.7 – Evolution de la pression maximale et de la vitesse de propagation longitudinale au cours de la simulation numérique.

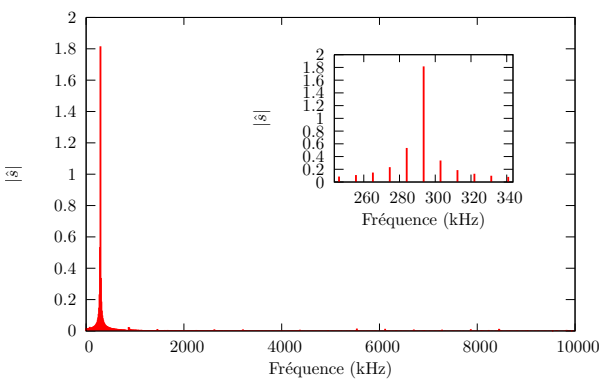
Déplacement longitudinal du point de pression maximale

La figure 3.7(d) montre l'évolution de la vitesse de propagation du point de pression maximale au cours de la simulation numérique et indique une incertitude de position du choc inférieure à 0.1 mm (soit deux cellules numériques). Dans la zone de propagation quasi-stationnaire, la vitesse de propagation du front de détonation est de 2263 m/s (soit $1.004D_{CJ}$, l'écart par rapport à D_{CJ} est négligeable).

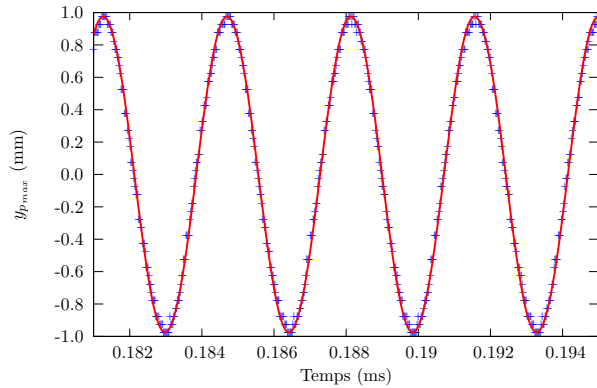
En effectuant la transformation de coordonnée $x \rightarrow x - Dt$, on se place dans le repère lié au choc plan noté CP dans la suite. La vitesse relative au choc plan vaut $\vec{W}_{CP} = (u_x - D, u_y, u_z)$ où u_x, u_y, u_z sont les composantes cartésiennes de la vitesse dans le repère du laboratoire.



(a) Evolution des coordonnées y et z du point de pression maximale (Signaux à traiter).



(b) Module des coefficients de Fourier de l'analyse en fréquence du signal $y_{p_{max}}(t)$ lorsque $t > 0.12$ ms.



(c) Signal original $y_{p_{max}}$ et sa modélisation.

FIG. 3.8 – Signaux à traiter pour connaître la fréquence de rotation du front de détonation.

Déplacement tangentiel du point de pression maximale

Pour déterminer la fréquence de rotation du front de détonation, on utilise les coordonnées du point de pression maximale dans une section droite à x constant. D'après les observations, ce point est toujours situé au niveau de la surface du tube à détonation à une ou deux mailles près. Si la vitesse angulaire de rotation $\omega = 2\pi f$ est relativement constante, les signaux $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$ des coordonnées du point de pression maximale représentés sur la figure 3.8(a) ont une forme sinusoïdale et s'écrivent :

$$y_{p_{max}}(t) = 0.975R \sin(2\pi f_y t + \phi_y) \quad (3.1a)$$

$$z_{p_{max}}(t) = 0.975R \sin(2\pi f_z t + \phi_z) \quad (3.1b)$$

La transformée de Fourier donne une bonne estimation de la fréquence de rotation f mais la précision n'est pas suffisante pour caractériser le changement de repère : d'après la figure 3.8(b), la fréquence est de $293\text{kHz} \pm 10\text{kHz}$. Pour améliorer la précision, une méthode basée sur la technique de réduction aux moindres carrés est mise en oeuvre en présumant la forme des signaux avec les équations (3.1). La figure 3.8(c) présente la correspondance entre la modélisation et le signal original. Grâce à cette méthode, la fréquence de rotation est déterminée très précisément :

$$f_y = 291.306 \pm 5.10^{-4} \text{kHz} \quad (3.2a)$$

$$\phi_y = 103.3276 \pm 10^{-4} \text{rd} \quad (\text{coefficient de corrélation : } 0.986) \quad (3.2b)$$

$$f_z = 291.303 \pm 5.10^{-4} \text{kHz} \quad (3.2c)$$

$$\phi_z = 98.6177 \pm 10^{-4} \text{rd} \quad (\text{coefficient de corrélation : } 0.986) \quad (3.2d)$$

Les signaux correspondant aux directions y et z ont quasiment des fréquences identiques et évoluent en phase : $\phi_y - \phi_z = 4.71 \approx \frac{3\pi}{2}$. Grâce à cette méthode, le pas de l'hélice $P = D/f = 7.77\text{mm}$ (i.e. $P = 3.89d$) peut être calculé et sa valeur numérique correspond à l'espacement des bandes obtenues sur les traces enregistrées sur les plaques numériques.

Enfin, la vitesse de rotation est utilisée pour transformer les coordonnées du repère lié au laboratoire à celui lié au choc transverse noté CT :

$$x \longrightarrow x - Dt \quad (3.3a)$$

$$\theta \longrightarrow \theta - \omega t \quad (3.3b)$$

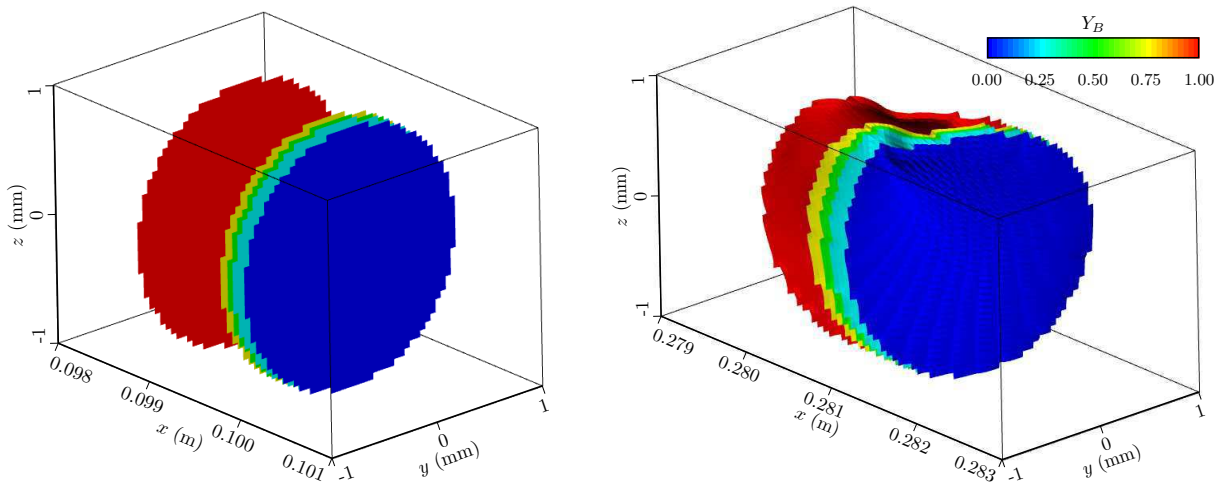
La vitesse relative au choc transverse s'écrit $\overrightarrow{W_{CT}} = (u_x - D, u_y + \omega r \sin(\theta), u_z - \omega r \cos(\theta))$ où (u_x, u_y, u_z) sont les composantes cartésiennes de la vitesse dans le repère lié au laboratoire et $r = \sqrt{y^2 + z^2}$.

3.3.2 Evolution de l'aire des isosurfaces de la fraction massique des gaz brûlés

L'aire des isosurfaces de la fraction massique des gaz brûlés Y_B est utilisée pour estimer le changement de la forme du front. Les figures 3.9(a) et 3.9(b) montrent la forme de ces surfaces pour deux instants différents.

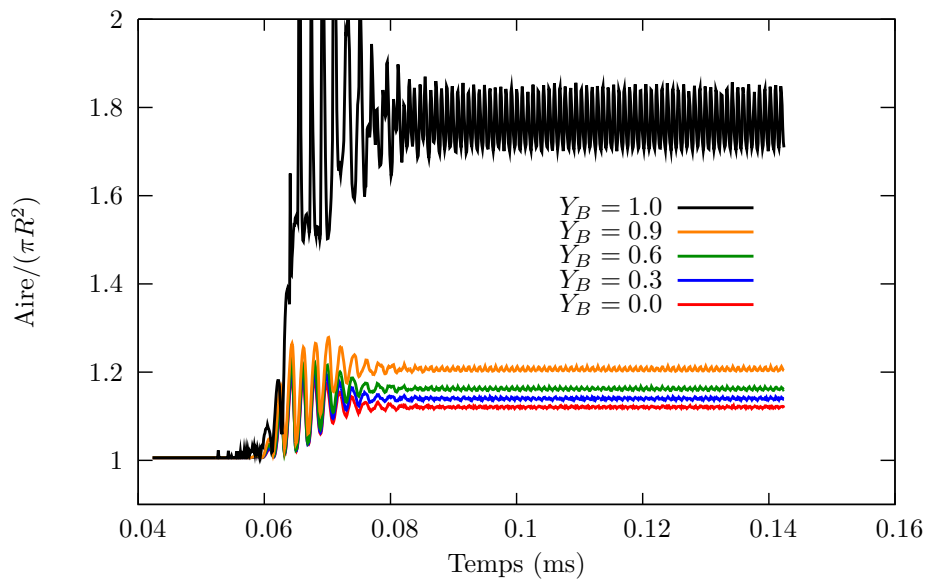
La figure 3.9(c) indique que l'aire est minimale lorsque le front est plan (fig. 3.9(a)) et augmente lorsque le front se plisse (fig. 3.9(b)). Quelques soient les isosurfaces, l'aire initiale vaut $3.16\text{mm}^2 \approx \pi R^2$ au début du calcul 3D. Les différentes aires sont quasiment constantes lorsque $t > 0.09\text{ms}$, ce qui argumente en faveur de l'existence du régime quasi-stationnaire.

Lorsque le régime est quasi-stationnaire, l'isosurface $Y_B = 0.6$ a gagné 16% de surface par rapport au front plan. L'isosurface $Y_B = 1.0$ qui correspond à la fin de réaction en a gagné 76%.



(a) $t=42.3\mu\text{s}$ (début du calcul 3D).

(b) $t=122.2\mu\text{s}$ (régime quasi-stationnaire).



(c) Evolution de l'aire des isosurfaces de la fraction massique de gaz brûlés.

FIG. 3.9 – Formes et aires des isosurfaces de concentration de gaz brûlés Y_B .

3.4 Détail du front de détonation quasi-stationnaire

3.4.1 Description détaillée du front sur la paroi du tube à détonation

La figure 3.10 montre la fraction des gaz brûlés, la pression, la densité et le saut d'entropie au niveau du front de détonation et de la paroi du tube à détonation ($r = \tilde{R}$). L'onde de Mach et le choc incident du front de détonation sont clairement identifiables et leurs formes sont celles décrites par Schott [1965] et Voitsekhovskii *et al.* [1969] (cf. figure 1.15(b)). La représentation 2D peut cacher des détails et induire en erreur c'est pourquoi la représentation 3D de droite double les résultats de gauche pour mieux apprécier les niveaux et les gradients.

En ce qui concerne la fraction des gaz brûlés, la longueur de réaction s'étend entre $x=280\text{mm}$ et $x=282\text{mm}$. Etant donné la résolution du maillage ($\Delta x_{fine}=0.05\text{mm}$), l'épaisseur de la zone de réaction contient au moins 40 mailles. Cette épaisseur n'est d'ailleurs pas constante sur la circonférence du tube, elle est plus étroite au début de cellule de détonation (i.e. au niveau de l'onde de Mach) qu'à la fin (i.e. au niveau du choc incident, juste devant l'onde transverse).

Le graphique 3D de la répartition surfacique de la pression montre à quel point le pic de pression est relativement fin mais important au niveau du point triple. Elle visualise également en jaune, attachée à l'onde transverse, l'onde de surpression (par rapport à p_{CJ}) qui s'amortit lentement. Les niveaux de pression diminuent sur les deux premiers tiers de la cellule de détonation et, étonnamment, réaugmentent légèrement sur le dernier tiers. Cette augmentation de pression peut être attribuée à la simplicité du modèle chimique où l'étape d'induction pure n'est pas rendue dans sa forme la plus stricte. Ce point pourra être amélioré dans les simulations futures.

A première vue, le champ de densité est très semblable à celui de la pression mais il diffère quelque peu. Malgré l'existence du pic de densité très important, celui-ci est plus large et légèrement décalé (en amont) par rapport à la pression. Il en est de même de la crête située sur l'onde de Mach et le choc incident. De plus, différemment de la pression, la densité augmente continuellement le long de la cellule de détonation.

Enfin, une échelle très étroite de couleur est sélectionnée pour visualiser les fluctuations du saut d'entropie. Il apparaît que le saut d'entropie est plus grand au niveau de l'onde de Mach que derrière l'onde transverse. En effet, à états initial et final équivalents en pression, le saut d'entropie est plus faible à travers deux chocs qu'à travers un seul.

Même si la forme du front de détonation est connue, son explication reste encore à déterminer aujourd'hui. Depuis le début des recherches en détonation, les scientifiques sont persuadés du caractère important que revêt la thermodynamique avec notamment la place de l'entropie dans les mécanismes de propagation : *[les] états stationnaires peuvent être caractérisés par un principe d'extremum qui établit que la production d'entropie possède sa valeur minimale compatible avec*

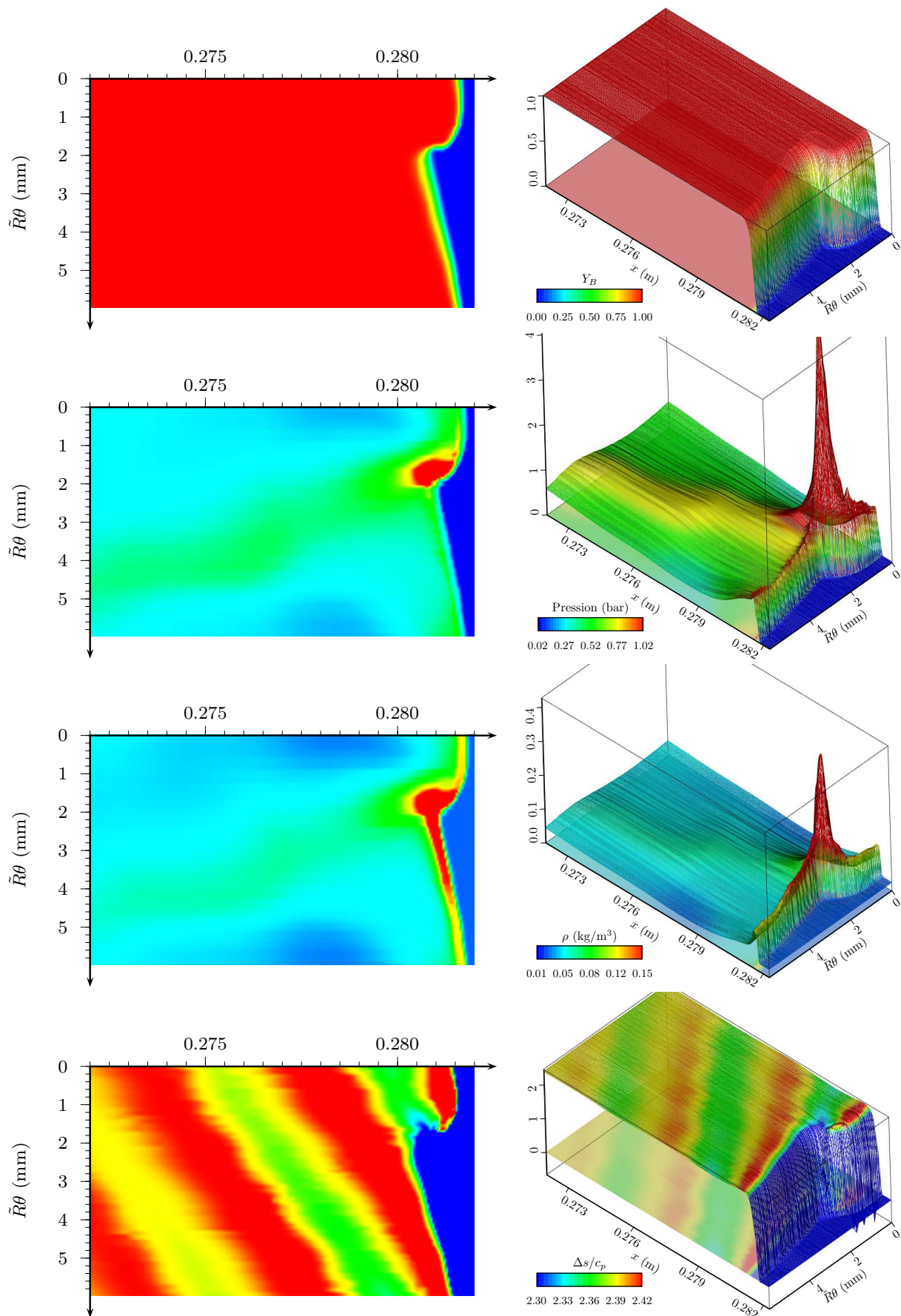


FIG. 3.10 – Fraction massique des gaz brûlés, pression, densité et saut d'entropie en proche paroi ($r=\tilde{R}$) pour $t=122.2\mu\text{s}$. La représentation 3D de droite permet d'apprécier les gradients.

des conditions auxiliaires à spécifier dans chaque cas [Prigogine, 1996, p. 86]. Ceci établit une propriété importante de la théorie CJ et, dans la situation présente, peut constituer une des causes de la stabilisation de la forme tridimensionnelle du front de détonation.

3.4.2 Lignes de courant et capteurs en périphérie

La figure 3.11 place les *pseudo* lignes de courant (de couleur blanche) sur les champs précédemment commentés de la figure 3.10 ainsi que les signaux de trois capteurs, fixes dans le repère lié au laboratoire, situés dans une même section droite et espacés par un angle de 90° . La trajectoire des capteurs est indiquée par les lignes pointillées rouges, vertes et bleues. Les deux lignes noires correspondent aux positions de deux iso-fractions massiques de gaz brûlés ($Y_B=0.01$ et $Y_B=0.9875$) pour faciliter l'identification de la zone de réaction. Le terme *pseudo* utilisé ici pour qualifier les lignes de courant est justifiée un peu plus loin dans le texte ; dans cette section, les lignes de courant établies grâce au champ de vecteurs vitesses relatifs au choc transverse ignorent la composante radiale de la vitesse. Celle-ci, nulle sur la surface du tube, est supposée négligeable à la périphérie, en particulier pour $r = \tilde{R} = 0.95R$ où la coupe cylindrique est réalisée¹.

Les commentaires de la figure 3.10 donnés à la section précédente peuvent être relus avec les informations additionnelles fournies par les lignes de courant et les signaux des capteurs, notamment en ce qui concerne l'épaisseur de la zone de réaction et le léger décalage entre la densité et la pression.

La très bonne cohérence des lignes de courant avec les champs de *grandeurs transportables* tels que la fraction massique des gaz brûlés ou l'entropie, n'a été possible qu'en déterminant finement le champ de vitesse relatif à l'onde transverse.

Dans le repère lié au choc transverse, l'écoulement représenté sur la figure 3.11 progresse de la droite vers la gauche. La distribution régulière des lignes de courant dans le milieu amont (à gauche) et la répartition de ces mêmes lignes à l'aval (à droite) montre la réorganisation opérée par le front de détonation : les lignes de courant qui sont passées par l'onde transverse sont très resserrées alors qu'un *vide* de lignes de courant se crée. Au bout d'un ou deux diamètres de tube derrière le front de détonation, les lignes de courant sont quasiment rectilignes. Derrière l'onde incidente, les lignes de courant s'élargissent un peu avant de passer à travers l'onde transverse.

Vers $t=0.5\mu s$, le décrochement observé dans la montée du signal représentant l'entropie est la conséquence de la non-coïncidence des lignes de courant avec les trajectoires des capteurs dans le repère lié à l'onde transverse. C'est le capteur 3 qui est sollicité le premier par le front de détonation au niveau de l'onde de Mach puis le capteur 1 et enfin le capteur 2 qui traverse la zone de très forte pression autour du point triple.

Les conclusions précédentes se réitèrent en analysant les signaux issus des capteurs mais

¹ La coupe était initialement réalisée à $r = \tilde{R}$ pour des raisons techniques.

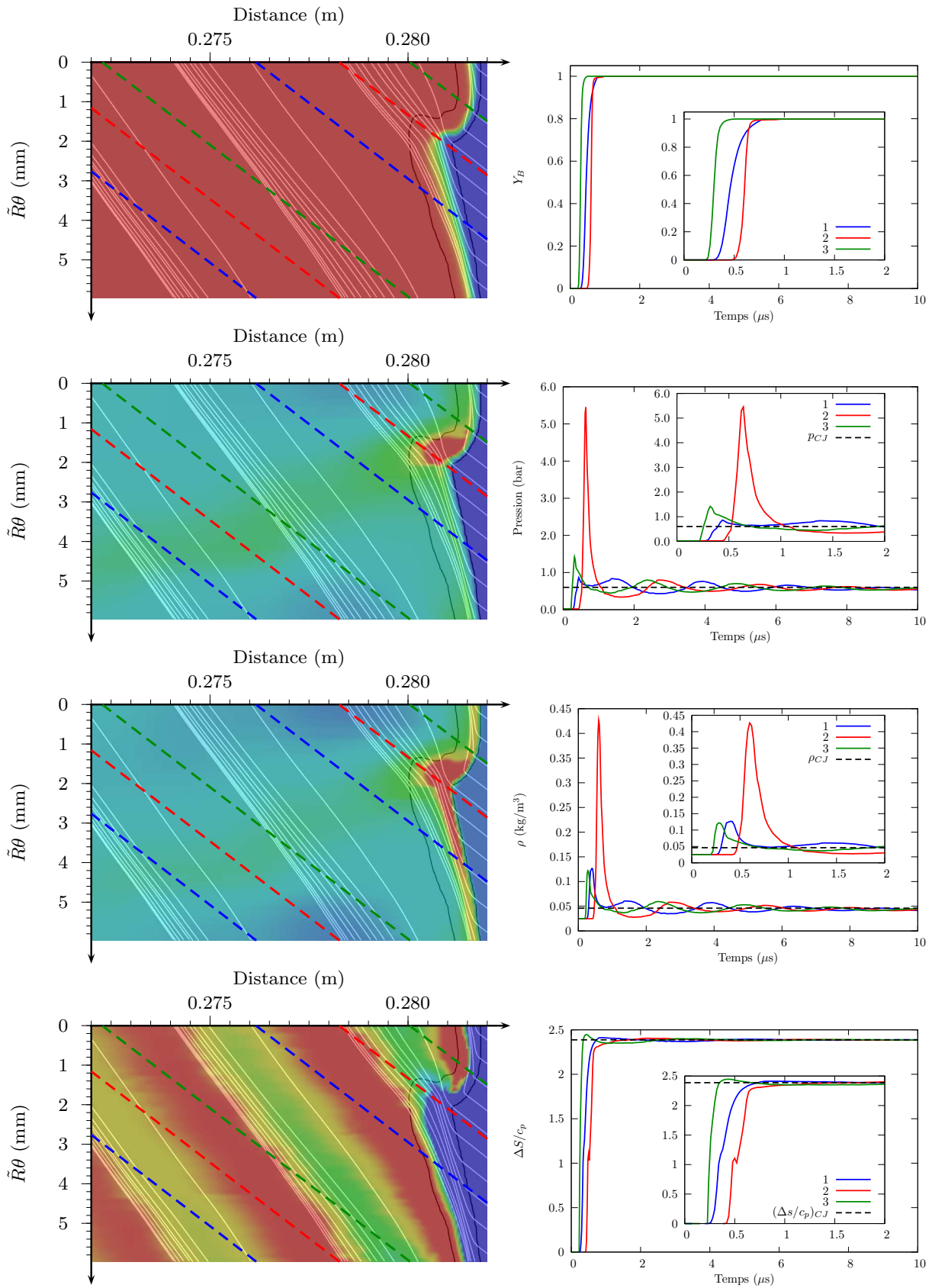


FIG. 3.11 – A gauche, les *pseudo* lignes de courant superposées aux champs de fraction massique de gaz brûlés, pression, densité et saut d'entropie avec les mêmes échelles de valeurs que dans la figure 3.10. A droite, les signaux de trois capteurs fixes dans le repère du laboratoire dont les trajectoires sont indiquées par les lignes pointillées sur les champs de gauche. Les capteurs sont situés sur une même section droite, deux angles de $+90^\circ$ séparent les capteurs 3-2 et 2-1. Chaque graphique inclut un agrandissement au niveau du front de détonation.

notons également les oscillations des grandeurs autour de leur valeur CJ après le passage de l'onde de détonation.

Revenons maintenant à l'expression *pseudo lignes de courant* et justifions sa raison d'être. La figure 3.12 permet d'apprécier l'hypothèse précédemment faite au sujet de la vitesse radiale sur le cylindre de coupe. Seules les zones vertes vérifient raisonnablement la condition $u_r \approx 0$ en proche paroi ($r = \tilde{R}$). Par conséquent la vitesse radiale n'est pas négligeable au niveau de l'onde de Mach, du choc incident, autour du point triple et derrière l'onde transverse; les particules quittent réellement cette surface pour se diriger vers le centre du tube (zones bleues) ou vers les parois (zones rouges). Ceci explique pourquoi, par exemple, la longueur de réaction est exagérément élevée pour la ligne de courant qui attaque à la normale l'exubérance de l'onde de Mach. Si la représentation des lignes de courant en proche paroi est donc assez périlleuse, elle donne toutefois un bon ordre d'idée. Avant d'étudier les lignes de courant 3D (où toutes les composantes du champ de vitesse sont prises en compte), regardons ce qu'il se passe dans des sections presque droites...

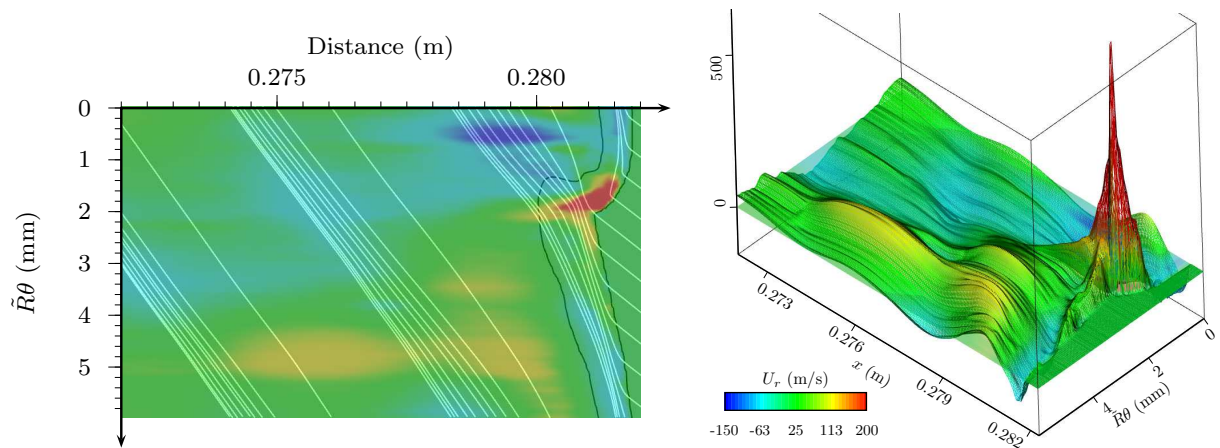


FIG. 3.12 – Vitesse radiale u_r en proche paroi ($r=\tilde{R}$).

3.4.3 Front de détonation au centre du tube

Cette section regarde plus attentivement l'évolution des champs de pression, de densité, de variation d'entropie et de vitesses radiales et tangentielles au centre du tube. Ces champs sont représentés sur la figure 3.13 pour trois iso-fractions massiques de gaz brûlés correspondant au début des réactions chimiques ($Y_B=0.01$), à la fin ($Y_B=0.99$) et à l'avancement moitié ($Y_B=0.5$)

La zone de forte pression est principalement localisée au niveau de la surface du tube (vers midi) et s'étend en profondeur sur environ un demi rayon (cf. graphe du milieu). Sur l'iso-fraction massique $Y_B=0.99$ (à gauche), la pression a déjà amorcé la descente pour rejoindre la valeur CJ .

Alors que, au début de la réaction (à droite), le champ de pression est globalement uniforme (hormis au niveau de la protubérance de l'onde de Mach), la densité montre une répartition bien

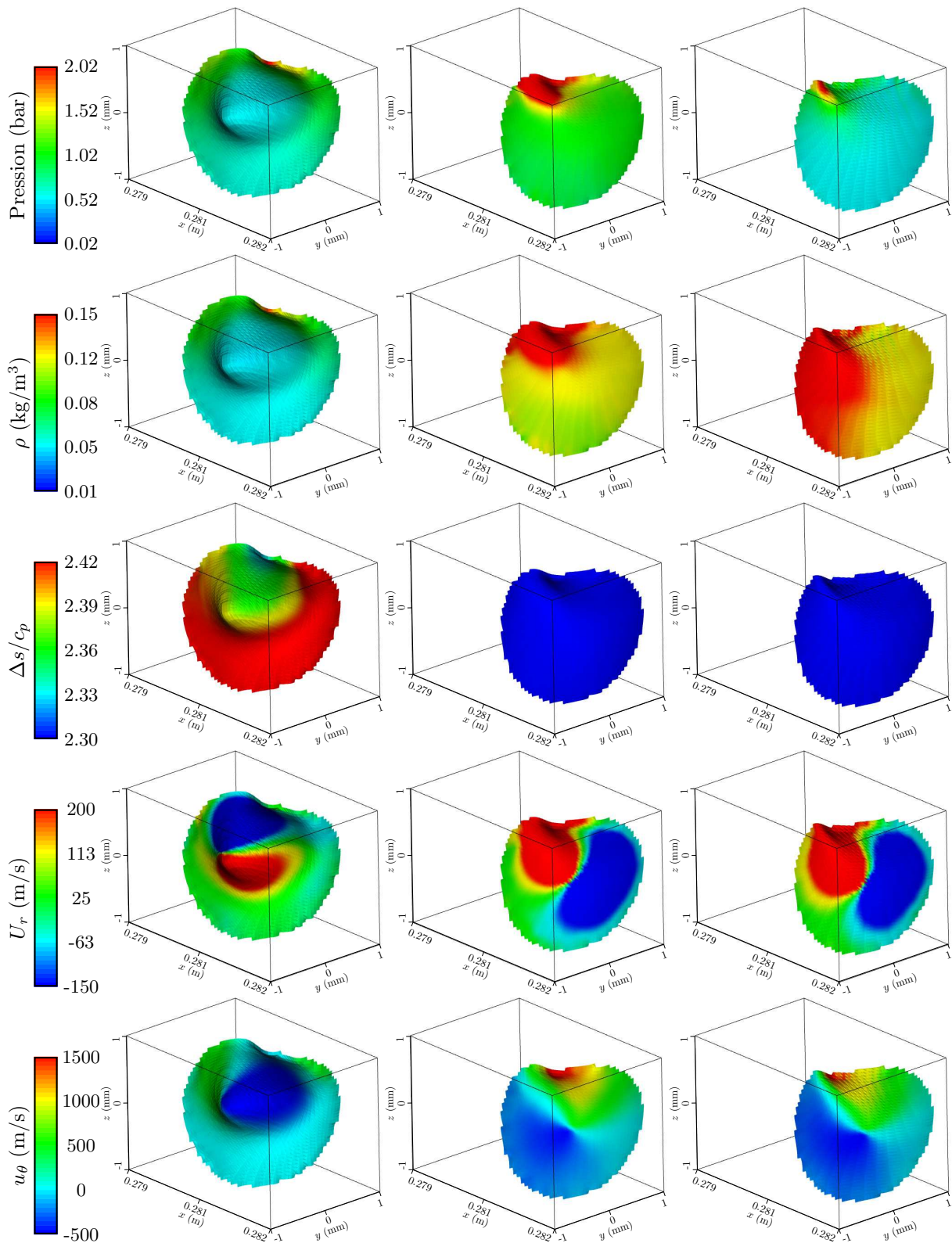


FIG. 3.13 – Profils de pression, densité, variation d'entropie, vitesses radiale et tangentielle sur trois isosurfaces de fraction massique de gaz brûlés : $Y_B=0.99$ (gauche), $Y_B=0.5$ (milieu) et $Y_B=0.01$ (droite). Pour cet instant ($t=122.2\mu s$) le point triple se situe vers midi.

différente avec, au niveau du choc incident, une zone où le mélange frais est très dense jusqu'au centre du tube. Le léger décalage déjà évoqué entre la pression et la densité est également visible en profondeur sur les vues centrales.

L'entropie en fin de réaction présente différents niveaux suivant que les particules ont brûlé en passant par deux ondes successives (dont l'onde transverse) ou non. Un enfoncement de l'iso-fraction massique $Y_B=0.99$ coïncidant avec un faible niveau d'entropie en fin de réaction est remarquable.

Mécanisme responsable du *changement de rayon* des lignes de courant

La figure 3.14(a) sélectionne quelques lignes de courant mettant en évidence le changement de rayon.

L'analyse de la vitesse radiale u_r dans la zone de réaction à partir des illustrations de la figure 3.13, suggère une séparation de l'écoulement en deux parties : une partie de l'écoulement est entraînée par des forces centrifuges ($u_r > 0$), l'autre par des forces centripètes ($u_r < 0$). Un inversement géographique de ces zones est visible sur l'iso-fraction massique correspondant à la fin de la réaction chimique.

En réécrivant l'équation d'Euler du mouvement selon la direction radiale,

$$\frac{Du_r}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho \frac{u_\theta^2}{r} \quad (3.4)$$

deux mécanismes permettent d'expliquer le changement de rayon des lignes de courant : la contribution radiale du gradient de pression et la force centrifuge $\rho \frac{u_\theta^2}{r}$.

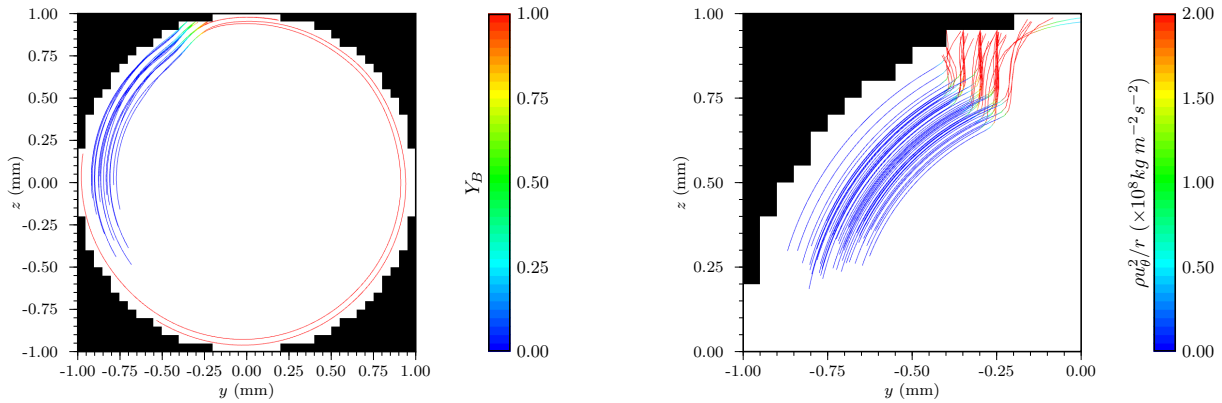
Au niveau du point de pression maximale, comme les gradients de pression sont très élevés et que les vitesses tangentielles sont relativement faibles (point d'explosion), la composante du gradient de pression l'emporte sur l'effet de la force centrifuge.

Etant donné que u_θ indique le sens de rotation des particules, les iso-fractions massiques $Y_B=0.01$ et $Y_B=0.5$ de la figure 3.13 montrent que les particules sont accélérées et mises en rotation selon le sens trigonométrique lorsqu'elles traversent l'onde de Mach alors qu'elles sont mises en vitesse dans l'autre direction lorsqu'elles passent à travers l'onde incidente. Malgré la coexistence de deux zones où les particules sont mises en rotation dans des sens différents, les particules les plus fortement accélérées sont celles traversant l'onde de Mach avec des vitesses tangentielles de l'ordre de 1800m/s (soit $0.8D_{CJ}^2$).

Les grandes vitesses tangentielles liées à une zone de forte densité rendent les effets de la force centrifuge vraiment importants. La force centrifuge est très importante dans l'onde de Mach au niveau de sa protubérance ; la figure 3.14(b) présente l'effet assez spectaculaire de la

² Cette valeur un peu faible explique également pourquoi les traces de la trajectoire du point triple sur les plaques enfumées ne sont pas exactement à 45°.

force centrifuge pour dévier les particules de leur rayon.



(a) Lignes de courant passant autour du point de densité maximale.

(b) Lignes de courant passant par la zone de proche paroi où la force centrifuge est la plus importante.

FIG. 3.14 – Déviation des lignes de courant. Instant $t=122.2\mu s$, le point triple est situé vers midi.

3.5 Mouvement contra-rotatif de l'écoulement quasi-stationnaire

Dans cette section, l'écoulement induit par la détonation hélicoïdale va être analysé du point de vue de la mécanique des fluides. La vorticité $\vec{\omega} = \text{rot}\vec{U}$ est utilisée pour caractériser localement le niveau de rotation de l'écoulement (fig. 3.15). Etant donné la géométrie, seule la composante longitudinale ω_x est intéressante et se calcule simplement par la relation :

$$\omega_x = \vec{\omega} \cdot \vec{e}_x = \frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \quad (3.5)$$

ω_x est positif lorsque, localement, l'écoulement est tourbillonnaire dans le sens trigonométrique et vice-versa.

Vorticité locale

Pour un instant donné ($t=122.2\mu s$), les figures 3.16 à 3.20 montrent les champs de vitesse, de pression, de fraction massique de gaz brûlés et de vorticité dans cinq sections différentes en s'éloignant du front de détonation. Les positions de ces coupes sont montrées en haut ; la coupe active est repérée par un cadre rouge.

Dans la section $x=0.2816m$ (fig. 3.16), une seule partie du mélange réactif est soumise au choc de tête ($y>0$) : le champ de vitesse indique la mise en rotation des particules selon le sens positif trigonométrique ce que confirme la vorticité positive. La pression s'élève dans la partie choquée et son gradient est le plus important dans la zone où les vitesses sont les plus grandes, les réactions chimiques débutent et peuvent déjà avoir atteint la moitié de l'avancement global.

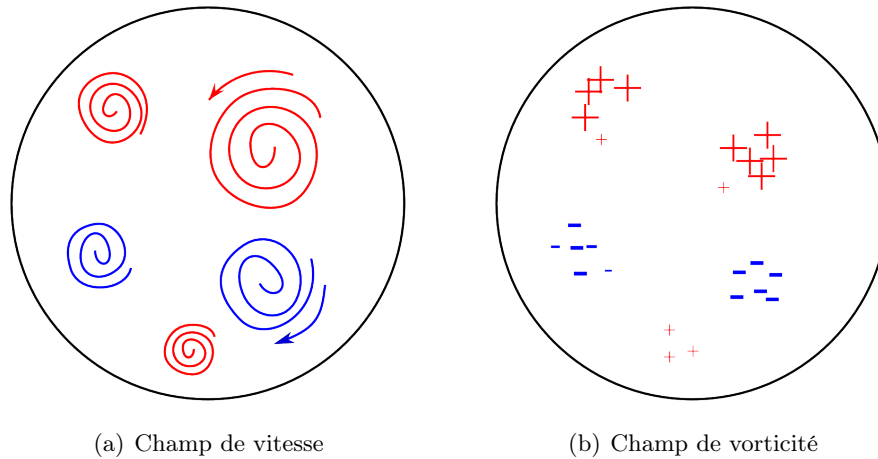


FIG. 3.15 – Utilisation de la composante longitudinale de la vorticité ω_x pour décrire le mouvement tourbillonnant de l'écoulement dans une section droite S lors de la propagation de la détonation hélicoïdale.

En déplaçant la section d'étude de 0.5mm par rapport à la première section (fig. 3.17), on se trouve juste devant le point triple, il reste encore une région où du gaz frais n'est pas encore touché par le choc de tête : les particules situées entre 11h30 et 12h sont fortement accélérées par l'onde de Mach (environ 1500m/s et rotation dans le sens trigonométrique), le gradient de pression est très fort (passage très rapide de 0.02bar à plus de 2bar), la combustion est complète en très peu de temps. La vorticité indique le début d'un inversement du sens de rotation des particules derrière la zone précédemment décrite ; la zone où la vorticité est négative est géographiquement située un peu plus au centre du tube (environ au mi-rayon et entre 12h et 3h).

La section de la figure 3.18 passe par le point de pression maximale et coupe l'onde transverse. Les vitesses sont les plus importantes au passage de l'onde même si les niveaux ne sont pas ceux du plan de la figure 3.17. D'après les champs de vorticité et les vecteurs vitesse, l'onde entraîne les particules dans le sens trigonométrique mais cela reste géographiquement très limité car, dans cette section, la zone où la vorticité est négative (bleu) prédomine.

Dans la section suivante (fig. 3.19), les réactions chimiques sont à peine terminées, les champs de vitesse pointent en moyenne vers le sens des aiguilles d'une montre tandis que la vorticité et la pression diminuent.

Dans la cinquième section (fig. 3.20), la plus éloignée du front de détonation, le milieu est complètement brûlé, la pression se situe en moyenne autour de p_{CJ} et la vorticité tend vers zéro.

Vorticité globale

Comme nous avons pu l'apercevoir sur les figures 3.16 à 3.20, plusieurs tourbillons peuvent coexister dans une même section. Plutôt que de regarder individuellement chaque tourbillon,

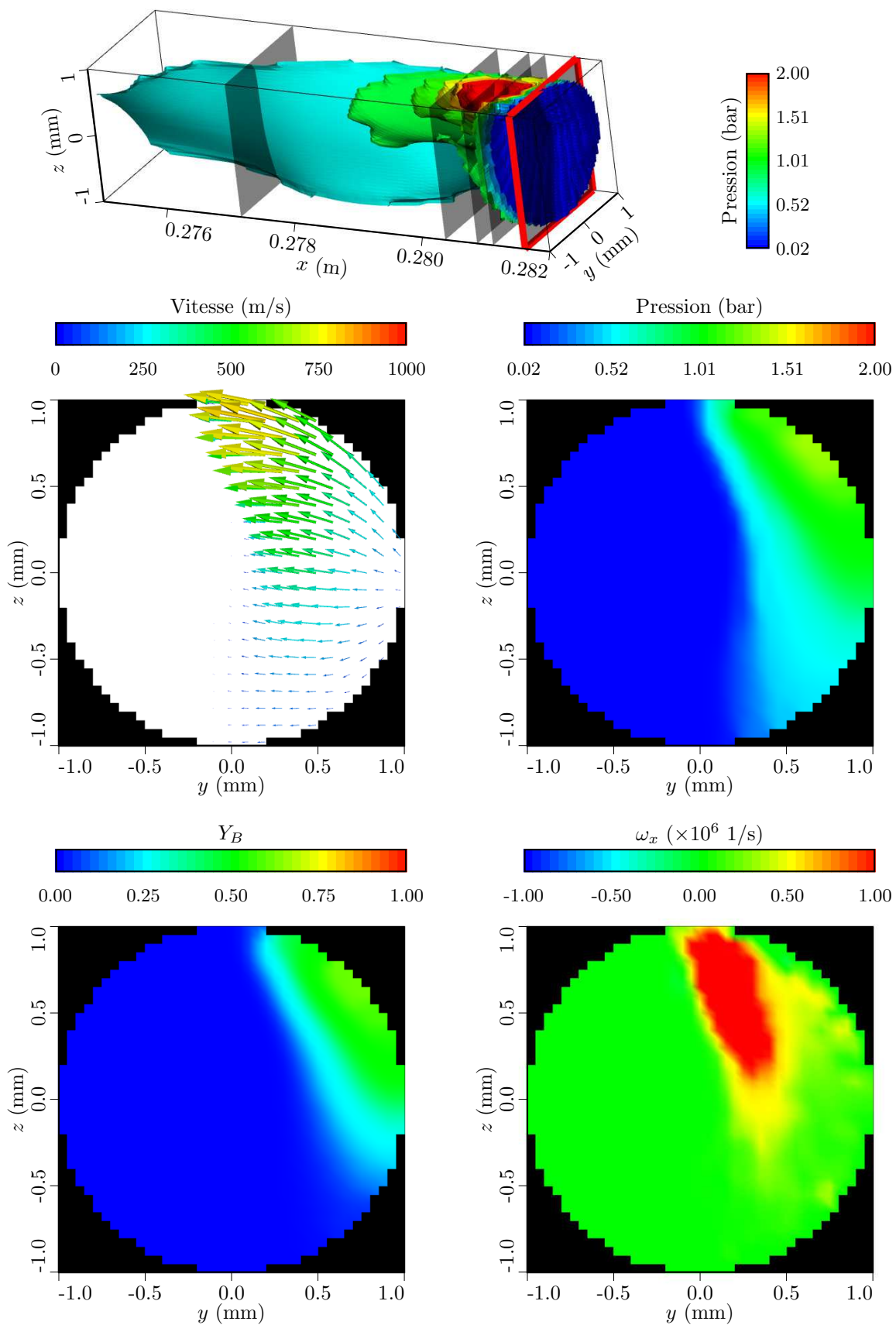


FIG. 3.16 – Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticité pour la section du tube à détonation à $x=281.6\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).

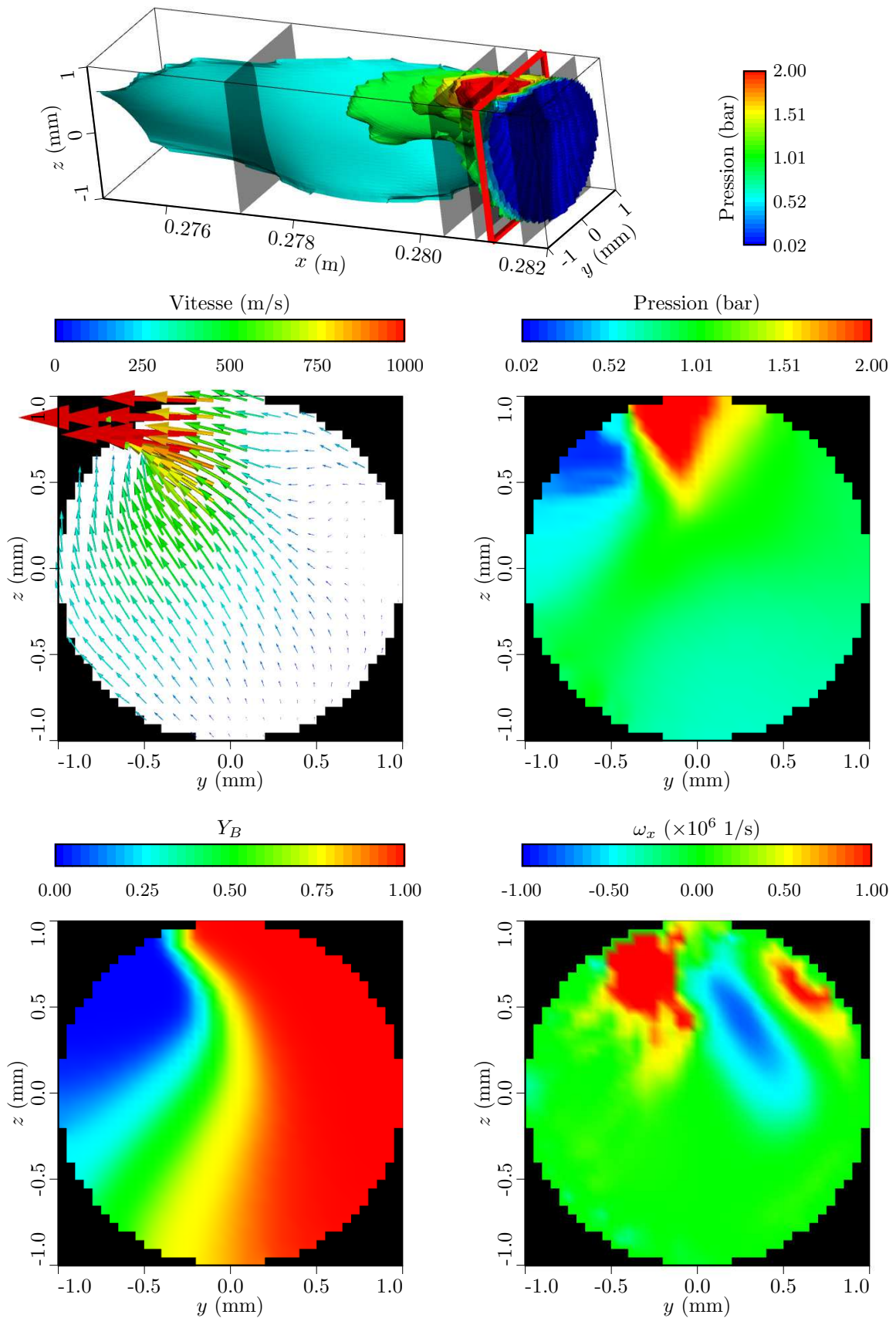


FIG. 3.17 – Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticité pour la section du tube à détonation à $x=281.1$ mm ($t=122.2\mu$ s).

