

Contribution à l'étude de la structure des détonations dans les milieux biphasiques

Arnaud Briand

► To cite this version:

Arnaud Briand. Contribution à l'étude de la structure des détonations dans les milieux biphasiques. Sciences de l'ingénieur [physics]. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechique - Poitiers, 2009. Français. NNT: . tel-00460888

HAL Id: tel-00460888 https://theses.hal.science/tel-00460888

Submitted on 2 Mar 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.

THESE

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 Arnaud BRIAND

* * * * * * * *

Contribution à l'étude de la structure des détonations dans les milieux biphasiques

* * * * * * * *

Directeurs de thèse

B. VEYSSIERE B.A. KHASAINOV

Laboratoire de Combustion et de Détonique

* * * * * *

Soutenue le 05 novembre 2009 devant la Commission d'Examen

$\sim \underline{JURY} \sim$

G. DAMAMME	Assistant du Directeur Scientifique du CEA-DAM, Bruyères-Le-Châtel, rapporteur
E. DANIEL	Professeur à l'Université d'Aix - Marseille I, rapporteur
B.A. Khasainov	Ingénieur de Recherches au CNRS au LCD de Poitiers, directeur de thèse
I. Sochet	Professeur à l'ENSIB de Bourges, examinateur
A. Trotsyuk	Directeur de Recherches à l'Institut de Mécanique de Novosibirsk, examinateur
B. Veyssiere	Directeur de Recherches au CNRS au LCD de Poitiers, directeur de thèse

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier Mr Henri Noël Presles, directeur du Laboratoire de Combustion et de Détonique (LCD UPR CNRS 9028), de m'avoir accueilli au sein de l'équipe Détonation du laboratoire durant ces travaux de thèse.

J'exprime également ma gratitude envers Mr Bernard Veyssière, Directeur de Recherche, ainsi qu'envers Mr Boris Khasainov, Ingénieur de Recherche, qui ont été mes directeurs de thèse durant ces trois années et avec qui j'ai eu grand plaisir à échanger aussi bien scientifiquement qu'humainement. Leurs conseils, compétences et connaissances sur les détonations ont été pour moi d'un grand intérêt et d'une grande utilité pour mener à bien ces travaux de thèse.

Mes remerciements s'adressent également à Mr Gilles Dammame, Assistant du Directeur Scientifique du CEA-DAM à Bruyères-Le-Châtel, et à Mr Eric Daniel, Professeur à l'Université d'Aix-Marseille I, qui ont jugé ce travail en tant que rapporteurs. J'exprime toute ma reconnaissance envers Mme Isabelle Sochet, Professeur à l'ENSIB de Bourges, ainsi qu'à Mr Anatoly Trotsyuk, Directeur de Recherche à l'Institut de Mécanique de Novosibirsk, respectivement membre et président du jury de thèse.

Je remercie également tout le personnel du laboratoire, avec qui j'ai eu l'occasion d'échanger, de nouer des liens aussi bien professionnels qu'amicaux, et qui n'a pas hésité à s'impliquer lorsque je l'ai sollicité (merci Jocelyne!), que ce soit pour une raison scientifique, administrative ou personnelle. Chacun à sa manière m'a aidé à mener à bien mon projet de thèse.

J'ai une pensée tout particulière pour les doctorants que j'ai côtoyés, et ceux devenus depuis jeunes docteurs, en particulier Raphaël, Yann et Julie, mes voisins de bureau, et ceux de l'équipe Combustion dans les Moteurs (Maxime, Camille, John, Bastien, Laetitia et Vivien). Remercions au passage les différentes machines à café que nous avons testées tous ensemble, autour d'une conversation scientifique ou autre. Je remercie également l'équipe russe qui a tenté de m'apprendre une langue et un alphabet nouveaux pour moi (Irina, Ekaterina, Yakhya, Sergei, Boris), ainsi que toutes les autres personnes que j'ai rencontrées lors de mon séjour au laboratoire (Ludovic, Yassine, Guillaume, Vianney, Gabriel, Laurence et tous les autres).