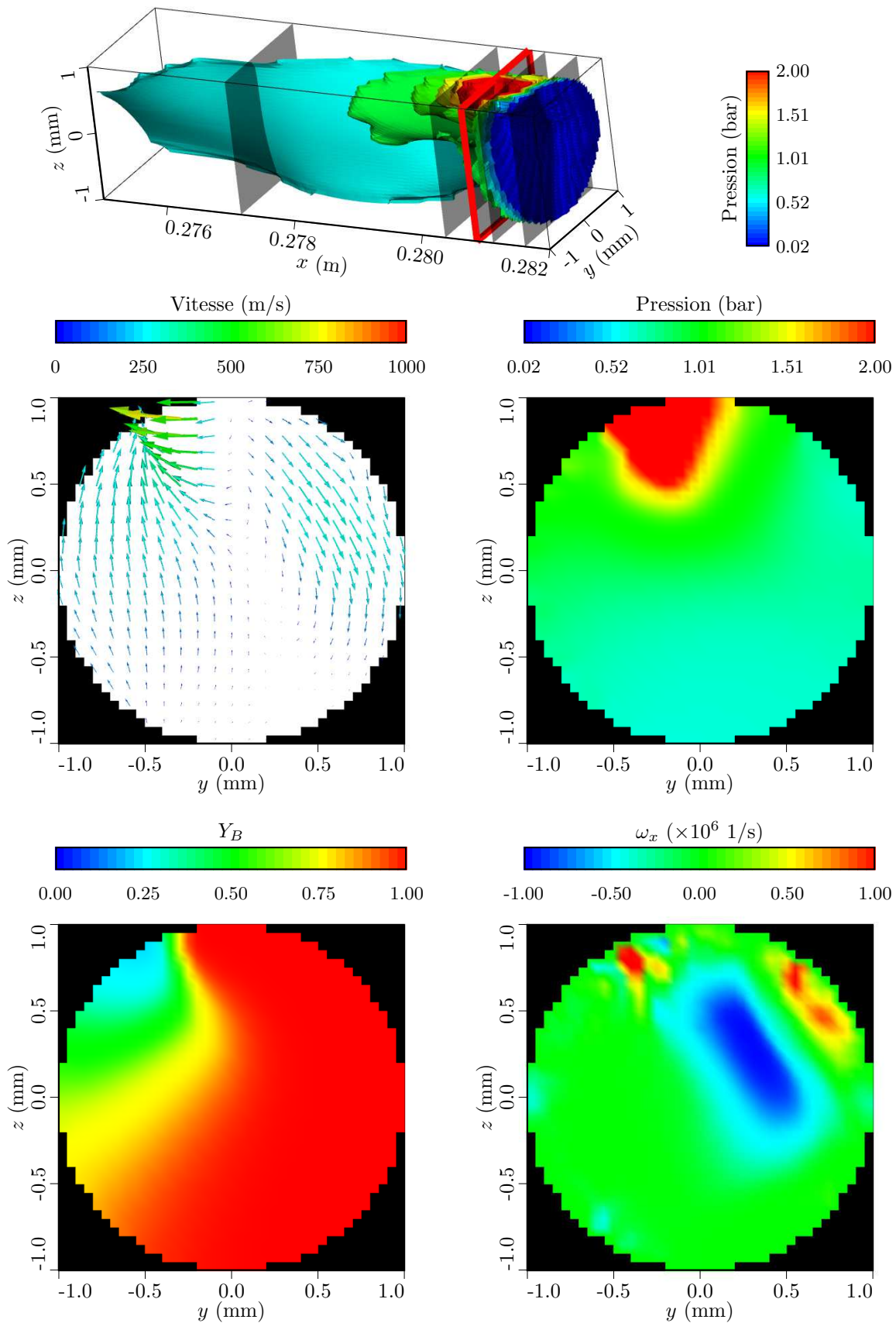


FIG. 3.18 – Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticité pour la section du tube à détonation à $x=280.9\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).

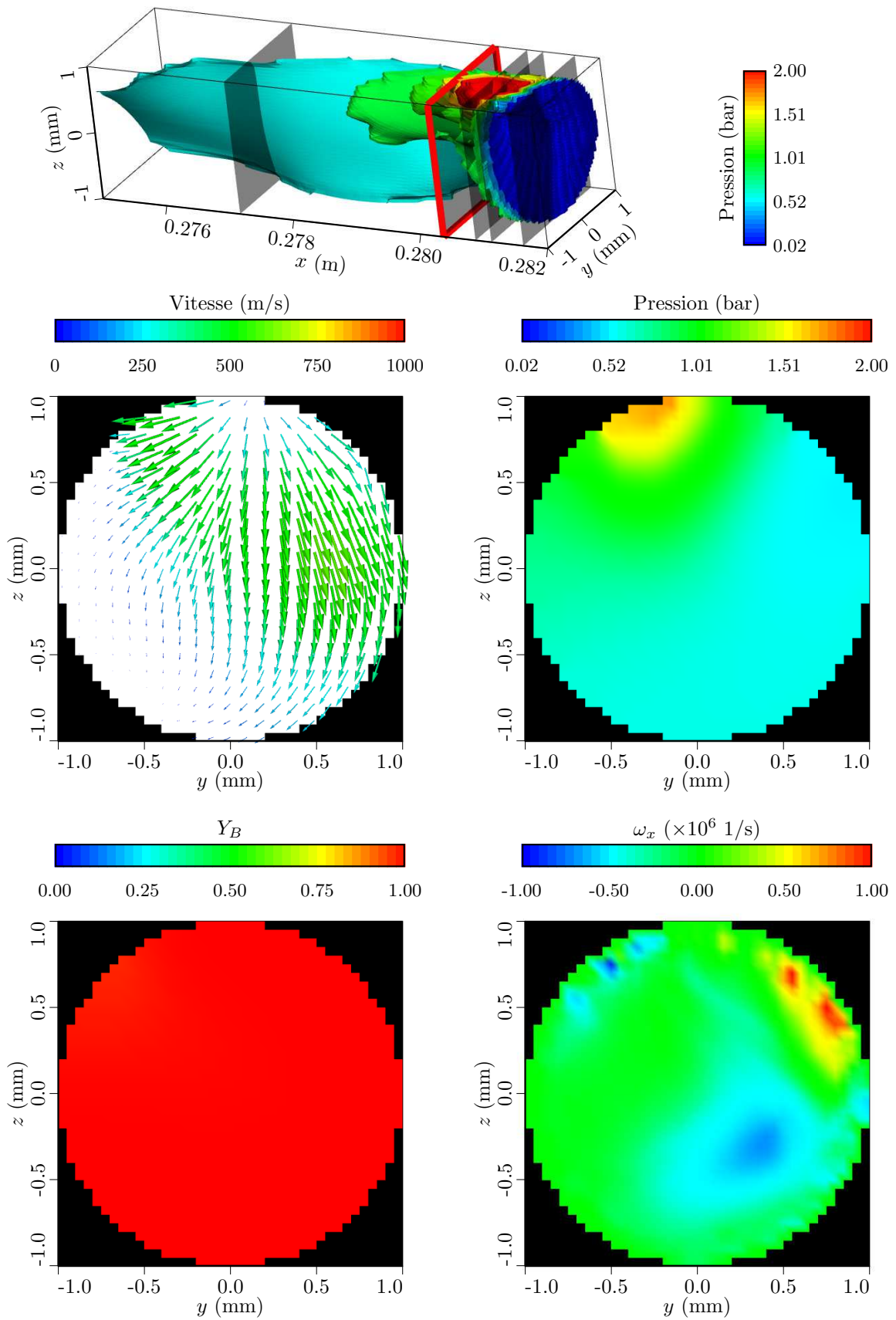


FIG. 3.19 – Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticité pour la section du tube à détonation à $x=280.4\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).

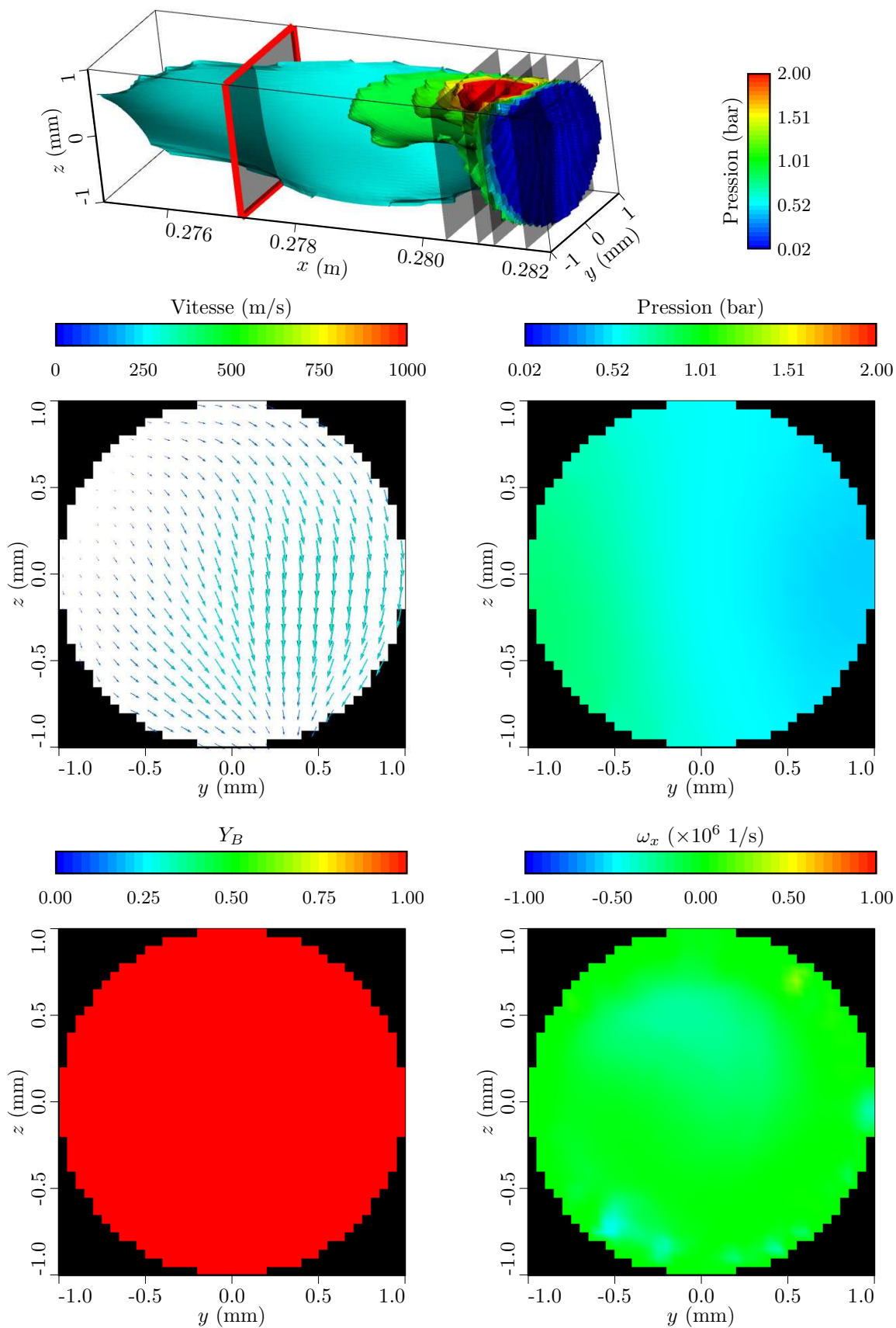


FIG. 3.20 – Champs de vitesse (composantes y et z), pression, fraction massique de gaz brûlés et vorticité pour la section du tube à détonation à $x=277.2\text{mm}$ ($t=122.2\mu\text{s}$).

regardons la somme de leur effet sur la section droite entière S , c'est à dire :

$$\oiint_S \vec{\omega} \cdot d\vec{A} \quad (3.6)$$

qui, d'après le théorème de Stokes, s'identifie à la circulation Γ

$$\Gamma = \oint_C \vec{V} \cdot d\vec{l} = \oiint_S \vec{\omega} \cdot d\vec{A} \quad (3.7)$$

où C est le support de la surface S .

Pour la géométrie considérée, la fonction définie par l'équation (3.7) s'écrit :

$$\Gamma(x, t) = \oint_C Ru_\theta d\theta = \oiint_S \omega_x dA \quad (3.8)$$

Elle est représentée sur la figure 3.21 pour l'instant $t=122.2\mu s$. Depuis les gaz frais vers les gaz brûlés, la vorticité globale, initialement nulle, devient positive puis s'inverse très brutalement (sur quelques millimètres) devenant négative. Dans la détente arrière de la détonation, la vorticité augmente de nouveau pour finalement s'annuler. Par conséquent le fluide change globalement de direction de rotation lorsque, initialement accéléré par l'onde transverse dans le sens trigonométrique, celui-ci rencontre les ondes de détente qui l'entraînent dans le sens inverse.

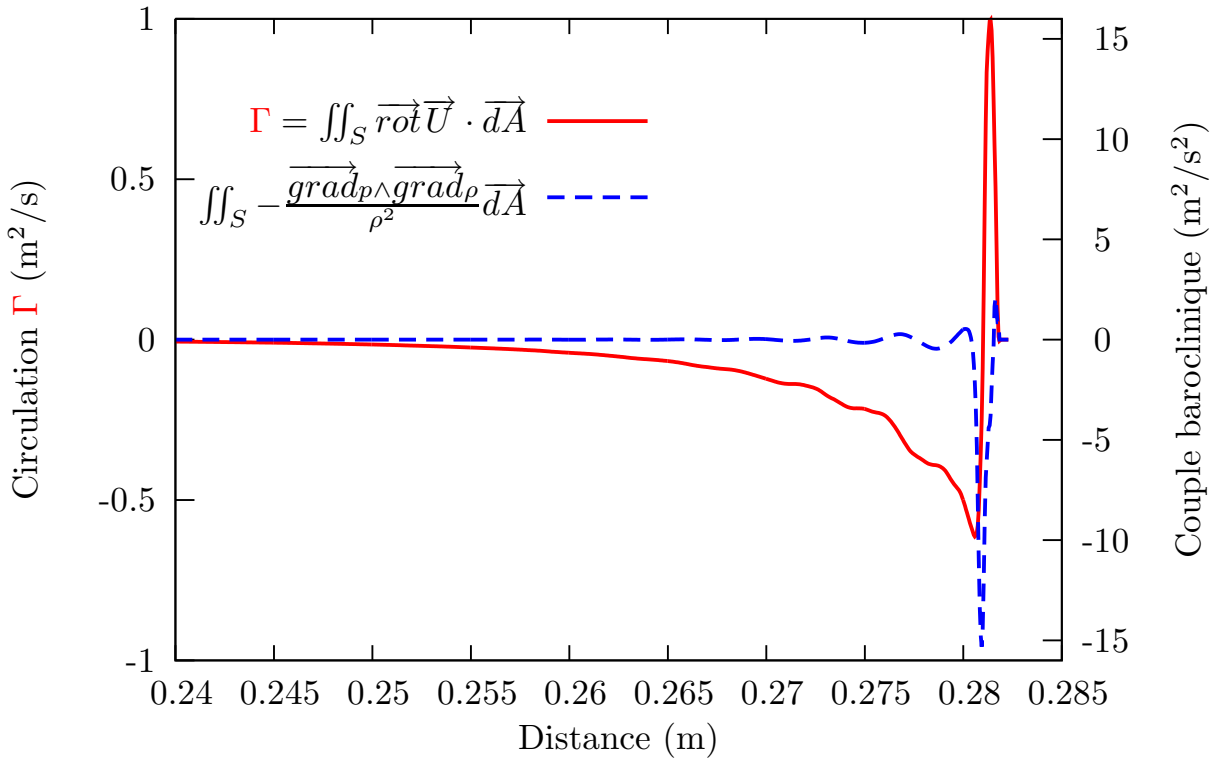


FIG. 3.21 – Circulation Γ et couple baroclinique dans les sections droites le long du tube à détonation pour l'instant $t=122.2\mu s$.

Source de la vorticité

Dans les écoulements non visqueux, la source de vorticité provient seulement du couple baroclinique \vec{B} (cf. [Paterson, 1983]) dont la composante longitudinale est définie par :

$$B_x = \vec{B} \cdot \vec{e}_x = -\frac{1}{\rho^2} \left(\overrightarrow{\text{grad}p} \wedge \overrightarrow{\text{grad}\rho} \right) \cdot \vec{e}_x \quad (3.9)$$

En effet, lorsque les iso-surfaces de pression et de densité se coupent, un couple baroclinique se crée (cf. fig. 3.22). Si les iso-surfaces de pression et de densité ne se coupent pas et que l'écoulement est isentropique, alors le couple baroclinique est nul.

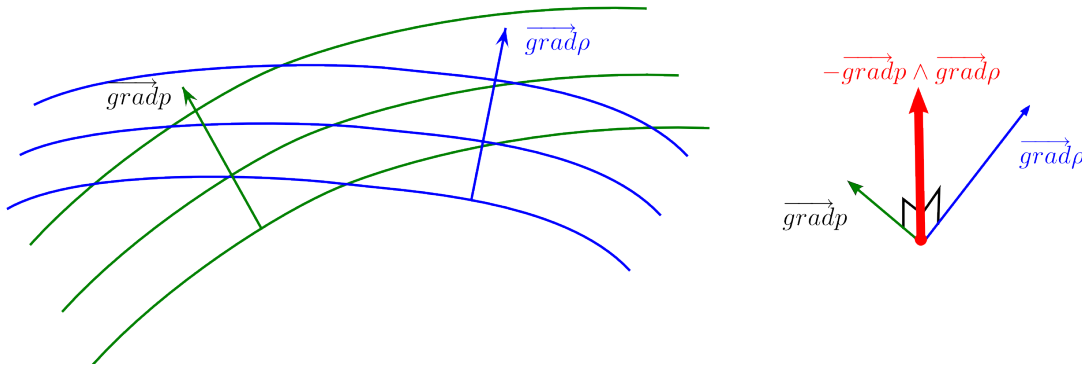


FIG. 3.22 – Représentation physique de la création du couple baroclinique lorsque les isosurfaces de pression et de densité se coupent.

Le théorème de Bjerknes (cf. [Lamb, 1975, p. 247]) stipule que le taux de variation de la circulation autour de la surface S est égal à la somme des sources à l'intérieur de cette surface. Autrement dit, mathématiquement parlant :

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = - \iint_S \frac{1}{\rho^2} \overrightarrow{\text{grad}p} \wedge \vec{\rho} d\vec{A} = - \oint_C \frac{1}{\rho} \overrightarrow{\text{grad}p} \cdot d\vec{l} \quad (3.10)$$

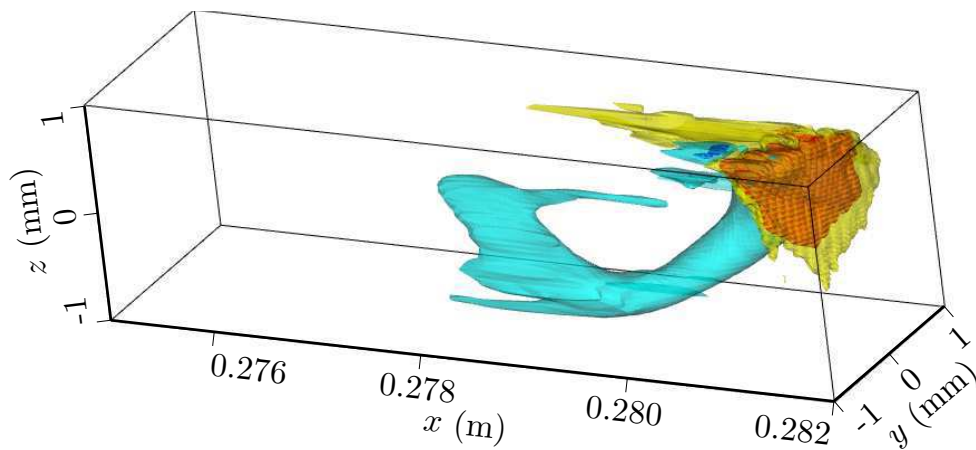
et particulièrement pour notre géométrie :

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = - \oint_C \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta = - \iint_S B_x dA \quad (3.11)$$

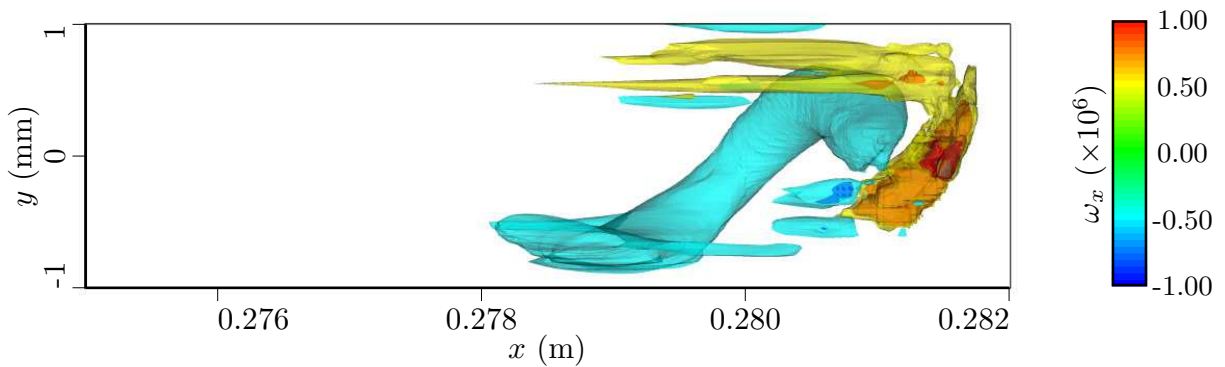
L'intégration du couple baroclinique sur les sections droites S est également représentée sur la figure 3.21 où la circulation Γ a déjà fait l'objet de commentaires. Il apparaît sur cette figure que la vorticité augmente lorsque le couple baroclinique est positif et vice-versa.

Inversion du sens de rotation de l'écoulement au passage de l'onde transverse.

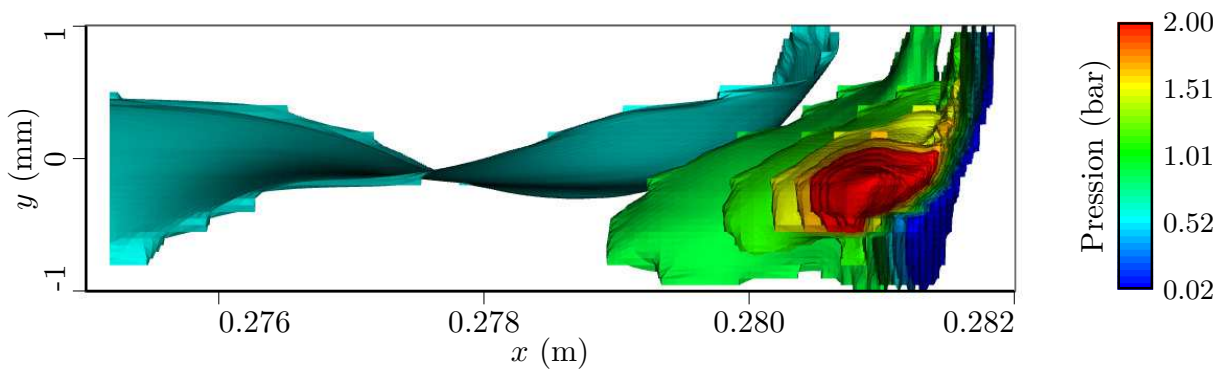
Les figures 3.23(a) et 3.23(b) montrent les isosurfaces de vorticité au niveau du front de détonation et leurs positions vis-à-vis de l'onde de Mach et de l'onde transverse : la vorticité est positive devant l'onde transverse et dans l'onde de Mach, alors qu'elle est négative derrière l'onde transverse où les isosurfaces prennent la forme d'une hélice.



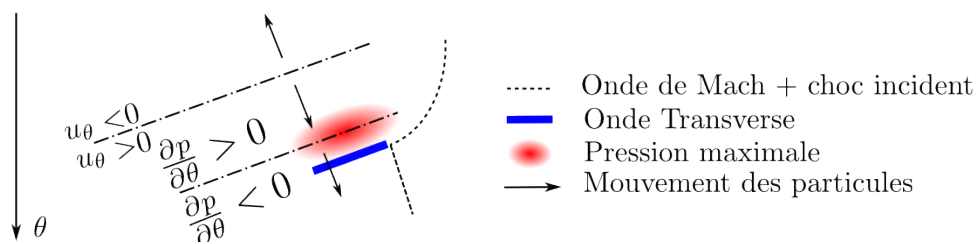
(a) Isosurfaces de vorticité vues de profil.



(b) Isosurfaces de vorticité vues de dessus.



(c) Isosurfaces de pression vues de dessus pour repérer la position de l'onde transverse sur la figure 3.23(b).



(d) Schéma du mécanisme expliquant l'inversion du sens de rotation de l'écoulement.

FIG. 3.23 – Isosurfaces de vorticité ($\omega_x \in \{-1, -0.5, 0.5, 1\} \times 10^6 s^{-1}$) et isosurfaces de pression ($p \in [0.03 : 2.5] \text{bar}$) pour l'instant $t=122.2\mu s$. Mécanisme expliquant l'inversion du sens de rotation de l'écoulement.

Pour tenter d'expliquer l'inversion du sens de rotation au niveau de l'onde transverse, prenons parmi les équations d'Euler l'équation du moment en coordonnées cylindriques selon la direction orthoradiale :

$$\rho \frac{D(r u_\theta)}{Dt} = - \frac{\partial p}{\partial \theta} \quad (3.12)$$

Pour une particule proche de la surface du tube à détonation ($r \approx R$) lorsque $\frac{\partial p}{\partial \theta} < 0$, u_θ augmente et vice-versa. Ce mécanisme est schématisé sur la figure 3.23(d). Un temps d'inertie est observé entre le moment où la pression est maximum et le moment où le changement de direction se produit.

3.6 Lignes de courant 3D

3.6.1 Description générale

La figure 3.24 montre les lignes de courant qui ont été distribuées uniformément dans la section droite située à $x=0.282\text{m}$.

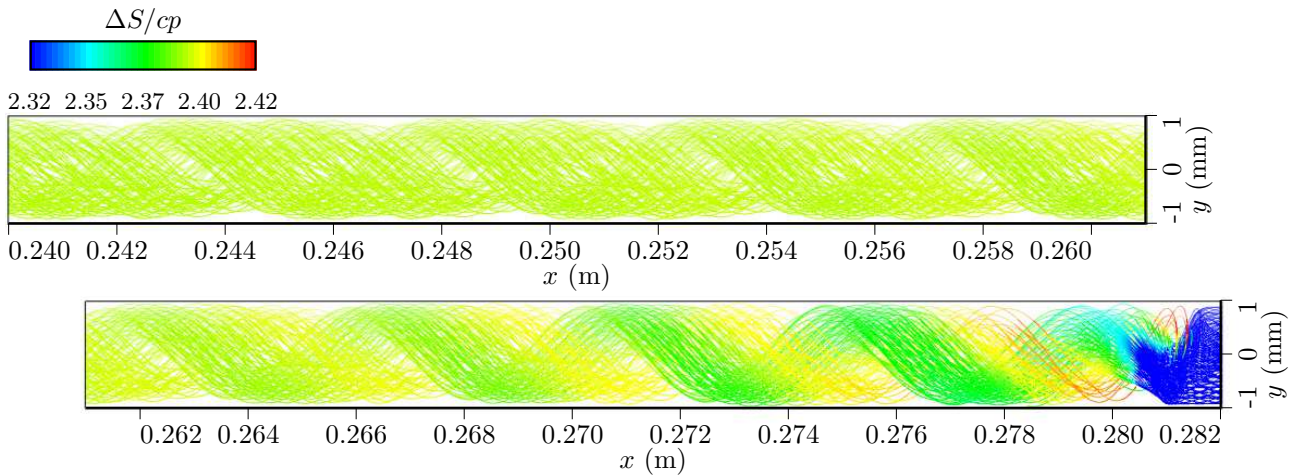


FIG. 3.24 – Lignes de courant 3D colorées en fonction de la variation d'entropie.

On vérifie que l'entropie est transportée par les lignes de courant ; ceci est obtenu grâce au calcul correct du champs de vitesses relatif à l'onde quasi-stationnaire. Comme avec les *pseudo lignes de courant* précédentes, une zone *vide de ligne de courant* est visible et correspond à l'expansion derrière l'onde de Mach et où l'entropie est la plus grande.

Ces mêmes lignes de courant sont colorées en fonction du rayon d'entrée (i.e. rayon du point d'ensemencement) en haut de la figure 3.25 et en fonction de l'angle d'entrée en bas de la figure 3.25. Les lignes de courant sont réorganisées d'une façon complexe à la traversée du front de détonation.

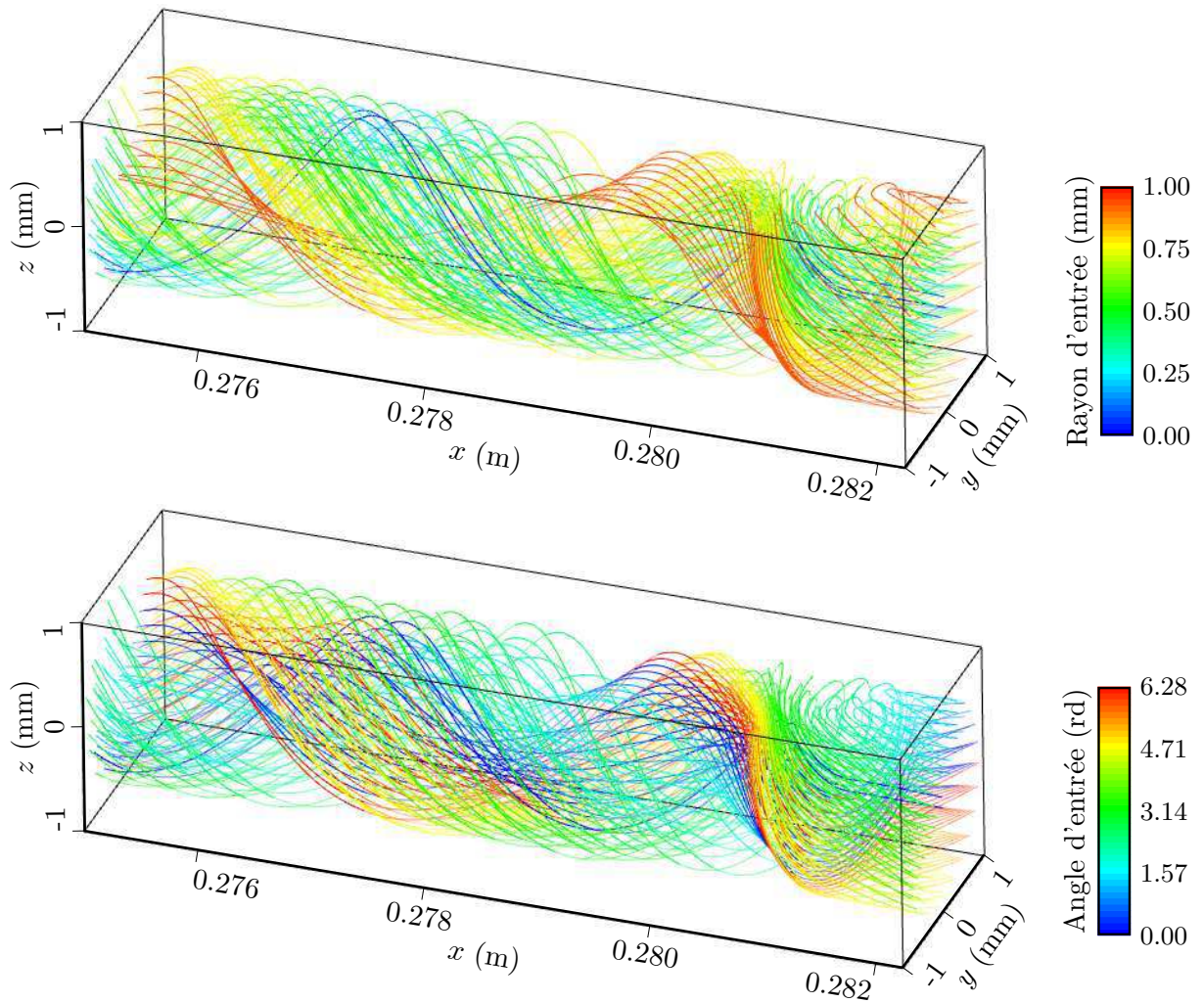


FIG. 3.25 – Lignes de courant 3D colorées en fonction du rayon d'entrée (en haut) et de l'angle d'entrée (en bas).

3.6.2 Lignes de courant traversant la zone de très forte pression

Il apparaît intéressant de regarder l'origine des particules traversant la zone de très forte pression (i.e. $p > 4\text{bar}$) et leur évolution lors de la traversée de cette zone. En regardant la figure 3.26, les lignes de courant sont classifiables selon deux catégories suivant qu'elles traversent l'onde de Mach ou le choc incident : la famille de lignes de courant représentées en rouge (respectivement en noir) est celle où les lignes de courant traversent l'onde de Mach (respectivement le choc incident). Ceci met en évidence la ligne de glissement entre les régions ② et ⑤ de la figure 1.15(b) (p. 25).

D'autre part, les profils typiques de la pression le long des lignes de courant *noires* montrent les deux sauts de pression correspondant à la traversée successive du choc incident et de l'onde transverse (fig. 3.27(a)) alors qu'une seule discontinuité de pression n'est visible le long des lignes de courant *rouges* (fig. 3.27(b)). La distance entre les deux sauts de pression est d'autant plus

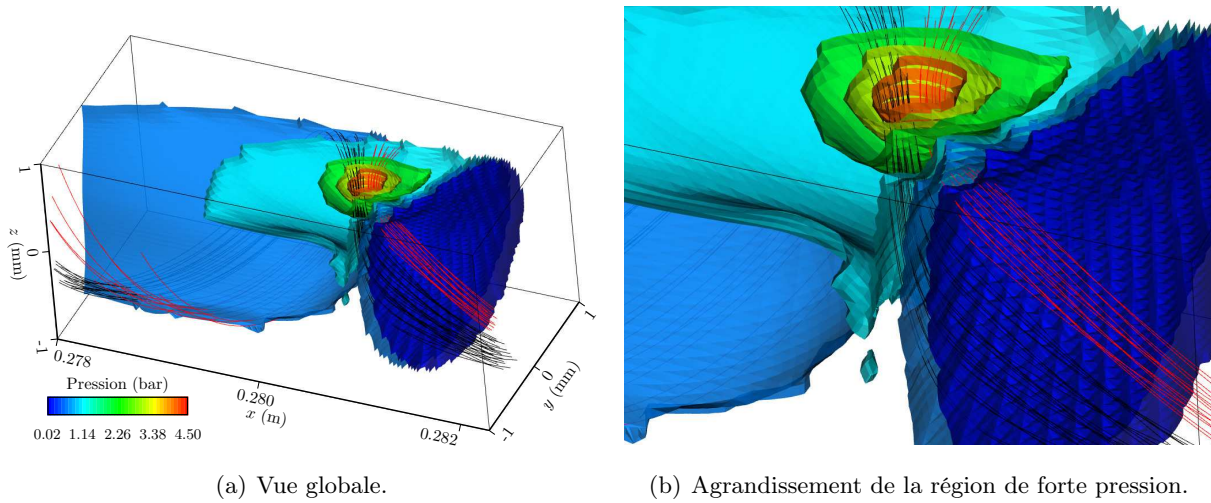


FIG. 3.26 – Isosurfaces de pression ($p \in \{0.1, 0.6, 1, 2, 3, 4\}$ bar) avec les lignes de courant traversant la zone de pression où $p > 4$ bar.

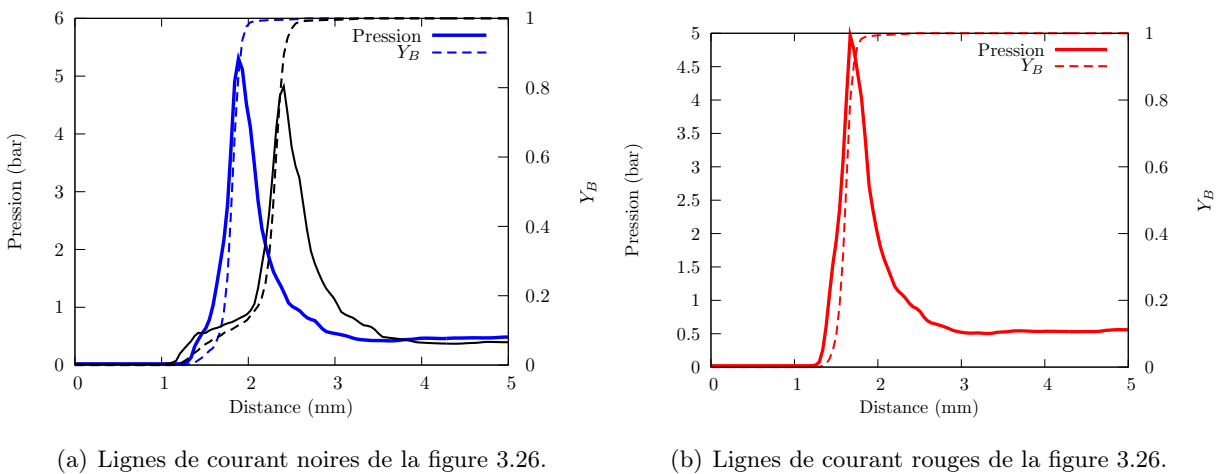


FIG. 3.27 – Profils typiques de la pression et de la fraction massique des gaz brûlés le long des lignes de courant passant par la zone de forte pression ($p > 4$ bar).

courte que la ligne de courant est proche du point triple de l'onde de Mach. L'avancement des réactions chimiques repéré grâce à la fraction massique des gaz brûlés rend compte de la brutalité de la libération d'énergie dans cette zone ; pour les particules impactant normalement l'onde de Mach, les réactions chimiques se réalisent entièrement sur moins de 0.5mm.

3.6.3 Diagrammes pv le long des lignes de courant

La figure 3.28 présente les diagrammes pv des états thermodynamiques relevés sur les lignes de courant initialementensemencées sur $r=0.2R$ et $r=0.8R$.

Tout d'abord, la pression enregistrée derrière les chocs est supérieure à p_{ZND} étant donné que la vitesse relative au choc est supérieure à D_{CJ} . En effet, dans le repère lié à l'onde transverse,

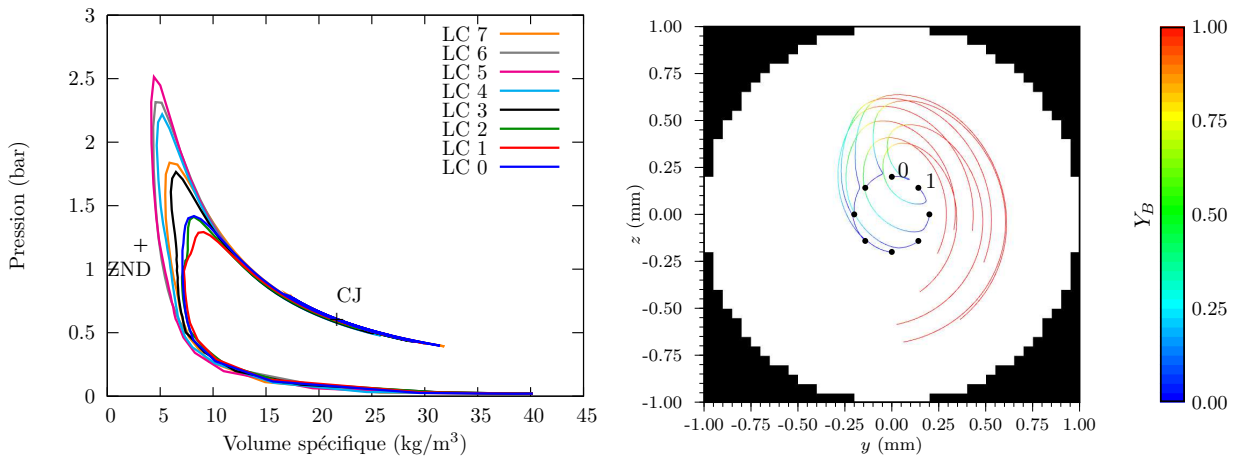
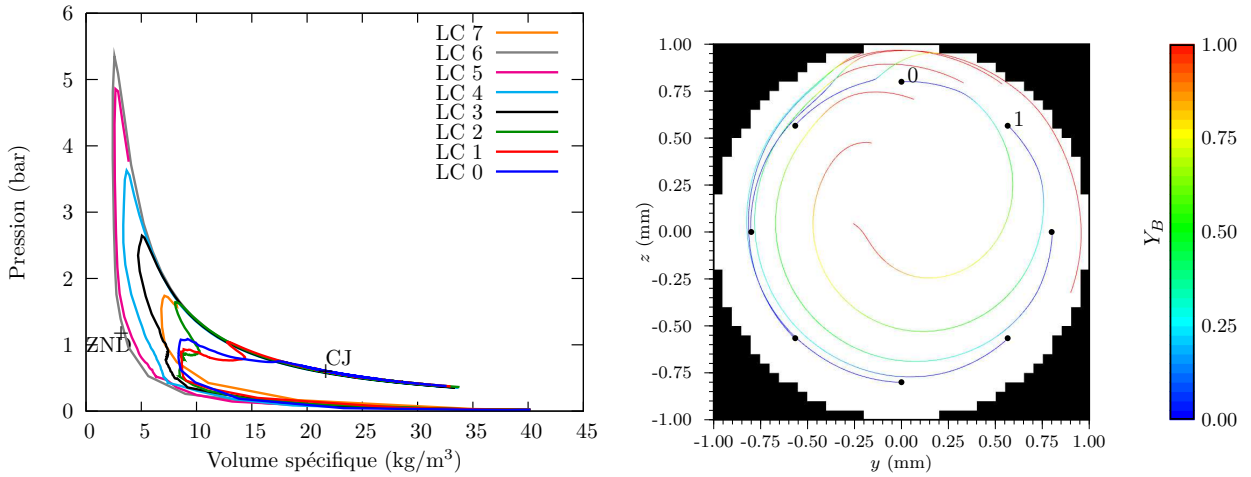
(a) Distribution des particules pour $r=0.2R$ (b) Distribution des particules pour $r=0.8R$

FIG. 3.28 – Diagramme pv des états thermodynamiques relevés sur les lignes de courant ensencées à $r=0.2R$ et $r=0.8R$. Instant $t=122.2\mu s$; le point triple se situe vers midi.

les particules attaquent l'onde de détonation à la vitesse (relative) égale à $W = \sqrt{D_{CJ}^2 + (\omega r)^2}$. Sur un même rayon r , les lignes de courant attaquent le choc avec un angle qui varie conduisant à des fluctuations de la force du choc et expliquant la dispersion des profils. D'autre part la force du choc est d'autant plus importante que r est grand d'après la dépendance en r de W , c'est pourquoi les niveaux de pression sont plus importants sur le diagramme pv de la figure 3.28(b) que sur celui de la figure 3.28(a).

Sur le diagramme pv de la figure 3.28(b), les chemins associés aux lignes de courant LC1 et LC2 ont des allures assez inhabituelles puisqu'une seconde compression est visible; au lieu d'avoir une forme classique en fer à cheval, le chemin dessine une forme en S. Ce genre de profil apparaît lorsque $r > 0.3R$; la ligne de courant coupe par derrière l'onde de pression générée par le point triple.

CHAPITRE 4

Etude numérique des détonations
dans les mélanges où la libération
d'énergie s'effectue en deux
étapes

Chapitre 4

Etude numérique des détonations dans les mélanges où la libération d'énergie s'effectue en deux étapes

Ce chapitre présente les résultats des simulations numériques de la propagation des détonations pour lesquelles la loi de libération d'énergie possède deux étapes globales avec des temps caractéristiques très différents responsables de l'existence d'une double structure cellulaire (hors effets du confinement). On dénomme ces mélanges réactifs *double-étape/double-structure* en les différenciant des mélanges réactifs *simple-étape/simple-structure* étudiés au chapitre précédent.

4.1 Paramètres des simulations de ce chapitre

Dans ce quatrième chapitre, sauf mention contraire, les simulations numériques utilisent les paramètres décrits ci-dessous :

- Propriétés des gaz : (gaz idéal)
 - Pression et température initiales : $p_0=0.05\text{bar}$, $T_0=298\text{K}$.
 - Thermodynamique : $\gamma_A=\gamma_B=\gamma_C=1.25$, $W_{m,A}=W_{m,B}=W_{m,C}=30.3\text{g/mol}$ et $Q_1=Q_2=4.402\text{MJ/kg}$.
 - Lois de cinétique chimique : $Z_1=4.10^{11}\text{s}^{-1}$, $Z_2=6.10^8\text{s}^{-1}$, $E_{a_1}=E_{a_2}=250\text{kJ/mol}$, $n_1=n_2=1.0$.
- Paramètres liés à la résolution du maillage :
 - Tailles du domaine : $L_x, L_y=22.5\text{mm}$, $L_z=22.5\text{mm}$.
 - Nombres de mailles : $N_x=1333$, $N_y=400$, $N_z=400$.
 - Nombre de mailles de la zone la mieux résolue : $N_{fine}=1000$ (i.e. $\Delta x=\Delta y=\Delta z=5.625 \cdot 10^{-5}\text{m}$).
- Paramètres de l'intégrateur : $\text{CFL}=0.75$, $\nu_{num}=0.998$.
- Amorçage : Energie et position de l'explosion ponctuelle : $E_{PE}=100\text{kJ/m}^2$ à $x_{PE}=0$.

Ces paramètres d'entrées reprennent les données thermodynamiques et cinétiques des simulations numériques détaillées dans la thèse de Guilly [2007]. Les propriétés CJ et ZND associées à ces conditions sont les suivantes :

$$D_{CJ}=2270.6\text{m/s}, p_{CJ}=1.423\text{bar}, T_{CJ}=4787\text{K}, \rho_{CJ}=0.1084\text{kg/m}^3, c_{CJ}=1282\text{m/s}.$$

$$p_{ZND}=2.797\text{bar}, T_{ZND}=2146\text{K}, \rho_{ZND}=0.4750\text{kg/m}^3.$$

Un calcul 2D sert à initialiser la simulation 3D par la technique de clonage déjà évoquée au chapitre 2. L'écoulement 2D est calculé jusqu'à $x=2.97\text{m}$. A cet instant, l'allure des profils moyens de pression et vitesse matérielle dans les sections droites est semblable à celle des profils auto-semblables de Taylor-Zeldovich caractéristiques des détonations stationnaires autonomes (fig. 4.1). De plus, la célérité de détonation mesurée $D=2272\text{m/s}$ est très proche de la valeur CJ (0.1% d'écart).

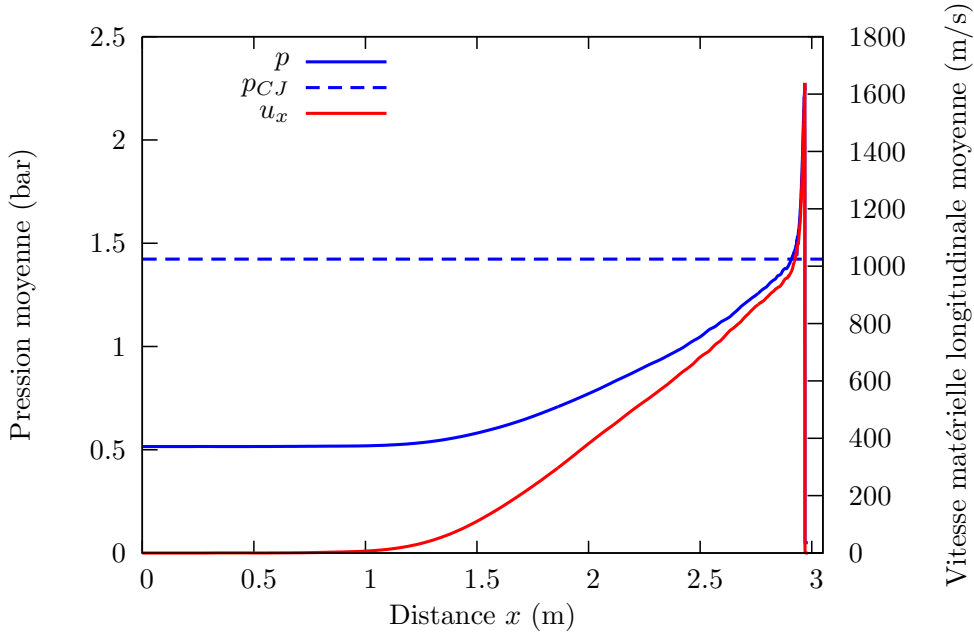


FIG. 4.1 – Profils moyens de pression et vitesse longitudinale dans les sections droites à la fin du calcul 2D servant à initialiser la simulation 3D.

4.2 Traces à la surface du tube

La figure 4.2 présente les traces numériques laissées sur la paroi du tube lors du passage de la détonation. Un régime transitoire apparaît dès le début entre $x=2.9\text{m}$ et $x=3.25\text{m}$ où l'existence de deux réseaux de cellules de détonation est perceptible. Pour la structure la plus large, la cellule de détonation remplit entièrement le tube de diamètre d . La structure principale incluse dans la structure secondaire n'a pas de taille fixe car elle subit les variations de célérité locale de détonation. Une vingtaine de petites cellules peut être dénombrée au milieu de la cellule de la

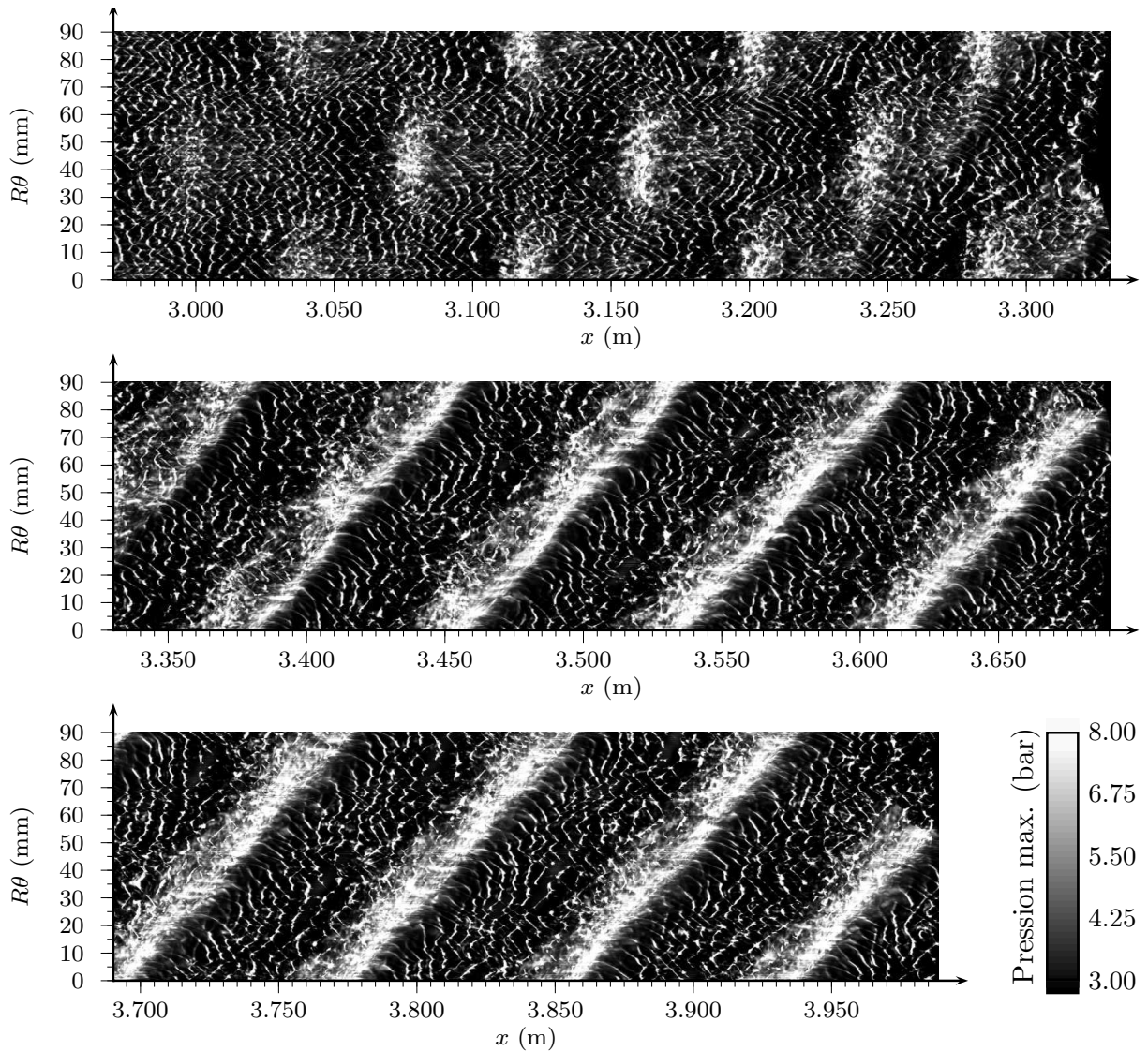


FIG. 4.2 – Traces issues de la simulation numérique révélant la double structure cellulaire. L'onde transverse de la structure la plus large se propage de façon hélicoïdale pour $x > 3.3\text{m}$.

structure la plus large (tâche assez difficile vu l'irrégularité de la structure).

Le régime transitoire cède ensuite la place à un régime quasi-stationnaire dont une vue agrandie et une schématisation sont données sur la figure 4.3. Une seule onde transverse subsiste pour la structure la plus large faisant apparaître les traces caractéristiques d'une détonation hélicoïdale : le pas de l'hélice est d'environ 81mm (soit $P=3.6d$) et l'angle par rapport à l'axe du tube est de 51° . Les bandes laissées par l'onde transverse de la seconde étape ne sont pas parfaitement rectilignes et indiquent une variation locale de la célérité de détonation. La célérité oscille autour d'une valeur moyenne stable : les caractéristiques approchées du régime stationnaire sont la célérité $D=2272\text{m/s}$ et le taux de rotation $\omega=163\text{rd.s}^{-1}$. La vitesse tangentielle de propagation de l'onde transverse de la structure secondaire est donc de 1840m/s soit $0.81D_{CJ}$.

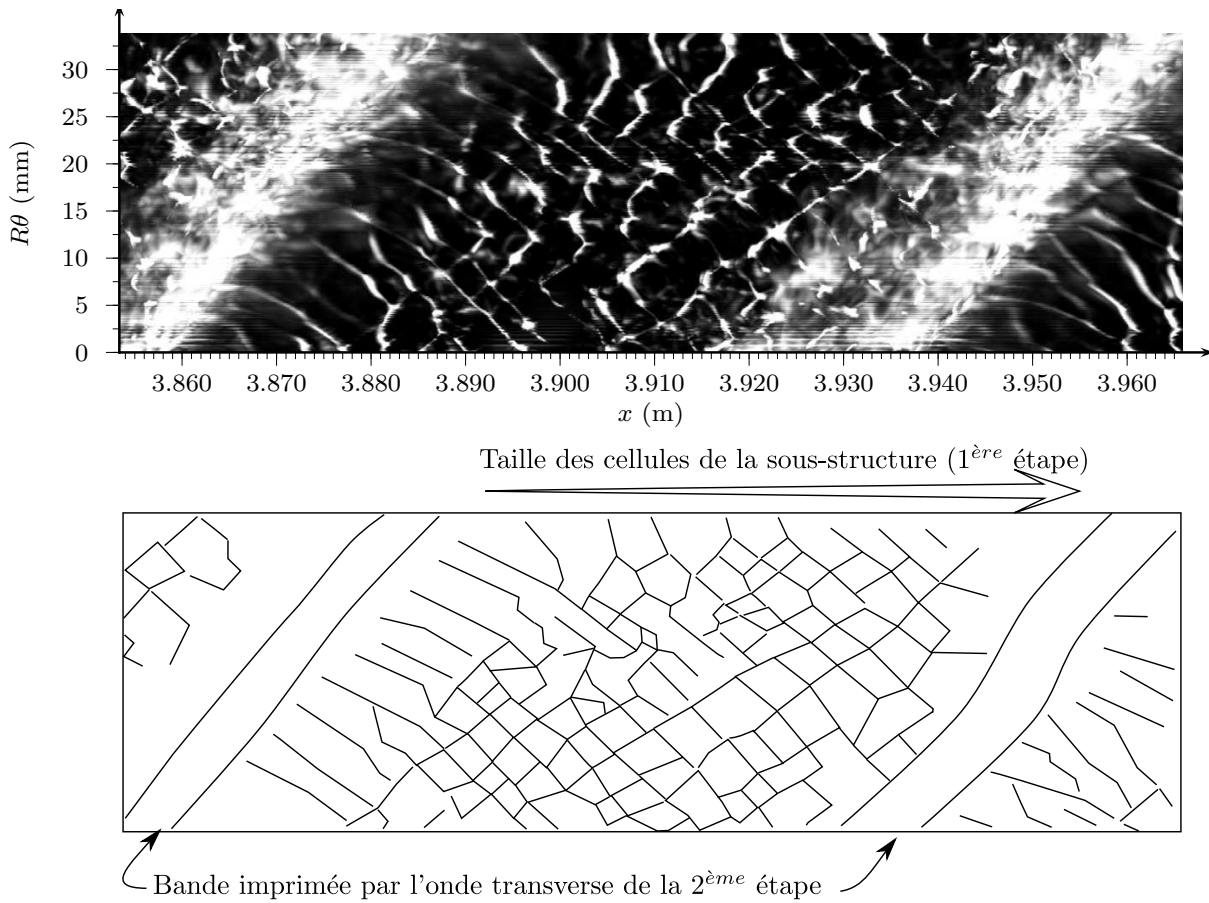


FIG. 4.3 – Vue agrandie d'une partie de la figure 4.2.

L'évolution des traces le long d'un pas d'hélice est représentée en détail sur la figure 4.3. Une légère augmentation de la taille λ_1 des cellules de la structure principale est visible entre les bandes tracées par l'onde transverse de la structure secondaire. Les (petites) cellules de taille λ_1 sont plus grandes à la fin de la cellule de détonation de taille λ_2 qu'au début de celle-ci ; des cellules à peine formées se manifestent sur les traces par des lignes parallèles inclinées. Une résolution numérique insuffisante dans cette région est probablement la cause de la déformation des cellules de détonation comme l'avait déjà fait remarquer Guilly dans ses simulations 2D [Guilly *et al.*, 2006; Guilly, 2007].

4.3 Champs instantanés de pression

La figure 4.4 représente les isosurfaces de pression ($p \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ bar) vues de côté en haut et vues de face en bas pour cinq instants successifs (de $t_{(a)}=1.740$ ms à $t_{(e)}=1.755$ ms régulièrement espacés). L'onde transverse associée à la structure secondaire est repérée par une large zone de forte pression de couleur rouge. Elle se déplace à proximité de la paroi, dans le sens inverse des aiguilles d'une montre sur une demi période de rotation.

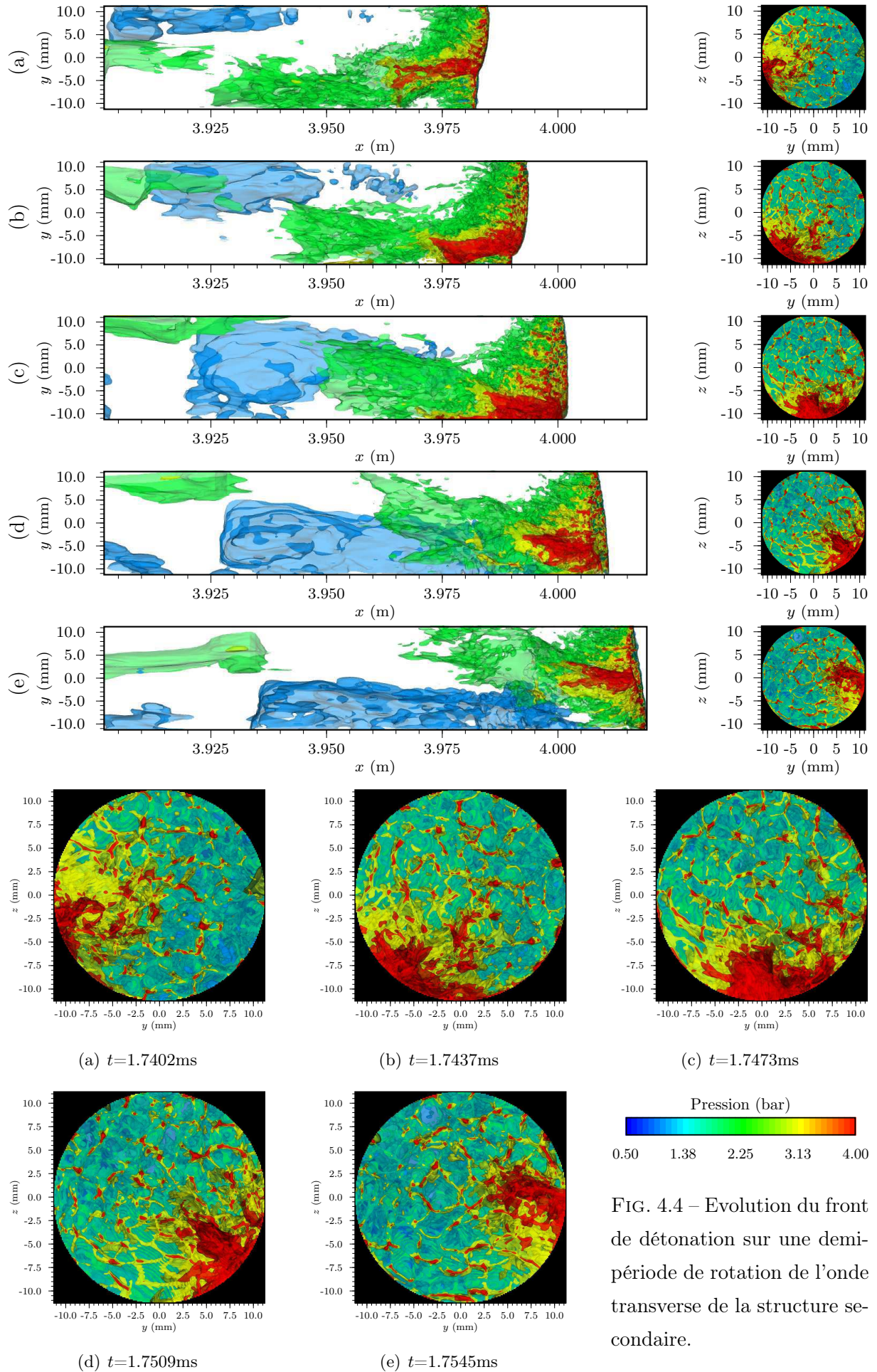


FIG. 4.4 – Evolution du front de détonation sur une demi-période de rotation de l'onde transverse de la structure secondaire.

Les ondes triple formant les cellules de la première structure sont visibles sur les vues frontales. Le niveau de pression enregistré dans ces ondes est inférieur mais du même ordre que celui de l'onde transverse de la deuxième structure. Les deux structures se distinguent avant tout par leur différence d'échelle : la surface d'application de la forte pression est beaucoup plus locale (petite) dans les ondes transverses de la structure cellulaire principale.

En faisant abstraction de la structure fine, l'allure du front de détonation (hélicoïdal) est très semblable à celui d'une détonation *simple-étape/simple-structure* où les ondes de Mach, incidente et transverse concourent au point triple. Dans la suite, sauf indication contraire, la dénomination de ces ondes portera sur la grande structure.

4.4 Profils instantanés à la surface du tube

La figure 4.5 montre les profils des fractions massiques de gaz frais/brûlés, de densité, de pression et d'entropie en proche paroi. Comme au chapitre 3, la représentation de droite double, avec une mise en relief, la développée de la surface du tube située à gauche afin de montrer les détails masqués par la représentation en échelles de couleurs.

La première réaction $A \rightarrow B$ étant très raide, les gaz frais A disparaissent très rapidement au passage de l'onde de Mach (début de cellule de détonation) et rapidement lors de la traversée de l'onde incidente (fin de cellule de détonation). Des petites poches de gaz frais A sont d'ailleurs perceptibles derrière l'onde incidente car le taux de force de l'onde est plus faible.

En regardant la fraction massique de gaz brûlés (Y_c), les ondes de Mach, incidente et transverse sont facilement identifiables. Derrière ces ondes, l'écoulement est fortement perturbé par l'interaction des ondes de choc créées par la première libération d'énergie.

La vue en relief donne des informations supplémentaires sur les longueurs (distance de parcours des particules) et l'épaisseur (distance projetée sur l'axe du tube) de la zone de réaction : à la surface du tube, les particules franchissant l'onde de Mach ou l'onde transverse à proximité du point triple sont le plus rapidement brûlées tandis que les particules franchissant l'onde transverse et éloignées du point triple sont les plus longues à brûler (zone de glissement déjà évoquée par Hu *et al.* [2004]) ; au total, la zone de réaction s'étend sur une épaisseur de 60mm (soit 2.6d) à la surface du tube.

Par rapport aux simulations du chapitre précédent (*simple-étape/simple-structure*), la résolution du maillage pour traiter le front de détonation hélicoïdal est nettement améliorée (passage de 40 cellules dans le diamètre du tube à 400) ce qui offre beaucoup plus de détails. En particulier, en analysant attentivement les champs de pression et de densité au niveau du point triple, on s'aperçoit que l'onde transverse n'est pas directement attachée au point triple : l'onde notée AB et la zone de glissement entre les régions ③ et ⑤ de la figure 1.15 (p. 25) sont donc bien

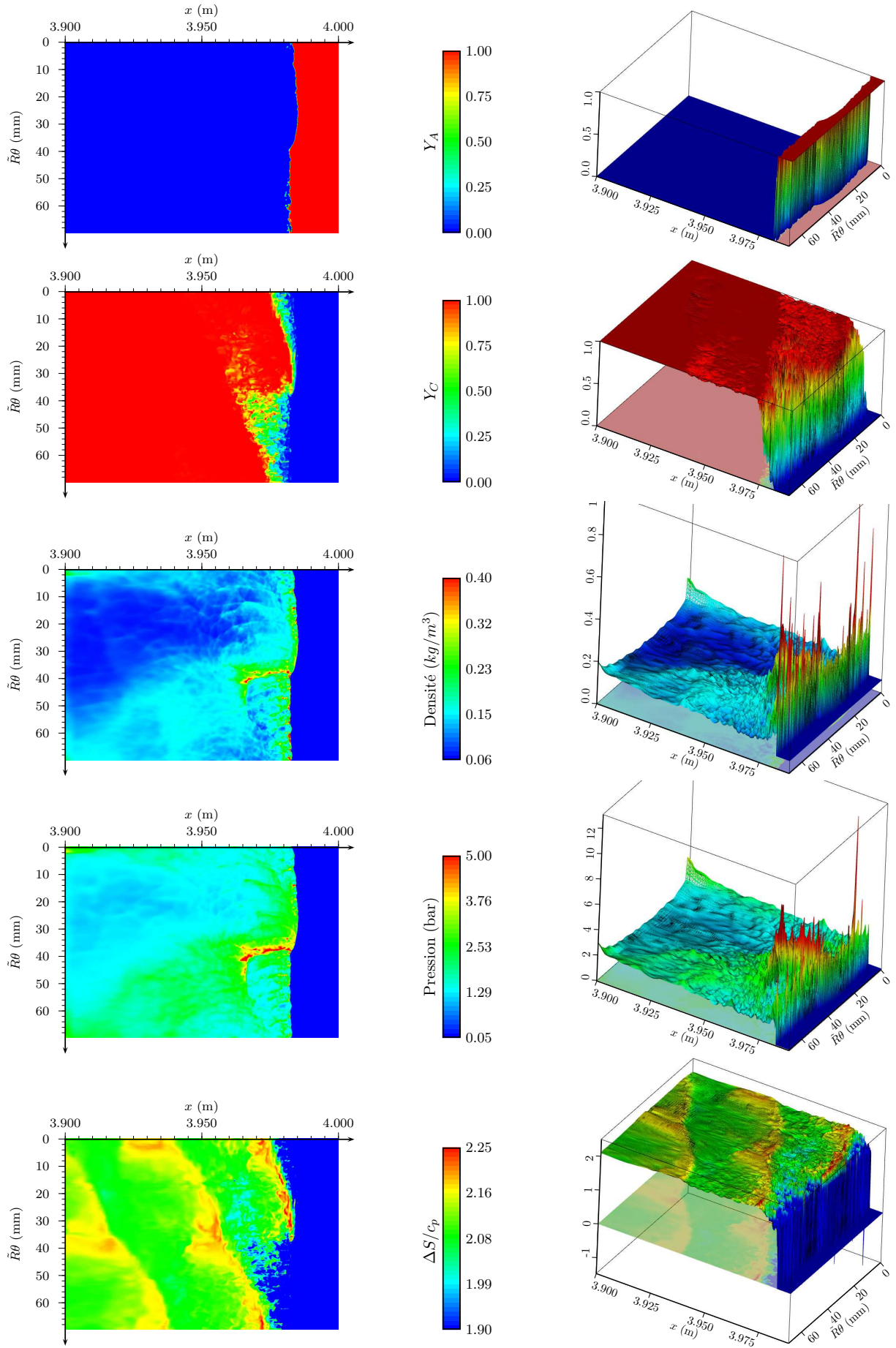


FIG. 4.5 – Profils de fraction massique de gaz frais Y_A , de fraction massique de gaz brûlés Y_C , de densité, de pression et de saut d'entropie en proche paroi ($\tilde{R} = 0.98R$) lorsque $t=1.293\text{ms}$.

rendues.

Il est difficile de comparer les niveaux de pression ou de densité des fronts des ondes de Mach et incidente pour les mélanges réactifs *simple-étape* et *double-étape*. Les *crêtes* des mélanges *double-étapes* sont fortement perturbées par la première étape de libération d'énergie dont les points triples créent des inhomogénéités de pression et de densité manifestées par des pics.

La pression et la densité sont assez faibles sur la protubérance de l'onde de Mach, le maillage trop grossier dans cette région fournit probablement des grandeurs moyennées.

Comme pour les mélanges *simple-étape/simple-structure*, le saut d'entropie est globalement plus important pour les particules traversant l'onde de Mach, que pour celles traversant successivement les ondes incidente et transverse. La distance pour obtenir l'uniformisation de l'entropie dans le milieu complètement brûlé est longue. Malgré les temps caractéristiques distincts des deux lois globales de libération d'énergie chimique, l'amortissement des inhomogénéités d'entropie produites par la première étape de libération d'énergie ne peut pas être total avant que les particules ne soient attaquées par le deuxième front derrière lequel le reste de l'énergie chimique est libéré.

4.5 Instabilité de l'onde transverse

La figure 4.6 montre des variations de la largeur de l'onde transverse. Au cours d'une demi-période de rotation, une onde se déplace perpendiculairement à l'onde transverse de la gauche vers la droite (i.e. dans la direction de propagation de la détonation).

Ce phénomène est également visible sur la figure 4.4 où l'étendue de la zone de forte pression (i.e. $p > 4\text{bar}$) est plus réduite sur la figurine 4.4(a) que sur la figurine 4.4(c). Ceci explique sûrement les variations de taille et de trajectoire de la bande laissée par l'onde transverse sur les traces de la figure 4.2.

Les causes de cette instabilité ne sont pas encore déterminées. On peut d'abord s'interroger sur la force de la détonation, mais la vitesse de propagation et les profils sont très proches de ceux de la détonation stationnaire autonome. Le nombre de Courant un peu élevé ($CFL=0.75$) pourrait ensuite être critiqué mais un calcul avec un nombre de Courant de 0.3 montre les mêmes particularités.

Cette instabilité peut tout à fait être physique et être l'origine d'une structure de bande qui a déjà fait l'objet d'observations expérimentales dans certains mélanges réactifs et calculée dans des simulations numériques 2D hautement résolues [Gamezo *et al.*, 2000].

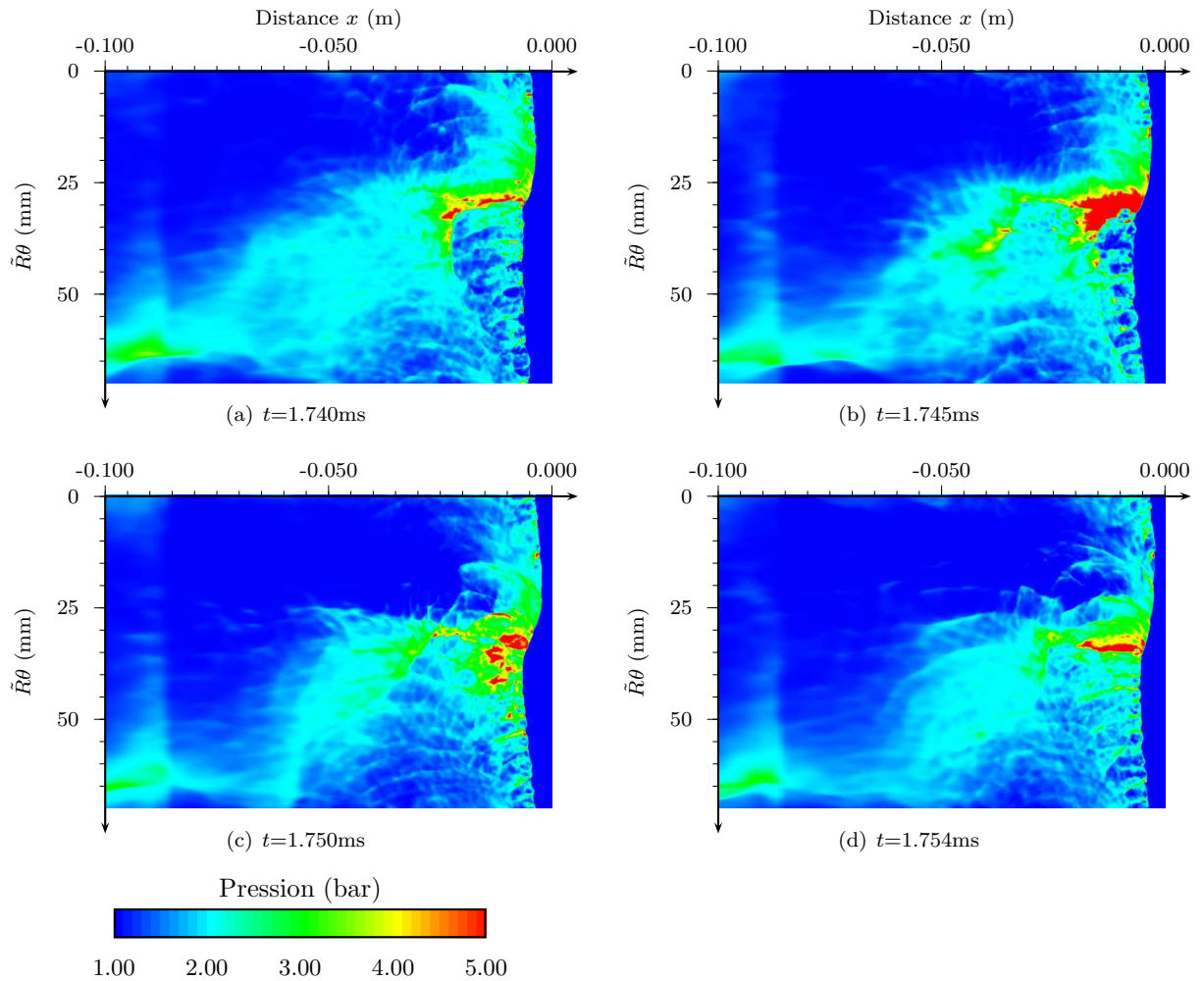


FIG. 4.6 – Instabilité de l’onde transverse visualisée à travers quatre instants successifs dans le repère lié à celle-ci. Dans le repère du laboratoire, l’onde transverse se déplace sur un demi-périmètre de tube.

4.6 Influence du diamètre du tube à détonation sur la structure et le régime de détonation

Les simulations de cette section utilisent des paramètres d’entrée différents de ceux de la simulation précédente analysée dans les sections 4.2 à 4.5. Tout en gardant les mêmes conditions thermodynamiques et cinétiques, on fait varier le diamètre du tube. La résolution du maillage est plus faible qu’auparavant avec une taille de maille dans la zone la mieux résolue $\Delta x_{fine}=0.15\text{mm}$ (au lieu de 0.0563mm précédemment). Les paramètres qui changent sont répertoriés dans le tableau 4.1. Le diamètre de tube de la simulation précédente correspond à celui du cas \mathcal{B} .

La figure 4.7 présente les traces obtenues pour les différents diamètres de tube d tandis que la figure 4.8 montre les isosurfaces de pression vues de face à un instant donné où différents régimes sont observables. Comme aucune perte n’est prise en compte, toutes les détonations se propagent

Cas	d (mm)	maillage	Structure cellulaire	N_1	λ_1 (mm)
\mathcal{A}	26.25	$500 \times 175 \times 175$	Double – Multi-têtes	*	*
\mathcal{B}	22.5	$500 \times 150 \times 150$	Double – 2 ^{ème} étape hélicoïdale	*	*
\mathcal{C}	15	$500 \times 100 \times 100$	Simple – Multi-têtes	3-4	3.7-5
\mathcal{D}	7.5	$500 \times 50 \times 50$	Simple – Multi-têtes	1.5	5
\mathcal{E}	5.25	$500 \times 35 \times 35$	Simple – Multi-têtes	1	5.25
\mathcal{F}	3	$500 \times 20 \times 20$	Simple – 1 ^{ère} étape hélicoïdale	0.5	6

TAB. 4.1 – Paramètres des simulations montrant l'influence du diamètre du tube d sur la structure et le régime de détonation et quelques résultats de calcul : N_1 correspond au nombre de cellules de taille λ_1 produites dans le diamètre d par la première libération d'énergie. L'astérisque (*) indique que les cellules de la petite structure n'ont pas de taille fixe lorsque la double structure est présente.

à des célérités proches de D_{CJ} .

Pour le plus grand diamètre de tube (cas \mathcal{A}), une double structure cellulaire est visible où les grandes cellules de taille $\lambda_2 = d$ sont remplies de petites cellules de taille variable.

En diminuant le diamètre du tube (cas \mathcal{B}), la structure associée à la deuxième étape de libération d'énergie n'a plus suffisamment d'espace pour que deux ondes transverses coexistent dans la section du tube. Une seule onde transverse subsiste et se propage le long d'une trajectoire hélicoïdale de pas 7cm (soit $P=3.1d$). En comparant cette simulation avec celle présentée au début de ce chapitre, on remarque que la résolution du maillage n'a pas d'effet sur le régime de propagation : dans les deux cas, la double structure est observée avec la propagation hélicoïdale d'une seule onde transverse associée à la deuxième étape. L'augmentation de la résolution du maillage apporte toutefois des améliorations conséquentes pour résoudre les petites échelles liées à la petite structure.

Pour des tubes encore plus petits (cas \mathcal{C} à \mathcal{F}), une simple structure est présente. Malgré la disparition complète de la structure la plus large, l'énergie libérée par la deuxième étape participe cependant à la propagation de la détonation. Les cellules de détonations visibles sont dues à la première libération d'énergie et sont d'autant plus régulières que le tube est petit (à résolution du maillage fixe, la réduction de la géométrie revient à diminuer les degrés de liberté qui permettent aux cellules de détonation d'être irrégulières). La taille λ_1 des cellules de détonation est relativement constante et se situe autour de 5mm (cf. tableau 4.1). A mesure que le diamètre de tube décroît, le nombre de cellules dans le diamètre diminue jusqu'à obtenir le régime hélicoïdal (cas \mathcal{F}) avec un pas d'hélice de 10.5mm (soit $P=3.5d$) et un angle d'environ 45°.

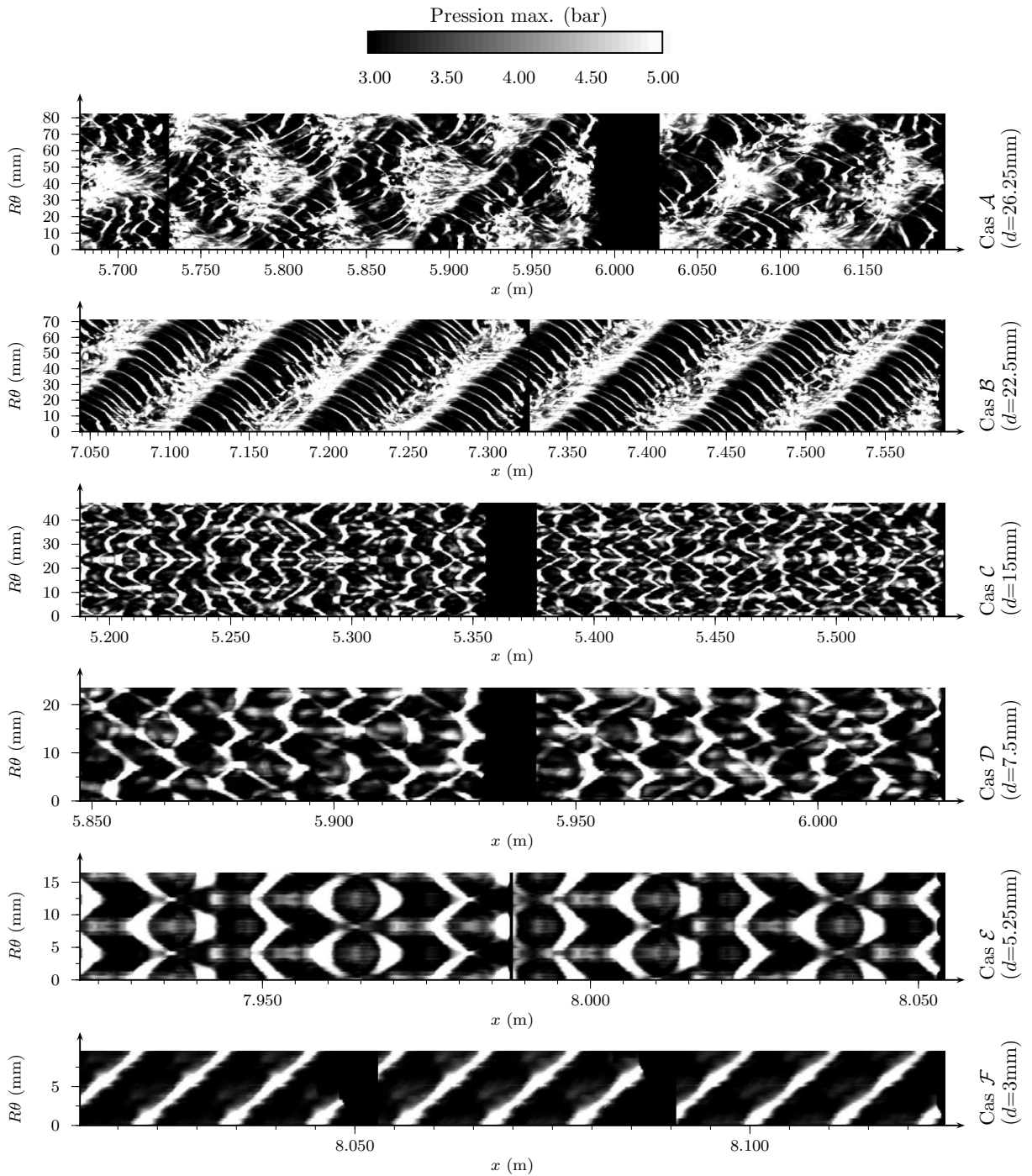


FIG. 4.7 – Traces numériques laissées sur la paroi du tube à détonation. En fonction du diamètre du tube d , plusieurs régimes sont observés : de la double structure cellulaire multi-têtes (cas \mathcal{A}) à la simple structure avec une onde hélicoïdale (cas \mathcal{F}).

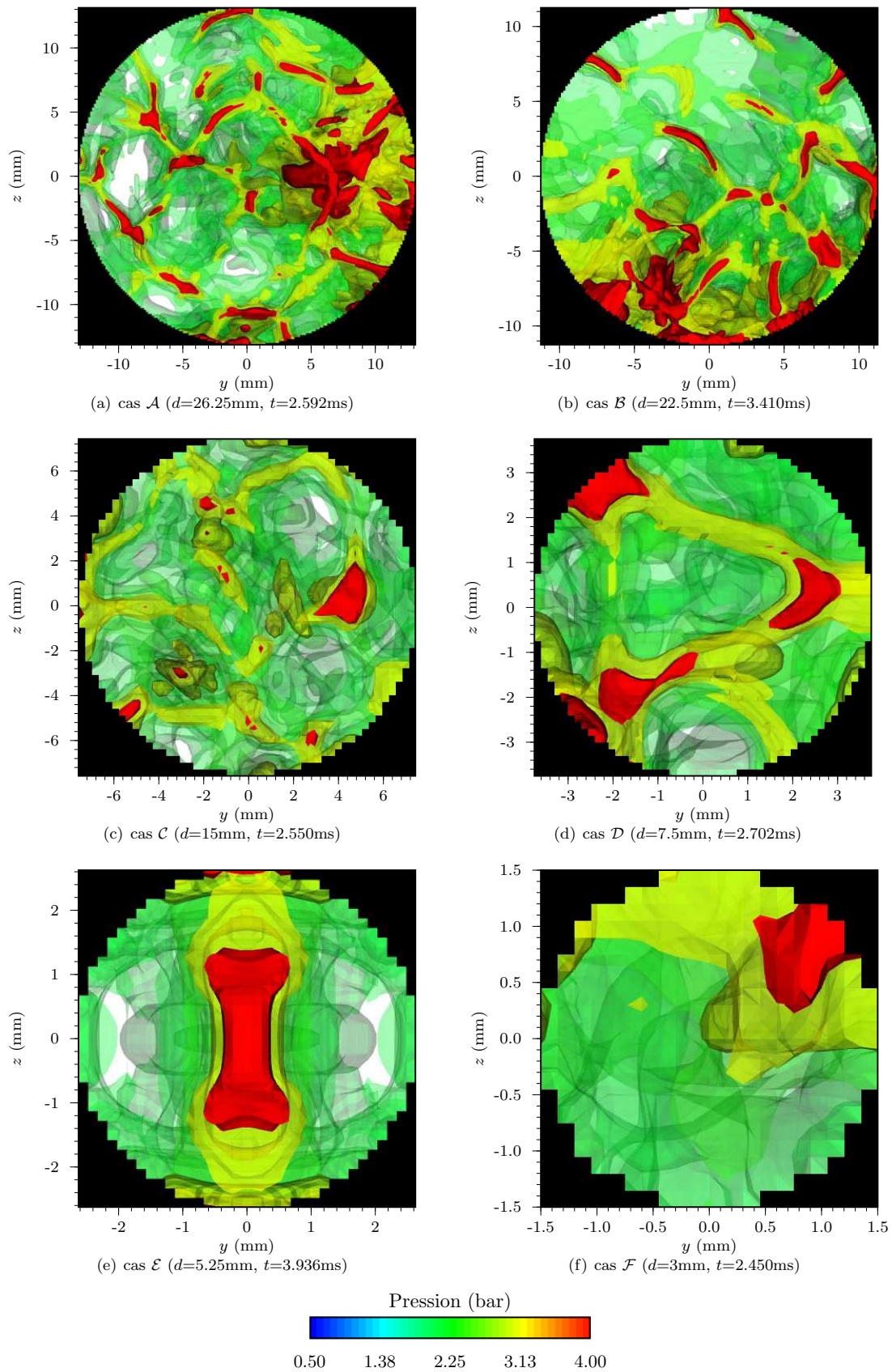


FIG. 4.8 – Isosurfaces de pression ($p \in \{1, 2, 3, 4\}\text{bar}$) vues de face révélant les zones de fortes pressions à proximité des points triple.

Les différents régimes de détonation observés en fonction du diamètre du tube sont indiqués sur le graphique de la figure 4.9. Leur existence dépend du rapport entre la taille de la cellule de détonation λ_i et la taille du confinement (d) c'est pourquoi les effets de la variation du diamètre du tube peuvent être transposés par ceux de la variation de pression initiale.

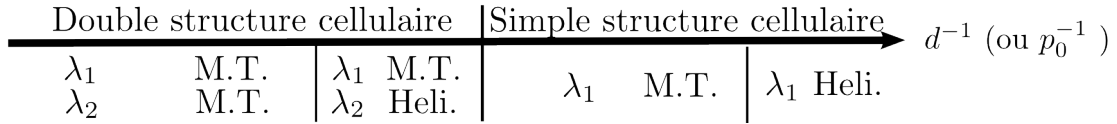


FIG. 4.9 – Régimes de détonation observés dans un tube en fonction du diamètre ou de la pression initiale (*M.T.* et *Héli.* sont respectivement les abréviations de Multi-Têtes et Hélicoïdal).

Les figures 4.10, 4.11 et 4.12 présentent les champs de pression, de fractions massiques de gaz frais Y_A et de gaz brûlés Y_C dans le plan $z=0$ pour trois tailles de tube (cas \mathcal{B} , \mathcal{C} , \mathcal{F}).

Dans tous les cas, la réaction $A \rightarrow B$ est très rapide et l'épaisseur de la zone de réaction mesure entre 0.3 et 0.7mm alors que la réaction $B \rightarrow C$ est plus lente et s'étend sur 10–20mm.

Dans les tubes suffisamment larges où une seconde structure se développe, des interactions entre structures existent (cf. schéma de la figure 4.10) : l'onde transverse associée à la deuxième étape pousse et déforme la tête du front ; les ondes transverses derrière la première libération d'énergie peuvent déstabiliser le front où la deuxième libération d'énergie s'opère.

Au contraire, dans les tubes où la structure associée à la deuxième étape de libération d'énergie n'apparaît pas car $\lambda_2 \gg d$ (fig. 4.11 et 4.12), le front de détonation est semblable à celui d'une détonation *simple-étape/simple-structure*. Les constatations expérimentales montrent toutefois des baisses de célérité de détonation significatives dans ces situations car les pertes aux parois (frottement, flux de chaleur) consomment une part non négligeable du potentiel énergétique. Ces pertes doivent désormais être prises en compte dans les simulations numériques afin d'observer ces écarts de célérité et prévoir l'extinction de la détonation.

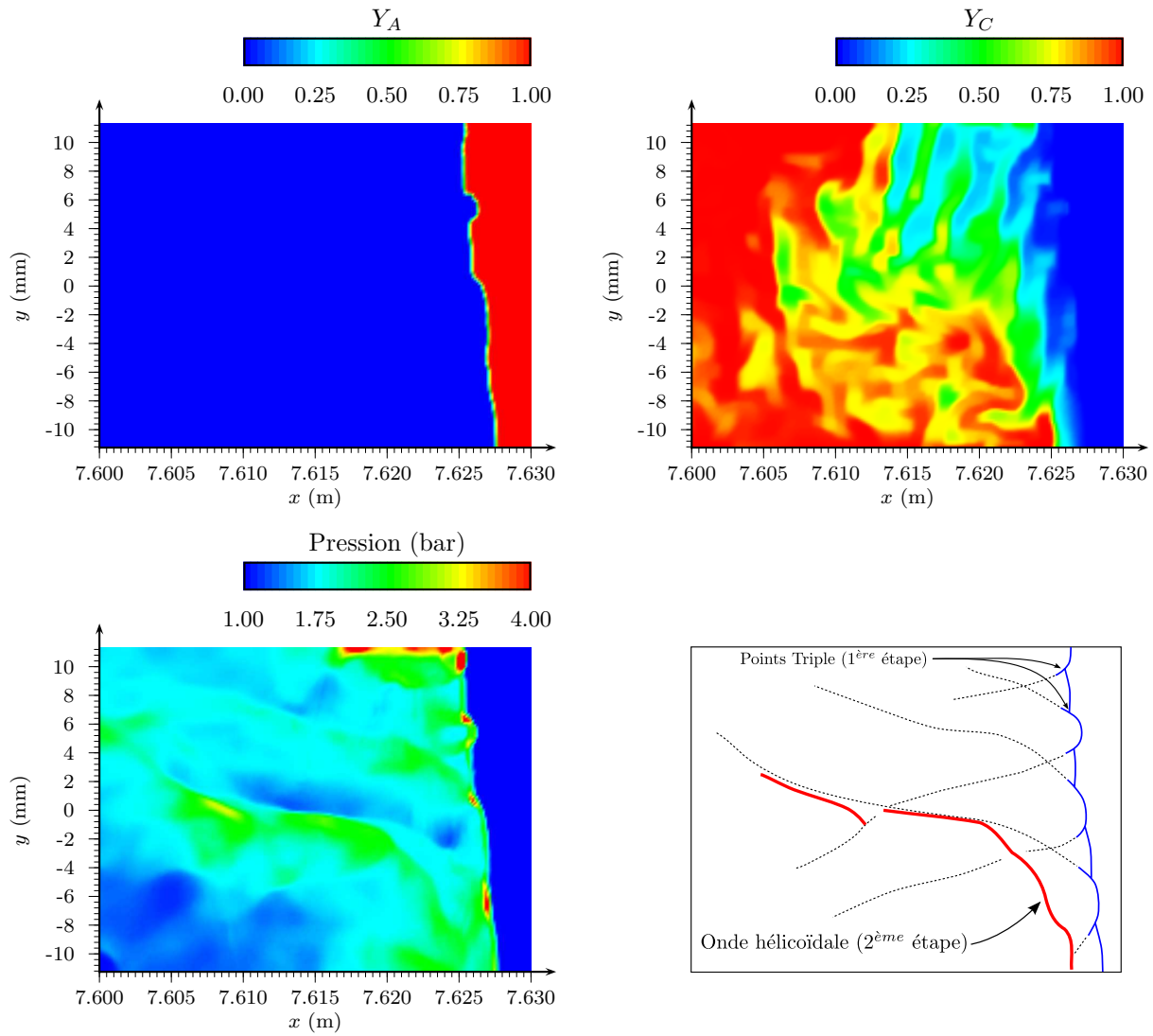


FIG. 4.10 – Profils de fractions massiques de gaz frais Y_A , de gaz brûlés Y_C et de pression p selon une coupe longitudinale passant par le diamètre du tube à détonation (plan d'équation $z=0$). Cas \mathcal{B} à $t=3.411$ ms. La représentation schématique du champ de pression montre l'interaction des ondes transverses de la première étape avec l'onde transverse de la seconde étape.

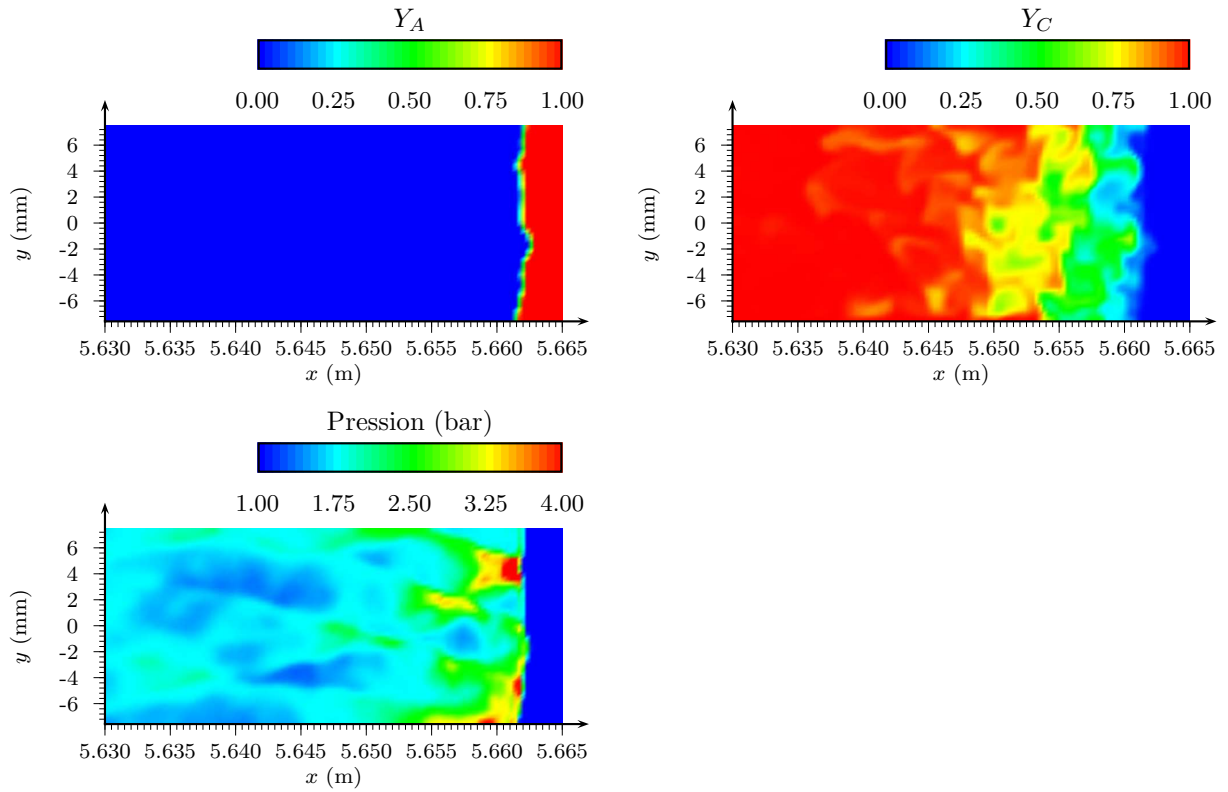


FIG. 4.11 – Profils de fractions massiques de gaz frais Y_A , de gaz brûlés Y_C et de pression p selon une coupe longitudinale passant par le diamètre du tube à détonation (plan d'équation $z=0$). Cas \mathcal{C} à $t=2.550$ ms.