Je tiens de même à exprimer ma reconnaissance à l'encontre de tous les musiciens avec qui j'ai joué ou échangé, en particulier Witty Alley (merci Mathieu, Julien, Anthony, Caryl et Benjamin), Camille, Atabak, les deux Alex, Maxime, Jack, Cedric, etc...

Enfin, un grand merci à l'ensemble de ma famille, en particulier mes parents Michel et Evelyne, ainsi qu'à Julie, qui m'ont toujours soutenu et encouragé durant ces travaux et qui ont par leur engagement largement contribué à l'avènement de ce projet de thèse.

Table des matières

N	omen	clatur	e	vii
Ta	able o	les figu	ires	xix
Li	ste d	es tabl	leaux	xxii
In	trod	uction		1
Ι	\mathbf{Et}	ude b	ibliographique	5
1	Eta siqu	t des c le	onnaissances sur les détonations hétérogènes en milieu bipha-	9
	1.1	Généra	alités sur les détonations homogènes et hétérogènes	9
		1.1.1	Rappel de quelques définitions	9
		1.1.2	Le modèle Chapman Jouguet des détonations	12
		1.1.3	Le modèle Zel'dovich - Von Neumann - Döring	17
		1.1.4	Structure tridimensionnelle de l'onde de détonation	19
		1.1.5	Les spécificités des détonations en milieu biphasique	24
	1.2	Les dé	tonations hétérogènes gaz / particules solides $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	27
2	Les	détona	ations hétérogènes gaz / particules d'aluminium	33
	2.1	Combu	stion de l'aluminium	33
		2.1.1	Introduction	33
		2.1.2	Inflammation des particules d'aluminium	34
		2.1.3	Loi de combustion d'une particule d'aluminium $\ldots \ldots \ldots \ldots$	35
		2.1.4	Cas de l'inflammation derrière une onde de choc	37
	2.2	Donné	es expérimentales sur les détonations hétérogènes gaz oxydant / par-	

		······································	
	ticules	s d'aluminium	39
	2.2.1	Détonations en milieu confiné	39
	2.2.2	Initiation, détonabilité et expériences non confinées	40
	2.2.3	Structure cellulaire	42
2.3	Résult	tats d'études numériques des détonations hétérogènes gaz oxydant /	
	partic	ules d'aluminium	45

		2.3.1	Simulations 1D	45
	0.4	2.3.2	Simulations 2D - Structure cellulaire	47
	2.4	Concil	isions sur les detonations nétérogènes de suspensions d'aluminium en	50
		atmos	phere gazeuse oxydante	50
3	Les	détona	ations hétérogènes gaz $/$ gouttelettes liquides	55
	3.1	Introd	uction	55
	3.2	Premi	ères études de détonations de gouttelettes liquides en atmosphère	
		gazeus	e	56
	3.3	Comb	ustion de gouttelettes liquides derrière un choc	58
		3.3.1	Les différents régimes de désintégration de gouttelettes liquides	58
		3.3.2	Applications à la détonation	64
	3.4	Donné	ses expérimentales sur les détonations hétérogènes gaz oxydant /	
		goutte	lettes liquides réactives	66
		3.4.1	Détonations hétérogènes en milieu confiné : effet du diamètre de	
			tube et de la taille des gouttelettes liquides	67
		3.4.2	Détonations hétérogènes en milieu non confiné	68
		3.4.3	Structure cellulaire des détonations de gouttelettes liquides en at-	
			mosphère gazeuse	69
		3.4.4	Initiation et détonabilité	70
	3.5	Résult	ats des travaux numériques sur les détonations hétérogènes gaz oxy-	
		dant /	gouttelettes liquides réactives	73
		3.5.1	Modélisation	73
		3.5.2	Résolution numérique	75
		3.5.3	Initiation et détonabilité	76
	0.0	3.5.4	Etudes récentes	77
	3.6	Conclu	usion sur les détonations de gouttelettes liquides en atmosphère gazeus	e 79
Π	\mathbf{L}	es dét	onations hétérogènes gaz - particules d'aluminium	81
4	Mo	délisat	ion numérique	85
-	4.1	Introd	uction \ldots	85
	4.2	Equat	ions de bilan pour la phase gazeuse	85
	4.3	Equat	ions de bilan pour la phase solide	86
	4.4	Intera	ctions entre les phases gazeuse et solide	87
		4.4.1	Cinétique de combustion et transfert de masse	87
		4.4.2	Taux d'échange de quantité de mouvement	90
		4.4.3	Flux de chaleur entre les deux phases	90
	4.5	Param	lètres thermodynamiques et équation d'état	91
	4.6	Traite	ment numérique du système d'équations	92
	-	4.6.1	Discrétisation du problème et stabilité du schéma numérique	92
		4.6.2	Maillage Numérique	94