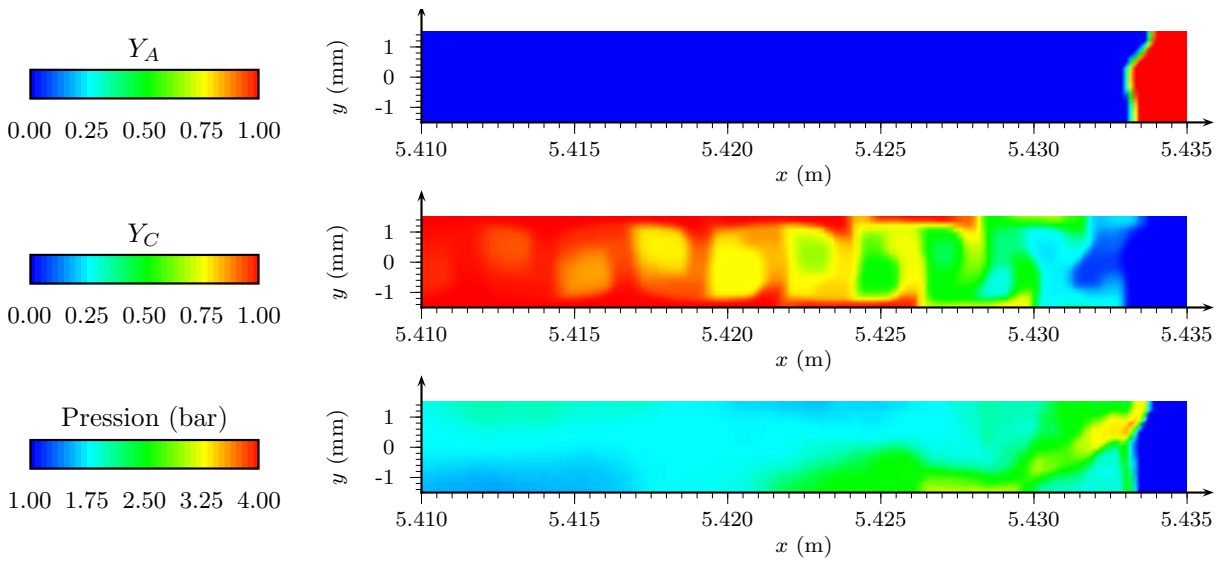


FIG. 4.12 – Profils de fractions massiques de gaz frais Y_A , de gaz brûlés Y_C et de pression p selon une coupe longitudinale passant par le diamètre du tube à détonation (plan d'équation $z=0$). Cas \mathcal{F} à $t=2.450$ ms.

CHAPITRE 5

Dispositif expérimental

Chapitre 5

Dispositif expérimental

5.1 Vue générale du dispositif expérimental

Le dispositif expérimental (figure 5.1) est composé d'un tube à détonation et d'une section motrice en acier inoxydable de diamètre intérieur $d=53\text{mm}$ (diamètre extérieur 61mm) séparés par une feuille de mylar d'épaisseur 0.1mm . Le tube à détonation est constitué de tronçons de longueur variable, sa longueur maximale est de 19m .

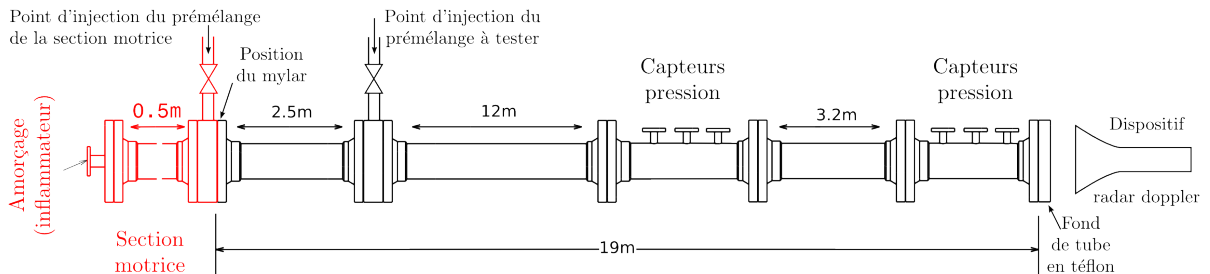


FIG. 5.1 – Schéma du dispositif expérimental.

La section motrice, d'une longueur de 50cm , joue le rôle d'un tube à choc et permet d'amorcer la détonation dans un mélange réactif contenu dans le tube à détonation par transition choc-détonation. La section motrice est remplie par un mélange sensible éthylène/oxygène stœchiométrique. La déflagration initiée par un inflammateur électrique (excité par une tension continue de 12V) transite rapidement en détonation. La pression initiale qui permet de moduler l'intensité du choc est ajustée empiriquement.

5.2 Préparation des pré-mélanges

Les pré-mélanges sont effectués dans une bouteille en acier de 50L au moyen d'une installation spécialement conçue pour ces opérations. Le combustible, l'oxydant et éventuellement un gaz

inerte sont successivement introduits et leur proportion contrôlée via la méthode des pressions partielles. Le mélange ainsi préparé n'est utilisé que quelques heures après, afin de s'assurer que les constituants sont parfaitement mélangés.

La pression maximale des pré-mélanges est de 4bar ce qui fournit généralement une réserve pour effectuer plusieurs tirs. Pour réduire le risque de stratification des pré-mélanges (notamment avec l'hydrogène), la bouteille est stockée horizontalement sur un ensemble de roulements permettant de la faire pivoter sur son axe avant chaque expérience.

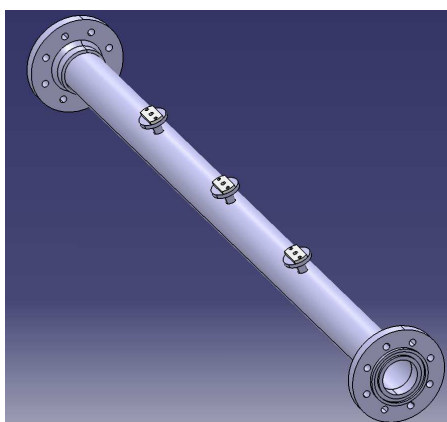
L'air contenu dans le tube à détonation et la section motrice est évacué au moyen de pompes à vide avant l'injection des pré-mélanges respectifs. Leur pression est contrôlée par une jauge (MKS PDR-C-1C) précise à 2mbar.

5.3 Métrologie

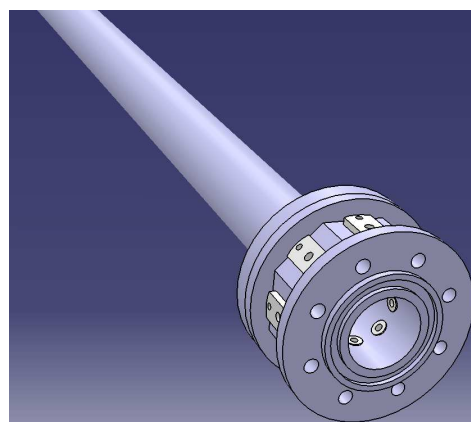
5.3.1 Capteurs de pression dynamique

Les capteurs de pression (KISTLER 603B) sont des jauges à quartz piézoélectriques qui répondent en $1\mu\text{s}$. Les capteurs ont une surface active circulaire (5mm de diamètre) et sont montés sur le tube à détonation de sorte qu'ils affleurent la paroi interne. Même si ces capteurs possèdent une fréquence propre élevée et une compensation de l'accélération, ils sont montés sur un support en Téflon qui amortit les vibrations. Une fine couche de silicone de l'ordre de 1mm isole thermiquement le capteur des hautes températures des produits de détonation.

L'utilisation de plusieurs capteurs de pression peut servir à obtenir une célérité moyenne de l'onde de détonation lorsqu'ils sont disposés le long de l'axe du tube à détonation (fig. 5.2(a)) ou à estimer la forme d'un front de choc lorsqu'ils sont répartis dans une même section (fig. 5.2(b)).



(a) Tronçon de capteurs



(b) Tourelle de capteurs

FIG. 5.2 – Répartition des capteurs le long du tube à détonation (tronçon) ou dans une même section (tourelle). Les supports capteurs sont blancs.

Les capteurs délivrent des charges électriques proportionnellement à leur sollicitation. Un amplificateur de charge (KISTLER 5011) convertit la grandeur mécanique (niveau de pression) en une tension électrique enregistrée sur un oscilloscope (TEKTRONIX TDS420). Le signal est ensuite transféré sur ordinateur via l'interface GPIB. Les capteurs sont utilisés sur leur gamme d'étalonnage 0–200bar. Un exemple de signal est donné sur la figure 5.3 : au passage du choc de tête, la pression augmente brutalement puis diminue progressivement dans la détente. Desbordes *et al.* [1982] ont montré que, dans la propagation stationnaire des détonations, un niveau de pression plus faible que la valeur théorique CJ est habituellement mesuré juste après le front (10 à 15 μ s) à cause de la divergence de l'écoulement. Dans un tube de diamètre $d=53$ mm, ce niveau avoisine $0.75p_{CJ}$.

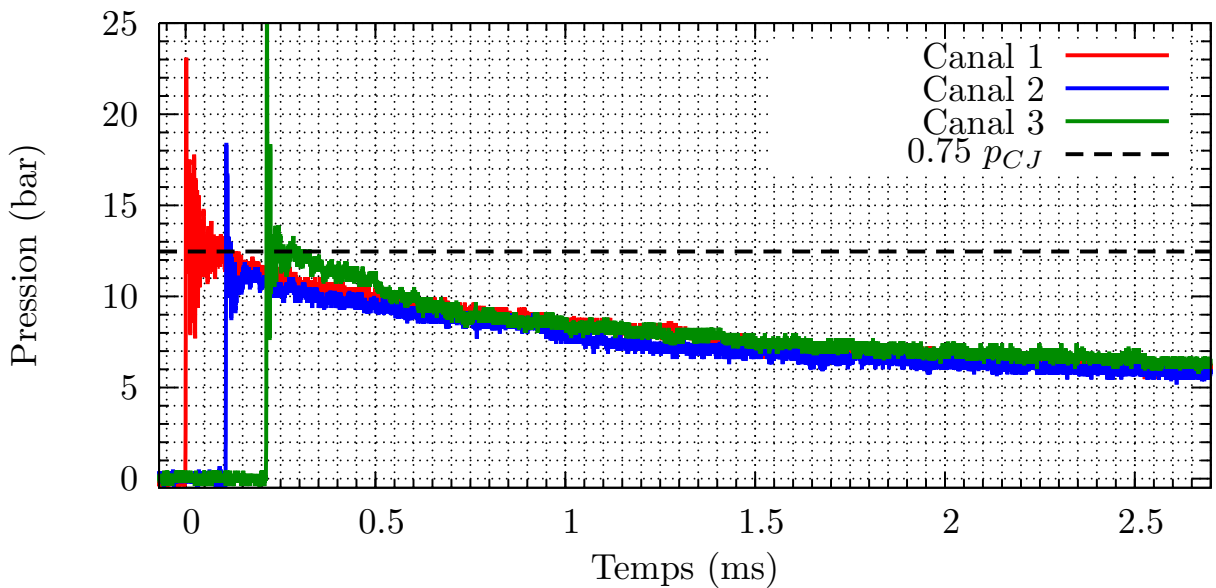


FIG. 5.3 – Exemple de signaux de pression obtenus sur un tronçon de capteurs pour une détonation multitétes ($C_2H_4 + 3O_2$, $p_0=0.5$ bar ; capteurs espacés de 25cm ; pour ces conditions, $\lambda \approx 2-3$ mm).

Exploitation des signaux de capteurs distribués le long de l'axe du tube à détonation

L'incertitude D de la célérité de détonation déterminée par deux capteurs espacés d'une distance x vaut

$$\frac{\delta D}{D} = \frac{\delta x}{x} + \frac{\delta t}{t} \quad (5.1)$$

La discontinuité brutale de pression au passage d'un choc droit (cf. fig. 5.3) permet de déterminer précisément l'instant de passage du choc. L'incertitude δt porte sur la mesure du temps entre les deux signaux et est liée au temps de réaction du capteur : $\delta t=2\mu$ s.

Pour une détonation multitétes, le front peut être considéré plan avec une bonne approxima-

tion. Dans ce cas, l'incertitude liée à l'espacement est bonne $\delta x = 10^{-4} \text{m}$ (précision d'usinage). Par conséquent $\delta D \approx 30 \text{m.s}^{-1}$ (i.e. $\pm 1.5\%$).

Pour une détonation hélicoïdale, la déformation du front de choc peut induire une incertitude de position (projetée sur l'axe de détonation) $\delta x = 2.5 \cdot 10^{-2} \text{m}$. Dans ce cas $\delta D \approx 150 \text{m.s}^{-1}$ (i.e. $\pm 7.5\%$). Toutefois, cette incertitude peut être négligée si les capteurs sont espacés d'un nombre entier de pas d'hélice (exactement) et si la forme du front est invariante : sur les trois tronçons existants, deux sont équipés de capteurs espacés de 25cm et le troisième de capteurs distants de 29cm. En supposant que la vitesse est relativement constante sur la distance x , l'incertitude sur la mesure de vitesse est minimisée si le pas d'hélice mesure 12.5cm ou 14.5cm.

Exploitation des signaux de capteurs distribués dans une section droite du tube à détonation

La figure 5.4 expose, séparément, les signaux des capteurs de pression régulièrement distribués dans une section droite du tube à détonation alors qu'ils sont superposés sur la figure 5.5. Une couleur est attribuée à chaque capteur.

Les signaux de pression issus des deux expériences (fig. 5.4(a) et 5.4(b)) montrent, d'une part, que les résultats sont bien reproductibles et, d'autre part, que la forme du front est semblable aux distances $x = 14.6 \text{m}$ et $x = 18 \text{m}$.

Les signaux de pression obtenus sur la périphérie du tube à détonation sont similaires : ils sont constitués d'un seul choc très fort (choc de l'onde de Mach) ou de deux chocs successifs dont le premier modéré et correspondant au choc de l'onde incidente est suivi par le choc de l'onde transverse plus ou moins retardé. Des oscillations de pression régulières se manifestent dans l'onde de détente arrière ; l'onde de surpression créée par l'onde transverse a la forme d'une hélice qui tourne à la même fréquence que la détonation. Le trait pointillé de la figure 5.4(a) suit cette hélice sur les différents capteurs.

L'analyse de l'ordre d'apparition des oscillations sur les figures 5.5(a) et 5.5(b) indique que le sens de rotation des détonations hélicoïdales des deux expériences est contraire.

Sur les agrandissements de la figure 5.5, des *chocs* sont visibles sur 3–4 signaux de pression identifiés par des pics sur les fronts montants des oscillations.

L'utilisation de la tourelle de capteurs permet également d'estimer la largeur ξ du front de choc de tête de la détonation, i.e. la distance projetée sur l'axe du tube entre les points où le choc est le plus avancé et le moins avancé (fig. 5.6). En supposant que l'onde tourne peu pendant Δt et connaissant la célérité de propagation longitudinale D , cette largeur de front de choc vaut $\xi = \Delta t \cdot D$. Pour les conditions de mélange et de pression initiale de la figure 5.6, $\xi = 14 \text{mm}$.

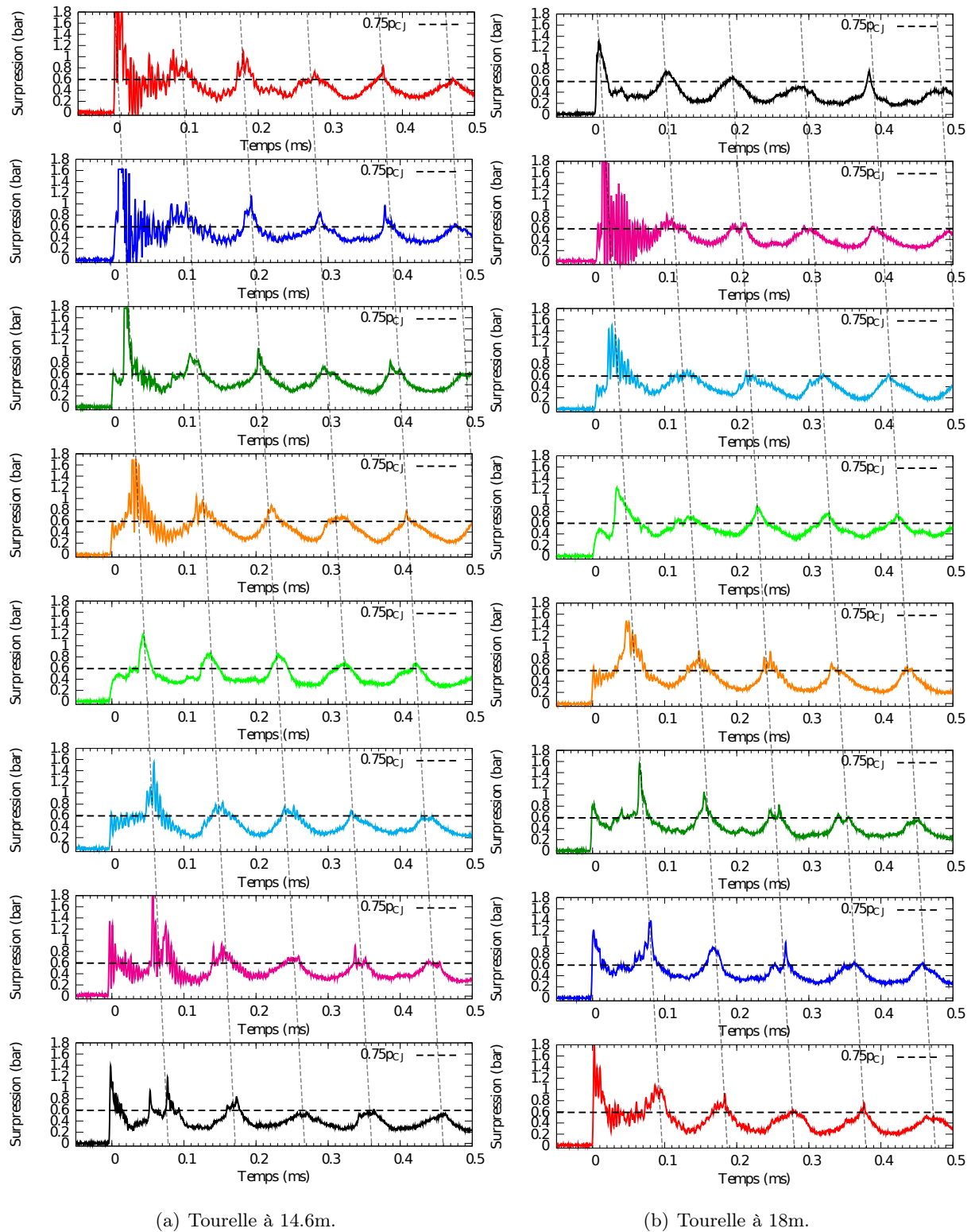
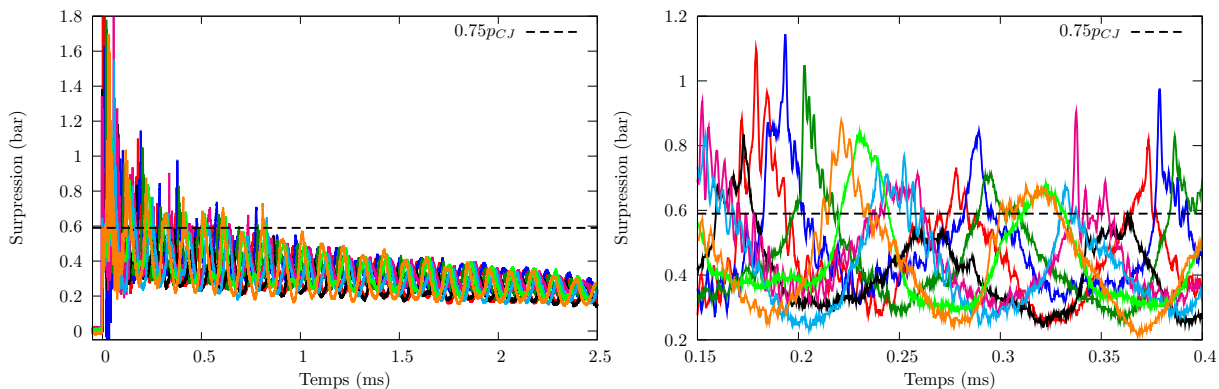
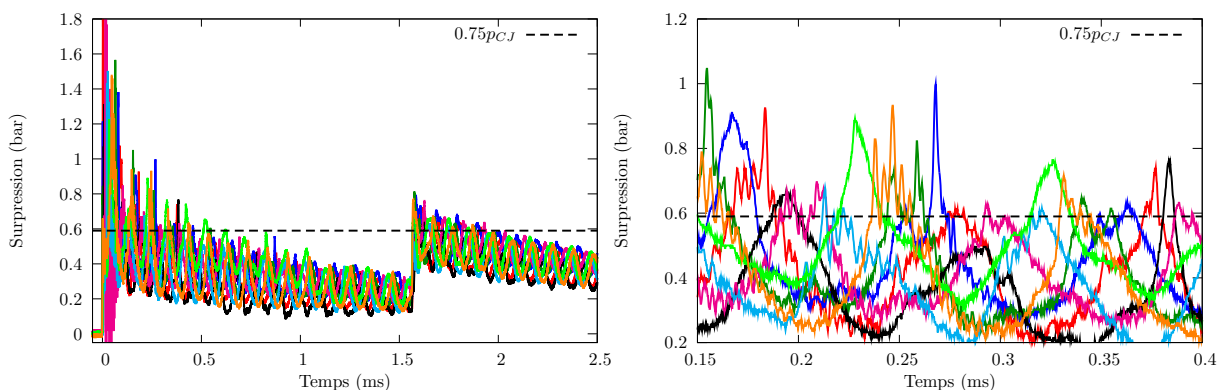


FIG. 5.4 – Enregistrements de pression pour $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ à $p_0=40\text{mbar}$ (détonation hélicoïdale). Une couleur est attribuée pour chaque capteur ; le sens de rotation de la détonation hélicoïdale dans l'expérience 5.4(a) est contraire à celui de l'expérience 5.4(b). Les signaux de pression des deux expériences sont mis en correspondance.



(a) Tourelle à 16m. A droite, agrandissement de la vue de gauche.



(b) Tourelle à 18m. A droite, agrandissement de la vue de gauche.

FIG. 5.5 – Enregistrements de pression pour $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ à $p_0=40\text{mbar}$ (détonation hélicoïdale). Une couleur est attribuée pour chaque capteur ; le sens de rotation de la détonation hélicoïdale dans l'expérience 5.5(a) est donc inversé par rapport à celui de l'expérience 5.5(b). Le saut de pression visible sur la figurine 5.5(b) vers $t=1.5\text{ms}$ est l'effet de la réflexion au fond du tube à détonation.

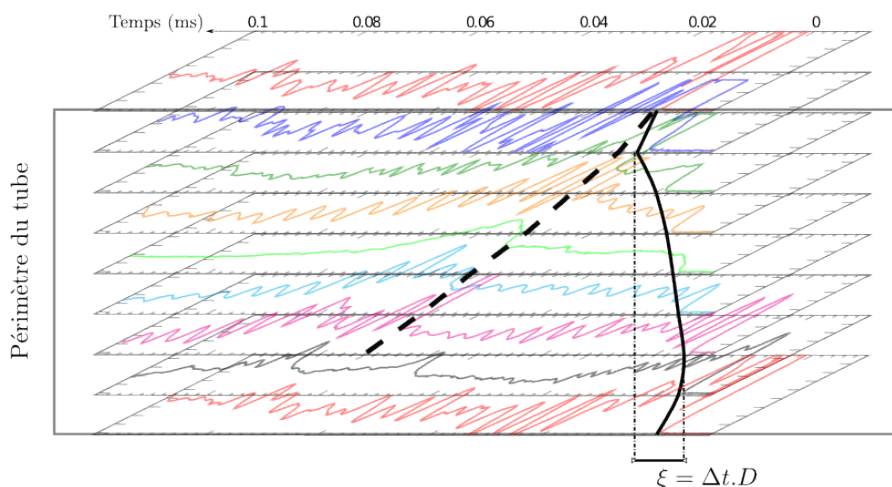


FIG. 5.6 – Détermination de la forme du front de choc à partir des huit signaux de pression pour $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ à $p_0=40\text{mbar}$. $D=1443\text{m/s}$ et $\Delta t=10\mu\text{s}$.

5.3.2 Dispositif radar à effet Doppler

L'utilisation de plusieurs capteurs de pression permet d'obtenir la valeur moyenne de la célérité de détonation le long d'une base de mesure localisée. Le dispositif radar à effet Doppler permet d'obtenir la célérité locale de l'onde de détonation pendant toute sa propagation. Cependant, l'interprétation des signaux obtenus grâce à ce système est délicate dans le cas des régimes limites de propagation des détonations.

Principe

La zone de réaction d'une détonation est caractérisée par l'existence d'une tranche de gaz ionisé qui constitue un miroir pour la propagation des ondes électromagnétiques centimétriques. Ce miroir est plus au moins réfléchissant suivant la densité électronique de la zone ionisée et de sa planéité. L'onde électromagnétique réfléchiée par le front de combustion interagit avec l'onde incidente car ces ondes progressives sont cohérentes, elles proviennent d'un tube auto-oscillateur (klystron 2K25) dont la fréquence de résonance est $f=9.58\text{GHz}$ (longueur d'onde $\lambda=3.13\text{cm}$). Un cristal détecteur (diode 1N23) délivre un signal à l'oscilloscope en rapport avec l'amplitude des ondes électromagnétiques incidente et réfléchiée.

Le dispositif interférométrique constitué de guides d'ondes rectangulaires est placé à la fin du tube à détonation (cf. fig. 5.1). Ce dernier constitue également un guide d'onde mais de forme circulaire; un hublot en Téflon permet le passage des ondes électromagnétiques et un cornet de forme rectangulaire permet d'adapter les deux types de guide d'onde. Lorsque le front de détonation se déplace à la vitesse D , la fréquence de l'onde réfléchiée est légèrement modifiée par l'effet Doppler. La fréquence f du signal en sortie de la diode est liée à D et λ par la relation 5.2.

$$D = \frac{\lambda}{2} f \quad (5.2)$$

La propagation des ondes électromagnétiques est régie par les équations de Maxwell. Dans un guide d'onde, les conditions aux limites imposent une forme particulière de l'expression des champs électrique et magnétique et la longueur d'onde guidée dépend des caractéristiques du guide $\lambda_g = \frac{\lambda}{\sqrt{1 - \lambda^2/\lambda_c^2}}$ où $\lambda_c \propto d/2$ est la longueur d'onde de coupure dans un tube de diamètre d au delà de laquelle l'onde ne peut plus se propager.

λ_g a été déterminée par une méthode inverse en mesurant (plusieurs fois) la vitesse de propagation de la détonation pour un mélange éthylène/oxygène en proportion stœchiométrique à $p_0=0.5\text{bar}$. Pour cette pression initiale, la taille de cellule de détonation est de l'ordre de 2mm et la vitesse de propagation mesurée par les jauges de pression est égale à la célérité théorique $D_{CJ}=2350\text{m.s}^{-1}$. La valeur $\lambda_g=3.5955\text{cm}$ est utilisée.

Plusieurs modes de propagation des ondes stationnaires peuvent coexister. Pelhate qui a

été le premier à mettre en oeuvre cette technique en dénombrant trois pour un tube de 36mm de diamètre (tableau 5.1 [Pelhate, 1966, p. 53-54]). Un nombre plus important de modes doit exister dans notre cas car la fréquence de coupure est plus basse pour un tube plus large (diamètre 53mm). La coexistence de plusieurs modes conduit à un phénomène de battement dans l'espace de la longueur d'onde λ_b modulant le signal de sortie. Ces variations périodiques d'amplitude sont nuisibles pour l'interprétation. Lee aurait amélioré le dispositif en tendant un fil de cuivre pour imposer une configuration coaxiale du guide d'onde [Lee *et al.*, 1995; Haloua *et al.*, 2000] afin, sans doute, d'éliminer le mode TE_{11} qui n'est pas à symétrie de révolution (cf. tableau 5.1). Même si des variations d'amplitude du signal subsistent, Lee *et al.* obtiendraient des résultats satisfaisants même dans les régimes limites de propagation des détonations. Pour réduire le phénomène de battement, Pelhate avait suggéré et validé l'utilisation d'un polariseur; un tel dispositif n'a pas été utilisé dans notre cas.

Mode	a) TM_{01}	b) TE_{11}	c) TE_{21}
λ_c (cm)	4.637	6.050	3.651
$f_c = \frac{c}{\lambda_c}$ (GHz)	6.48	4.95	8.23
λ_g (cm)	4.17	3.66	6.06
λ_b (cm)	29.8	–	9.65
Champs			
$\vec{E} \rightarrow$			
$\vec{B} - - \rightarrow$			

TAB. 5.1 – Modes de propagation des ondes stationnaires dans un tube à détonation de diamètre 36mm. λ_c , λ_g , λ_b sont respectivement les longueurs d'ondes de coupure, guidée et de battement avec TE_{11} . Extrait de la thèse de Pelhate [1966].

Dans des travaux antérieurs, un filtre analogique passe-haut (actif) était utilisé entre la diode de mixage et l'oscilloscope pour éliminer quelques perturbations et la composante continue du signal [Auffret, 1998]. Etant donné les faibles amplitudes de nos signaux, le bruit engendré par les amplificateurs opérationnels ont conduit à remplacer ce filtre par une simple capacité en série dont la valeur (56pF) a été empiriquement choisie. L'amplification de la puissance de l'émetteur devrait améliorer la qualité des signaux enregistrés.

Le radar à effet Doppler est commode d'utilisation avec les détonations multitêtes. Jusqu'au cas où deux ondes transverses évoluent dans le diamètre du tube, un traitement informatique automatisé peut être mis en oeuvre grâce aux transformées de Fourier car le signal est quasi-périodique et d'amplitude relativement constante. Cependant, lorsque le régime hélicoïdal est

atteint, l'allure des signaux est fortement dégradée, les variations d'amplitude du signal sont très importantes et l'analyse de Fourier, même sur une fenêtre temporelle étroite, est imprécise. En repérant des groupes d'oscillations, des mesures ponctuelles ont été réalisées. L'explication du saut de qualité de signal n'est pas rigoureusement connue, elle est peut-être en partie liée au fait que l'énergie des ondes électromagnétiques est plutôt répartie au centre du tube [Pelhate, 1966, p. 53-54] pour le mode dominant TE_{11} alors que le point triple (zone où on peut s'attendre à avoir l'ionisation la plus forte), évolue uniquement à la périphérie du tube en ne passant jamais par le centre.

Traitement des signaux Doppler

La figure 5.7(a) montre le signal obtenu directement en sortie de la diode de mixage. Un saut de tension est toujours observé à l'instant correspondant à l'allumage. Positif ou négatif et d'amplitude variable, ce phénomène indésirable justifie l'utilisation d'un filtre qui élimine les basses fréquences.

La zone où la flamme s'accélère jusqu'au régime de détonation (phénomène de transition déflagration détonation, TDD) est visible sur les deux figures 5.7(a) et 5.7(b). L'auto-explosion du mélange conduit à une détonation forte qui relaxe rapidement au régime stationnaire autonome. A l'entrée du guide d'onde, la longueur d'onde est différente de λ_g et fausse l'indication de vitesse : une baisse de la célérité de propagation non réelle est souvent observée à la fin du tube à détonation.

Les figures 5.7(c) et 5.7(d) indiquent que la réflexion des ondes électromagnétiques est meilleure sur un front de détonation que sur un front de flamme car l'amplitude du signal Doppler enregistrée est plus importante.

La figure 5.8 montre l'allure d'un signal Doppler à la sortie d'un filtre passe haut (filtre utilisé par Auffret [1998]). La valeur moyenne est nulle mais l'introduction de parasites et le gain empêchent son utilisation lorsque l'amplitude du signal est très faible. Dans les conditions de la figure 5.8, le régime de détonation est immédiatement amorcé.

D'après les résultats des figures 5.7 et 5.8, l'utilisation du dispositif radar Doppler indique que la pression initiale du mélange stoechiométrique éthylène/oxygène utilisé dans la section motrice doit être supérieure à 0.2bar pour que le régime de détonation soit établi au niveau de l'interface avec le tube à détonation.

Traitement des signaux Doppler, cas particulier de l'hydrogène

Les signaux Doppler obtenus avec les mélanges hydrogène/oxygène sont connus pour être très faibles et très difficilement exploitables. Au cours de cette campagne expérimentale, des

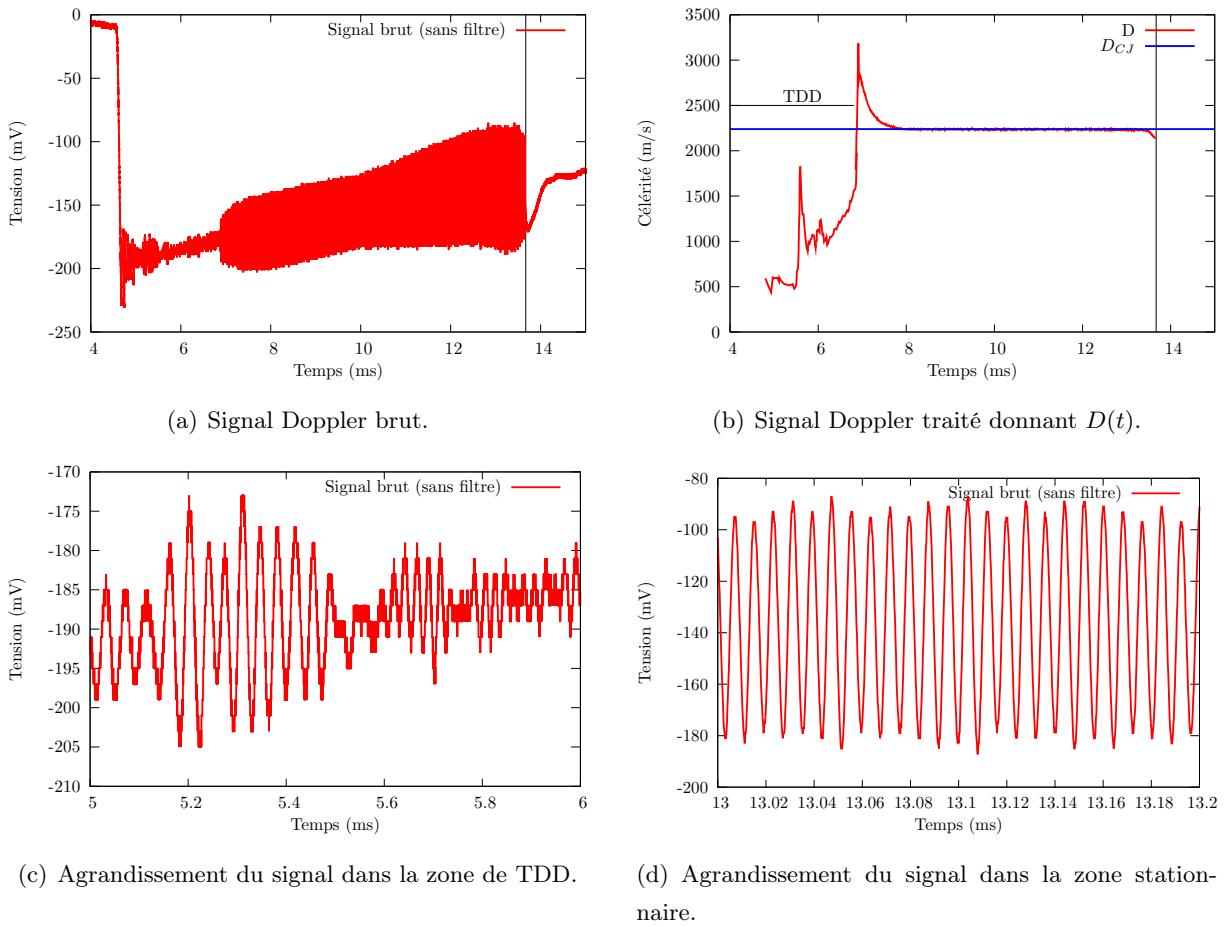


FIG. 5.7 – Analyse d'un signal Doppler obtenu avec le mélange $C_2H_4 + 3O_2$ à $p_0=75\text{mbar}$. L'amplitude du signal Doppler est beaucoup plus importante lors du régime de détonation que lors de la transition déflagration détonation (TDD).

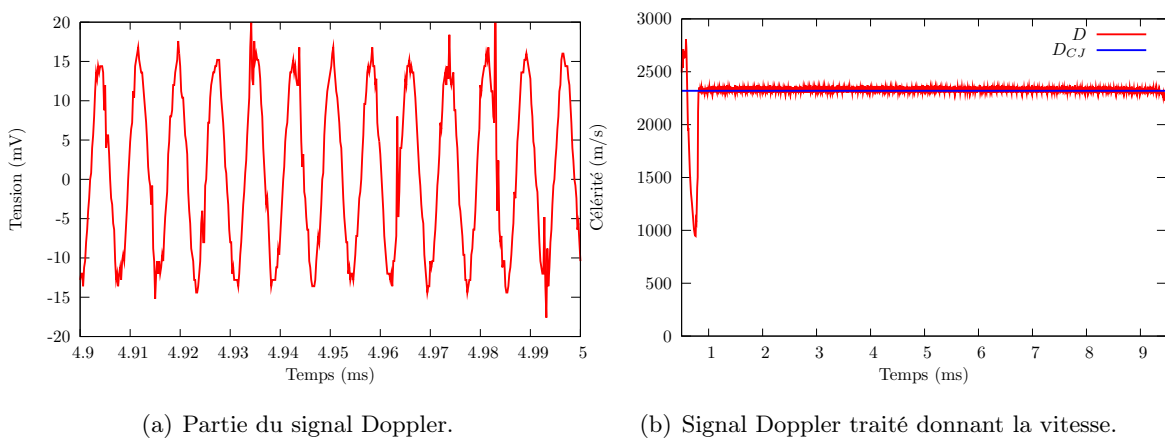


FIG. 5.8 – Analyse d'un signal Doppler obtenu avec un filtre actif (passe haut) pour le mélange $C_2H_4 + 3O_2$ à $p_0=0.3\text{bar}$. Les parasites engendrés par le filtre empêchent son utilisation pour des signaux de faible amplitude.

signaux d'amplitude raisonnable (mais certes variable) ont été observés (cf. signal rouge sur la figure 5.9). La première analyse des signaux révèle des vitesses de propagation de l'ordre de 700m.s^{-1} non-compatibles avec :

- le temps écoulé entre l'amorçage et l'arrivée de la détonation en fond de tube visible sur le signal Doppler complet,
- l'observation d'un régime de propagation quasi-CJ de la détonation ($D_{CJ} \approx 2800\text{m.s}^{-1}$) car la taille de cellule $\lambda < \pi d/2$,
- l'enregistrement des signaux de pression sur la tourelle de capteurs utilisée comme source de déclenchement (origine des temps commune avec le dispositif Doppler) qui irréfutablement indique le passage d'une détonation établie depuis longtemps.

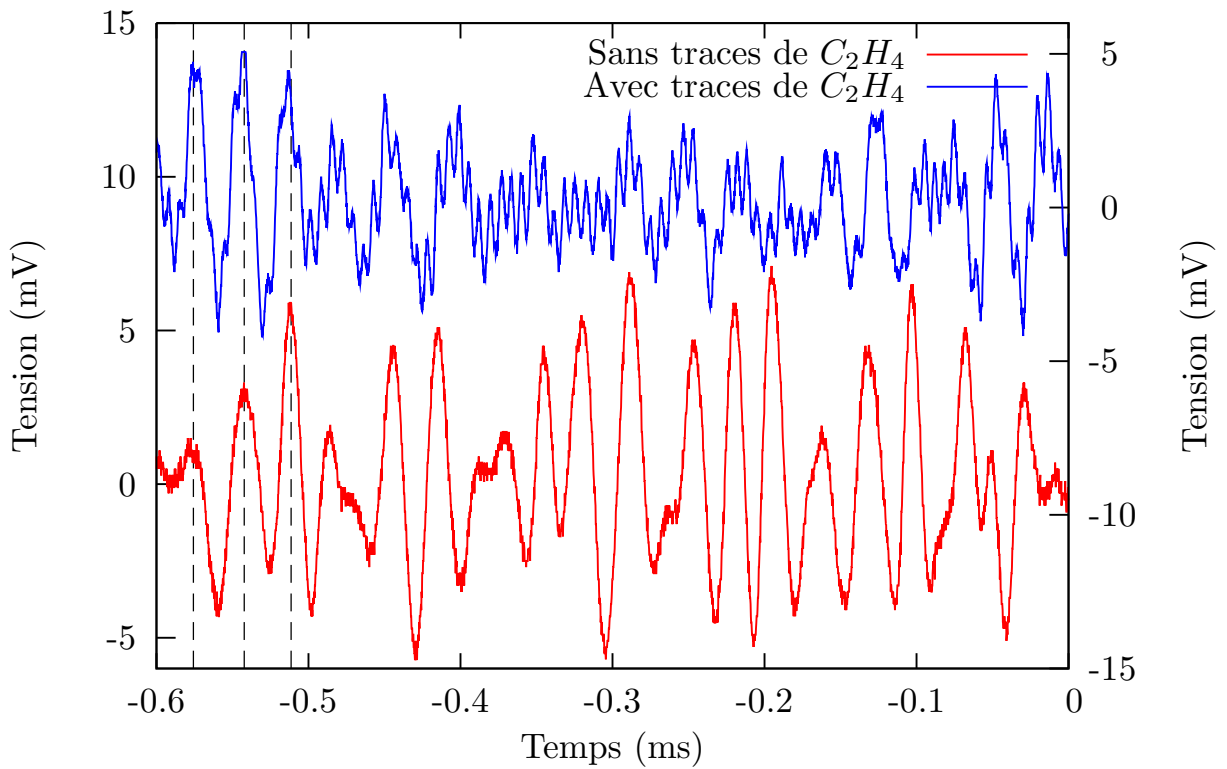


FIG. 5.9 – Signaux Doppler obtenus avec les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ (rouge) et $H_2 + \frac{1}{2}O_2 + 0.015C_2H_4$ (bleu) pour $p_0=50\text{mbar}$ ($\lambda = \pi d/2$). Pour ces mélanges, la célérité de détonation est respectivement $D_{CJ}=2677\text{m.s}^{-1}$ et $D_{CJ}=2703\text{m.s}^{-1}$; les propriétés de détonation sont très légèrement modifiées par l'ajout d'éthylène en faible quantité.

L'ajout d'une faible concentration d'un élément carboné ($\approx 1.5\%$ de C_2H_4 dans le cas de cette étude) modifie très légèrement les propriétés de détonation : $D_{CJ}=2703\text{m.s}^{-1}$ au lieu de $D_{CJ}=2677\text{m.s}^{-1}$ pour $p_0=50\text{mbar}$. En revanche, la signature radar enregistrée est différente; la figure 5.9 compare deux signaux enregistrées pour deux mélanges dans des conditions très proches : la signature radar du mélange contenant les traces d'éthylène est composée d'une basse fréquence f_1 qui module une fréquence plus élevée f_2 alors que seule la fréquence f_1 est observée

dans le mélange hydrogène/oxygène (sans éthylène). Il a été constaté que $f_1 \approx 0.25 f_2$ et que les vitesses associées aux fréquence f_2 correspondent convenablement aux vitesses de propagation des détonations : pour les conditions expérimentales de la figure 5.9, $D=2559\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ soit $95\% D_{CJ}$.

Il semble donc que les molécules ionisées contenant les éléments H et/ou O ne réfléchissent pas les ondes centrimétriques de la même façon que celles contenant l'élément C . Des ondes progressives électromagnétiques semblent se réfléchir sur le front de détonation des mélanges hydrogène/oxygène avec des longueurs d'ondes différentes du mode principal TE_{11} . Des études supplémentaires devront déterminer l'origine de ces ondes. L'analyse de ces ondes donne cependant une information sur l'instant où le régime de propagation se stabilise ainsi que des éléments comparatifs entre expériences.

Effet de la pression initiale du mélange de la section motrice

La figure 5.10 montre les célérités de détonation enregistrées pour le mélange $C_2H_6 + 3.5O_2 + 13.16Ar$ à $p_0=75\text{mbar}$. A cette pression, la cellule de détonation remplit entièrement la section du tube à détonation. La vitesse est intégrée par rapport au temps pour obtenir la distance de propagation sur l'axe des abscisses. On fait varier la pression initiale de la section motrice entre 0.5bar et 2.5bar.

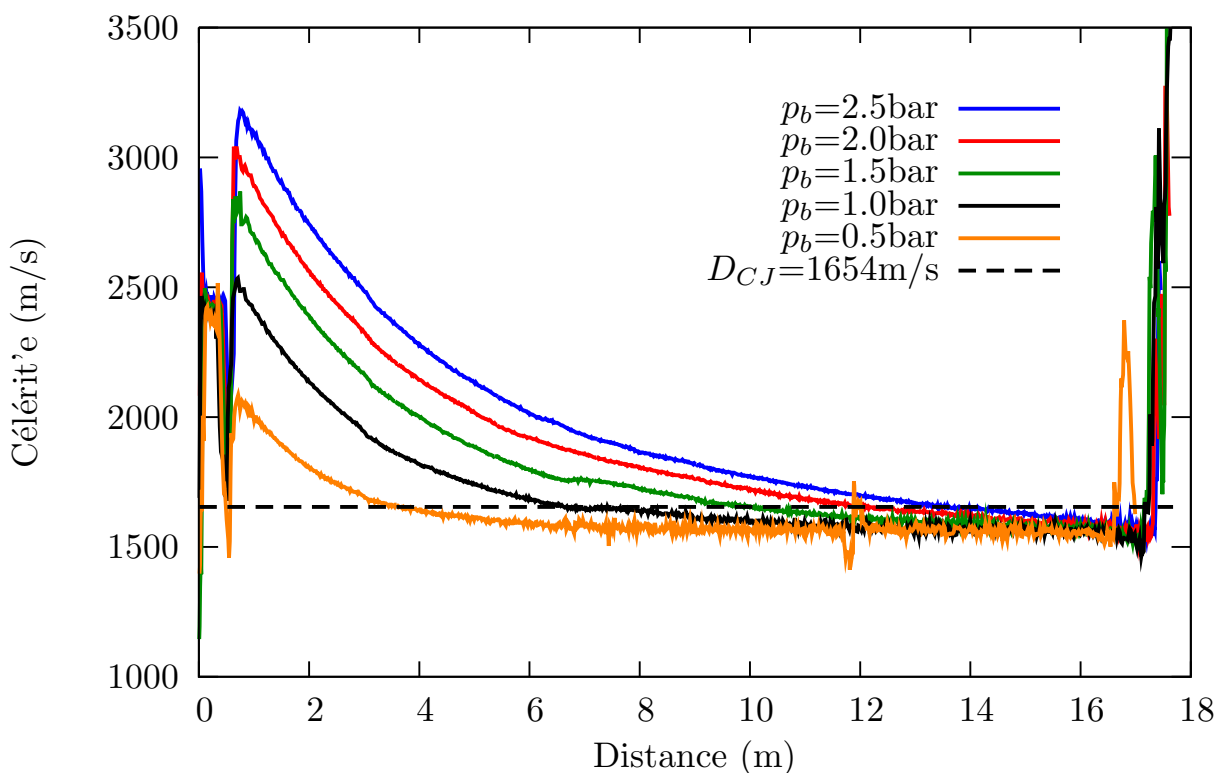


FIG. 5.10 – Intégration des signaux doppler pour le mélange $C_2H_6 + 3.5O_2 + 13.16Ar$ à $p_0=75\text{mbar}$ montrant l'effet de la pression initiale du mélange de la section motrice.

La section motrice est clairement repérable au début de chaque expérimentation. La célérité correspond à la célérité CJ du mélange $C_2H_4 + 3O_2$ pour chaque pression considérée (de 2340m.s^{-1} à 2412m.s^{-1} dans la plage considérée). D'après les constatations expérimentales, la section motrice mesure 0.5m .

Le choc généré dans le tube à détonation est d'autant plus fort et met d'autant plus de temps à relaxer que la pression initiale du mélange dans la section motrice est élevée. Le dispositif radar Doppler permet de vérifier les distances d'amorçage de la détonation.