	4.6.3	Intégration par la méthode FCT (Flux-Corrected Transport)	96
	4.6.4	Initialisation du problème	98
	4.6.5	Performances et temps de calcul	99
4.7	Calibra	tion du modèle numérique sur les résultats expérimentaux existant .	101
	4.7.1	Positionnement du problème	101
	4.7.2	Calibration de la cinétique chimique du modèle	103
Rés	ultats d	e simulations monodimensionnelles des détonations gaz - par	_
ticu	ıles d'alı	uminium	107
5.1	Introdu	$\operatorname{ction} \ldots \ldots$	107
5.2	Mélang	e air - aluminium	108
	5.2.1	Célérité de détonation	108
	5.2.2	Pic de pression	109
	5.2.3	Taux d'échanges de masse entre les gaz et les particules	110
	5.2.4	Profils caractéristiques des paramètres d'écoulement	111
5.3	Mélange	e oxygène - aluminium	114
	5.3.1	Célérité de détonation	114
	5.3.2	Pic de pression	115
	5.3.3 '	Termes d'échanges de masse entre les gaz et les particules	115
	5.3.4	Profils caractéristiques des paramètres d'écoulement	117
5.4	Conclus	sions sur les deux modèles de combustion des particules d'aluminium	n 117
Las	structur	e cellulaire des détonations gaz - particules d'aluminium	123
6.1	Introdu	ction	123
6.2	Modèle	à deux étapes	123
	6.2.1	Mélange air - aluminium	123
	6.2.2	Mélange oxygène - aluminium	127
6.3	Modèle	hybride	130
	691	•	
	0.5.1	Mélange air - aluminium	130
	6.3.2	Mélange air - aluminium	130 133
6.4	6.3.2 Spécific	Mélange air - aluminium	130 133 136
$6.4 \\ 6.5$	6.3.2 Spécific Influenc	Mélange air - aluminium	130 133 136 139
$6.4 \\ 6.5 \\ 6.6$	6.3.2 Spécific Influence Compor	Mélange air - aluminium	130 133 136 139
$6.4 \\ 6.5 \\ 6.6$	6.3.2 Spécific Influence Compose / partice	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141
6.4 6.5 6.6	6.3.2 Spécific Influence Compon / partice 6.6.1	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147
6.4 6.5 6.6	6.3.2 Spécific Influence Compor / partice 6.6.1 6.6.2	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147 149
6.46.56.6	6.3.2 Spécific Influence Compor / partice 6.6.1 6.6.2 Influence	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147 149
6.46.56.6	6.3.2 Spécific Influence Compor / partice 6.6.1 6.6.2 Influence duction	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147 149 151
6.46.56.66.7	6.3.2 Spécific Influence Compor / partice 6.6.1 6.6.2 Influence duction 6.7.1	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147 149 151
6.46.56.6	6.3.2 Spécific Influence Compor / partice 6.6.1 6.6.2 Influence duction 6.7.1	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147 149 151 152
6.46.56.6	6.3.2 Spécific Influence Compor / partice 6.6.1 6.6.2 Influence duction 6.7.1	Mélange air - aluminium	 130 133 136 139 141 147 149 151 152 153
	 4.7 Résticu 5.1 5.2 5.3 5.4 La s 6.1 6.2 6.3 	4.6.4 4.6.5 4.7 Calibra 4.7.1 4.7.2 Résultats d ticules d'ala 5.1 Introdu 5.2 Mélang 5.2.1 5.2.2 5.2.3 5.2.4 5.3 Mélang 5.3.1 5.3.2 5.3.4 5.3.2 5.3.4 5.3.4 5.4 Conclus La structur 6.1 Introdu 6.2 Modèle 6.2.1 6.2.2 6.3 Modèle	4.6.4 Initialisation du problème 4.6.5 Performances et temps de calcul 4.7 Calibration du modèle numérique sur les résultats expérimentaux existant 4.7.1 Positionnement du problème 4.7.2 Calibration de la cinétique chimique du modèle 5.2 Calibration de la cinétique chimique du modèle 5.1 Introduction 5.2 5.2 Mélange air - aluminium 5.2 5.2.1 Célérité de détonation 5.2.2 5.2.2 Pic de pression 5.3.1 5.3.1 Célérité de détonation 5.3.2 5.3.2 Pic de pression 5.3.3 5.3.3 Termes d'échanges de masse entre les