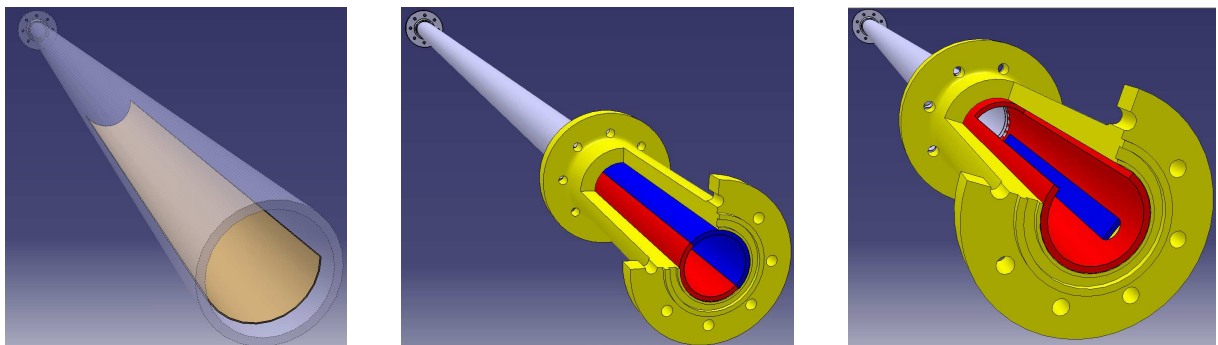
L'information de vitesse donnée par le dispositif radar Doppler est précise ; les signaux indiquent une longueur de tube constante entre chaque tir (sauf pour le cas $p_b=0.5\text{bar}$ où une perte de signal a été constatée vers 12m peut-être à cause d'une extinction momentanée).

Enfin, l'ensemble des expériences de la figure 5.10 montre que la vitesse se stabilise vers $D=1570\text{m.s}^{-1}$ (soit $0.95D_{CJ}$).

5.4 Enregistrement des cellules de détonation sur plaques recouvertes de noir de carbone

Différents dispositifs recouverts de noir de carbone par la combustion incomplète d'acétone permettent, lorsqu'ils sont balayés par une onde de détonation, l'enregistrement de la structure cellulaire de détonation ;

- une tôle polie roulée d'épaisseur 0.5mm ou 1mm et de longueur comprise entre 0.5m et 1.5m épouse la forme du tube à détonation (fig. 5.11(a)) ; elle est déposée dans le tube à détonation.
- deux demi-coquilles polies (pièces rouge et bleue de la figure 5.11(b)) sont insérées dans un corps (jaune) ; de même nature et diamètre intérieur que le tube à détonation, elles ne perturbent pas l'écoulement.



(a) Tôle fine formée.

(b) Coquille.

(c) Plaque de verre.

FIG. 5.11 – Types de plaques enfumées utilisées pour enregistrer les cellules de détonation.

- une plaque de verre de 3mm d'épaisseur, large de 15mm et mesurant 28cm (pièce bleue sur la figure 5.11(c)) est insérée dans une ouverture usinée dans une demi-coquille. Le verre est le matériau qui permet les meilleurs enregistrements photographiques des structures cellulaires.

CHAPITRE 6

Résultats expérimentaux

Chapitre 6

Résultats expérimentaux

Ce chapitre décrit les résultats des mesures visant à caractériser le régime de détonation stationnaire et autonome de chacun des mélanges étudiés en fonction de la pression initiale jusqu'à l'obtention du régime hélicoïdal.

Rappelons que les mélanges étudiés sont constitués d'un combustible (H_2 , CH_4 ou C_2H_6) et d'un oxydant (O_2) en proportions stœchiométriques dilués au non par Ar ou N_2 .

Pour chaque combustible, la structure cellulaire et la célérité de détonation sont successivement présentées.

Les résultats des calculs de la zone de réaction selon le modèle ZND avec un mécanisme détaillé de cinétique chimique sont donnés au préalable pour permettre la discussion qui clôt ce chapitre.

6.1 Etude des mélanges où H_2 est le combustible

6.1.1 Lois de libération d'énergie chimique

La figure 6.1 montre, à gauche, l'évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour différentes valeurs de pression initiale. Pour les trois mélanges stœchiométriques H_2/O_2 ($H_2 + \frac{1}{2}O_2$), $H_2/O_2/Ar$ ($H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$) et H_2/Air ($H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$), les profils de températures varient avec la pression initiale : plus p_0 est faible, moins le profil de température est raide. Les longueurs d'induction¹ et de recombinaison augmentent lorsque p_0 diminue ; leurs valeurs diffèrent approximativement d'un ordre de grandeur entre $p_0=0.5\text{bar}$ et $p_0=40\text{mbar}$. Un repère vertical est placé à la distance correspondant au diamètre $d=53\text{mm}$ du tube à détonation. Il sera exposé un peu plus loin que, pour les mélanges H_2/O_2 , le régime hélicoïdal est observé autour de $p_0=40\text{mbar}$, c'est à dire lorsque d est de l'ordre de la longueur

¹ Pour évaluer la longueur d'induction, la distance entre le choc et le pied de l'augmentation de température est choisie.

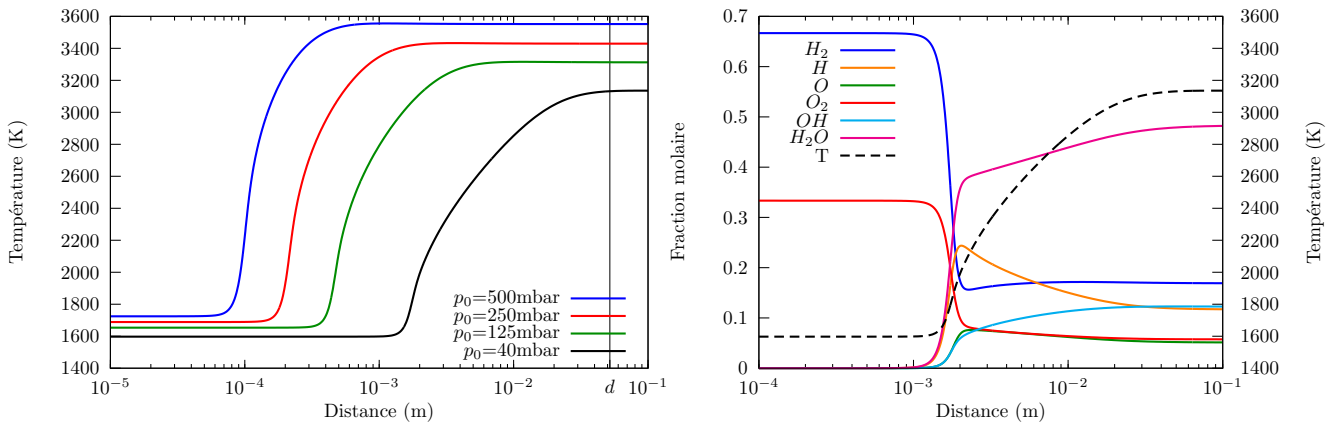
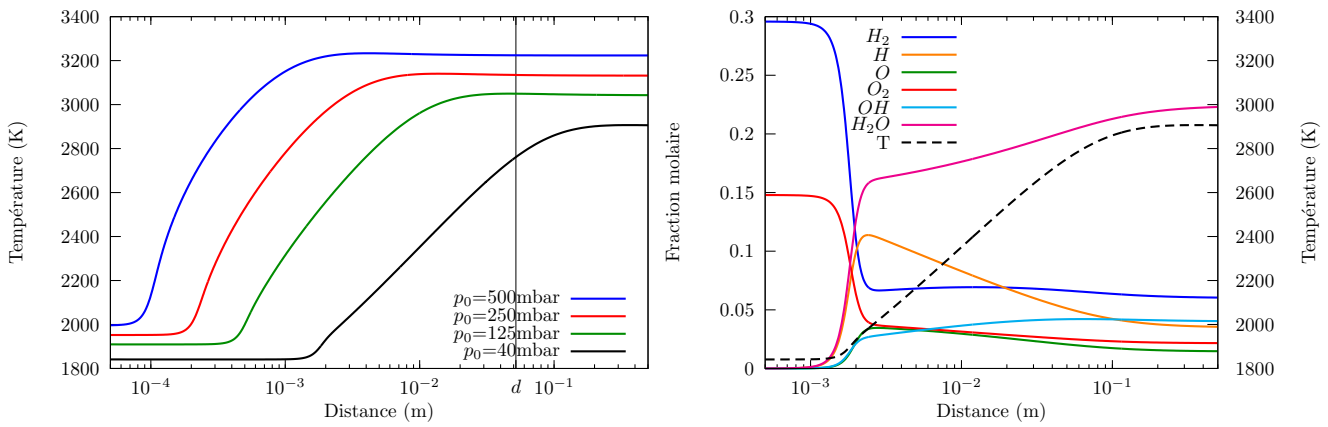
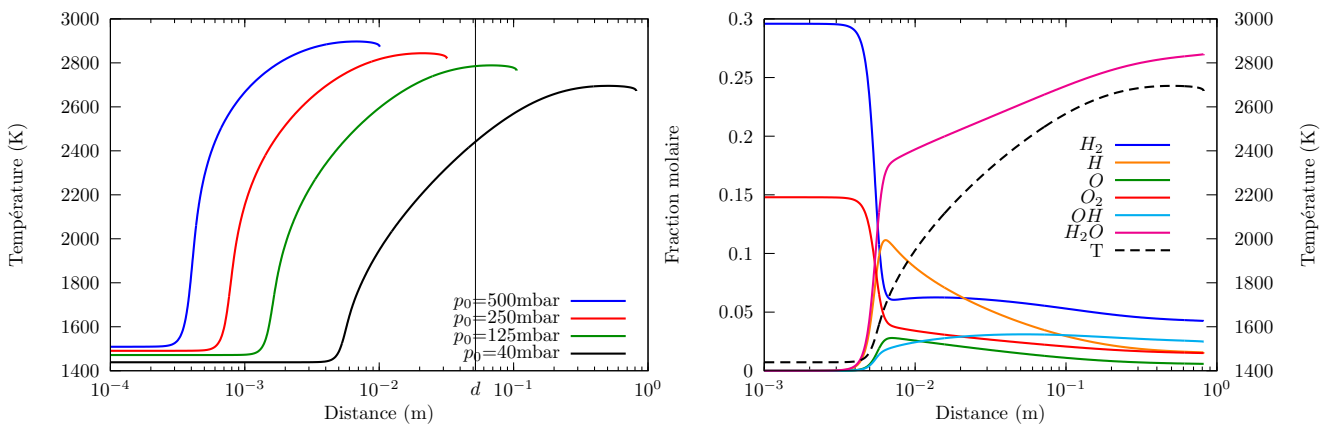
(a) $H_2 + \frac{1}{2}O_2$ (b) $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$ (c) $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$

FIG. 6.1 – Pour trois mélanges (a) $H_2 + \frac{1}{2}O_2$, (b) $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$, (c) $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$: à gauche, évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour plusieurs valeurs de pression initiale ; à droite, évolution des espèces dans la zone de réaction pour $p_0 = 40$ mbar. Les calculs sont obtenus avec le mécanisme de cinétique détaillée GRI 3.0 [Smith *et al.*, 1999].

de la zone de réaction (somme des longueurs d'induction et de recombinaison).

Par rapport au mélange stœchiométrique non dilué (fig. 6.1(a)), la dilution par l'argon (figure 6.1(b)) augmente la température dans la zone d'induction. D'autre part la loi de libération est moins brutale, le profil de température à basse pression ($p_0=40\text{mbar}$) a l'allure d'une rampe (en échelle logarithmique) : la température augmente progressivement sur deux décades de T_{ZND} à T_{CJ} .

Par rapport au mélange stœchiométrique non dilué (fig. 6.1(a)), la dilution par l'azote (figure 6.1(c)) diminue la température dans la zone d'induction ; cependant, la brutalité de la loi de libération reste similaire.

La figure 6.1 montre, à droite, l'évolution des espèces dans la zone de réaction (modèle ZND) pour la pression initiale $p_0=40\text{mbar}$, i.e. proche du régime hélicoïdal. Il apparaît que, pour les trois mélanges présentés, la cinétique se décompose globalement en deux étapes : l'une rapide correspondant à



suivie d'une seconde (lente) correspondant à



6.1.2 Cellules de détonation

Les figures 6.2, 6.3 et 6.4–6.5 montrent respectivement les cellules de détonation enregistrées sur les plaques enfumées pour les mélanges H_2/O_2 , $H_2/O_2/Ar$ et H_2/Air . Les traces obtenues avec les mélanges hydrogène/oxygène sont beaucoup plus discrètes qu'avec des mélanges contenant des espèces carbonées. Les traces sont d'autant moins marquées que p_0 est faible, c'est pourquoi les plaques de verre sont utilisées à basse pression. L'observation du régime hélicoïdal est d'autant plus difficile qu'il apparaît à basse pression.

Mélange $H_2 + \frac{1}{2}O_2$

Concernant les mélanges H_2/O_2 stœchiométriques (fig. 6.2), le motif formé par les cellules de détonation est assez régulier lorsque le régime de détonation multitêtes est observé (fig. 6.2(a) et 6.2(b)). Le régime hélicoïdal est constaté sur une plage de pression initiale en dessous de $p_0=40\text{mbar}$ (fig. 6.2(c) et 6.2(d)). Les pas d'hélice, réguliers pour chaque expérience, mesurent entre 14cm et 16cm.

Des bandes de 1.5cm de large marquent la trajectoire de l'onde transverse. Elles sont délimitées par deux traits fins ($\approx 0.1\text{mm}$) quasiment parallèles formant un angle entre 45° et 55° par rapport à l'axe du tube. La figure 6.2(d)) révèle l'existence de petites cellules de détonation à

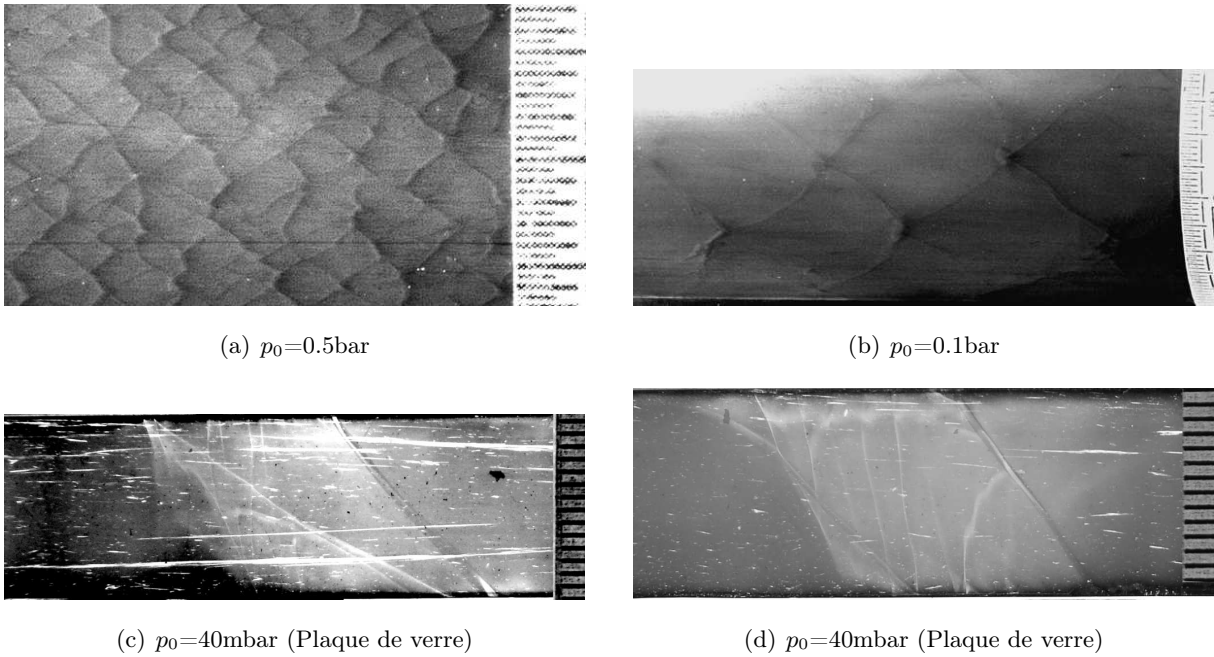


FIG. 6.2 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}O_2$.

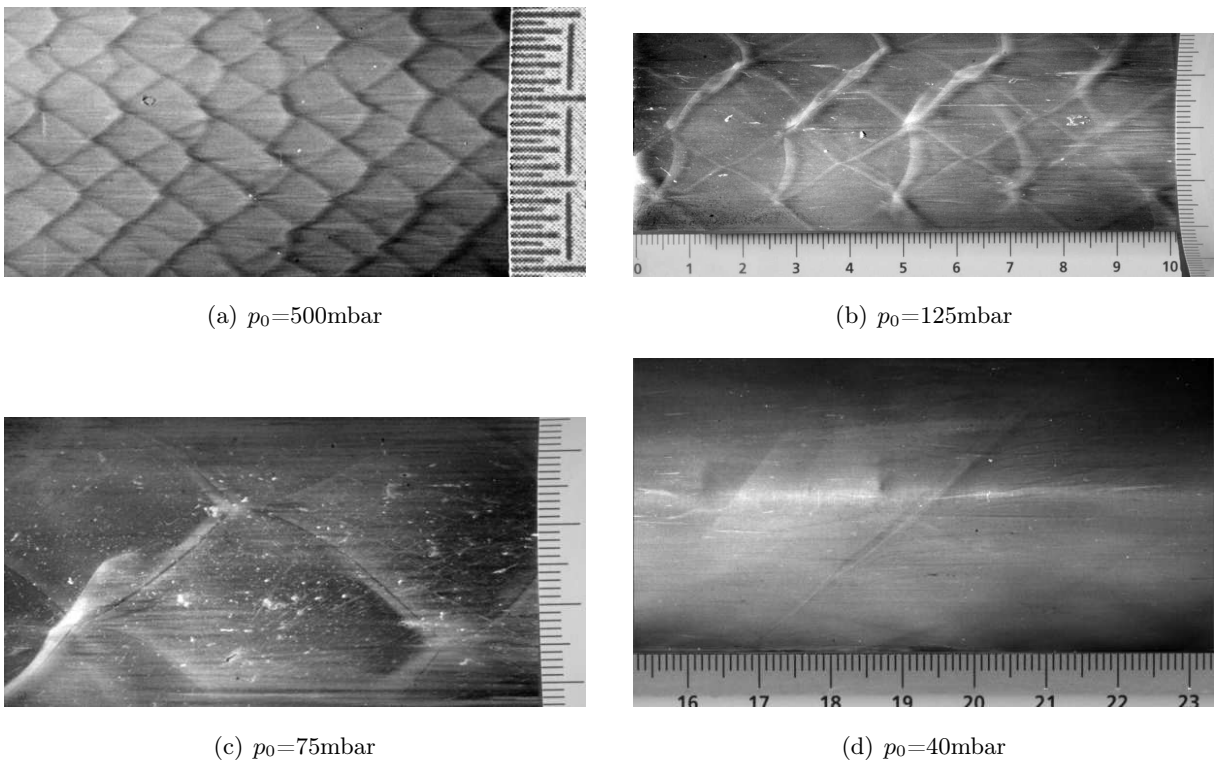


FIG. 6.3 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$.

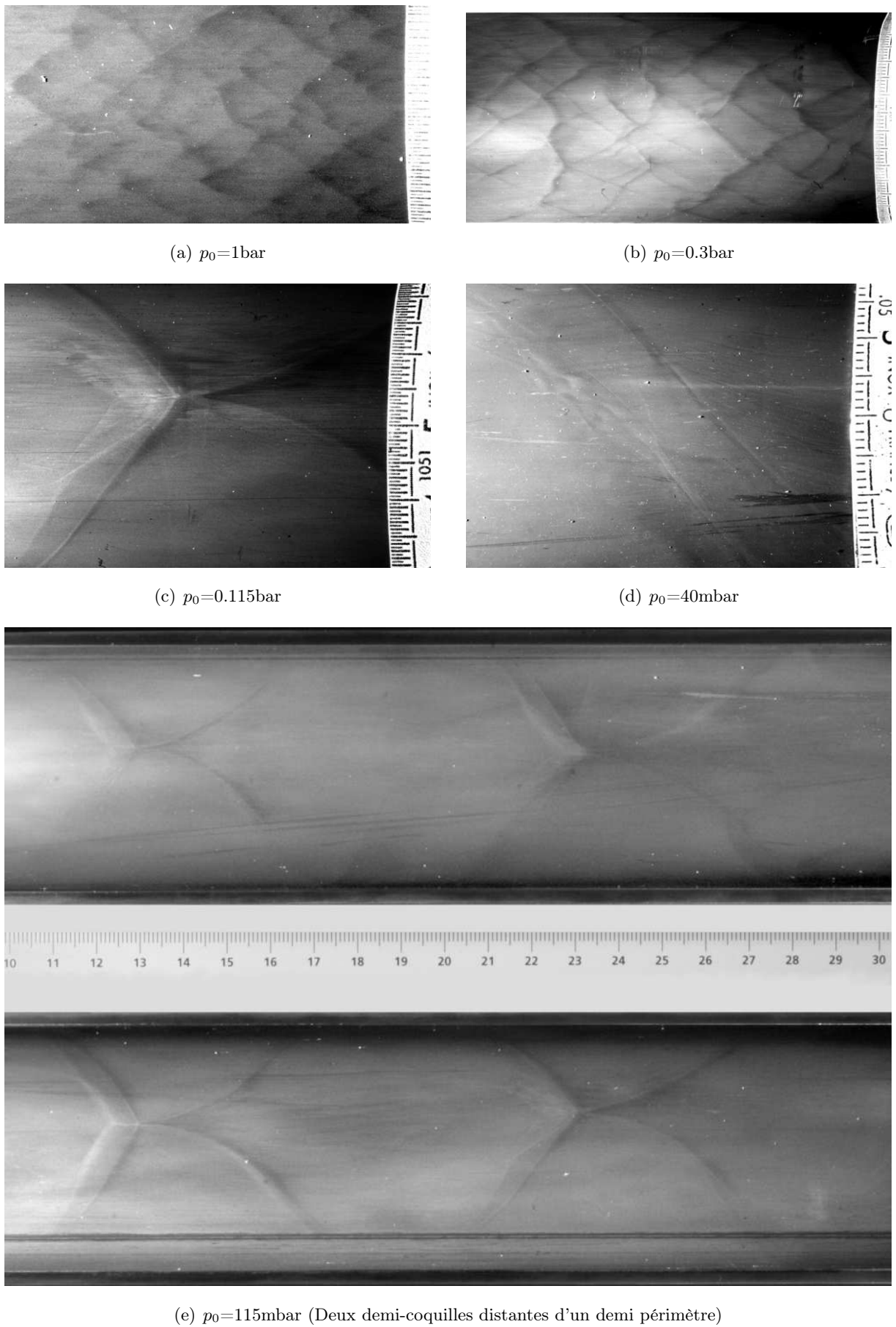
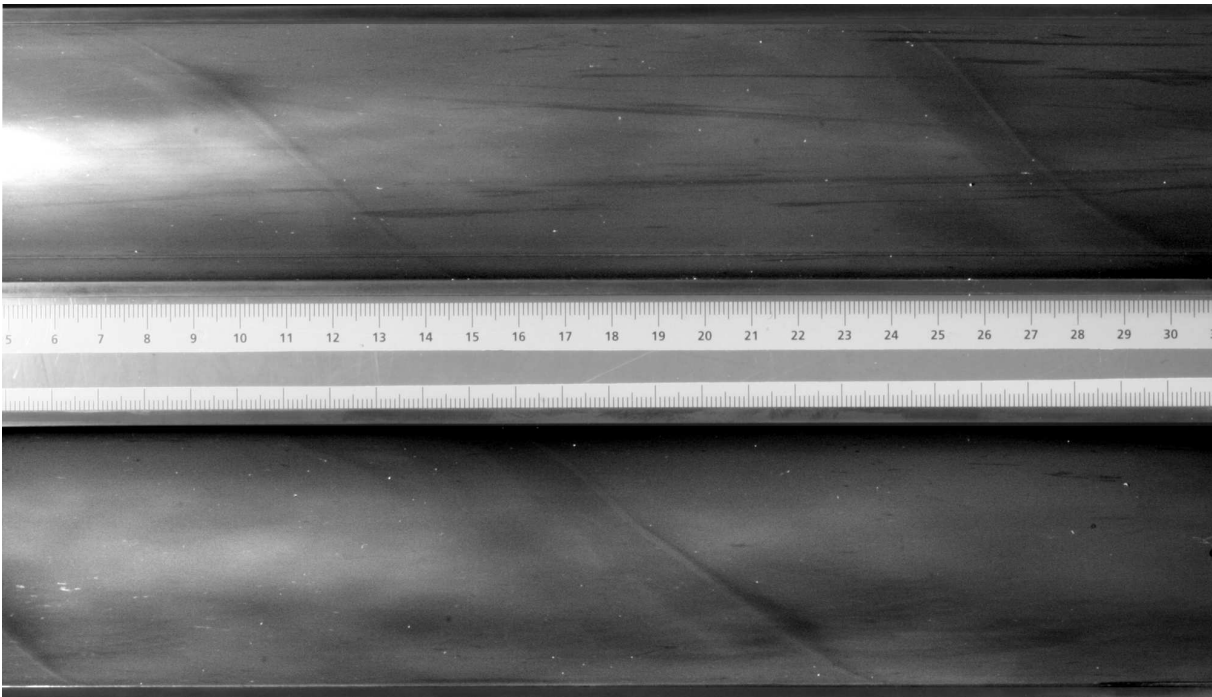
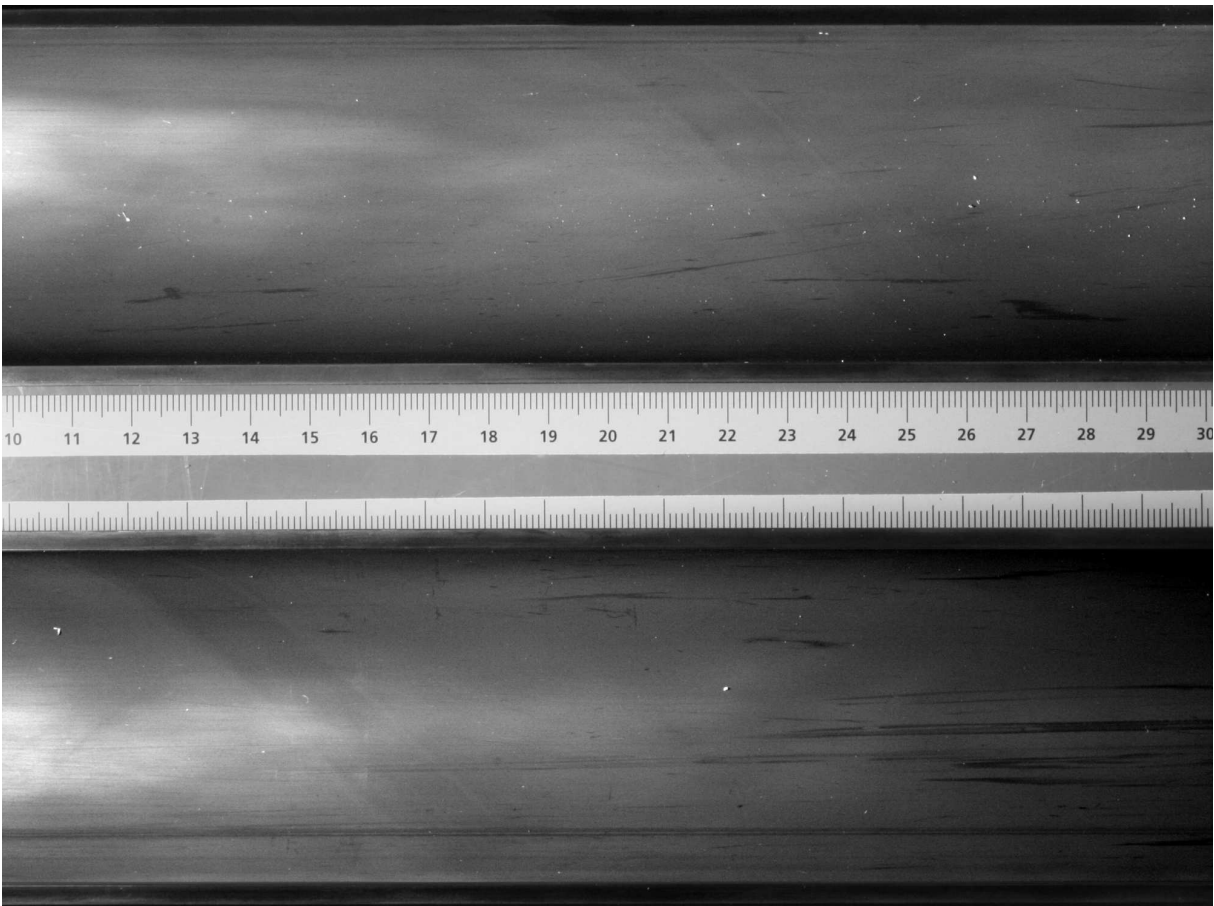


FIG. 6.4 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$.



(a) $p_0=80\text{mbar}$ (Deux demi-coquilles distantes d'un demi périmètre)



(b) $p_0=40\text{mbar}$ (Deux demi-coquilles distantes d'un demi périmètre)

FIG. 6.5 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$.

l'intérieur de la bande ayant une taille constante $\lambda=2\text{mm}$. Aucune autre structure cellulaire est décelée en dehors des bandes.

Mélange $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$

D'après les photographies des cellules de détonation des mélanges dilués avec l'argon (fig. 6.3), l'effet du gaz monoatomique améliore nettement la régularité de la structure cellulaire (l'énergie d'activation réduite est plus faible) sans toutefois arranger le contraste des traces.

Le régime hélicoïdal est obtenu lorsque $p_0 < 40\text{mbar}$. Sur la photographie de la figure 6.3, un seul trait délimitant la bande de largeur 1.5–2cm est nettement marqué. Il n'est pas possible de dire s'il existe des cellules à l'intérieur de la bande car aucun essai n'a été effectué sur plaque de verre pour ce mélange.

Mélange $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$

Les enregistrements des cellules de détonation pour les mélanges H_2/Air montrent l'irrégularité de la structure lorsque plusieurs cellules remplissent la section du tube (figures 6.4(a) et 6.4(b)). La structure cellulaire devient très régulière lorsque le régime hélicoïdal est proche (figures 6.4(c) et 6.4(e)). Le régime hélicoïdal est observé sur une grande plage de pression initiale ($40\text{mbar} < p_0 < 90\text{mbar}$, fig. 6.4(d), 6.5(a) et 6.5(b)).

La figure 6.4(c) détaille la zone au niveau de l'apex lorsque la largeur de la cellule de détonation correspond au diamètre du tube. Les traces laissées par les ondes transverses juste avant leur collision sont caractéristiques des mélanges avec l'hydrogène.

A la limite basse du régime hélicoïdal ($p_0 \approx 40\text{mbar}$, fig. 6.4(d)), les bandes de largeur constante (1.5cm) sont délimitées par deux traits fins alors qu'à la limite haute ($p_0 \approx 80\text{mbar}$) les traces sont plus irrégulières et la largeur des bandes peut varier entre 0.5cm et 1.5cm.

6.1.3 Taille de cellules et célérité de détonation pour les mélanges

$$H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + \beta.X)$$

La figure 6.6 rassemble les tailles de cellules mesurées sur les plaques enfumées pour les trois mélanges précédents plus $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + N_2)$ et compare les célérités de détonation relevées au cours des expériences avec les valeurs théoriques CJ (ligne continue).

Le déficit de célérité $\left(1 - \frac{D}{D_{CJ}}\right)$ commence à apparaître lorsque la taille de cellule avoisine $\lambda = 20\text{--}30\text{mm}$ et l'extinction intervient lorsque le déficit de célérité atteint environ 15%.

Le tableau 6.1 rassemble, pour les trois mélanges précédents, les valeurs de k et n de la loi de variation de la largeur de cellule de détonation avec la pression initiale $\lambda = kp_0^n$ et le pas des traces de l'onde hélicoïdale. La pression, la taille de cellule extrapolée selon la loi $\lambda = kp_0^n$ et le rapport des célérités $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.

Mélange	$\lambda = kp_0^n$	P (cm)	limite p_0 basse			limite p_0 haute		
			p_0 (bar)	λ (mm)	$\frac{D}{D_{CJ}}$	p_0 (bar)	λ (mm)	$\frac{D}{D_{CJ}}$
$H_2 + \frac{1}{2}O_2$	$1.1 p_0^{-1.33}$	14–16	0.025	165	0.79	0.040	82.5	0.92
$H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + N_2)$	$1.6 p_0^{-1.33}$	16–16.5	0.020	290	0.83	0.040	116	0.95
$H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76N_2)$	$6.0 p_0^{-1.2}$	16	0.040	285	0.85	0.090	108	0.93
$H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + 3.76Ar)$	$1.3 p_0^{-1.33}$	16	0.040	94	0.91	0.040	94	0.95

TAB. 6.1 – Tableau récapitulatif des valeurs de k et n de la loi $\lambda = kp_0^n$ et des pas des traces de l'onde hélicoïdale pour les mélanges où H_2 est le combustible. p_0 , $\lambda = kp_0^n$ et $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.

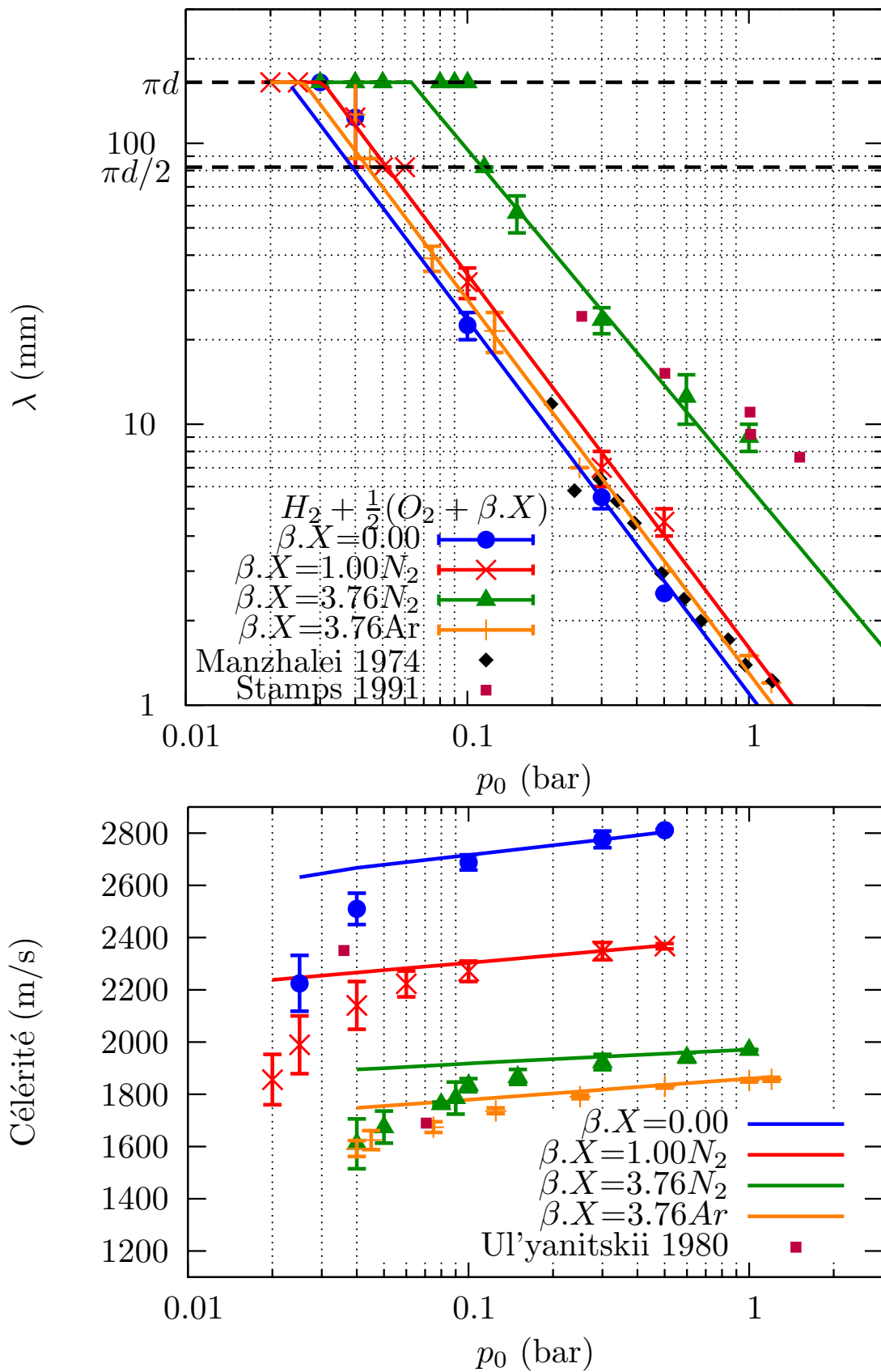


FIG. 6.6 – Tailles de cellules et célérités de détonation pour les mélanges $H_2 + \frac{1}{2}(O_2 + \beta N_2)$ en fonction de la pression initiale p_0 . Les données collectées dans la littérature se rapportent aux mélanges H_2/O_2 et H_2/Air .

6.2 Etude des mélanges où CH_4 est le combustible

6.2.1 Lois de libération d'énergie chimique

La figure 6.7 présente successivement les profils de température et/ou des fractions massiques des espèces dans la zone de réaction selon le modèle ZND pour les mélanges $CH_4 + 2O_2$, $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$ et $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$ pour différentes valeurs de la pression initiale.

Ces profils indiquent que la libération d'énergie s'effectue en deux étapes. La première étape, toujours brutale, correspond à la réaction (6.3) (rapide)



alors que la seconde étape est associée à la réaction (6.4) (lente) d'oxydation du monoxyde de carbone.



Pour les mélanges méthane/oxygène, les calculs font apparaître sur la figure 6.7(a) qu'à $p_0 > 70$ mbar, la seconde étape est exothermique alors qu'elle devient endothermique à plus basse pression ($p_0 < 70$ mbar). Un point sonique arrête donc les calculs avant que l'équilibre (point CJ) ne soit atteint ; l'énergie associée à la seconde étape est proportionnellement faible par rapport à la première étape, ce qui confère une vitesse de détonation pathologique supérieure à D_{CJ} mais proche de celle-ci.

Cette pathologie est peu remarquable lorsque CH_4 est mélangé avec l'air (fig. 6.7(b)) et n'existe pas lorsque le mélange CH_4/O_2 est fortement dilué par Ar (fig. 6.7(c)). Dans ce dernier cas, le profil d'évolution de la température laisse apparaître une cassure entre les deux étapes d'autant plus marquée que la pression initiale est basse. L'énergie chimique libérée par la seconde étape peut correspondre à la moitié de l'énergie chimique totale.

6.2.2 Cellules de détonation

Les figures 6.8, 6.9 et 6.10 présentent respectivement les photographies des cellules de détonation obtenues par la méthode des traces pour les trois mélanges étudiés précédemment. Des résultats complémentaires concernant les mélanges à plus faible dilution en Ar sont donnés sur la figure 6.11 ($CH_4 + 2(O_2 + X.Ar)$, $X \in \{1, 2, 5\}$).

Mélange $CH_4 + 2O_2$

L'irrégularité des cellules de détonation est très caractéristique des mélanges méthane/oxygène (figures 6.8(a) et 6.8(b)).

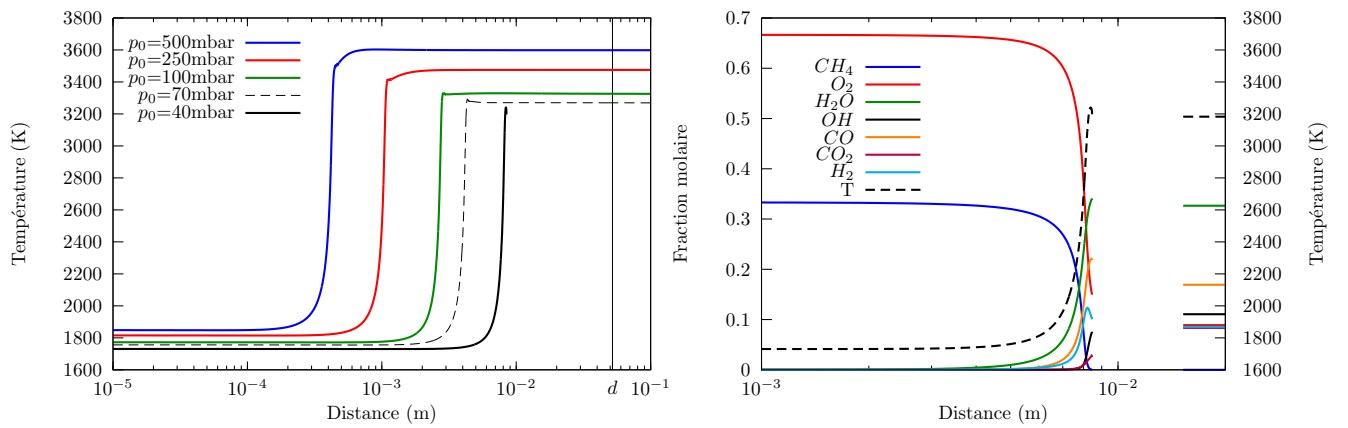
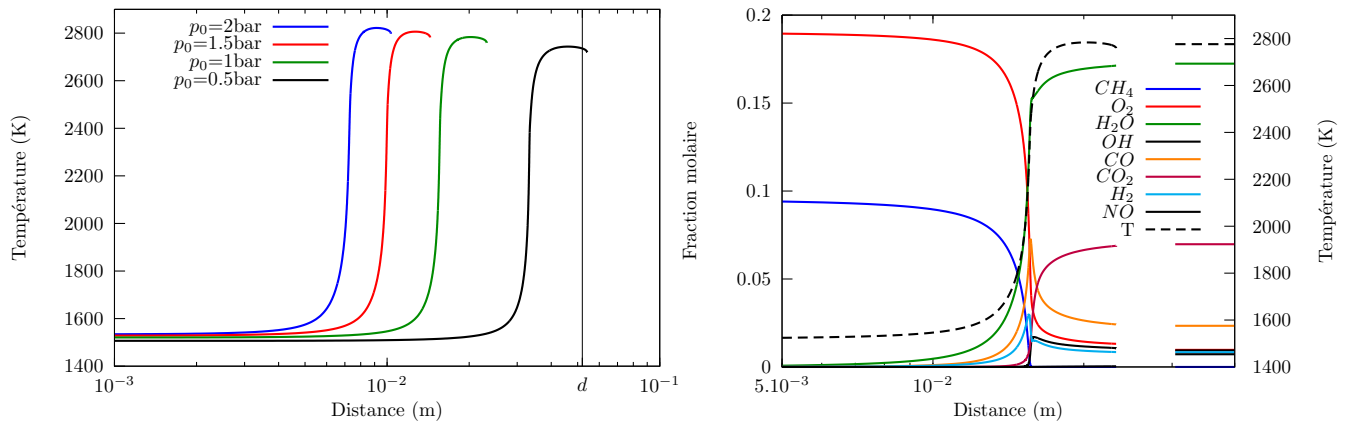
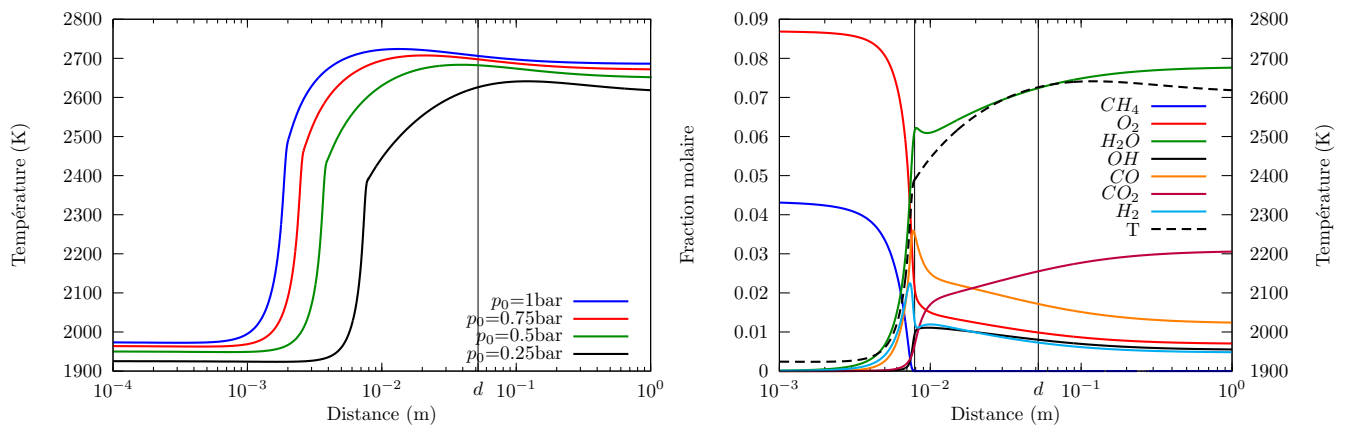
(a) $CH_4 + 2O_2$; à droite, $p_0 = 40$ mbar(b) $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$; à droite, $p_0 = 1$ bar(c) $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$; à droite, $p_0 = 0.25$ bar

FIG. 6.7 – Pour trois mélanges (a) $CH_4 + 2O_2$, (b) $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$, (c) $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$: à gauche, évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour plusieurs valeurs de la pression initiale ; à droite, évolution des espèces dans la zone de réaction. Les calculs sont obtenus avec le mécanisme de cinétique détaillée GRI 3.0 [Smith *et al.*, 1999].

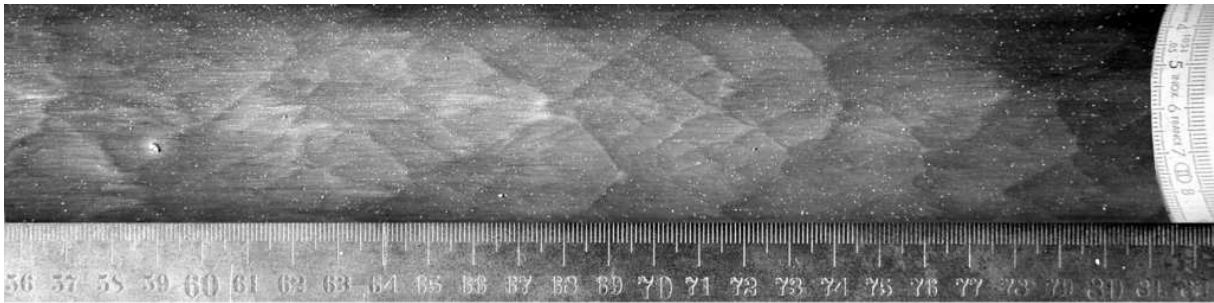
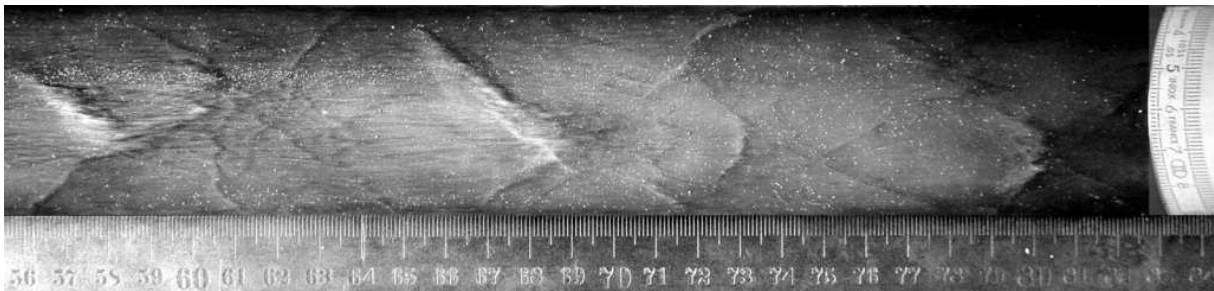
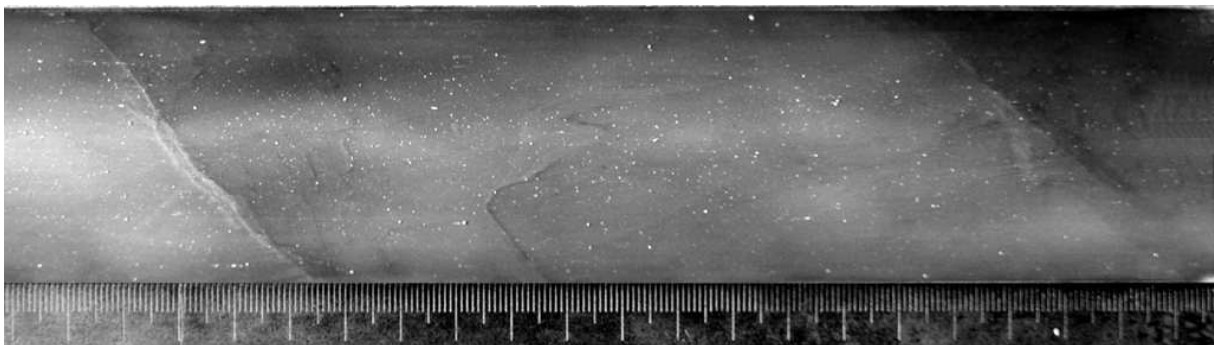
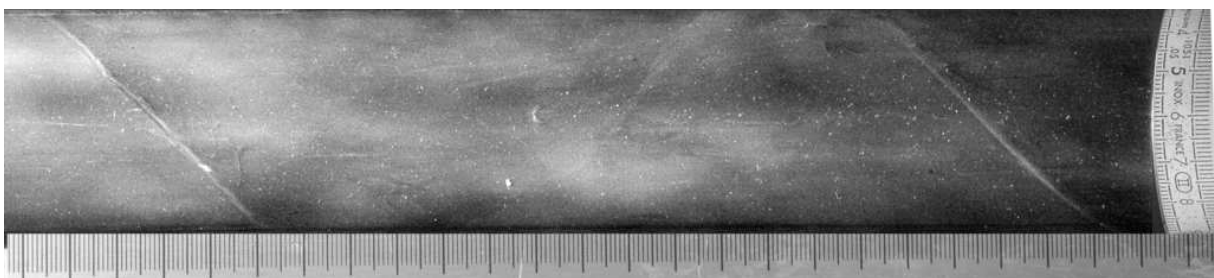
(a) $p_0=200\text{mbar}$ (b) $p_0=100\text{mbar}$ (c) $p_0=50\text{mbar}$ (d) $p_0=35\text{mbar}$

FIG. 6.8 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$.