	6.8	Influence des longueurs chimiques caractéristiques sur la structure de la
		$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
		6.8.1 Simulations numeriques complementaires
		6.8.2 Influence de la longueur d'induction
		$0.8.3 \text{Influence de la longueur de combustion} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $
	C O	$\begin{array}{c} \text{0.8.4} \text{Influence du rapport} \xrightarrow{\tau_c} \\ \text{C}_{c} \text{C}_{c} \text{C}_{c} \text{C}_{c} \text{Imfluence du rapport} \end{array}$
	0.9	Confirmation par le modele hybride
		6.9.1 Les longueurs chimiques caracteristiques
		6.9.2 Taille de la structure cellulaire
		6.9.3 Conclusions sur le modele hybride
7	Le	régime hélicoïdal de détonation 167
	7.1	Introduction
	7.2	Existence d'un régime hélicoïdal de détonation
		7.2.1 Traces de pression maximale sur la paroi du tube
		7.2.2 Représentation de la détonation hélicoïdale dans le tube 168
		7.2.3 Domaine d'existence
		7.2.4 Comparaison avec les résultats existants
	7.3	Etude de la propagation du front de détonation sur la paroi du tube 172
		7.3.1 Cartographies 2D des paramètres thermomécaniques
		7.3.2 Oscillations périodiques de pression et célérité de détonation 175
	7.4	Conclusion sur le régime hélicoïdal
8	Init	iation directe des détonations gaz - particules d'aluminium et condi-
	tion	as critiques d'amorçage 181
	8.1	Initiation des détonations hétérogènes planes
		8.1.1 Hypothèses
		8.1.2 Rappels des résultats antérieurs
	8.2	Résultats pour les détonations sphériques
	8.3	Conditions critiques d'initiation des détonations hétérogènes Al/Air et Al/O $_2$
		sphériques
		8.3.1 Corrélation entre l'énergie critique d'amorçage et la taille de la
		structure cellulaire
		8.3.2 Mélanges oxygène - particules d'aluminium
		8.3.3 Mélanges air - particules d'aluminium
		8.3.4 Conclusion
TT	ΤŢ	les détonations hétérogènes gaz - gouttelettes liquides 191
	- I	Les determinents neterogenes gaz goutterettes inquides 191
9	Mo	délisation numérique 195
	9.1	Introduction
	9.2	Hypothèses

	9.3	Equations de bilan		. 196
		9.3.1 Equations de bilan pour la phase gazeuse		. 196
		9.3.2 Equations de bilan pour la phase liquide		. 196
		9.3.3 Equations spécifiques au bilan de masse des espèces gaze	uses	197
	9.4	Interactions entre les phases gazeuse et liquide		198
		9.4.1 Taux de production de vapeur		. 198
		9.4.2 Réactions chimiques dans la phase gazeuse		. 199
		9.4.3 Conséquence sur les paramètres thermodynamiques		. 200
	9.5	Equations d'état		. 201
10	Dét	onations hétérogènes gaz - gouttelettes liquides d'octane		205
	10.1	Introduction		. 205
	10.2	Paramètres de calcul		. 205
		10.2.1 Conditions initiales $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$. 205
		10.2.2 Paramètres thermodynamiques du mélange		. 206
		10.2.3 Paramètres de cinétique chimique		. 206
		10.2.4 Etat CJ		. 207
		10.2.5 Initiation de la détonation		. 208
	10.3	Calculs monodimensionnels		. 208
		10.3.1 Domaine de calcul et résolution numérique		. 208
		10.3.2 Résultats $\ldots \ldots \ldots$. 208
		10.3.3 Analyse des résultats		. 210
	10.4	Structure cellulaire		. 214
		10.4.1 Paramètres des simulations 2D		. 214
		10.4.2 La structure cellulaire		. 214
		10.4.3 Cartographies des paramètres thermomécaniques		. 217
IV	⁄ S	ynthèse et conclusions		221
Sy	nthè	se et conclusions		223
AI	NNE	XES		229
Δ	Par	mètres CI nour les mélanges air - aluminium à $n_0 = 1$ a	tm	231
Л	T and	anetres C5 pour les inclanges an - arunninum a $p_0 = 1$ a		201
В	Para	imetres UJ pour les mélanges oxygène - aluminium à p_0 :	$= 1 \mathrm{atm}$	233
С	Para	mètres CJ pour les mélanges air - octane à $p_0 = 1$ atm		235
D	Solu	tion autosemblable de Taylor et Zel'dovich (cas 1D plan	avec for	nd
	tern	ne)		237

Nomenclature

Symbole Désignation

Unités SI

A_C	Facteur préexponentiel des réactions chimiques gazeuses	$\left[\frac{mol}{cm^3}\right]^{1-b_{fuel}-b_{ox}} \cdot \frac{1}{s}$
a	Grand semi-axe de la particule ellipsoïdale	m
Bo	Nombre de Bond $Bo = u_p^{"} \rho_p d_{p0}^2 \sigma_l^{-1} = 4 u_p^{"} \rho_p R_{p0}^2 \sigma_l^{-1}$	-
b	Petit semi-axe de la particule ellipsoïdale	m
b_{fuel}	Exposant lié au combustible gazeux de l'équation (9.22)	-
b_{ox}	Exposant lié à l'oxydant gazeux de l'équation (9.22)	-
C_d	Cœfficient de traînée	-
c	Célérité du son	$\mathrm{m.s}^{-1}$
c_p	Capacité thermique massique à p constante	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
c_v	Capacité thermique massique à v constant	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
D	Célérité de détonation	$\mathrm{m.s}^{-1}$
D_{tube}	Diamètre du tube à détonation	m
d_c	Diamètre critique de transmission de la détonation	m
d_p	Diamètre de la particule	m
d_p^*	Constante de la relation (2.6)	m
Ė	Energie totale massique $E \equiv e + \frac{1}{2}V^2$	$ m J.kg^{-1}$
E_0	Energie caractéristique d'explosion	J
E_{AC}	Energie d'activation des réactions chimiques gazeuses	$J.mol^{-1}$
E_a	Energie d'activation des réactions hétérogènes	$ m J.mol^{-1}$
E_c	Energie critique d'amorçage de la détonation	J
E_i	Energie d'initiation	$\mathrm{J.m}^{-i}$
Eo	Nombre d'Etvos $Eo = u_p^{"}(\rho_p - \rho_0)d_{p0}^2\sigma_l^{-1}$	-
e	Energie interne massique	$ m J.kg^{-1}$
e_{flocon}	Epaisseur de la particule (type flocon)	m
e_{spin}	Epaisseur de bande de la détonation hélicoïdale	m
f	Force de traînée de la particule	Ν
f	Fréquence de rotation de la détonation hélicoïdale	Hz
h	Enthalpie absolue massique	$\rm J.kg^{-1}$
\hat{h}	Enthalpie spécifique massique	$\rm J.kg^{-1}$