Le régime hélicoïdal est observé sur une faible plage de pression initiale ($40\text{mbar} < p_0 < 50\text{mbar}$). Le pas et l'angle d'hélice mesurent respectivement 16cm et 55° à la limite haute du régime hélicoïdal alors qu'à la limite basse (proche de l'extinction) ils mesurent jusqu'à 18cm et 45° . Les bandes sont d'autant plus régulières et fines que la pression est basse.

Une sous-structure est perceptible sur le premier tiers de l'hélice ; contre la bande, les cellules sont petites et orientées dans la même direction que celle-ci puis s'agrandissent et s'orientent selon l'axe du tube à mesure qu'elles s'en éloignent.

Mélange $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$

Le régime hélicoïdal est observé sur une très grande plage de pression initiale pour le mélange méthane/air : $0.6\text{bar} < p_0 < 1.7\text{bar}$. L'angle formé par l'axe du tube et les traces correspondant à la trajectoire du point triple est très proche de 45° .

Sur la figure 6.9(a), l'onde de détonation n'est pas hélicoïdale ; deux ondes transverses se propagent dans la section du tube même si l'une est plus faible que l'autre (la sous-structure n'est pas visible pour l'onde transverse faible). A 1.2bar (fig. 6.9(b)), l'onde transverse faible subsiste encore mais ne déforme quasiment plus la trajectoire de l'onde ; à pression initiale plus basse, elle va disparaître.

Au milieu de la plage d'observation du régime hélicoïdal (i.e. de 0.65bar à la pression atmosphérique), le pas d'hélice et la bande sont relativement réguliers et mesurent respectivement 16cm et 0.5–1cm (cf. fig. 6.9(c)).

A la limite basse du régime hélicoïdal, l'hélice est moins régulière (fig. 6.9(d) et 6.9(e)).

Mélange $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$

La plage de pression initiale où le régime hélicoïdal de détonation est observé est étendue : $0.2\text{bar} < p_0 < 0.7\text{bar}$. La figure 6.10 montre la variation de la structure cellulaire en fonction de la pression initiale. Dans tous les cas, une sous-structure cellulaire est visible dans le premier tiers de la cellule. La figure 6.10(a) correspond au cas où la détonation est encore multi-têtes.

La figure 6.10(b) montre les traces du régime hélicoïdal à la limite haute : le pas mesure 14.5cm et la bande est délimitée par un trait fin régulier et bien marqué d'une part (trajectoire du point triple) et par un trait moins marqué et irrégulier d'autre part.

Autour de $p_0=0.3\text{bar}$, le pas d'hélice et la largeur de bande sont réguliers et mesurent respectivement 14.5–15cm et 2cm (fig. 6.10(c)).

Les enregistrements sur plaque de verre révèlent l'existence de cellules de détonation dans la bande (fig. 6.10(e), $\lambda \approx 2\text{mm}$). L'état de surface des coquilles ne suffit pas à les rendre visibles.

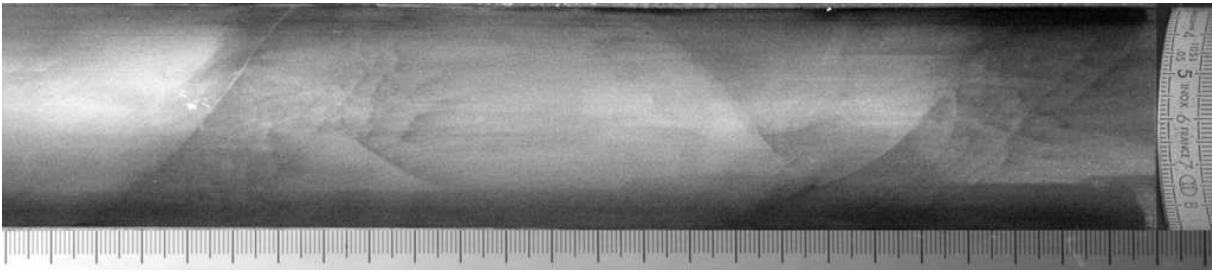
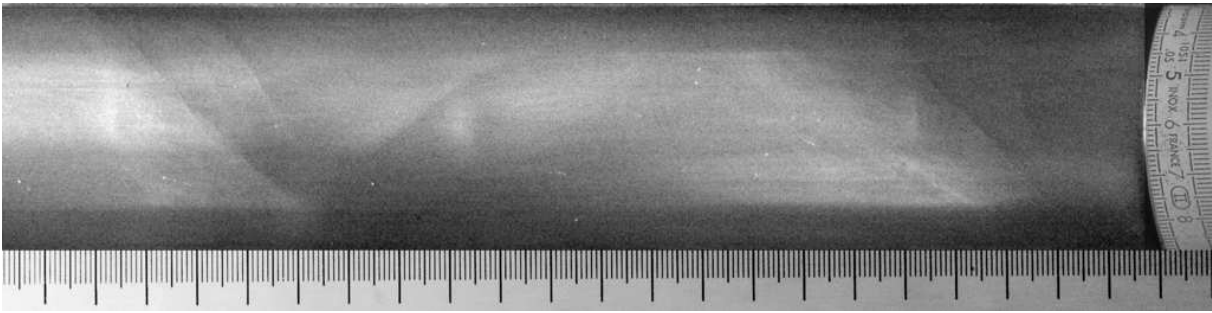
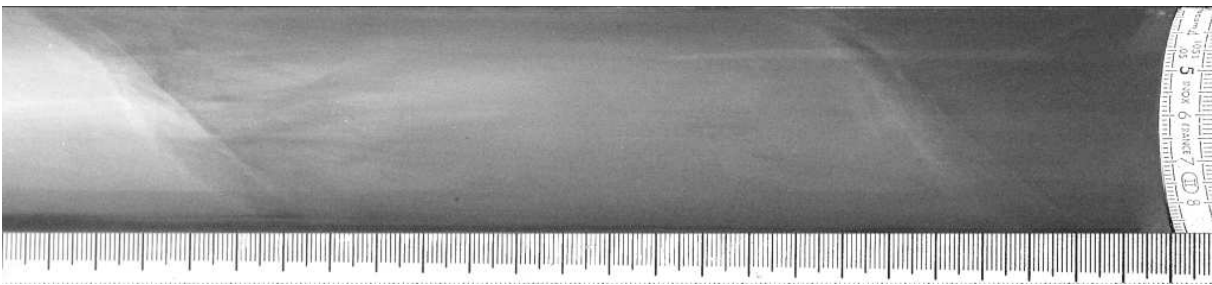
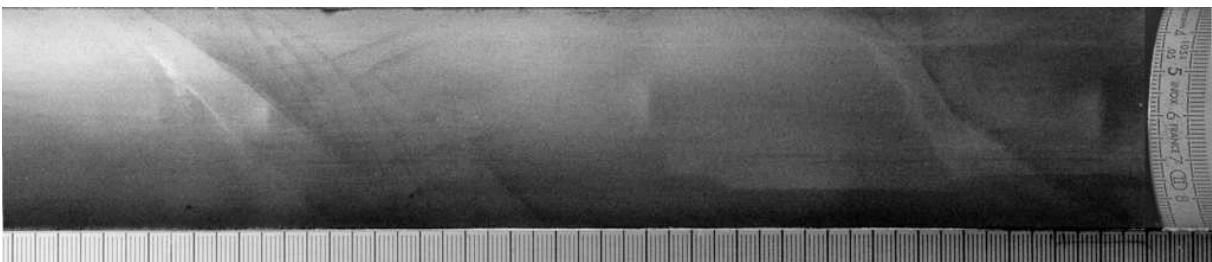
(a) $p_0=1.8\text{bar}$ (b) $p_0=1.2\text{bar}$ (c) $p_0=0.65\text{bar}$ (d) $p_0=0.62\text{bar}$ (e) $p_0=0.4\text{bar}$

FIG. 6.9 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$.

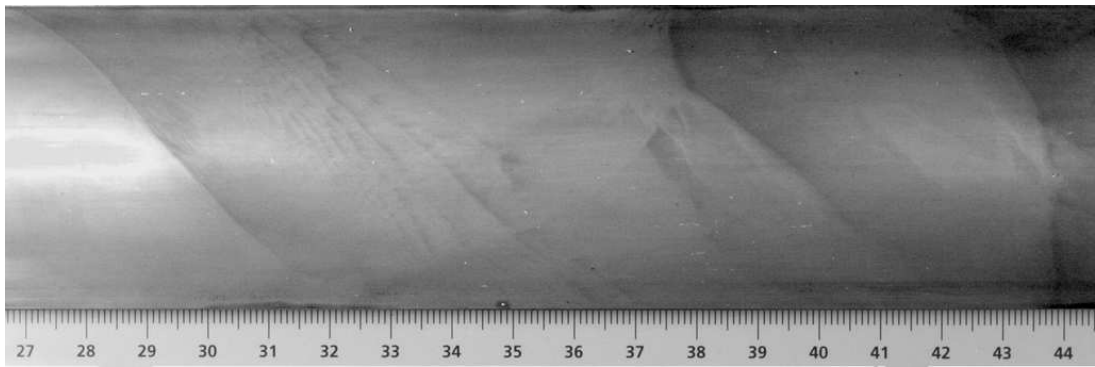
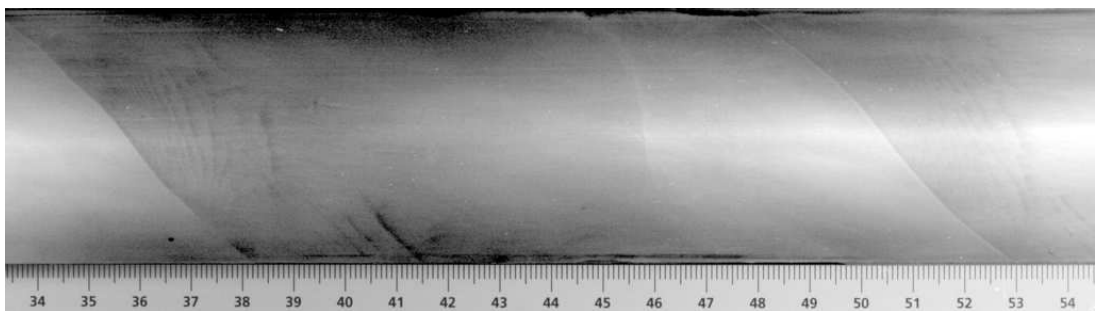
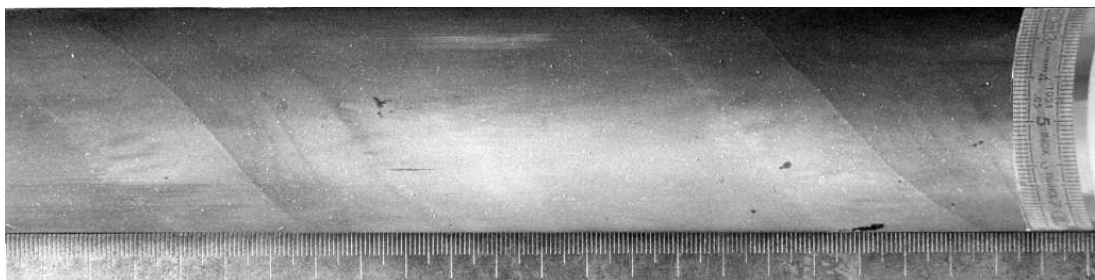
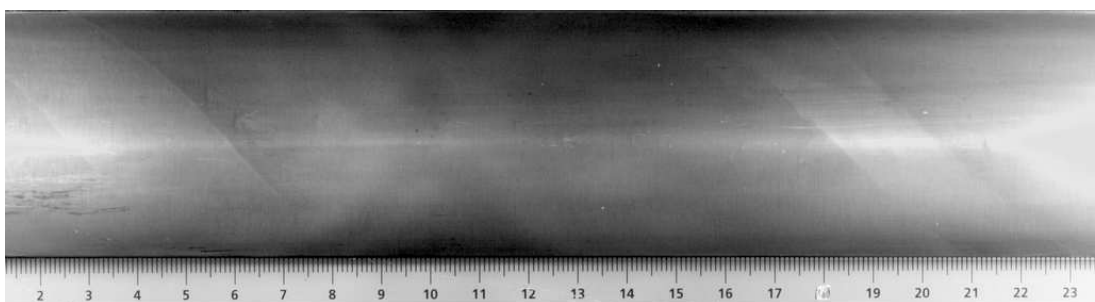
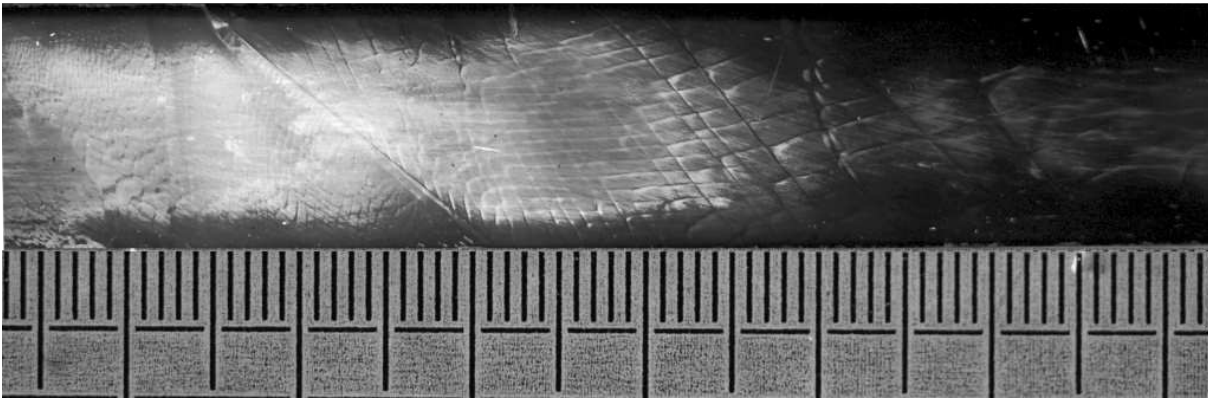
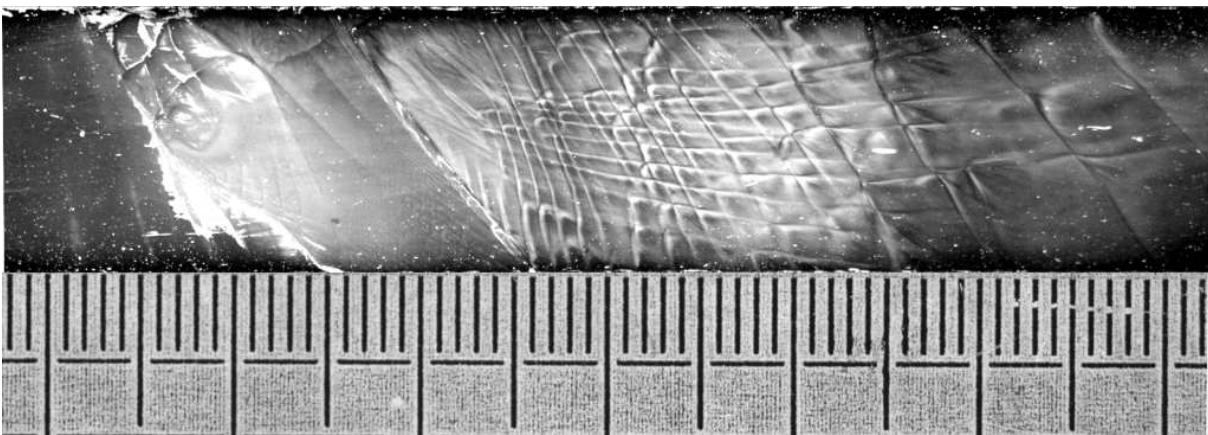
(a) $p_0=1\text{bar}$ (b) $p_0=0.5\text{bar}$ (c) $p_0=0.29\text{bar}$ (d) $p_0=0.24\text{bar}$ (sur plaque de verre)(e) $p_0=0.2\text{bar}$

FIG. 6.10 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$.



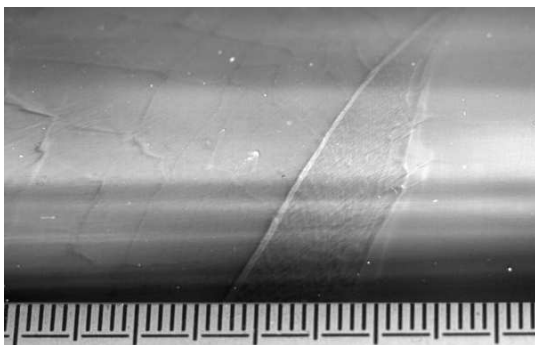
(a) $p_0=0.18\text{bar}$ (sur plaque de verre - $X=5$)



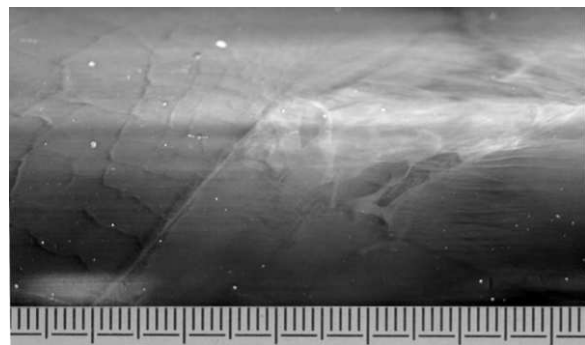
(b) $p_0=90\text{mbar}$ (sur plaque de verre - $X=2$)



(c) $p_0=70\text{mbar}$ (sur plaque de verre - $X=1$)



(d) $p_0=100\text{mbar}$ ($X=1$)



(e) $p_0=100\text{mbar}$ ($X=1$)

FIG. 6.11 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $CH_4 + 2(O_2 + X.Ar)$.

Enfin, à la limite basse du régime hélicoïdal, la largeur de la bande fluctue de nouveau : on mesure des bandes entre 1.5cm et 2.5cm de large pour un pas d'hélice toujours égal à 14.5cm.

Mélanges $CH_4 + 2(O_2 + X.Ar)$, $X \in \{1, 2, 5\}$

$X=10$ constitue un cas où le mélange est fortement dilué par l'argon. La figure 6.11 présente les traces de détonation en régime hélicoïdal pour des dilutions modérées.

Lorsque la dilution en argon est faible ($X \in \{1, 2\}$), la bande est très instable et les variations de la largeur de celle-ci sont visibles sur les figures 6.11(b), 6.11(d) et 6.11(e). L'argon joue un rôle important sur la régularité de la structure.

La dilution en argon déplace le domaine de pression initiale sur lequel le régime hélicoïdal est observé : plus la dilution est importante, plus la pression initiale pour obtenir le régime hélicoïdal est élevée car la longueur d'induction augmente. Par conséquent, il semble que la taille de la sous-structure diminue comparativement à l'onde hélicoïdale (dont la taille est figée par les caractéristiques du tube) d'autant plus que le mélange est dilué.

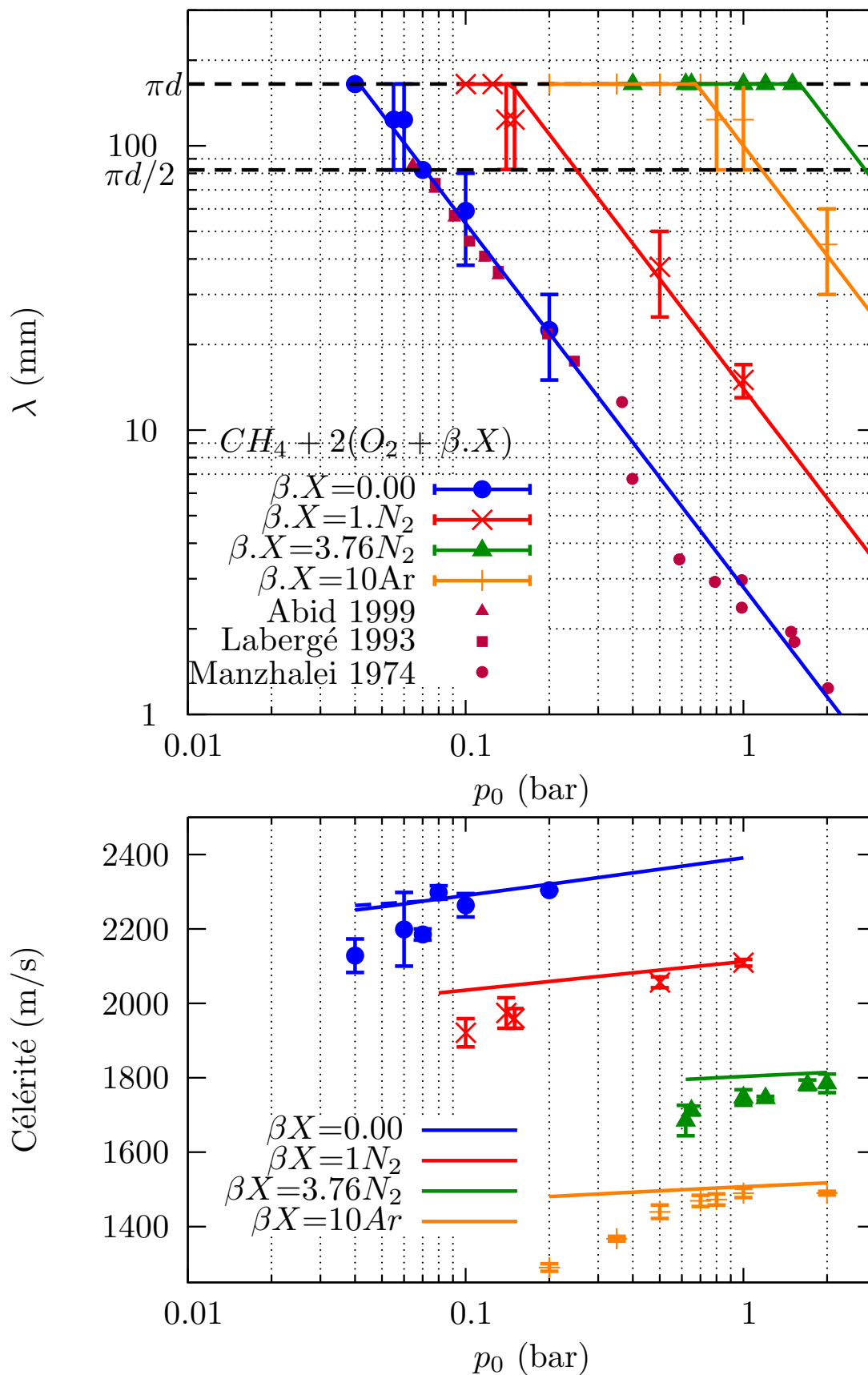
Des cellules de détonation de taille sub-millimétrique sont décelables dans chaque bande. Pour le mélange $CH_4 + 2(O_2 + 5Ar)$ à $p_0=180\text{mbar}$, une structure particulière se dessine dans la bande en haut à gauche de la figure 6.11(a) : une instabilité dans la bande induit des variations de la taille des petites cellules de détonation. Cette constatation est remarquée sur plusieurs expériences. Il serait étonnant de trouver cette même structure beaucoup plus grande pour les mélanges précédents alors que la pression initiale est plus élevée (même si la dilution est plus importante $X=10$). Des investigations complémentaires doivent être réalisées.

6.2.3 Taille de cellules de détonation pour les mélanges avec CH_4

La figure 6.12 rassemble les tailles de cellules mesurées dans les mélanges où CH_4 est le combustible. Les barres d'incertitude (erreur de mesure et dispersion) sont faibles pour les mélanges fortement dilués avec l'argon contrairement au mélange stœchiométrique méthane/oxygène pur où la dispersion peut être importante.

Les célérités de détonation relevées au cours des expériences sont comparées avec les valeurs théoriques CJ (ligne continue). Pour $p_0 < 70\text{mbar}$, la vitesse de détonation pathologique, légèrement supérieure à D_{CJ} , est représentée en pointillé.

Le déficit de célérité $\left(1 - \frac{D}{D_{CJ}}\right)$ commence à apparaître beaucoup plus tardivement qu'avec les mélanges contenant H_2 : 1 à 2% de déficit est mesuré alors que la taille de cellule avoisine le diamètre du tube. L'extinction est observée lorsque le déficit de célérité atteint environ 7% (soit deux fois moins qu'avec les mélanges contenant H_2) sauf avec l'argon. Il semble donc que les pertes agissent très sévèrement en diminuant le potentiel énergétique des mélanges où la

FIG. 6.12 – Taille des cellules de détonation pour les mélanges contenant CH_4 .

libération d'énergie est brutale et où la part de l'énergie chimique totale accordée à la première étape de libération d'énergie est importante. Le fait que les calculs montrent que la part d'énergie chimique attribuée à la première étape par rapport au potentiel total est plus faible pour les mélanges fortement dilués avec l'argon corrobore le déficit de célérité plus important mesuré dans ces mélanges.

Le tableau 6.2 rassemble, pour les trois mélanges précédents, les valeurs de k et n de la loi de variation de la largeur de cellule de détonation avec la pression initiale $\lambda = kp_0^n$ et le pas des traces de l'onde hélicoïdale. La pression, la taille de cellule (extrapolée selon la loi $\lambda = kp_0^n$) et le rapport des célérités $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.

Mélange	$\lambda = kp_0^n$	P (cm)	limite p_0 basse			limite p_0 haute		
			p_0 (bar)	λ (mm)	$\frac{D}{D_{CJ}}$	p_0 (bar)	λ (mm)	$\frac{D}{D_{CJ}}$
$CH_4 + 2O_2$	$2.8 p_0^{-1.28}$	16–(18)	0.04	172	0.93	0.045	148	0.98
$CH_4 + 2(O_2 + N_2)$	$14 p_0^{-1.28}$	16–16.5	0.09	354	0.93	0.15	158	0.96
$CH_4 + 2(O_2 + 3.76N_2)$	$300 p_0^{-1.28}$	15–16.5	0.6	576	0.93	1.7	152	0.98
$CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$	$100 p_0^{-1.28}$	14–15	0.2	784	0.87	0.7	158	0.98

TAB. 6.2 – Tableau récapitulatif de k et n de la loi $\lambda = kp_0^n$ et pas des traces de l'onde hélicoïdale pour les mélanges où CH_4 est le combustible. p_0 , $\lambda = kp_0^n$ et $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.

Les résultats montrent que la plage de pression initiale où le régime de détonation est observé est d'autant plus grande que le mélange est dilué : selon la loi $\lambda = kp_0^n$ correspondant au mélange $CH_4 + 2(O_2 + 10Ar)$, la taille de la cellule de détonation extrapolée à la limite basse du régime hélicoïdal (proche de l'extinction) est cinq fois plus grande que celle obtenue à la limite haute (proche du régime multitétes).

6.3 Etude des mélanges où C_2H_6 est le combustible

6.3.1 Lois de libération d'énergie chimique

La figure 6.13 regroupe les profils de température et des fractions massiques des espèces dans la zone de réaction (modèle ZND) des mélanges $C_2H_6 + 3.5O_2$, $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$, $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$ et $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$ pour différentes valeurs de pression initiale.

La loi de libération de l'énergie chimique fait apparaître deux étapes globales : la première étape rapide correspond à la réaction (6.5) de formation de CO,



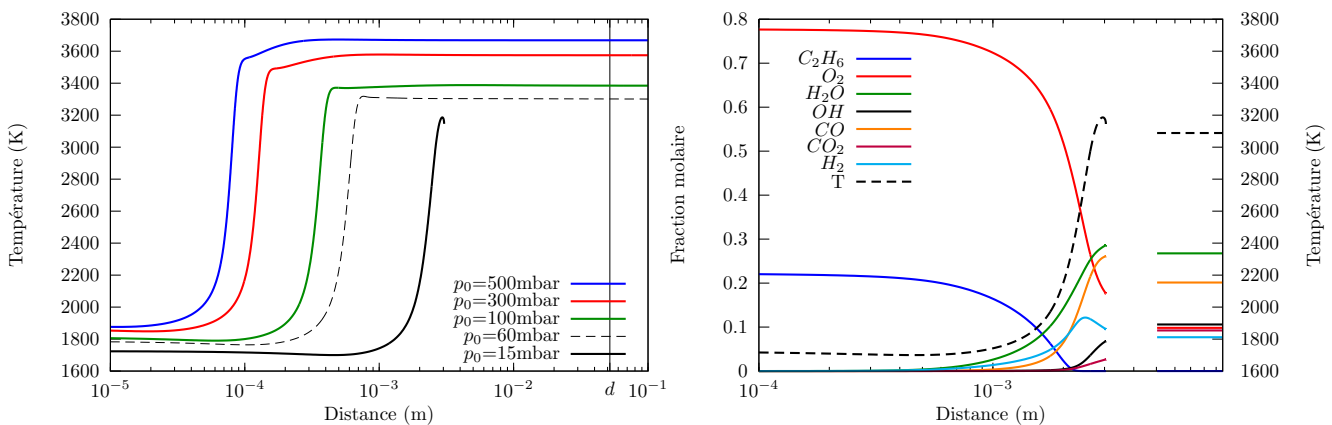
suivie de la seconde étape (lente) d'oxydation du monoxyde de carbone.



Le schéma cinétique est donc globalement similaire à celui du méthane (fig. 6.7) ; la première réaction est toutefois moins brutale avec l'éthane.

En comparant les figures 6.7(b) et 6.13(d), la température dans la zone induction est plus faible pour les mélanges éthane/air que pour les mélanges méthane/air. La seconde étape est nettement plus marquée dans le cas des mélanges éthane/oxygène/azote et la cassure apparaissant à une température plus faible laisse penser qu'une part plus importante d'énergie est attribuée à la seconde étape réactionnelle (à énergie totale constante).

Enfin, les profils de température des mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$ (fig. 6.13(b)) sont semblables à ceux des mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$ (fig. 6.13(c)) en ce qui concerne l'allure, la répartition d'énergie entre les deux étapes réactionnelles et leur temps caractéristique. Les constatations expérimentales indiquent d'ailleurs que la taille des cellules de détonation et la plage d'observation du régime hélicoïdal sont très similaires pour ces deux mélanges.



(a) $C_2H_6 + 3.5O_2$; à droite, $p_0 = 15$ mbar

FIG. 6.13 – Légende page suivante.

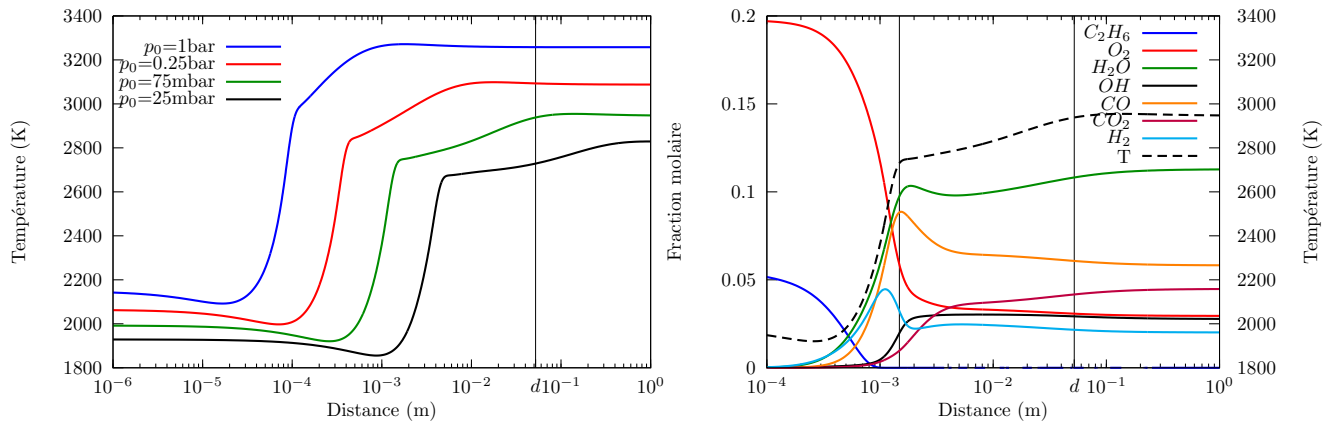
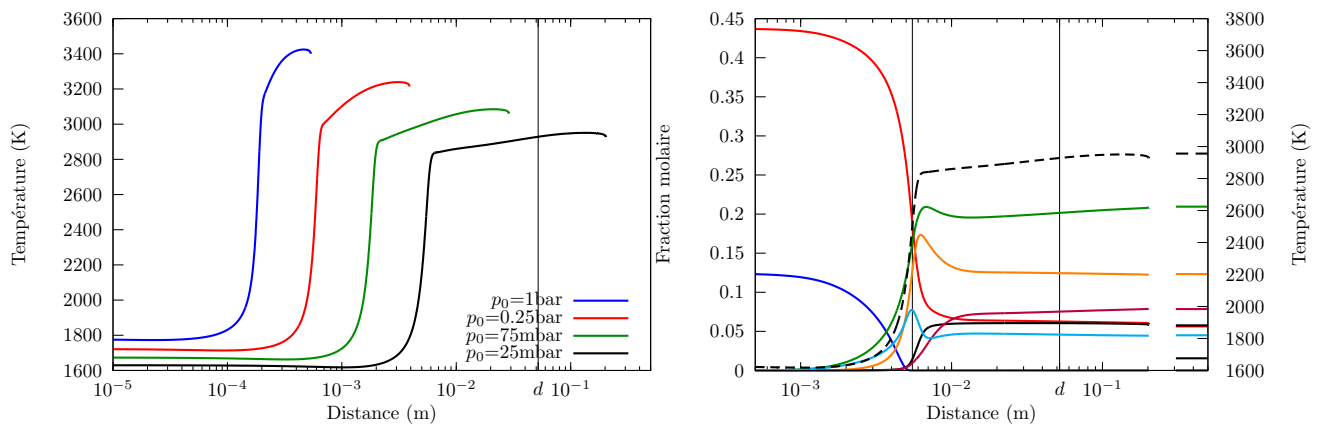
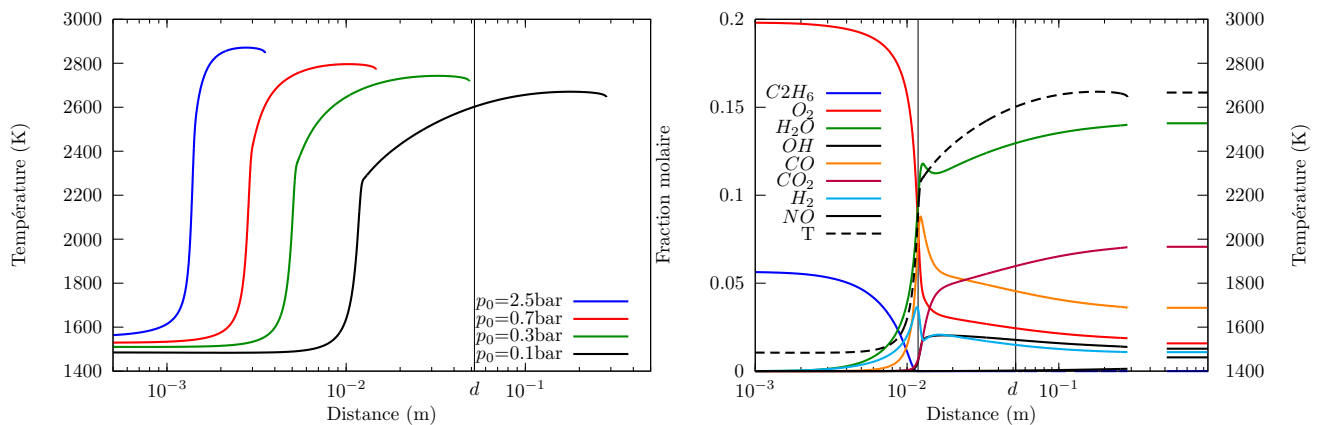
(b) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$; à droite, $p_0=75\text{mbar}$ (c) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$; à droite, $p_0=25\text{mbar}$ (d) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$; à droite, $p_0=100\text{mbar}$

FIG. 6.13 – Pour quatre mélanges (a) $C_2H_6 + 3.5O_2$, (b) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$, (b) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$, (d) $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$: à gauche, évolution de la température dans la zone de réaction (modèle ZND) pour plusieurs valeurs de pression initiale ; à droite, évolution des espèces dans la zone de réaction. Les calculs sont obtenus avec le mécanisme de cinétique détaillée GRI 3.0 [Smith *et al.*, 1999].

6.3.2 Cellules de détonation

Les figures 6.14, 6.15, 6.16 et 6.17 présentent les enregistrements des cellules de détonation des quatre mélanges dont les lois de libération viennent d'être commentées.

Mélange $C_2H_6 + 3.5O_2$

Les cellules de détonation exposées sur la figure 6.14 indiquent une structure cellulaire peu régulière, une sous-structure est perceptible dans la première moitié des cellules de détonation.

Le régime hélicoïdal est difficilement observable car il se situe autour de $p_0=15\text{mbar}$.

L'onde transverse trace, dans ses parties régulières, une bande de largeur 2–3mm dans laquelle des cellules de petites tailles sont visibles (figures 6.14(c) et 6.14(d)).

Mélange $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$

Même si la régularité des cellules de détonation est bonne en régime multitêtes, les figures 6.15(a) et 6.15(b) montrent que la qualité des enregistrements est faible.

La structure cellulaire est très perturbée lorsque le régime hélicoïdal est proche (fig. 6.15(c)).

Sur l'échelle logarithmique de pression, le régime hélicoïdal est obtenu sur une large plage : $25\text{mbar} < p_0 < 60\text{mbar}$. Les traces laissées par l'onde hélicoïdale sont très caractéristiques ; elles sont photographiées pour deux valeurs de pression initiale différentes sur les figures 6.15(d) et 6.15(e). Les bandes relativement régulières sont très larges (1–2cm) dans lesquelles des cellules de détonation sont généralement visibles ($\lambda=1\text{mm}$ sur la figure 6.15(e)).

La largeur des bandes diminue rapidement lorsque la pression initiale s'approche de la pression critique où l'extinction est constatée. Les deux photographies de la figure 6.15(f) (issues de la même expérience) montrent les variations rapides de l'allure des traces laissées par l'onde transverse à la limite basse du régime hélicoïdal.

Mélange $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$

La régularité de la structure est plutôt bonne en régime multitêtes (fig. 6.16(a)) mais se dégrade à l'approche du régime hélicoïdal (fig. 6.16(c)).

Sur l'échelle logarithmique de pression, le régime hélicoïdal est observé sur une plage étendue : $25\text{mbar} < p_0 < 50\text{mbar}$. Lorsqu'il est établi, la régularité de la structure est bonne (fig. 6.16(d)) : le pas et l'angle d'hélice mesurent respectivement 16cm et 45° ; la bande a une largeur assez constante (4–8mm).

Des cellules de détonation sont présentes dans la bande, elles sont orientés selon la trajectoire

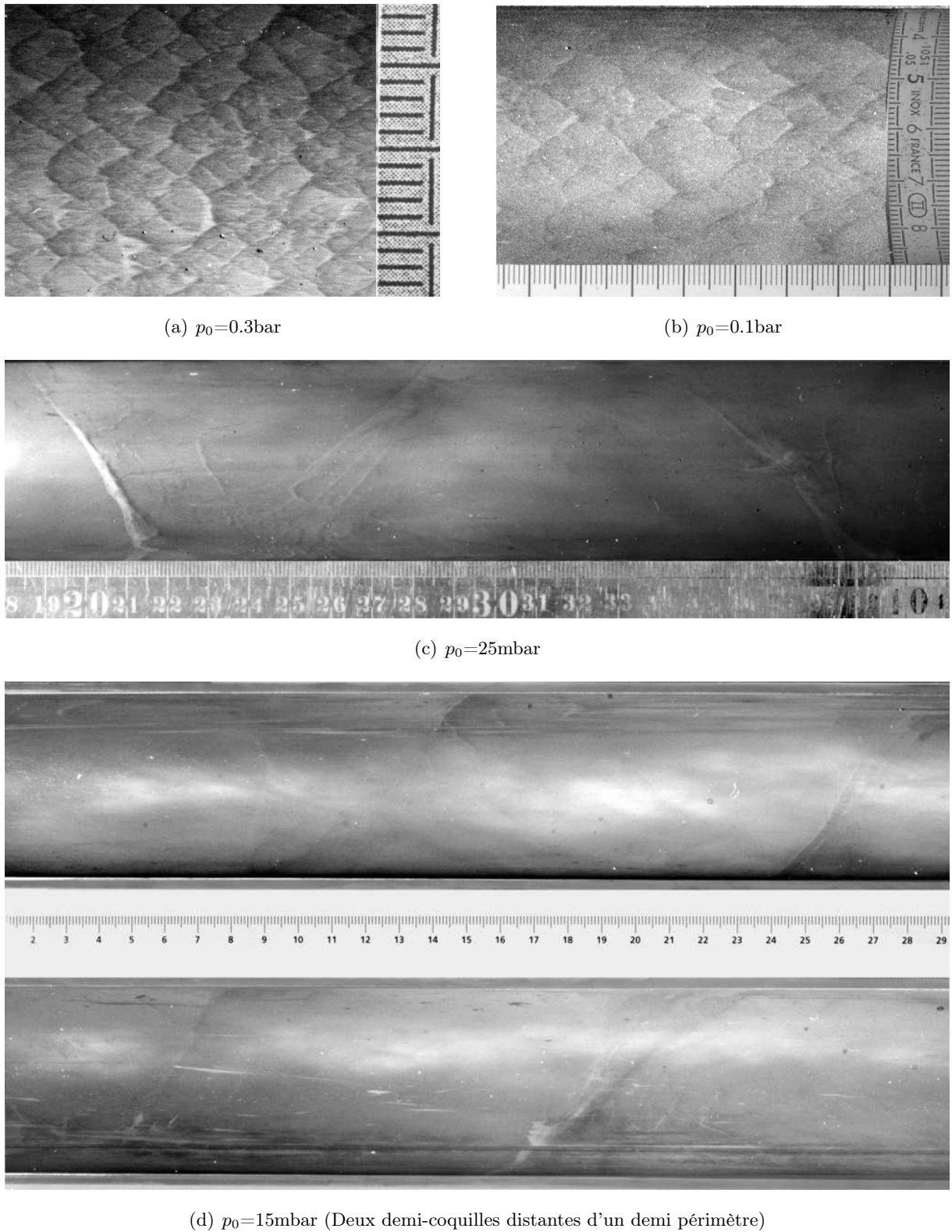


FIG. 6.14 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5O_2$.