h^*	Enthalpie de référence massique	$J.kg^{-1}$
J	Terme d'échanges massiques	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
K	Constante empirique dans la définition du temps de combustion	$s.m^{-2}$
K'	Constante empirique de combustion de la relation (2.4)	$\mathrm{s.m}^{-2}$
K_{vap}	Constante d'évaporation de la gouttelette liquide	$s.m^{-2}$
k	Constante de proportionnalité de la relation (1.25)	-
k_{het}	Paramètre $\frac{\gamma + r_{het}}{1 + r_{e}}$ du tableau (1.3)	-
k'_i	Constante lié à l'oxydant i de la relation (2.4)	$s.m^{-2}$
Ĺ	Longueur de la cellule de détonation	m
L_c	Longueur de la zone de combustion	m
L_i	Longueur d'induction chimique	m
L_{tube}	Longueur du tube à détonation	m
L_{vap}	Chaleur latente de vaporisation	$\rm J.kg^{-1}$
L_{λ}	Période des oscillations de la célérité de propagation	m
M	Nombre de Mach	-
m	Masse	kg
\dot{m}	Débit masse	$\rm kg.s^{-1}$
N	Nombre de mailles	-
Nu	Nombre de Nusselt	-
n_p	Nombre de particules par unité de volume	m^{-3}
P	Pas de la détonation hélicoïdale	m
Pr	Nombre de Prandtl	-
p	Pression	Pa
Q	Chaleur massique de réaction	$\rm J.kg^{-1}$
Q_{PT}	Chaleur de réaction globale de combustion	$\rm J.kg^{-1}$
$Q_{m\acute{e}lange}$	Chaleur massique de réaction hétérogène	$J.kg^{-1}$
Q_p	Energie libérée par la particule pendant la phase d'induction	$ m J.kg^{-1}$
q	Flux de chaleur entre les deux phases	$J.kg^{-1}.s^{-1}$
q_m	Paramètre d'adaptation $q_m = \frac{\Delta x(i)}{\Delta x(i+1)}$	-
R	Constante des gaz parfaits	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
R_0	Longueur caractéristique d'explosion	m
$R_{D_{min}}$	Rayon critique de célérité minimum de propagation	m
R_c	Rayon critique de transmission de la détonation	m
Re	Nombre de Reynolds	-
R_p	Rayon de la particule	m
R_{p*}	Rayon critique de désintégration de la particule	m
$R_p^{(i)}$	Rayon de la particule après i désintégrations	m
r	Constante des gaz parfaits (massique)	$J.kg^{-1}.K^{-1}$