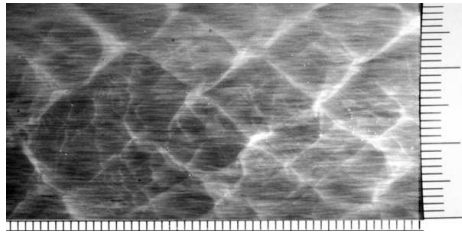
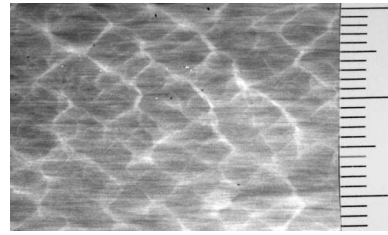
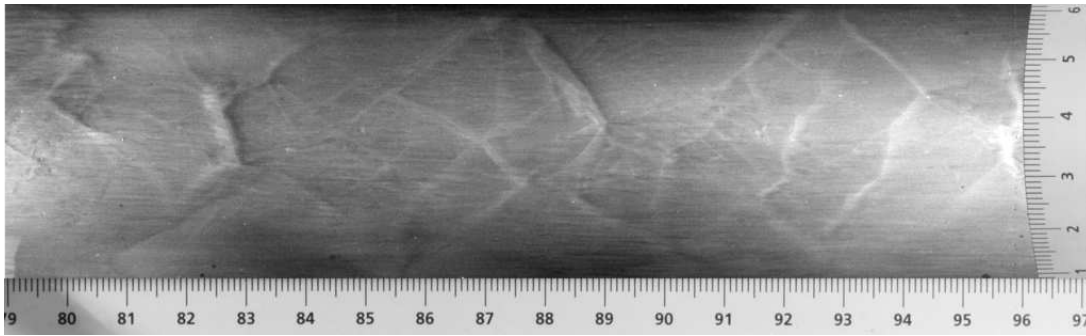
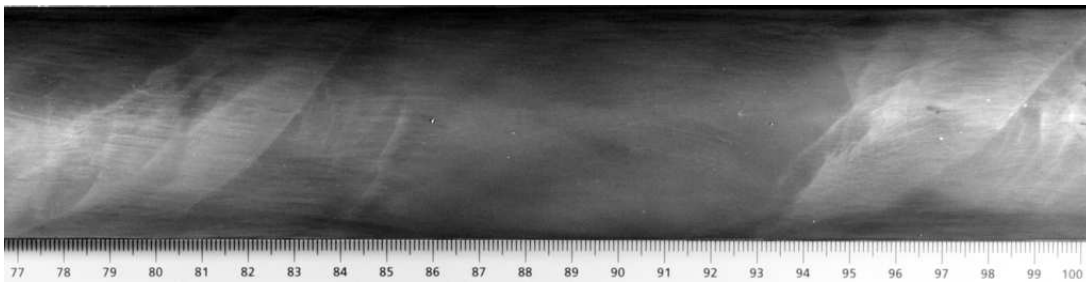
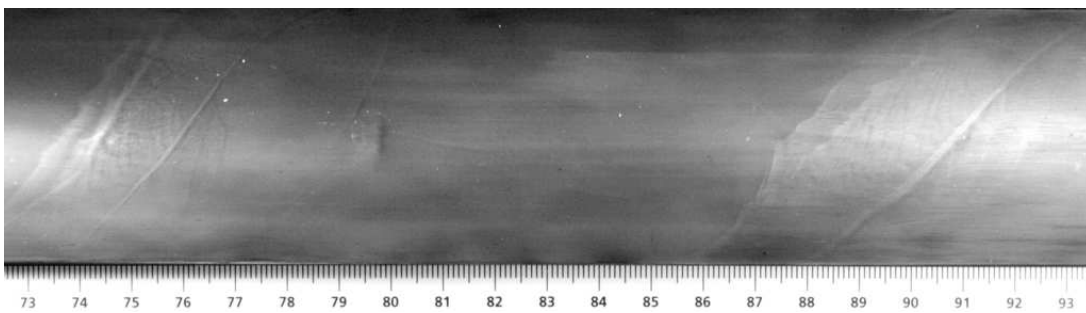
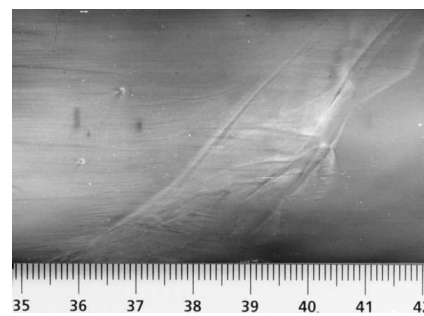
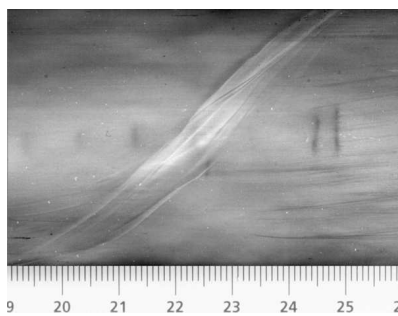
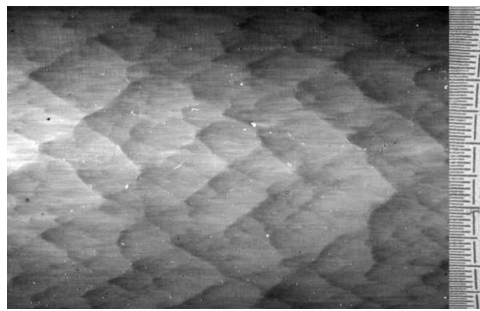
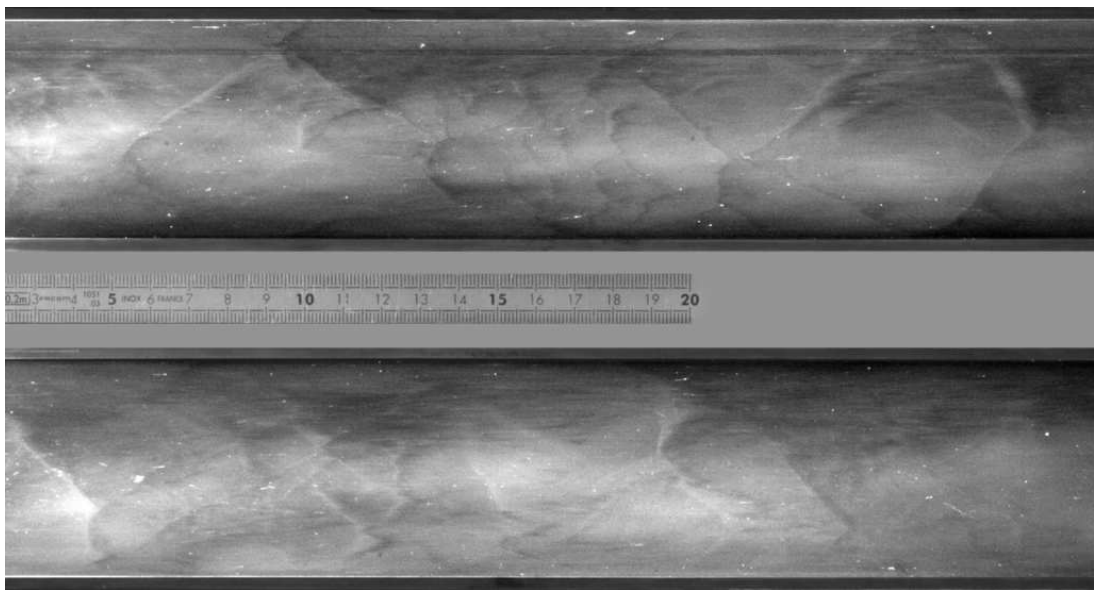
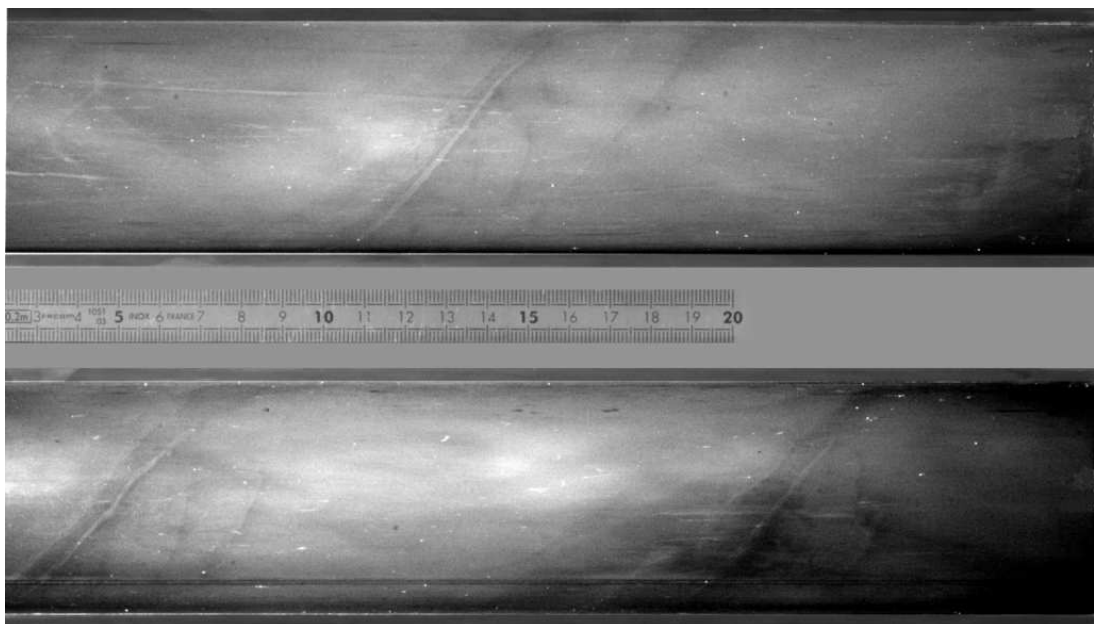
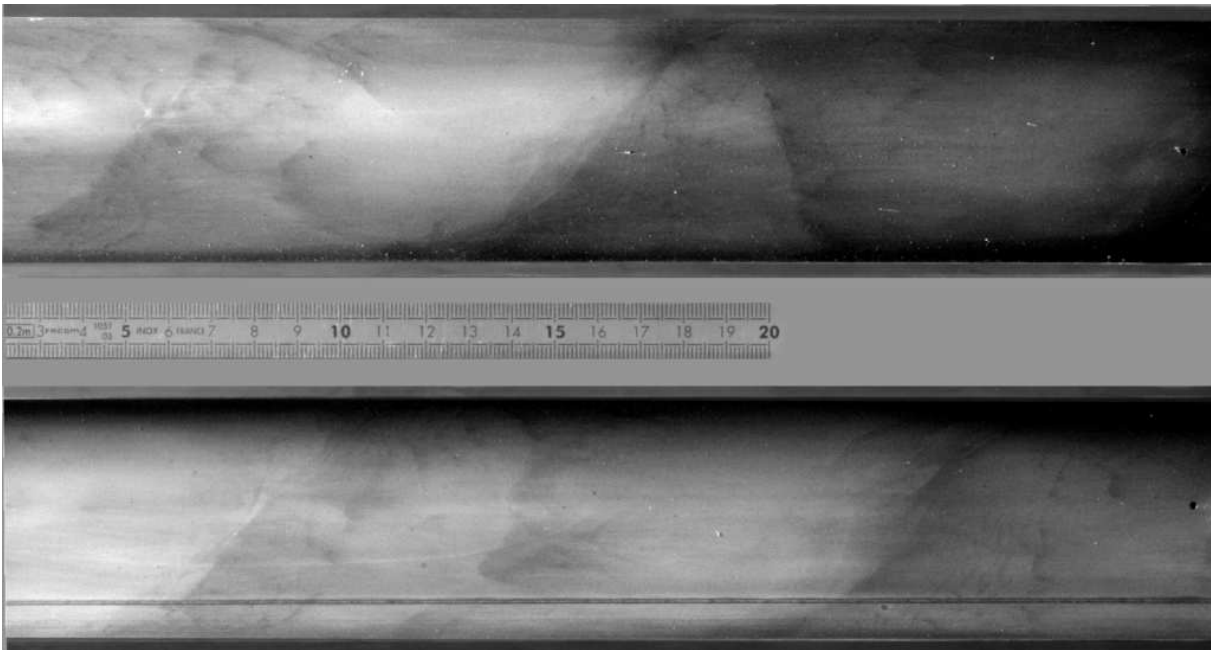
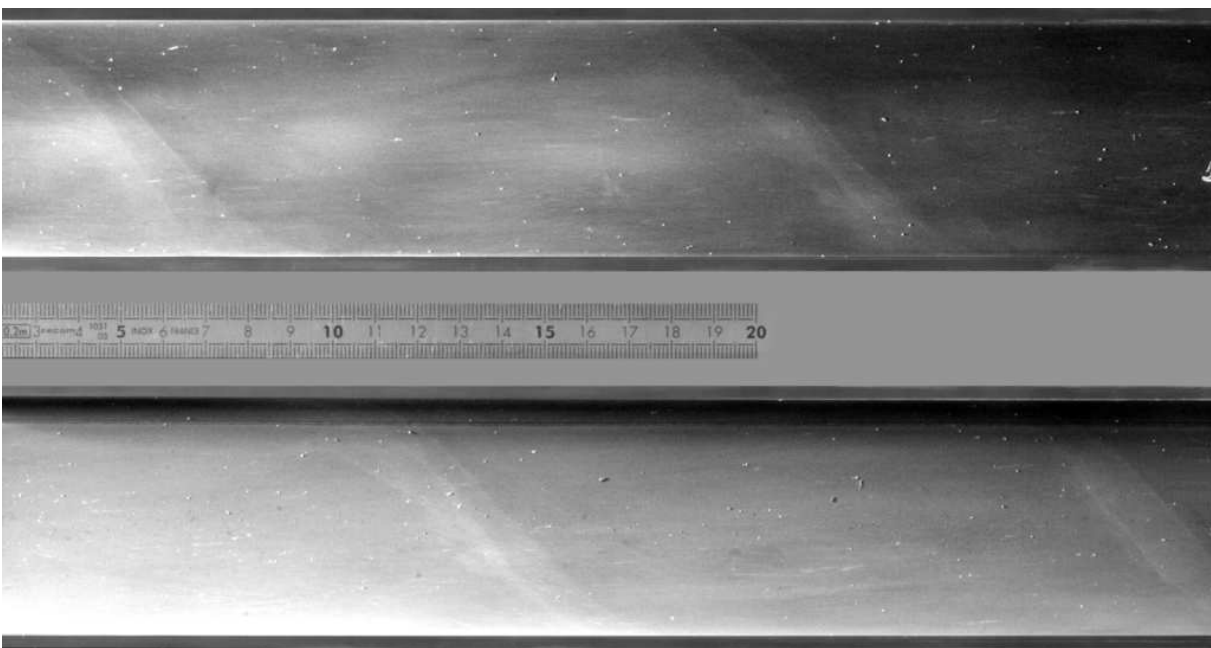
(a) $p_0=0.25\text{bar}$ (b) $p_0=0.5\text{bar}$ (c) $p_0=0.1\text{bar}$ (d) $p_0=60\text{mbar}$ (e) $p_0=35\text{mbar}$ (f) $p_0=25\text{mbar}$

FIG. 6.15 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$.

(a) $p_0=0.5\text{bar}$ (b) $p_0=35\text{mbar}$ (c) $p_0=75\text{mbar}$ (Deux demi-coquilles distantes d'un demi périmètre)(d) $p_0=35\text{mbar}$ (Deux demi-coquilles distantes d'un demi périmètre)FIG. 6.16 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$.

(a) $p_0=1.2\text{bar}$ (b) $p_0=0.6\text{bar}$ (Deux demi-coquilles distantes d'un demi périmètre)(c) $p_0=0.1\text{bar}$ (Deux demi-coquilles distantes d'un demi périmètre)FIG. 6.17 – Enregistrement des cellules de détonation sur plaques enfumées pour les mélanges $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$.

du point triple et mesurent environ 1mm de large (fig. 6.16(b)).

Une sous-structure est visible sur le premier tiers de la cellule.

Mélange $C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$

En régime multi-têtes, la régularité des cellules de détonation est faible (fig. 6.17(a)) mais s'améliore à mesure que le régime hélicoïdal s'installe (figures 6.17(b) et 6.17(c)). Ce dernier est observé sur une grande plage de pression initiale (i.e. pour $0.1\text{bar} < p_0 < 0.6\text{bar}$) et lorsqu'il est établi (fig. 6.17(c)), le pas et l'angle des traces mesurent respectivement 14.5cm et 45° . La largeur de bande est relativement constante (entre 5mm et 15mm). Il est difficile de dire s'il existe des cellules à l'intérieur de la bande.

6.3.3 Taille de cellules et célérité de détonation pour les mélanges avec C_2H_6

La figure 6.18 rassemble les tailles des cellules et les célérités de détonation obtenues dans les expériences pour les mélanges où C_2H_6 est le combustible et compare les célérités de détonation relevées au cours des expériences avec les valeurs théoriques CJ (ligne continue). Comme à la section précédente, les vitesses de détonation pathologiques sont indiquées par la ligne en pointillé.

Le tableau 6.3 rassemble, pour les quatre mélanges précédents, les valeurs de k et n de la loi de variation de la largeur de cellule de détonation avec la pression initiale $\lambda = kp_0^n$ ainsi que les pas des traces de l'onde hélicoïdale. La pression, la taille de cellule extrapolée selon la loi $\lambda = kp_0^n$ et le rapport des célérités $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.

Mélange	$\lambda = kp_0^n$	P (cm)	limite p_0 basse			limite p_0 haute		
			p_0 (bar)	λ (mm)	$\frac{D}{D_{CJ}}$	p_0 (bar)	λ (mm)	$\frac{D}{D_{CJ}}$
$C_2H_6 + 3.5O_2$	$0.5p_0^{-1.385}$	15–16	0.015	168	0.86	0.020	112	0.93
$C_2H_6 + 3.5(O_2 + N_2)$	$4p_0^{-1.3}$	14–16.5	0.025	484	0.84	0.050	196	0.93
$C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76N_2)$	$70p_0^{-1.35}$	14–16	0.100	1567	0.90	0.600	140	0.96
$C_2H_6 + 3.5(O_2 + 3.76Ar)$	$2p_0^{-1.35}$	15–15.5	0.025	290	0.86	0.060	89	0.95

TAB. 6.3 – Tableau récapitulatif des valeurs de k et n de la loi $\lambda = kp_0^n$ et des pas des traces de l'onde hélicoïdale pour les mélanges où H_2 est le combustible. p_0 , $\lambda = kp_0^n$ et $\frac{D}{D_{CJ}}$ sont également indiqués pour les deux limites (basse et haute en pression initiale) du régime hélicoïdal.

Comme pour les mélanges avec H_2 et contrairement aux mélanges avec CH_4 dilués ou non avec l'azote, l'extinction de la détonation est observée lorsque le déficit de célérité par rapport à D_{CJ} atteint environ 15%.

Les mélanges C_2H_6/O_2 étudiés ici présentent une loi de libération de l'énergie en deux étapes

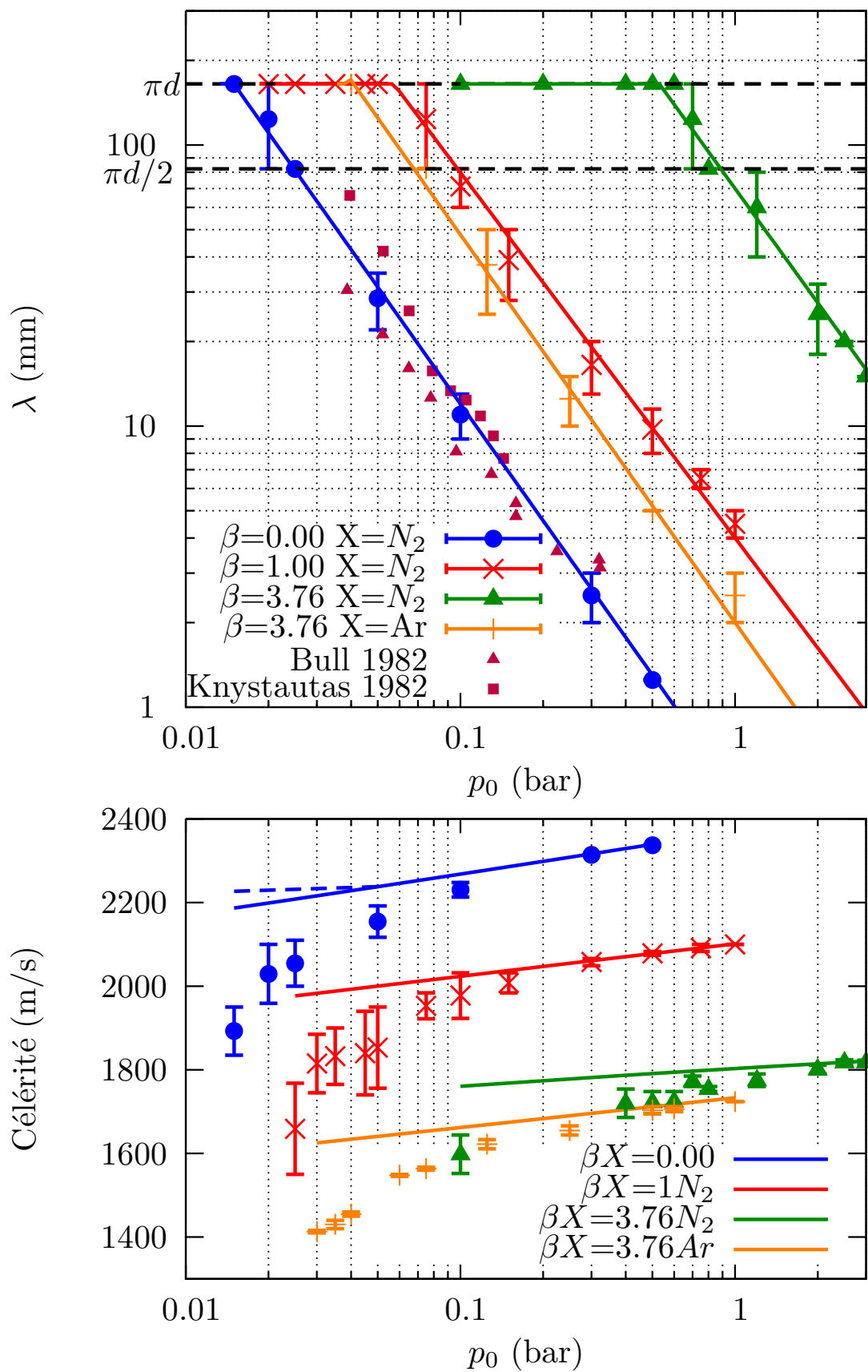


FIG. 6.18 – Taille des cellules et célérité de détonation pour les mélanges où C_2H_6 est le combustible.

semblable dans le principe à celle des mélanges contenant CH_4 . La première étape de libération d'énergie est toutefois moins brutale avec l'éthane et, comparativement au potentiel énergétique total, délivre moins d'énergie.

6.4 Discussion

Les mélanges stœchiométriques H_2/O_2 , CH_4/O_2 et C_2H_6/O_2 considérés dans cette étude présentent des lois de libération de l'énergie chimique évolutives en fonction de la dilution par un gaz inerte et de la pression initiale. L'étude de ces lois a été en particulier menée pour les valeurs de la pression initiale où le régime hélicoïdal est obtenu expérimentalement. Les lois globales de libération de l'énergie chimique sont plus raides pour les mélanges contenant CH_4 que pour ceux contenant C_2H_6 et H_2 .

Chaque mécanisme peut être décomposé en deux étapes globales de libération de l'énergie. Pour les mélanges non dilués, le poids de la première étape (par rapport à la globalité du processus de libération) est prédominant voire total. La dilution par un gaz inerte donne de l'importance à la seconde étape en retardant la libération d'une partie de l'énergie chimique.

Pour les mélanges avec le méthane non dilués ou modérément dilués, l'extinction apparaît très rapidement et un écart de 7% par rapport à D_{CJ} est observé alors qu'un écart d'environ 15% est habituellement mesuré à la limite (basse) du régime hélicoïdal.

Comme la première étape libère son énergie sur une très courte distance, la moindre atteinte affecte une quantité d'énergie importante. L'extinction de la détonation est très rapide dès lors que les pertes touchent le potentiel énergétique de la première étape.

Par ailleurs, pour les autres mélanges, les plages d'observation du régime hélicoïdal sont d'autant plus importantes que la part d'énergie attribuée à la seconde étape est importante et retardée. En effet, les pertes aux parois par conduction et/ou friction peuvent ainsi consommer progressivement l'énergie de la seconde étape.

Dans le tube de diamètre intérieur $d=53\text{mm}$, les mesures des pas des traces d'hélice sont raisonnablement en accord avec les théories acoustiques en étant comprises entre 14cm et 16cm. Les lois $\lambda = kp_0^n$ trouvées ont des exposants un peu forts en raison des pertes de célérité importantes par rapport à D_{CJ} d'une part et de la précision de la mesure de la cellule lorsque la structure est très irrégulière d'autre part.

La largeur de la bande (i.e. de l'onde transverse) est d'autant plus grande que la seconde étape est longue. Sa régularité bonne pour les mélanges dilués avec l'azote voire excellente pour ceux dilués avec l'argon laisse penser qu'elle est liée à une valeur de l'énergie d'activation réduite.

Conclusion et perspectives

Cette étude a pour but de montrer les effets de la loi de libération d'énergie sur les processus de propagation des détonations. Les contributions sont le fruit d'une part de résultats de simulations numériques s'appuyant sur l'élaboration d'un modèle de cinétique chimique, et d'autre part d'expériences avec la comparaison et l'analyse des comportements de différents mélanges réactifs en particulier en régime hélicoïdal de détonation.

Le modèle cinétique à deux étapes successives exothermiques et irréversibles prend en compte trois gaz polytropiques A, B, C : $A \xrightarrow{1} B \xrightarrow{2} C$. Le coût numérique raisonnable engendré par cette modélisation permet son application dans des codes de calculs 3D. Ce travail propose une méthode pour déterminer les paramètres d'entrée thermodynamiques et cinétiques, difficulté qui subsistait jusqu'alors :

- A partir des contraintes imposées par le modèle, les profils d'évolution des paramètres thermodynamiques et des espèces dans la zone de réaction d'une détonation stationnaire sont ajustés pour correspondre à ceux obtenus par un calcul utilisant un mécanisme détaillé de cinétique chimique.
- Des accords raisonnables sont trouvés entre les simulations stationnaires (cinétiques détaillée et réduite) et instationnaires (cinétique réduite).

Toutefois, avant d'utiliser la modélisation à deux étapes, le code de calcul développé au laboratoire et résolvant les équations d'Euler réactives a d'abord été validé sur des géométries 3D avec des mélanges présentant une loi de libération d'énergie chimique en une seule étape (une seule loi d'Arrhénius). Plusieurs résultats sont apportés par cette partie :

- Un faible nombre de mailles dans la section droite du tube (20×20) suffit pour observer la déformation du front et la mise en rotation du fluide dans les conditions de régime hélicoïdal. Il faut toutefois compter 40×40 mailles pour obtenir un niveau de détail raisonnable et 80×80 mailles pour résoudre la structure fine de l'onde transverse.
- Les résultats numériques sont qualitativement en accord avec l'expérience : les traces révèlent des pas mesurant 3 à 4 fois le diamètre du tube et formant un angle avec l'axe du tube d'environ 45° . La forme du front au niveau de la paroi est semblable à celle décrite par Schott [1965] et Voitsekhovskii *et al.* [1969].

- Même si les relations de choc 2D ont permis dans le passé d’estimer la pression et la température sur la surface du tube, les calculs montrent des effets tridimensionnels importants proche de la paroi en particulier au niveau du point triple et derrière le choc incident. La mise en rotation du fluide produit des forces d’inertie centrifuge et centripète importantes.
- L’analyse de l’écoulement d’un point de vue de la mécanique des fluides révèle également, pour les hypothèses liées à la modélisation, que la source de la vorticit   responsable de la mise en rotation du fluide provient de l’apparition d’un couple baroclinique. L’inversion du sens de rotation du fluide peu apr  s le passage de l’onde transverse est d  cel  e et expliqu  e par la diminution des gradients de pression derri  re cette onde.
- Les param  tres qui gouvernent la taille du pas n’ont pas   t   totalement mis en   vidence malgr   l’ensemble des simulations r  alis  es. Il a seulement   t   constat   que le pas est plus grand que πd lorsque la vitesse tangentielle de l’onde transverse    la paroi du tube est inf  rieure    D_{CJ} . La vitesse de propagation du front de d  tonation (selon l’axe du tube) est toujours tr  s proche de D_{CJ} car la mod  lisation ne tient pas compte d’  ventuels processus de pertes.
- Les raisons de l’existence de l’unicit   d’une forme stationnaire du front de d  tonation n’est pas encore totalement prouv  e mais l’analyse des champs d’entropie semble indiquer que cette forme s’adapte pour atteindre un minimum d’entropie en accord avec les principes de la thermodynamique.

Apr  s cette premi  re   tape, les simulations num  riques des m  langes pr  sentant une loi de lib  ration d’  nergie en deux   tapes sont consid  r  es. En particulier, l’effet de la taille du tube    d  tonation est   tudi  e pour les m  langes o   les longueurs caract  ristiques des   tapes r  actionnelles sont tr  s distinctes. Des r  sultats compl  mentaires sont apport  s par cette partie :

- Les calculs n  cessitent des ressources informatiques importantes pour pouvoir repr  senter simultan  ment les deux tailles (distinctes) des deux structures cellulaires. Il faut compter au moins 400×400 mailles dans la section droite pour obtenir des d  tails raisonnables. Avec cette r  solution, les plus petites cellules correspondant    la premi  re   tape de lib  ration d’  nergie ne sont toutefois pas suffisamment r  solues aux endroits o   la vitesse locale est importante (i.e. derri  re l’onde de Mach de la deuxi  me   tape) mais la structure h  lico  dale de d  tonation est parfaitement visible.
- Des progr  s notables sont r  alis  s avec la parall  lisation du code du laboratoire. Le laboratoire dispose d  sormais d’outils efficaces et performants pour   tudier les d  tonations 3D.
- Les r  sultats sont en bon accord avec l’exp  rience. Des plus grands diam  tres de tube aux plus petits, plusieurs r  gimes de d  tonations caract  ris  s par leur structure sp  cifique sont successivement observ  s :

1. double structure avec des fronts multicellulaires pour chaque structure,
 2. double structure avec la propagation hélicoïdale de la structure large,
 3. disparition de la structure large et front multicellulaire simple structure,
 4. enfin propagation hélicoïdale de la simple structure.
- Les résultats s'accordent avec ceux obtenus avec la loi de production à simple étape notamment en ce qui concerne l'entropie.

L'étude expérimentale porte sur les mélanges stœchiométriques mettant en jeu les combustibles classiques tels que H_2 , CH_4 et C_2H_6 avec O_2 dilués ou non par Ar ou N_2 . Les expériences sont conduites dans un tube à détonation de diamètre $d=53\text{mm}$ et de grande longueur (19m) afin que chaque onde de détonation puisse s'affranchir des effets d'amorçage et atteindre son régime autonome. Pour chaque mélange réactif, la pression initiale est diminuée progressivement jusqu'à obtenir le régime de détonation hélicoïdal puis l'extinction. Plusieurs conclusions sont déduites des observations expérimentales et de l'analyse des profils de température et des espèces dans la zone de réaction d'une détonation stationnaire obtenus avec un mécanisme détaillé de cinétique chimique :

- Quelque soit le mélange étudié, l'évolution des espèces dans la zone de réaction montre l'existence de deux étapes globales; la raideur de chaque étape est cependant variable suivant les mélanges. Les profils de température indiquent que la libération d'énergie est d'autant plus rapide que la pression initiale est élevée; pour un mélange donné, la loi de recombinaison n'est pas simplement dépendante de la pression initiale.
- La plage de pression initiale sur laquelle la détonation hélicoïdale est observée varie en fonction des mélanges. Elle est généralement d'autant plus étendue que le mélange est dilué. La dilution retarde la libération d'énergie particulièrement celle de la seconde étape. Les pertes vont d'abord agir sur la seconde étape.
- Le retard de la deuxième étape par rapport à la première n'est pas le seul critère responsable de l'étendue de la plage d'observation du régime hélicoïdal, la répartition d'énergie entre les étapes est également importante. Si l'énergie libérée par la deuxième étape est faible (voire négative) relativement à l'énergie chimique totale alors le mélange peut quasiment être considéré comme un mélange à une seule étape réactionnelle car les pertes vont rapidement consommer l'énergie de la seconde étape et amoindrir la première étape.
- La première étape est toujours brutale. Les effets des pertes sont très conséquents lorsque ceux-ci affectent la première étape car une grande quantité d'énergie est libérée sur une courte distance. Le mélange le plus difficile à expérimenter reste sans conteste le méthane qui, parmi les trois combustibles étudiés, possède la loi de libération la plus raide; il est d'ailleurs peu sûr que le régime de détonation hélicoïdal stationnaire existe pour le mélange $CH_4 + 2O_2$.

- Les grands déficits de célérité mesurés par rapport à la valeur théorique D_{CJ} sont observés autour de 15% pour les mélanges contenant CH_4 fortement dilué par l'inerte Ar et les mélanges contenant H_2 ou C_2H_6 (dilués ou non). Les calculs de la zone de réaction indiquent pour ces mélanges l'existence d'une deuxième étape bien marquée (i.e. la deuxième étape est longue et libère une part certaine de l'énergie totale chimique).
- La détermination des lois $\lambda = k.p_0^n$ dévoile, pour les mélanges considérés, des exposants un peu forts ($n \approx -1.3$ alors qu'ils sont habituellement trouvés autour de -1.2) à cause de l'incertitude liée à la mesure de la taille des cellules de détonation lorsque la structure est irrégulière d'une part et de l'écart significatif de la célérité de détonation mesurée par rapport à D_{CJ} dû aux pertes qui agissent proche du régime hélicoïdal d'autre part.

L'ambition de la modélisation est de pouvoir prédire à terme la taille de cellule, résoudre raisonnablement les petites échelles, notamment les structures cellulaires liées à l'onde transverse. Des études paramétriques doivent être réalisées sur les paramètres d'entrée afin de déterminer leur influence et donner des informations dans le but d'améliorer le modèle (lois de libération, pertes, ...). L'ajout d'une étape d'induction pure et l'ajustement du poids de la deuxième étape exothermique sur la première sont deux études particulièrement importantes.

Il est toujours possible d'optimiser le code de calcul. Une répartition du maillage sur des architectures à mémoire distribuée pourra accroître la résolution des simulations, diminuer le temps de calcul et/ou permettre de complexifier le modèle en résolvant notamment les équations de Navier-Stokes.

Coté expérimental, l'amélioration des systèmes d'enregistrement des traces uniquement sur des surfaces en verre apportera des informations précieuses pour les mélanges dont les structures cellulaires sont difficiles à mettre en évidence ou pour caractériser les structures de bande souvent masquées lorsque l'état de surface des dispositifs métalliques n'est pas suffisant. L'étude du régime hélicoïdal peut également être réalisé à plus haute pression avec un tube de diamètre plus petit. L'étude des régimes hélicoïdaux et des comportements en diffraction d'autres mélanges, en particulier ceux qui révèlent une double structure, doivent également être considérés.

ANNEXES

Annexe A

Problème du tube à choc

Le problème du tube à choc constitue un cas test particulièrement intéressant et difficile à traiter dans les simulations numériques. Comme le soulignent Oran et Boris [2001, p. 300], une méthode qui fonctionne à la perfection pour tous les tests n'existe pas. En fonction de la spécificité du problème, certaines méthodes paraissent meilleures (ou pires) que les autres. Dans le cas du tube à choc, une méthode utilisant un solveur exact de Riemann va produire le travail qu'il faut. Cependant, il n'est pas sûr que ce soit la méthode la plus efficace, la plus robuste et la plus précise pour traiter les problèmes complexes d'écoulements réactifs.

Rappelons brièvement les hypothèses qui composent le problème de Riemann du tube à choc : un diaphragme sépare initialement deux gaz ① et ② de pression et de densité différentes (fig. A.1). Sans réduire la généralité de l'approche, on choisit la section ② comme section motrice (i.e. $p_2 > p_1$). Lorsque cette membrane est soudainement rompue à l'instant initial ($t = 0$), une discontinuité de pression se propage à droite à la vitesse C dans la partie basse pression alors qu'une onde de détente se propage à gauche dans la partie haute pression. La surface de contact qui sépare les deux gaz se déplace vers la droite à la vitesse V . La solution théorique du problème de Riemann est connue grâce à la méthode des caractéristiques qui est détaillée dans de nombreux ouvrages en particulier dans celui de Hirsch [1988b, p. 204–211].

On suppose dans la suite que le tube est suffisamment long pour éviter les réflexions sur les murs, que le gaz est identique et inerte dans chaque partie avec le rapport des capacités calorifiques $\gamma=1.4$. Les différentes conditions initiales sont décrites dans le tableau A.1 et la synthèse des résultats est reportée sur les profils de pression, entropie, densité, vitesse matérielle et Mach sur les figures A.2 à A.4. Les simulations Sod2/3 correspondent à la situation où le choc est fort ($p_1/p_{1'}=7.155$) et où les nombres de Mach sont supersoniques après la détente contrairement à la simulation Sod1 où l'intensité de choc est plus modérée ($p_1/p_{1'}=3.031$). Ces conditions font partie des tests proposés par Sod [1978].

Les profils obtenus avec le code EFAE utilisant la technique FCT sont très semblables à ceux

obtenus par Zalesak [Oran et Boris, 2001, p. 301-303] ou Hirsch [1988b, p. 209-211].

Le choc est très bien capturé (seulement 2 ou 3 points le composent), avec une vitesse de propagation légèrement supérieure à la valeur théorique (+2% pour Sod1, moins de +6% pour Sod2/3). Les discontinuités de pression, température, densité sont associées au choc. Le saut d'entropie est strictement positif, le phénomène est irréversible.

La surface de contact est caractérisée par une discontinuité de densité alors que la pression et la vitesse matérielle sont continues. Le caractère continu de la vitesse et de la pression est très bien rendu mais la méthode FCT (comme la plupart des méthodes habituellement utilisées dans les simulations numériques d'écoulements réactifs) a des difficultés à rendre compte de la discontinuité de densité au sens le plus strict lorsque le nombre de mailles est faible. La variation du paramètre lié à gestion des flux anti-diffusifs ν_{num} n'a pas d'effet sur cette discontinuité. La vitesse de propagation de la surface de contact est proche de la valeur théorique (moins de +3.4%). Enfin, aucun problème relatif à la condition d'entropie à la surface de contact n'est trouvé contrairement, par exemple, au schéma de MacCormack [Hirsch, 1988b, p. 277].

Au passage de l'onde de détente, l'entropie reste constante et, dans les diagrammes (p, v) , la solution suit exactement la ligne pointillée représentant le lieu où pv^γ est constant. L'éventail de détente reste centré sur la position initiale du diaphragme.

Evidemment, les solutions des simulations numériques comportant un grand nombre de mailles (10000) sont plus proches de la solution idéale théorique que celles comportant 1000 mailles ou moins. Les vitesses de propagation sont quant à elles peu sensibles à la résolution.

La diminution du nombre de Courant entre les simulations Sod2 et Sod3 n'a pas d'effet sur la vitesse de propagation, mais la précision est bien meilleure lorsque le nombre de Courant vaut 0.2 (au lieu de 0.5) : les oscillations sur les profils d'entropie, de densité, de Mach et de température sont fortement atténués.

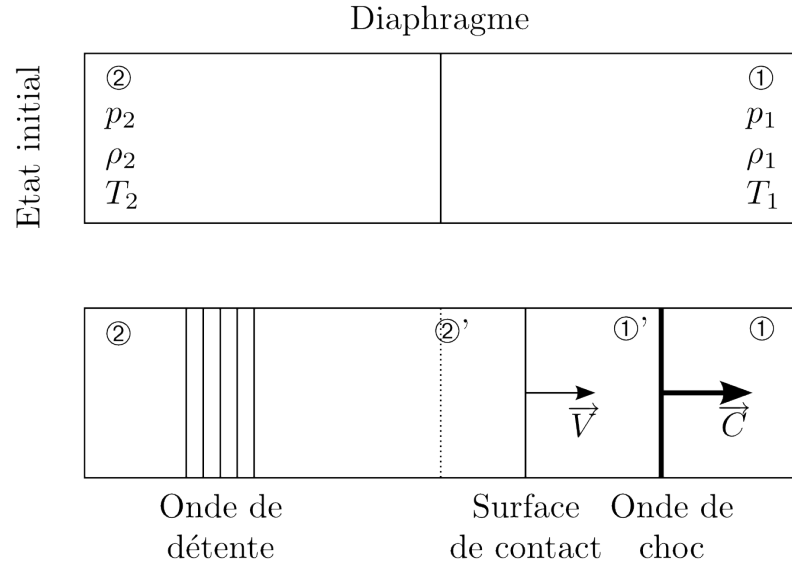


FIG. A.1 – Représentation schématique d'un tube à choc à l'instant initial et à l'instant $t > 0$.

	Sod1	Sod2	Sod3
p_1 (bar)	0.1	0.01	0.01
ρ_1 (kg/m ³)	0.125	0.01	0.01
p_2 (bar)	1	1	1
ρ_2 (kg/m ³)	1	1	1
W_m (g/mol)	28.85	28.85	28.85
T_1 (K)	347	347	347
T_2 (K)	277	347	347
CFL	0.5	0.5	0.2
ν_{num}	0.99	0.99	0.99
$p_{1'th}/p_{1'sim}$	0.303/0.303	0.071/0.063	0.071/0.063
V_{th}/V_{sim} (m/s)	293/292	587/607	587/607
C_{th}/C_{sim} (m/s)	544/554	838/888	838/888

TAB. A.1 – Conditions des problèmes de Riemann (Sod1–Sod3), paramètres supplémentaires pour le code EFAE et valeurs théoriques/simulées de p_1 , V et C . CFL et ν_{num} sont respectivement le nombre de Courant et la viscosité numérique.

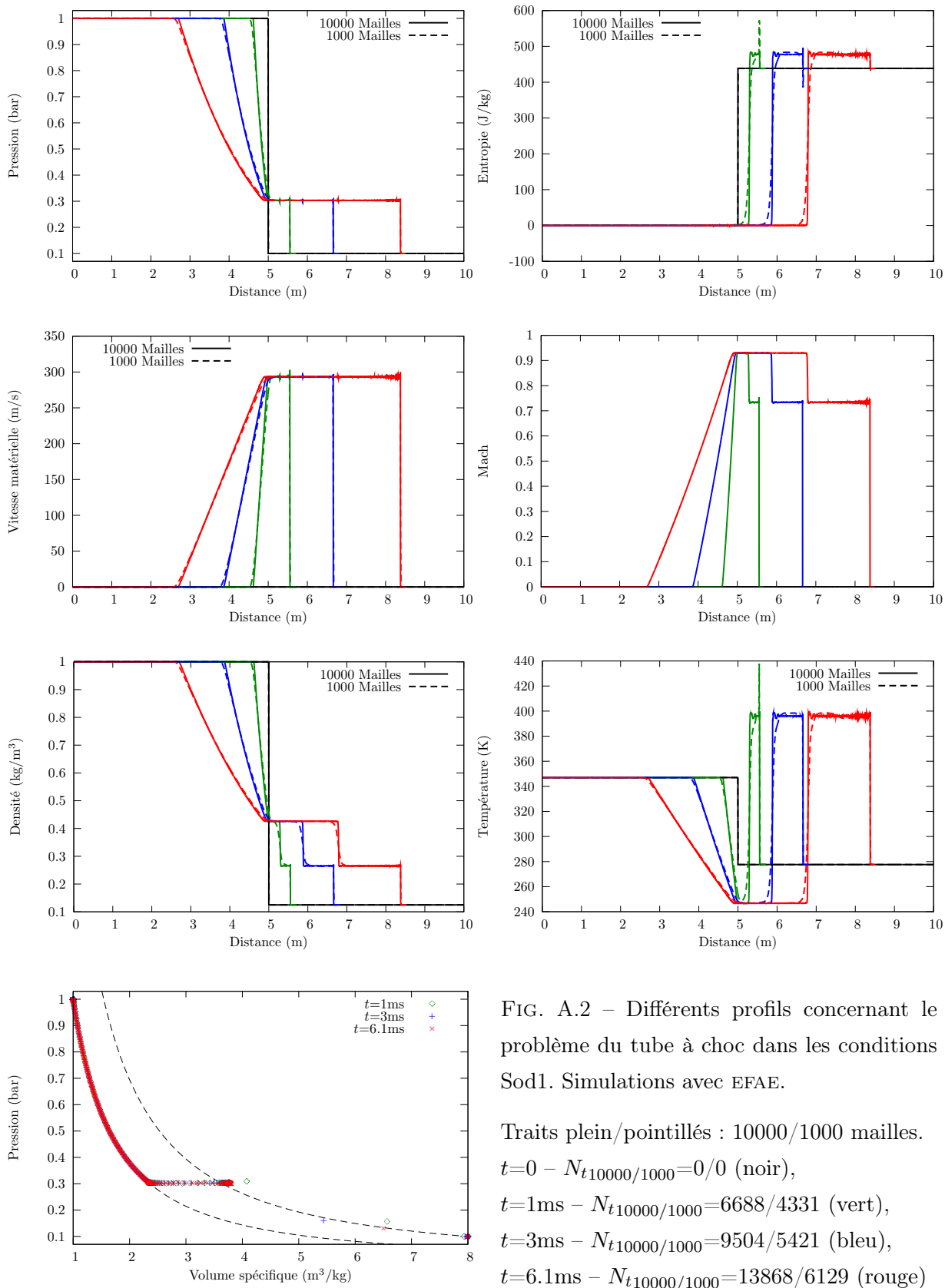


FIG. A.2 – Différents profils concernant le problème du tube à choc dans les conditions Sod1. Simulations avec EFAE.

Traits plein/pointillés : 10000/1000 mailles.

$t=0$ - $N_{t_{10000}/1000}=0/0$ (noir),

$t=1\text{ms}$ - $N_{t_{10000}/1000}=6688/4331$ (vert),

$t=3\text{ms}$ - $N_{t_{10000}/1000}=9504/5421$ (bleu),

$t=6.1\text{ms}$ - $N_{t_{10000}/1000}=13868/6129$ (rouge)

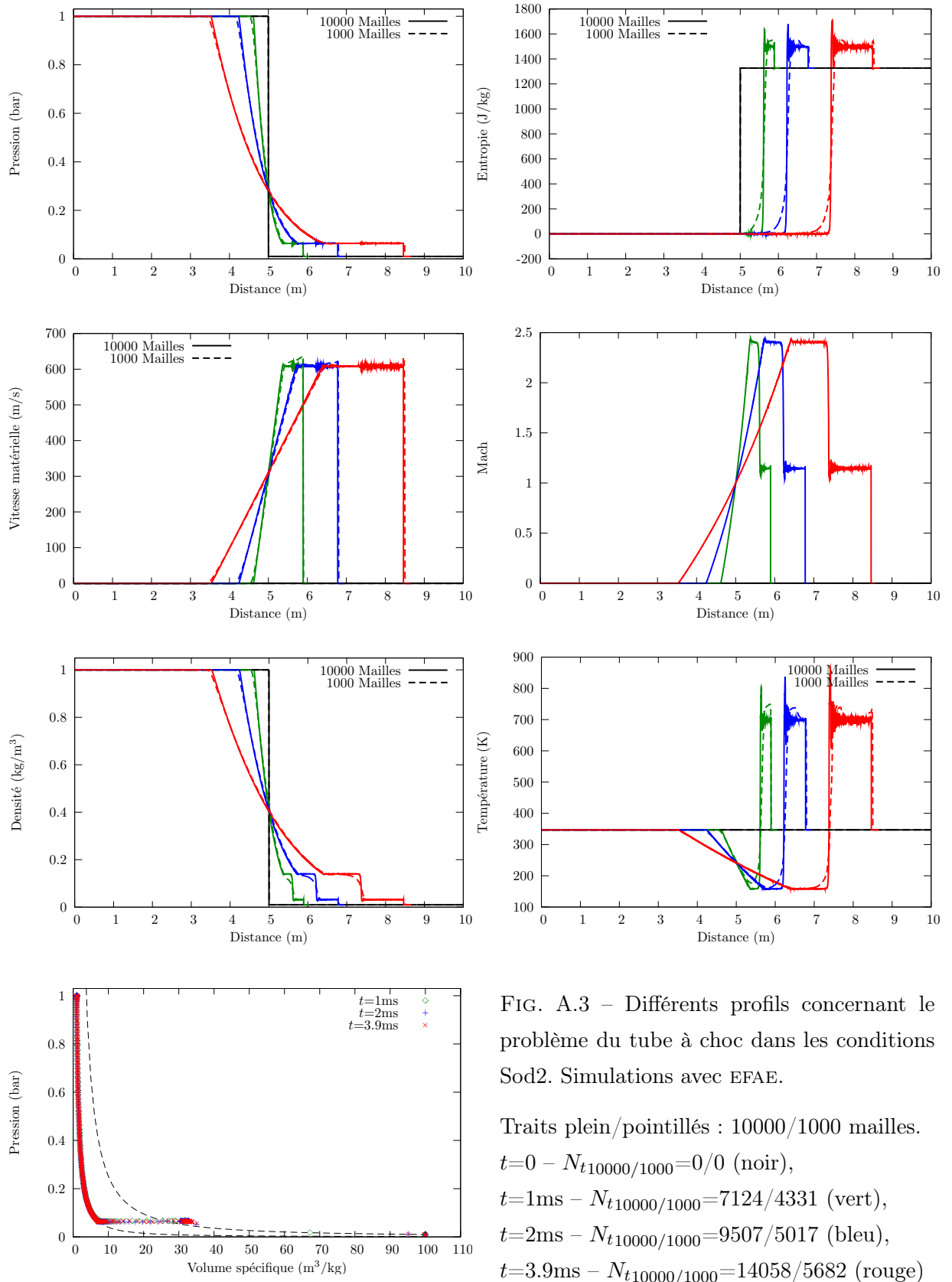


FIG. A.3 – Différents profils concernant le problème du tube à choc dans les conditions Sod2. Simulations avec EFAE.

Traits plein/pointillés : 10000/1000 mailles.
 $t=0$ - $N_{t10000/1000}=0/0$ (noir),
 $t=1\text{ms}$ - $N_{t10000/1000}=7124/4331$ (vert),
 $t=2\text{ms}$ - $N_{t10000/1000}=9507/5017$ (bleu),
 $t=3.9\text{ms}$ - $N_{t10000/1000}=14058/5682$ (rouge)

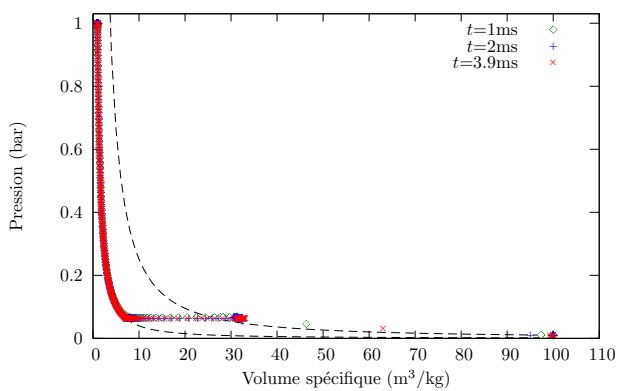
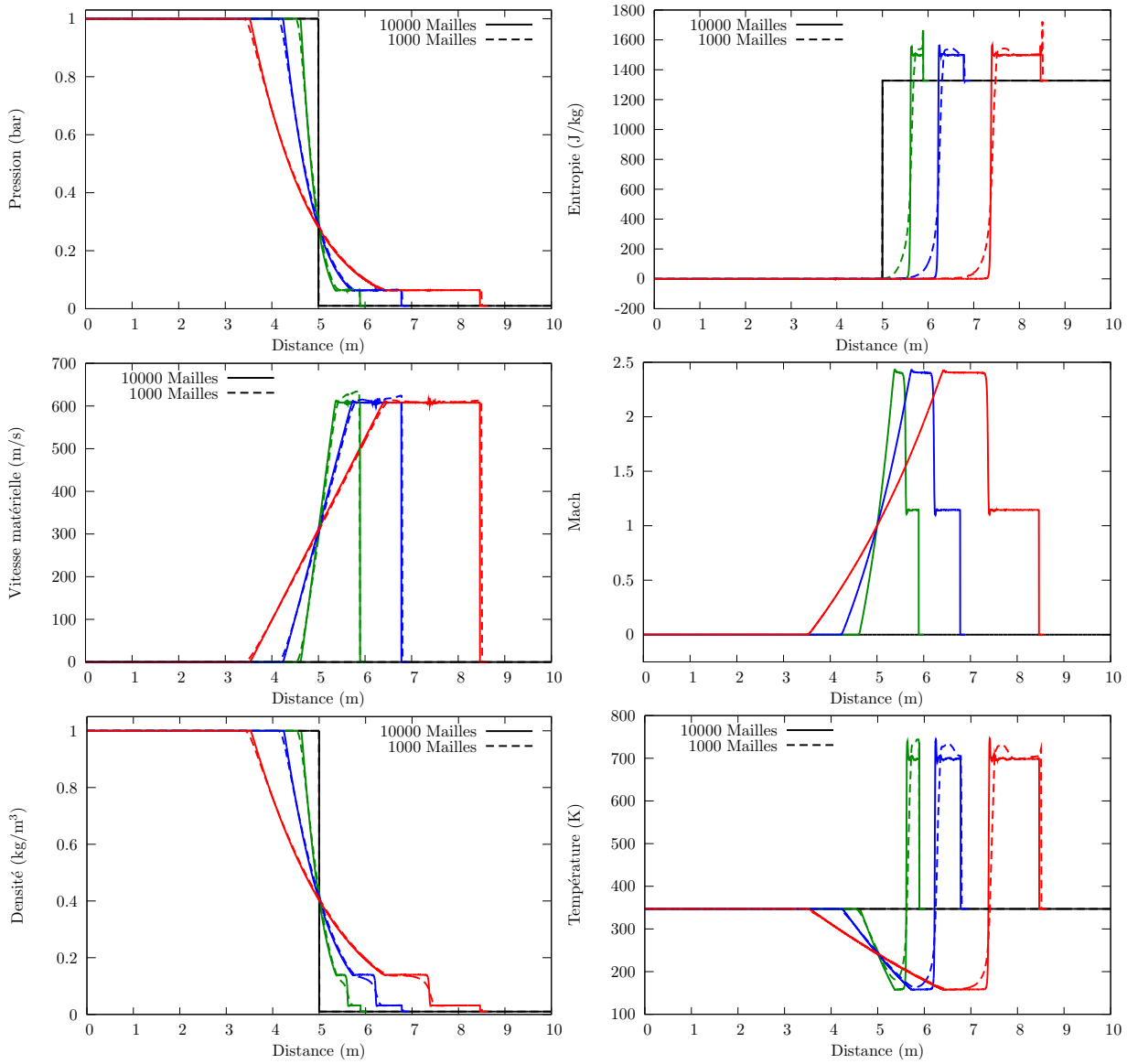


FIG. A.4 – Différents profils concernant le problème du tube à choc dans les conditions Sod3 (Conditions Sod2 avec un nombre Courant plus faible). Simulations avec EFAE.

Traits plein/pointillés : 10000/1000 mailles.
 $t=0 - N_{t_{10000}/1000}=0/0$ (noir),
 $t=1\text{ms} - N_{t_{10000}/1000}=10570/5239$ (vert),
 $t=2\text{ms} - N_{t_{10000}/1000}=16351/5943$ (bleu),
 $t=3.9\text{ms} - N_{t_{10000}/1000}=27345/7049$ (rouge)

Annexe B

Code source du programme de calcul de la zone de réaction d'une détonation stationnaire modélisée avec une chimie à deux étapes réactionnelles

Le code source du programme calculant l'évolution des paramètres thermodynamiques et cinétiques dans la zone de réaction d'une détonation stationnaire avec un mécanisme réduit de cinétique chimique comportent deux réactions successives et irréversibles est donnée ci-dessous. Deux lignes de commande sont nécessaires pour compiler la source et lancer l'exécution du programme :

```
1 g++ -o twostep twostep.cxx -lgslcblas -lgsl -lm
2 ./twostep -P=10000.0 -T=293.0 -Wm0=0.0134810828175 -Wm1=0.0128245205981 -Wm2
   =0.0132060856466 -cv0=2148.45475856 -cv1=2711.3732348 -cv2=4977.33812603 -Q1
   =4361806.52389 -Q2=10140633.6671 -D=stanu -o=pyt.dat -Z1=1E12 -n=1. -Ea1=200000 -
   Z2=2E8 -n=1. -Ea2=150000
```

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <gsl/gsl_errno.h>
3 #include <gsl/gsl_matrix.h>
4 #include <gsl/gsl_odeiv.h>
5 #include <math.h>
6 #include <sstream>
7 #include <dirent.h>
8 #include <string>
9 #include <iostream>
10 #include <vector>
11 #include <iomanip>
```



```

12 #include <algorithm>
13 #include <set>
14 #include <string.h>
15 #include <string>
16
17 using namespace std;
18 #define Neq 6
19
20 const double accuracy=1E-6 ;
21 const double R=8.314      ;// Constante des gaz parfaits
22
23 struct gas {
24     double P0, T0, cv0, cv1, cv2, Wm0, Wm1, Wm2;
25     double n, Z1, Z2, Q1, Q2, Ea1, Ea2;
26     double f[Neq];
27 };
28
29 struct gasshocked{
30     struct gas gaz;
31     double D;
32     double rho0, Pshock, ushock, rhoshock, Tshock ;
33     int valid;
34 };
35
36
37 /*****/
38 int func (double t, const double y[], double f[], void *params){
39     struct gas * J = (struct gas *)params;
40
41     double rho=y[0], w=y[1], P=y[2]; //, lambda=y[4];
42     double concA=1.-y[4]; //1.-lambda;
43     double concB=y[4]-y[5];
44     double concC=y[5];
45     double Wm=1./(concA/J->Wm0+concB/J->Wm1+concC/J->Wm2);
46     double cv=J->cv0*concA+J->cv1*concB+J->cv2*concC;
47     double gamma=1.+R/(Wm*cv);
48     double Temp=P*Wm/(rho*R);
49
50     double eta=w*w*rho/(gamma*P);
51
52     f[4]=J->Z1/w*pow(concA*rho, J->n)*exp(-J->Ea1*rho/(P*Wm)); // lambda1
53     f[5]=J->Z2/w*pow(concB*rho, J->n)*exp(-J->Ea2*rho/(P*Wm)); // lambda2
54     double sumQ=J->Q1*f[4]+J->Q2*f[5];
55     double dcv=-J->cv0*f[4]+J->cv1*(f[4]-f[5])+J->cv2*f[5];

```

```

56     double d1overM=-f[4]/J->Wm0+(f[4]-f[5])/J->Wm1+f[5]/J->Wm2;
57     f[1]=(gamma-1.)/(gamma*P)*(rho*w*(sumQ-P*Wm/(rho*R)*dcv+P*Wm*cv*Wm/(R*rho)*d1overM))
        /(1.-eta); //w
58     f[0]=-rho/w*f[1]; // rho
59     f[2]=-rho*w*f[1]; // P
60     f[3]=1./w; // t
61     J->f[0]=f[0];
62     J->f[1]=f[1];
63     J->f[2]=f[2];
64     J->f[3]=f[3];
65     J->f[4]=f[4];
66     J->f[5]=f[5];
67     return GSL_SUCCESS;
68 };
69
70
71 /*****
72
73 int calcshock(struct gasshocked * gaseous, struct gas * gazeux,double D){
74     gazeous->gaz=*gazeux;
75     double gamma0=1+R/(gazeux->Wm0*gazeux->cv0);
76     gazeous->rho0=gazeux->P0/(R/gazeux->Wm0*gazeux->T0); //kg/m^3
77     gazeous->Pshock=gazeux->P0+2./(gamma0+1.)*gazeous->rho0*D*D*(1.-gamma0*R/gazeux->Wm0
        *gazeux->T0/(D*D)); //Pa
78     gazeous->ushock=2./(gamma0+1.)*D*(1.-gamma0*R/gazeux->Wm0*gazeux->T0/(D*D)); //m/s
79     gazeous->rhoshock=gaseous->rho0*D/(D-gaseous->ushock); //kg/m^3
80     gazeous->Tshock=gaseous->Pshock/(gaseous->rhoshock*R/gazeux->Wm0); //K
81     gazeous->D=D;
82     gazeous->valid=1;
83
84     printf("PreShock parameters : P=%.3f bar, T=%.0fK, rho=%.4fkg/m^3, gamma=%.2f, Wm0=%
        f kg/m**3\n",gazeux->P0*1.0E-5,gazeux->T0,gaseous->rho0,gamma0,gazeux->Wm0);
85     printf("PostShock parameters : P=%.3f bar, T=%.0fK, rho=%.4fkg/m^3, w=%.0f m/s\n",
        gazeous->Pshock*1.0E-5,gaseous->Tshock,gaseous->rhoshock,D-gaseous->ushock);
86     printf("Shock parameters : D=%.0f m/s, M=%.3f, c0=%.0f m/s, u=%.0f m/s, Q=%.0f J/kg\
        n",D, sqrt(gamma0*R/gazeux->Wm0*gazeux->T0/D),sqrt(gamma0*R/gazeux->Wm0*gazeux->
        T0),gaseous->ushock,gazeux->Q1+gaseous->ushock,gazeux->Q2);
87     return 0;
88 }
89
90 /*****
91
92 void steadysys(struct gas * gaz, double D,string OutputFileName){
93     const gsl_odeiv_step_type * Tstep = gsl_odeiv_step_gear2;

```

```

94  gsl_odeiv_step * s = gsl_odeiv_step_alloc (Tstep, Neq);
95  gsl_odeiv_control * c = gsl_odeiv_control_y_new (accuracy, 0.0);
96  gsl_odeiv_evolve * e = gsl_odeiv_evolve_alloc (Neq);
97
98  struct gasshocked * gazchoc =new(struct gasshocked);
99
100 calcshock(gazchoc,gaz,D);
101
102 gsl_odeiv_system sys = {func, NULL, Neq, gaz};
103
104 double T=0.,Mach=0.;
105 double dLi=gaz->Z1/(D-gazchoc->ushock)*pow(gazchoc->rhoshock,gaz->n)*exp(-gaz->Ea1*
    gazchoc->rhoshock/(gazchoc->Pshock*gaz->Wm0)), TauI=0. , Li=0.;
106 double X = 0.0, X1 = 10000.0;
107 double h = 1e-12;
108 double concA=1.,concB=0.,concC=0.;//initial condition
109 double y[Neq] = { gazchoc->rhoshock , D-gazchoc->ushock,gazchoc->Pshock,0. ,concB,
    concC};
110
111 FILE * fichier;
112
113 if((fichier=fopen(OutputFileName.c_str(),"w")) {
114  fprintf(fichier,"# X(m) 1| t(s) 2| lambda1 3| lambda2 4|rho(kg/m3)5| w(m/s) 6|
    Press(bar)7| Temp(K) 8| Mach 9|dlambda/dX0| drho/dX 1| d w /dX 2| d P /dX 3| d
    t /dX 4| gamma 5| Wm(kg/m3)6|Entrop(J?)7| sigma 8| d T /dX 9| sumQ 0| sumdcv
    1|sumd1overM2| sigma 3| Q 4 \n");
115  while (concC <1.- accuracy&&Mach<1.-accuracy)
116  {
117  concA=1-y[4];
118  concB=y[4]-y[5];
119  concC=y[5];
120  double dconcA=-gaz->f[4];
121  int status = gsl_odeiv_evolve_apply (e, c, s, &sys, &X, X1, &h, y);
122  if (status != GSL_SUCCESS)
123  break;
124  if(dLi<dconcA) {
125  dLi=dconcA;
126  TauI=y[3];
127  Li=X;
128  }
129
130  double Wm=1./(concA/gaz->Wm0+concB/gaz->Wm1+concC/gaz->Wm2);
131  double cv=gaz->cv0*concA+gaz->cv1*concB+gaz->cv2*concC;
132  double gamma0=1.+R/(gaz->Wm0*gaz->cv0);

```

```

133     double gamma=1.+R/(Wm*cv);
134     double rho=y[0],w=y[1],P=y[2]; //, lambda=y[4];
135     T=P*Wm/(rho*R);
136     Mach=sqrt(w*w*rho/(gamma*P));
137     double sumQ=gaz->Q1*gaz->f[4]+gaz->Q2*gaz->f[5];
138     double dcv=-gaz->cv0*gaz->f[4]+gaz->cv1*(gaz->f[4]-gaz->f[5])+gaz->cv2*gaz->f[5];
139     double d1overM=-gaz->f[4]/gaz->Wm0+(gaz->f[4]-gaz->f[5])/gaz->Wm1+gaz->f[5]/gaz->
        Wm2;
140     double Dentropy=cv*log(y[2]*pow(y[0],-gamma));
141     double eta=w*w*rho/(gamma*P);
142     double drho=gaz->f[0];
143     double dP=gaz->f[2];
144     double sigma=gaz->f[1]*(1.-Mach*Mach);
145     double Q=gamma*cv*T-gamma0*gaz->cv0*gaz->T0-0.5*(P-gaz->P0)*(1/rho+8.314*gaz->T0
        /(gaz->Wm0*gaz->P0));
146
147     fprintf(fichier,"%0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e
        %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e %0.5e \n", X, y[3], y[4],y
        [5],y[0],y[1],y[2]*1E-5,T,Mach,gaz->f[4],gaz->f[0],gaz->f[1],gaz->f[2],gaz->f
        [3],gamma,Wm, Dentropy,gaz->f[1]*(1.-eta),T*( dP/P-drho/rho-Wm*d1overM ),sumQ
        ,-P*Wm/(rho*R)*dcv,P*Wm*cv*Wm/(R*rho)*d1overM,sigma,Q);
148 }
149 }
150
151 fclose(fichier);
152 printf("Li=%0.3e m, Tau=%0.3e s (dLi/dxmax=%0.3e)\n",Li,Tau,dLi);
153
154 gsl_odeiv_evolve_free (e);
155 gsl_odeiv_control_free (c);
156 gsl_odeiv_step_free (s);
157 free(gazchoc);
158
159 cout << "Final Mach Number: " << Mach<<endl;
160 }
161
162
163
164 int main (int argc, char* argv[])
165 {
166     struct gas gaz;
167     string OutputFileName="output.dat";
168     double Vel=0.;
169     bool stanu=true;
170     if(argc<2) {cout << "Syntax Error: " << argv[0]<< endl; return 0;}

```

```
171 //Look into the directory and retrieve the matching files into a vector array.
172 vector<string> FileNameArray;
173 FileNameArray.reserve( 100 );
174 for(int i=1; i<argc ;i++){
175     if(strcmp(argv[i], "-v")==0){
176         cout << "twostep $Revision: 1.1 $ $Date: 2009/01/30 15:43:41 $" << endl;
177         return 1;
178     }
179     else if(strncmp(argv[i], "-P=", 3)==0){
180         string temp=argv[i];
181         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
182         gaz.P0=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
183     }
184     else if(strncmp(argv[i], "-T=", 3)==0){
185         string temp=argv[i];
186         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
187         gaz.T0=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
188     }
189     else if(strncmp(argv[i], "-Wm0=", 5)==0){
190         string temp=argv[i];
191         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
192         gaz.Wm0=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
193     }
194     else if(strncmp(argv[i], "-Wm1=", 5)==0){
195         string temp=argv[i];
196         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
197         gaz.Wm1=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
198     }
199     else if(strncmp(argv[i], "-Wm2=", 5)==0){
200         string temp=argv[i];
201         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
202         gaz.Wm2=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
203     }
204     else if(strncmp(argv[i], "-cv0=", 5)==0){
205         string temp=argv[i];
206         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
207         gaz.cv0=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
208     }
209     else if(strncmp(argv[i], "-cv1=", 5)==0){
210         string temp=argv[i];
211         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
212         gaz.cv1=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
213     }
214     else if(strncmp(argv[i], "-cv2=", 5)==0){
```

```
215     string temp=argv[i];
216     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
217     gaz.cv2=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
218 }
219 else if(strncmp(argv[i], "-Z1=",4)==0){
220     string temp=argv[i];
221     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
222     gaz.Z1=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
223 }
224 else if(strncmp(argv[i], "-Z2=",4)==0){
225     string temp=argv[i];
226     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
227     gaz.Z2=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
228 }
229 else if(strncmp(argv[i], "-Ea1=",5)==0){
230     string temp=argv[i];
231     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
232     gaz.Ea1=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
233 }
234 else if(strncmp(argv[i], "-Ea2=",5)==0){
235     string temp=argv[i];
236     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
237     gaz.Ea2=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
238 }
239 else if(strncmp(argv[i], "-n=",3)==0){
240     string temp=argv[i];
241     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
242     gaz.n=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
243 }
244 else if(strncmp(argv[i], "-Q1=",4)==0){
245     string temp=argv[i];
246     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
247     gaz.Q1=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
248 }
249 else if(strncmp(argv[i], "-Q2=",4)==0){
250     string temp=argv[i];
251     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
252     gaz.Q2=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
253 }
254 else if(strncmp(argv[i], "-o=",3)==0){
255     string temp=argv[i];
256     size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
257     OutputFileName=temp.substr(pos+1).c_str();
258 }
```

```

259     else if(strncmp(argv[i], "-D=stanu", 9)==0){
260         stanu=true;
261     }
262     else if(strncmp(argv[i], "-D=", 3)==0){
263         string temp=argv[i];
264         size_t pos = temp.find_last_of( '=' );
265         Vel=atof(temp.substr(pos+1).c_str());
266         stanu=false;
267     }
268
269 }
270
271 //Stanukovich estimation of detonation velocity
272 double G1=1.+R/(gaz.Wm0*gaz.cv0), G2=1.+R/(gaz.Wm2*gaz.cv2), c0=sqrt(G1*R/gaz.Wm0*gaz.
    TO);
273 double Dsimple=sqrt(2*(G1*G1-1.)*(gaz.Q1+gaz.Q2));
274 double Dstanu=c0*(sqrt((G2-1.)/2.*((G2+1.)*(gaz.Q1+gaz.Q2)/(c0*c0)+(G2+G1)/(G1*(G1
    -1.))))+sqrt((G2+1.)/2.*((G2-1.)*(gaz.Q1+gaz.Q2)/(c0*c0)-(G1-G2)/(G1*(G1-1.)))));
275 printf("G1=%.3f, G2=%.3f\n", G1, G2);
276 printf("Estimation vitesse simple : %.0f m/s & Stanukovich %.0f m/s\n", Dsimple, Dstanu)
    ;
277
278 if(stanu) Vel=Dstanu;
279
280 cout << "Vel=" <<Vel<< endl;
281 steadysys(&gaz, Vel, OutputFileName);
282
283 return 0;
284 }

```

Annexe C

Scripts utiles pour la détermination des paramètres du modèle

script1.py

```
1 from Cantera import *
2 from SDToolbox import *
3 P0=10000
4 T0=293
5 mixture="N02:0.187105,H2:0.776954,N2O4:0.035941"
6 mech="konnov04light.xml"
7 [DCJ,tol]=CJspeed(P0,T0,mixture,mech,0)
8 gasCJ=PostShock_eq(DCJ,P0,T0,mixture,mech)
9 gas0=importPhase(mech)
10 gas0.setState_TPX(T0,P0,mixture)
11 gasZND=PostShock_fr(DCJ, P0, T0, mixture, mech)
12
13 gamma0=(gasZND.pressure()-gas0.pressure())/(gasZND.pressure()+gas0.pressure()*(gasZND
14   .density()+gas0.density()/(gasZND.density()-gas0.density()))
15 gammaCJ=(1-gas0.pressure()/gasCJ.pressure())/(gasCJ.density()/gas0.density()-1)
16 c0=sqrt(gamma0*8.314/(gas0.meanMolecularWeight()*1E-3)*T0)
17 Qst=c0**2/(gammaCJ**2-1)*(((DCJ/c0)**4+(gammaCJ/gamma0)**2)/(2*(DCJ/c0)**2)-(gammaCJ
18   **2-gamma0)/(gamma0*(gamma0-1)))
19 cv0=8314/(gas0.meanMolecularWeight()*(gamma0-1))
20 cvCJ=8314/(gasCJ.meanMolecularWeight()*(gammaCJ-1))
21 print "P0=",gas0.pressure(), "Pa"
22 print "T0=",gas0.temperature(), "K"
23 print "gamma0=",gamma0
24 print "cv0=",cv0
25 print "Wm0=",gas0.meanMolecularWeight()/1E3,"kg/mol"
```



```
24 print "gammaCJ=",gammaCJ
25 print "cvCJ=",cvCJ
26 print "WmCJ=",gasCJ.meanMolecularWeight()/1E3,"kg/mol"
27 print "c0=",c0,"m/s"
28 print "Qstanu=",Qst,"J/kg"
29 print "Dcj=",DCJ,"m/s"
```

script2.sh

```
1 #!/bin/sh
2 for i in $(seq 2000 1 3000)
3 do
4 export name=$(printf "D%d" $i)
5 echo "#Initial_Temperature_(K)" >> $name.inp
6 echo "293" >> $name.inp
7 echo "#Initial_Pressure_(Pa)" >> $name.inp
8 echo "10000" >> $name.inp
9 echo "#Shock_Velocity" >> $name.inp
10 echo "$i" >> $name.inp
11 echo "#Mole_Fractions_(string)" >> $name.inp
12 echo "N02:0.187105,H2:0.776954,N2O4:0.035941" >> $name.inp
13 echo "#Mechanism_File_-_xml_format_(string)" >> $name.inp
14 echo "konnov04light.xml" >> $name.inp
15 echo "#Writing_output_frequency_flag(1_to_very_large)" >> $name.inp
16 echo "3" >> $name.inp
17 echo "#print_progress(1or0)" >> $name.inp
18 echo "1" >> $name.inp
19 echo "#Output_file_title(string)" >> $name.inp
20 echo "$name" >> $name.inp
21 echo "#Species_Number(0(for_none),-1(for_all),or_an_int)" >> $name.inp
22 echo "-1" >> $name.inp
23 echo "#Species" >> $name.inp
24 echo "-1" >> $name.inp
25
26 echo "cd /home/florentv/H2N02" >> $name.pbs
27 echo "./znd $name.inp" >> $name.pbs
28
29 qsub $name.pbs
30 done
```

script3.py

```

1 [Premiere partie identique a script1.py]
2
3 print "Second step after determining LVD regime"
4 #Analyse courbes integrales
5 LVD=2230
6 #LVD=0.6*DCJ
7 #A partir de la chimie detaillee
8 TMID=2595
9 Pmid=3.083506*101325
10 rhomid=1.857185e-01
11 WmMID=8.314*TMID*rhomid/Pmid
12 gammaMID=1.01
13 for i in range(1, 100000):
14     gammaMID=1.0+0.0001*i
15     Qmid=c0**2/(gammaMID**2-1)*(((LVD/c0)**4+(gammaMID/gamma0)**2)/(2*(LVD/c0)**2)-(
16         gammaMID**2-gamma0)/(gamma0*(gamma0-1)))
17     root=gammaMID/(gammaMID-1)*Pmid/rhomid-gamma0/(gamma0-1.)*gas0.pressure()/gas0.
18         density()-Qmid-0.5*(Pmid-gas0.pressure()*(1/rhomid+1/gas0.density()))
19     if root<10 :print gammaMID, root , Qmid/Qst, Qmid
20     if root <0.:break
21
22 cvMID=8.314/(WmMID*(gammaMID-1.))
23 print "./twostepcomplex -P=", gas0.pressure(), " -T=",gas0.temperature(), " -Wm0=",
24     gas0.meanMolecularWeight()/1E3," -Wm1=",WmMID, " -Wm2=",gasCJ.meanMolecularWeight
25     ()/1E3, " -cv0=",cv0, " -cv1=",cvMID," -cv2=",cvCJ," -Q1=",Qmid ," -Q2=", Qst-Qmid,
26     "-D=stannu -o=pyt.dat -Z1=3000 -n=1. -Ea1=250000 -Z2=150 -n=1. -Ea2=250000"

```


Annexe D

Bride pour huit capteurs pression

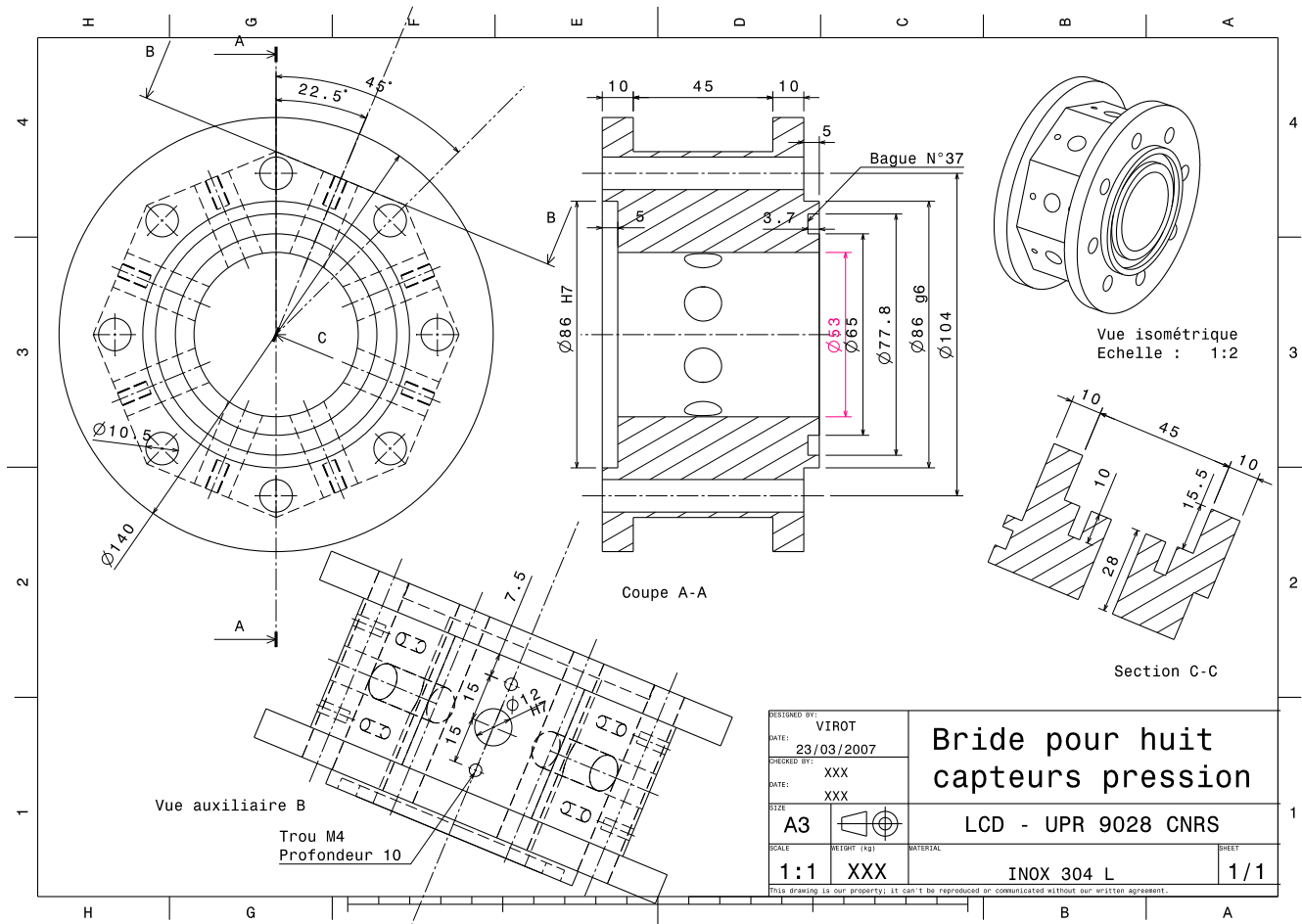


FIG. D.1 – Reproduction du plan de conception de la bride supportant jusqu'à huit capteurs pression dans la même section.

Bibliographie

- Abid S., Dupré G. et Paillard C. 1991. Oxidation of gaseous unsymmetrical dimethylhydrazine at high temperatures and detonation of $UDMH/O_2$ mixtures. *In Prog. Astronaut. Aeronaut.*, **153**, 162–181.
- Antolik K. 1875. Das gleiten elektrischer funken. *Annalen der Physik und Chemie [available on gallica.bnf.fr]*, **230**, 14–37.
- Auffret Y. 1998. *Etude de la détonation de mélanges gazeux à température initiale élevée*. Ph.D. thesis, Poitiers.
- Bartel H.O. et Strehlow R.A. 1966. Wave Propagation in One-Dimensional Reactive Flows. *The Physics of Fluids*, **9**(10), 1896–1907.
- Berthelot M. 1881. Sur la vitesse de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz. *Compte Rendu Hebdomadaires de l'Académie des Sciences*, **T93**, 18–27.
- Berthelot M. et Vieille P. 1882. Sur la vitesse de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz. *Compte Rendu Hebdomadaires de l'Académie des Sciences*, **T94**, 101.
- Boris J.P., Landsberg A., Oran E.S. et Gardner J.H. 1993. LCPFCT : Flux-Corrected Transport Algorithm for Solving Generalized Continuity Equations. *Naval Research Laboratory Report*, **NRL/MR/6410-93-7192**.
- Brochet C. 1966. *Contribution à l'étude des détonations instables dans les mélanges gazeux*. Ph.D. thesis, Université de Poitiers.
- Brown P., Collier A., Grant K., Hindmarsh A., Lee S., Serban R. et Woodward C. 2006 v2.3. SUNDIALS (SUite of Nonlinear and Differential/ALgebraic equation Solvers). computation.llnl.gov/casc/sundials/main.html.
- Browne S., Ziegler Z. et Shepherd J. 2007. Shock and Detonation Toolbox. www.galcit.caltech.edu/EDL/public/cantera/html/SDToolbox.
- Bruneau M. 1998. *Manuel d'acoustique fondamentale*. Hermès.

- Bull D.C., Elsworth J.E., Shuff P.J. et Metcalfe E. 1982. Detonation Cell Structures in Fuel/Air Mixtures. *Combustion and Flame*, **45**, 7–22.
- Campbell C. et Woodhead D.N. 1927. Striated Photographic Records of Explosion Waves (The Ignition Gases by Explosion Wave : Part Carbon Monoxide Hydrogen Mixture). *Journal of the chemical society*, 1572–1578.
- Chapman D.L. 1899. On the Rate of explosion in gases. *Philosophical Magazine*, **47**, 90–104.
- Chase M.W, Davies C.A., C.A., Davies J.R., Fulrip D.J., McDonald R.A et Syverud A.N. 1985. JANNAF Thermochemical Tables. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **14**.
- Chu B-T. 1956. Vibration of the gaseous column behind a strong detonation wave. *1st Gas Dynamics Symposium on Aerochemistry*, 95/111.
- Clavin P. 2004. Theory of gaseous detonations. *Chaos*, **14**(3), 825–838.
- Denisov Yu.N. et Troshin Ya.K. 1959. Pulsating spinning detonation gaseous mixture tubes. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, **125**, 110–113.
- Denisov Yu.N. et Troshin Ya.K. 1962. On the Mechanism of Detonative Combustion. *8th symposium on Combustion*, 600–610.
- Denisov Yu.N. et Troshin Ya.K. 1971. The Fine Structure of Spinning Detonation. *Combustion and Flame*, **16**, 141–145.
- Desbordes D. 1988. Transmission of overdriven plane detonations : Critical diameter as a function of cell regularity and size. *Prog. Astronaut. Aeronaut*, **114**, 170–185.
- Desbordes D. 1990. *Aspects stationnaires et transitoires de la detonation dans les gaz : relation avec la structure cellulaire du front*. Ph.D. thesis, Université de Poitiers.
- Desbordes D., Manson N. et Brossard J. 1982. Influence of Walls on Pressure Behind Self-Sustained Expanding Cylindrical and Plane Detonations in Gases. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, **87**, 302–317.
- Desbordes D., Presles H.N., Joubert F. et Gbagdo Douala C. 2004. Etude de la détonation de mélanges pauvres $H_2 - NO_2/N_2O_4$. *C.R. Mécanique*, **332**, 993–999.
- Djebaïli-Chaumeix N., Abid S. et Paillard C.E. 1997. Shock tube study of the nitromethane decomposition and oxidation. *21st Symposium on Shock Waves*, **1**, 121–126.
- Döring W. 1943. Über den Detonationsvorgang in Gasen. *Annalen der Physik*, **435**, 421–436.
- Dormal M., Libouton J-C. et Van Tiggelen P.J. 1979. Evolution of induction time in detonation cells. *Acta Astronautica*, **6**, 875–884.

- Dove J.E. et Wagner H.G.G. 1962. A Photographic Investigation of the Mechanism of Spinning Detonation. *8th Symposium on Combustion*, 589–600.
- Duff R.D. 1961. Investigation of Spinning Detonation and Detonation Stability. *The Physics of Fluids*, **4**(4), 1427–1433.
- Edwards D.H et Parry D.J. 1969. The Structure of Transverse Waves in Detonations. *Astronautica Acta*, **14**, 533–537.
- Edwards D.H, Parry D.J. et Jones A.T. 1966. On the Coupling between Spinning Detonation and Oscillations behind the Wave. *British Journal of Applied Physics*, **17**, 1507–1510.
- Fay James A. 1952. A Mechanical Theory of Spinning Detonation. *The journal of chemical physics*, **20**(6), 942–950.
- Franck-Kamenetskii D.A. 1955. *Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics*. Princeton University Press.
- Galassi et al. M. 2008. The GNU Scientific Library - a free numerical library licensed under the GNU GPL. <http://www.gnu.org/software/gsl/>.
- Gamezo V.N., Desbordes D. et Oran E.S. 1999. Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations. *Combustion and Flame*, **116**, 154–165.
- Gamezo V.N., Vasil'ev A.A., Khokhlov A.M. et Oran E.S. 2000. Fine Cellular Structures Produced by Marginal Detonations. *28th Symposium on Combustion*, 611–617.
- Glassman I. 1987. *Combustion*. second edn. Harcourt Brace Jovanovich, Publishers.
- Goodwin D. G. 2002. Cantera : Object-oriented software for reacting flows. blue.caltech.edu/cantera/index.html.
- Gordon W.E., Mooradian A.J. et Harper S.A. 1958. Limit and Spin Effects in Hydrogen-Oxygen Detonations. *7th Symposium on Combustion*, 752–759.
- Guilly V. 2007. *Etude de la diffraction de la détonation des mélanges C₂H₂–O₂ stœchiométriques dilués par l'argon*. Ph.D. thesis, Université de Poitiers.
- Guilly V., Khasainov B., Presles HN. et Desbordes D. 2006. Simulation numérique des détonations à double structure cellulaire. *C.R. Mécanique*, **334**, 679–685.
- Guirao C.M., Knystautas R., Lee J.H.S, Benedick W. et Berman M. 1982. Hydrogen-air detonations. *19th Symposium on Combustion*, 583–590.
- Haloua F., Brouillette M., Lienhart V. et Dupre G. 2000. Characteristics of Unstable Detonations Near Extinction Limits. *Combustion and Flame*, **122**, 422–438.

- He L. et Clavin P. 1994. In the Direct Initiation of Gaseous Detonation in by an Energy Source. *Journal of Fluid Mechanics*, **277**, 227–248.
- Hirsch C. 1988a. *Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol 1 : Fundamentals of Numerical Discretization*. John Wiley & Sons.
- Hirsch C. 1988b. *Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol2 : Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. John Wiley & Sons.
- Hu X.Y, Khoo B.C., Zhang D.L. et Jiang Z.L. 2004. The Cellular Structure of a Two-dimensional $H_2/O_2/Ar$ Detonation Wave. *Combustion Theory and Modelling*, **8**, 339–359.
- Hu X.Y., Zhang D.L., Khoo B.C. et Jiang Z.L. 2005. The Structure and Evolution of a two-dimensional $H_2/O_2/Ar$ cellular detonation. *Shock Waves*, **14**, 37–44.
- Huang Z.W. et Van Tiggelen P.J. 1992. Experimental study of the Fine Structure in Spin Detonation. *Pages 132–143 of : Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 153. AIAA.
- Huang Z.W., Lefebvre M.H. et Van Tiggelen P.J. 2000. Experiments on Spinning Detonations with Detailed Analysis of the Shock Structure. *Shock Waves*, **10**, 119–125.
- Joubert F. 2001. *Etude de la détonation de mélanges réactifs constitués d'un combustible (H_2 , CH_4 , C_2H_6 , C_2H_4) et d'un oxyde d'azote (N_2O , NO_2/N_2O_4)*. Ph.D. thesis, Université de Poitiers.
- Joubert F., Desbordes D. et Presles HN. 2008. Detonation Cellular Structure in NO_2/N_2O_4 –fuel Gaseous Mixtures. *Combustion and Flame*, **152**, 482–495.
- Jouguet E. 1905. Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz. *Journal des mathématiques pures et appliquées*, **1**, 327–425.
- Kasimov A. et Stewart D.S. 2002. Spinning Instability of Gaseous Detonations. *Journal of Fluid Mechanics*, **466**, 179–203.
- Kee R. J., Rupley F. M. et Miller J. A. 1989. Chemkin II : a Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. *Sandia National Laboratories Report SAND89-8009*.
- Khasainov B. et Veyssière B. 1996. Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures. *Shock Waves*, **6**(1), 9–15.
- Khasainov B., Priault C., Presles H.N. et Desbordes D. 2001. Influence d'un obstacle central sur la transmission d'une détonation d'un tube dans un grand volume. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics*, **329**(9), 679–685.

- Khasainov B., Presles HN., Desbordes D., Demontis P. et Vidal P. 2005. Detonation diffraction from circular tubes to cones. *Shock Waves*, **14**(3), 187–192.
- Knystautas R., Lee J.H.S et Guirao C.M. 1982. The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures. *Combustion and Flame*, **48**, 63–83.
- Knystautas R., Guirao C., Lee J.H.S et A. Sulmistras A. 1984. Measurement of cell size in hydrocarbon-air mixtures and predictions of critical tube diameter, critical initiation energy, and detonability limits. *Pages 23–37 of : Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 94. AIAA.
- Konnov A.A. 2000 v0.5. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. *homepages.vub.ac.be/ akonnov*.
- Kuo Kenneth K. 1986. *Principles of combustion*. Wiley-Interscience.
- Laberge S., Knystautas R. et Lee J.H.S. 1993. Propagation and extinction of detonation waves in tube bundles. *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, **153**, 381–396.
- Lamb H. 1975. *Hydrodynamics*. sixth edn. Cambridge University Press.
- Lamoureux N., Matignon C., Sturtzer MO., Desbordes D. et Presles HN. 2001. Interprétation de la double structure observée dans l'onde de détonation du nitrométhane gazeux. *C.R. Acad. Sci. Paris*, **329**, **IIb**, 687–692.
- Lee J.J., Dupré G., Knystautas R. et Lee J.H. 1995. Doppler interferometry study of unstable detonations. *Shock Waves*, **5**, 175–181.
- Lefebvre M.H., Oran E.S. et Van Tiggelen P.J. 1992. Simulation of Cellular Structure in a Detonation Wave. *In : Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 153. AIAA.
- Libouton J-C., Jacques A. et Van Tiggelen P.J. 1981. Cinétique, structure et entretien des ondes de détonations. *Actes du colloque international Berthelot-Vieille-Mallard-Le Chatelier*, **2**, 437–442.
- Macpherson A.K. 1969a. On the Structure of Single Headed Spin Detonation. *Astronautica Acta*, **14**, 549–558.
- Macpherson A.K. 1969b. The Three-dimensional Wave System Of Spinning Detonation. *12th Symposium on Combustion*, 839–850.
- Mallard E. et Le Chatelier H. 1881. Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les mélanges explosifs. *Compte Rendu Hebdomadaires de l'Académie des Sciences*, **T93**, 145–148.
- Manson N. 1946. On the structure of so-called helical detonation waves in gaseous mixture. *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. [available on gallica.bnf.fr]*, **222**, 46–48.

- Manzhalei V.I. 1977. Fine Structure of the Leading Front of a Gas Detonation. *Combust. Explos. Shock Waves (USSR)*, **13**(3), 402–404.
- Manzhalei V.I. et Mitrofanov V.V. 1973. The Stability of Detonation Shock Waves with a Spinning Configuration. *Combust. Explos. Shock Waves (USSR)*, **9**(5), 614–620.
- Manzhalei V.I., Mitrofanov V.V. et Subbotin V.A. 1974. Measurement of inhomogeneities of a detonation front in gas mixtures at elevated pressures. *Combust. Explos. Shock Waves (USSR)*, **10**, 89–95.
- Mitrofanov V.V. et Soloukhin R.I. 1965. The diffraction of multifront detonation waves. *Soviet Physics-Doklady*, **9**(12), 1055–1058.
- Morley C. 2005. GASEQ. *www.arcl02.dsl.pipex.com*.
- Nikolaev Yu.A., Topchiyan M.E. et Ul'yanitskii V.Yu. 1978. Experimental Investigation and Calculation of Triple Configurations of Spin Detonation. *Combust. Explos. Shock Waves (USSR)*, **14**(6), 790–793.
- Oppenheim A.K. 1965. Novel Insight into the Structure and Development of Detonation. *Astronautica Acta*, **11**(6), 391–400.
- Oppenheim A.K., Smolen J.J. et Zajac L.J. 1968. Vector Polar Method for the Analysis of Wave Interactions. *Combustion and Flame*, **12**, 63–76.
- Oran E.S. et Boris J.P. 2001. *Numerical Simulation of Reactive Flow*. second edn. Cambridge University Press.
- Oran E.S., Young T.R., Boris J.P., Picone J.M. et Edwards D.H. 1982. A Study of Detonation Structure : The Formation of Unreacted Gas Pockets. *Proceedings Symposium (International) on Combustion*, **19**, 573–582.
- Paterson A.R. 1983. *A First Course in Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.
- Pelhate M. 1966. *Dispositif radar à effet doppler destiné à la mesure de la célérité d'une détonation dans un mélange gazeux*. Ph.D. thesis, Poitiers.
- Presles H.N., Desbordes D., Guirard M. et Guerraud G. 1996. Gaseous Nitromethane and Nitromethane-Oxygen Mixtures : a New Detonation Structure. *Shock Waves*, **6**, 111–114.
- Prigogine I. 1996. *Introduction à la thermodynamique des processus irréversibles*. Gabay.
- Reynolds W. C. 1986. The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis : Implementation in the Interactive Program STANJAN. *Department of Mechanical Engineering, Stanford University*.

- Schott G.L. 1965. Observations of the Structure of Spinning Detonation. *The Physics of Fluids*, **8**(5), 850–865.
- Sharpe G.J. et Falle S.A.E.G. 2000. Numerical Simulations of Pulsating Detonations : I. Nonlinear Stability of Steady Detonations. *Combustion Theory and Modelling*, **4**, 557–574.
- Sharpe G.J. et Quirk J.J. 2008. Nonlinear Cellular Dynamics of the Idealized Detonation Model : Regular Cells. *Combustion Theory and Modelling*, **12**(1), 1–21.
- Shchelkin K.I et Troshin Ya.K. 1963a. Gasodynamika Goreniya [Gas dynamics of combustion]. *Izdatel Akad. Nauk SSSR Moscow [english trans NASA TT-F-231]*.
- Shchelkin K.I et Troshin Ya.K. 1963b. Non-stationary Phenomena in the Gaseous Detonation Front. *Combustion and Flame*, **7**, 143–151.
- Smith G.P., Golden D. M., Frenklach M., Moriarty N. W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R. K., Song S., Gardiner W.C., Lissianski V.V et Qin Z. 1999. Gri-Mech 3.0. www.me.berkeley.edu/gri_mech.
- Sod G.A. 1978. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, **27**, 1–31.
- Stamps D.W., Benedick W.B. et Tieszen S.R. 1991. Hydrogen-air-diluent detonation study for nuclear reactor safety analyses. *Technical Report NUREG/CR-5525, SAND89-2398, Sandia National Laboratories*.
- Stanukovich K. P. 1960. *Unsteady Motion of Continuous Media*. Pergamon Press, New York.
- Stewart D.S., Aslam T.D. et Yao J. 1996. On the Evolution of Cellular Detonation. *26th Symposium on Combustion*, 2981–2989.
- Strehlow R.A. et Crooker A.J. 1974. The Structure of Marginal Detonation Waves. *Acta Astronautica*, **1**, 303–315.
- Strehlow R.A. et Engel C.D. 1969. Transverse Waves in Detonations : II. Structure and Spacing in $H_2 - O_2$, $C_2H_2 - O_2$, $CH_4 - O_2$ Systems. *AIAA Journal*, **7**(2), 492–496.
- Strehlow R.A., Liaugminas R., Watson R.H. et Eyman J.R. 1967. Transverse Wave Structure in Detonations. *11th Symposium on Combustion*, 683–691.
- Strehlow R.A., Maurer R.E. et Rajan S. 1969. Transverse Waves in Detonations : I. Spacing in the Hydrogen-Oxygen System. *AIAA Journal*, **7**(2), 323–328.
- Sturtzer M.O., Lamoureux N., Matignon C., Desbordes D. et Presles H.N. 2005. On the origin of the double cellular structure of the detonation in gaseous nitromethane and its mixture with oxygen. *Shock Waves*, **14**, 45–51.

- Taki S. et Fujiwara T. 1978. Numerical Analysis of Two-Dimensional Nonsteady Detonations. *AIAA Journal*, **16**, 73–77.
- Topchian M.E. et Ul'yanitskii V.Yu. 1976. Nature of one kind of instability of spin detonation. *Combust. Explos. Shock Waves*, **12**(2), 270–275.
- Tsuboi N., Hayashi A.K. et Eto K. 2005. Three-dimensional numerical simulation of H₂/Air detonation in a circular tube : Structure of spinning mode. *In : 20th ICDERS*.
- Tsuboi N., Eto K. et Hayashi A.K. 2007. Detailed structure of spinning detonation in a circular tube. *Combustion and Flame*, **149**, 144–161.
- Ul'yanitskii V.Yu. 1980. Experimental investigation of the volumetric structure of a spinning detonation. *Combust. Explos. Shock Waves*, **16**(1), 99–103.
- Vasil'ev A.A. 2007. Correctness of Kinetic Data for Prediction of Multifront Detonation : Effect of Nitrogen. *Proceedings of 21st ICDERS*.
- Vasil'ev A.A. 2008. Kinetic Data and Accuracy of Prediction of Detonation Parameters. *Combust. Explos. Shock Waves (USSR)*, (**submitted**).
- Vasil'ev A.A., Gavrilenko T.P., Mitrofanov V.V., Subbotin V.A. et Topchian M.E. 1972a. Location of the Sonic Transition Behind a Detonation Front. *Combust. Explos. Shock Waves (USSR)*, **8**, 80–84.
- Vasil'ev A.A., Gavrilenko T.P. et Topchian M.E. 1972b. On the Chapman-Jouguet Surface in Multi-headed Gaseous Detonations. *Astronautica Acta*, **17**, 499–502.
- Victorov S. B., Gubin S. A. et Maklashova I. V. 2001. An equation of state and detonation properties of hydrazine-nitromethane liquid mixtures. *Shock Waves*, **11**, 105–114.
- Vieille P. 1900. Sur le rôle des discontinuités dans les phénomènes de propagation. *Mémoire des poudres et Salpêtres*, **10**, 177.
- Voitsekhovskii B.V., Mitrofanov V.V. et Topchian M.E. 1969. Investigation of the Structure of Detonation Waves in Gases. *International Symposium of Combustion*, **12**, 829–837.
- von Neuman J. 1942. Theory of Detonation Waves. *Progress report to the National Defense Research Committee*, PB 31090.
- Washizu T. et Fujiwara T. 1993. A Numerical Study of Spinning Detonation. *Proceedings of the 14th ICDERS*, D1–9.
- Wood W.W. 1961. Existence of Detonations for Small Values of the Rate Parameter. *The Physics of Fluids*, **4**(1), 1081–1090.

- Wood W.W. 1963. Existence of Detonations for Large Values of the Rate Parameter. *The Physics of Fluids*, **6**(8), 1081–1090.
- Yungster S. et Radhakrishnan K. 2005. Structure and Stability of One-Dimensional Detonations in Ethylene-Air Mixtures. *Shock Waves*, **14**, 61–72.
- Zel'dovich Y.B. 1940. On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz. (Journal of Experimental and Technical Physics)*, **10**, 542–568.
- Zel'dovich Y.B., Kogarko S.M. et Simonov N.N. 1956. An experimental investigation of spherical detonation of gases. *Sov. Phys. Tech. Phys*, **1**(8), 1689–1713.

Contribution à l'étude expérimentale et numérique du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes H_2 , CH_4 , $C_2H_6-O_2$ dilués ou non par N_2 ou Ar .

Résumé

Les détonations des mélanges gazeux C_nH_m/O_2 ($n \geq 0$) fortement dilués par un gaz inerte ainsi que les mélanges C_nH_m ($n \geq 0$) avec l'oxydant NO_2 présentent une loi de libération d'énergie chimique non monotone constituée de deux étapes réactionnelles globales plus ou moins séparées. A chaque longueur chimique caractéristique L est associée une structure cellulaire dont la largeur de cellule λ est proportionnelle à L . L'objectif de ce travail est de comprendre, pour les applications en lien avec la sécurité d'utilisation de ces compositions notamment, l'influence de la loi de libération de l'énergie chimique de ces mélanges sur le régime hélicoïdal (limite) de propagation stationnaire des détonations dans les tubes de diamètre d obtenu lorsque $\lambda \approx \pi d$. L'étude expérimentale, concernant les combustibles H_2 , CH_4 et C_2H_6 mélangés avec O_2 dilués ou non par N_2 ou Ar , montre que la plage de pression initiale où le régime hélicoïdal est établi dépend étroitement de l'importance relative de la deuxième étape exothermique par rapport à la première. Les simulations numériques 3D utilisant un code hydrodynamique Eulérien et une modélisation de la loi de production chimique en une ou deux étapes globales s'accordent qualitativement aux résultats expérimentaux en obtenant le régime hélicoïdal pour chaque structure cellulaire (λ pour les mélanges où la libération d'énergie chimique s'effectue en une seule étape ; λ_1 et λ_2 dans le cas d'une double structure).

Experimental and numerical study of spinning detonation regime in H_2 , CH_4 , $C_2H_6 - O_2$ mixtures diluted or not by N_2 or Ar .

Abstract

Detonation of gaseous mixtures such as C_nH_m/O_2 ($n \geq 0$) highly diluted by an inert gas or C_nH_m/NO_2 ($n \geq 0$) have non monotonous chemical heat release composed of two global reaction steps more or less separated. Each chemical characteristic length L_i is associated with a detonation cellular structure whose cell width λ is proportional to L_i . The aim of this work is to understand, especially for safety problems in industrial applications using these mixtures, the influence of the chemical heat release on spinning detonation regime known as the limit of the steady propagation in a tube of inner diameter d and obtained when $\lambda = \pi d$. The experimental study which concerns H_2 , CH_4 , C_2H_6 combustibles mixed with O_2 diluted or not by N_2 or Ar , shows that initial pressure range where the steady spinning regime is observed strongly depends on the position of the second step relative to the first one. The 3D numerical simulations using hydrodynamic code and a one-step or two-step global chemical kinetics model agree qualitatively with experiments by reproducing the spinning regime for each cellular structure (λ for mixtures which exhibit one-step chemical heat release ; λ_1 and λ_2 in the case of double structure).

Mots-clés

Détonation, structure cellulaire, limite de propagation, régime marginal, front de détonation, double structure, double étape, cinétique chimique.