r_{het}	Paramètre $\frac{\beta_p c_{vp}}{\beta c_v}$ intervenant dans k_{het}	-
S	Surface de la section maximale de la particule	m^2
S_p	Surface de la particule	m^2
s	Entropie massique	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
T	Température	Κ
T^*	Température de référence	Κ
t	Temps	S
t_{break}	Temps de désintégration de la particule	S
t_{gaz}	Délai d'inflammation de la phase gazeuse	S
t_i	Temps caractéristique i	S
u	Vecteur des vitesses matérielles du gaz	${\rm m.s^{-1}}$
u	Vitesse absolue par rapport au laboratoire	${\rm m.s}^{-1}$
V_p	Volume de la particule	m^3
v	Volume spécifique	${ m m}^3.{ m kg}^{-1}$
$\mathbf{v_p}$	Vecteur des vitesses matérielles de la particule	${\rm m.s}^{-1}$
Ŵ	Vitesse relative à la discontinuité	${\rm m.s^{-1}}$
We	Nombre de Weber	-
We^*	Nombre de Weber critique	-
We_r	Nombre de Weber ramené au rayon des particules	-
W_m	Masse molaire	$\rm kg.mol^{-1}$
X	Distance en aval du front de détonation	m
X_i	Fraction molaire de l'oxydant gazeux i	-
x	Distance de propagation de la détonation	m
x_i	Fraction massique de l'espèce i	-
Y	Fraction du délai d'induction t_{gaz} restant avant combustion	-
Z_{Arr}	Facteur préexponentiel (modèle à deux étapes)	${\rm m.s^{-1}}$
Z_{gaz}	Facteur préexponentiel du délai d'inflammation de la phase ga- zeuse	$s.Pa^{-i}$
Z_{hyb}	Facteur préexponentiel (modèle hybride)	$kg.m^{-2}.s^{-1}$

Symbole Désignation

Unités SI

Δr	Taille de maille (résolution numérique isotrope)	m
$\Delta_r h^*$	Enthalpie de réaction	$J.kg^{-1}$
Δt	Pas de temps	\mathbf{S}
Δt_g	Temps d'exposition à l'action de l'écoulement gazeux	\mathbf{S}
Δx	Taille de maille dans la direction x	m
Δy	Taille de maille dans la direction y	m
Δz	Taille de maille dans la direction z	m
α	Inclinaison de la bande de la détonation hélicoïdale	rd

ε	Emissivité	-
ε_a	Energie d'activation du délai d'inflammation de la phase gazeuse	$\rm J.mol^{-1}$
η	Paramètre sonique	-
Φ	Thermicité	$s.^{-1}$
Φ_{ox}	Fraction molaire des espèces oxydantes	-
ϕ	Richesse	-
γ	Rapport des capacités calorifiques $\gamma = \frac{c_p}{c_n}$	-
κ	Rapport des rayons de la particule entre deux désintégrations	-
λ	Largeur de la cellule de détonation	m
λ^*	Constante de la relation (2.6)	m
λ_g	Conductivité thermique du gaz	$\mathrm{W.m^{-2}.K^{-1}}$
μ	Viscosité dynamique	Pa.s
ν	Viscosité cinématique	$\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$
ρ	Masse volumique	${ m kg.m^{-3}}$
σ	Concentration de particules	${\rm kg.m^{-3}}$
σ_{Boltz}	Constante de Boltzmann	$J.K^{-1}$
σ_l	Tension superficielle de la particule liquide	$ m N.m^{-1}$
au	Temps adimensionné	-
$ au_0$	Echelle de temps caractéristique adimensionnée	-
$ au_{break}$	Temps de désintégration adimensionné de la particule	-
$ au_i^*$	Temps caractéristique t_i adimensionné	-
$ au_{inf}$	Délai d'inflammation de la particule	S
$ au_p$	Temps de combustion de la particule	S
$ au_{vap}$	Temps d'évaporation de la gouttelette liquide	S
χ	Cœfficient stœchiométrique	-

Abbréviations

[fuel]	Taux de réaction du combustible dans la phase gazeuse
CFL	Courant-Friedriechs-Lewy
CJ	Chapman-Jouguet
EFAE	Enhanced Fuel Air Explosion
FCT	Flux-Corrected Transport
PDE	Moteur à Détonation Pulsée (Pulsed Detonation Engine)
SMD	Diamètre de Sauter Moyen (Sauter Mean Diameter)
TDD	Transition Déflagration Détonation

ZND Zel'dovich-Von Neumann-Döring

Indices et Exposants

$()_{0}$	Milieu amont
$()_{1}$	Milieu aval
$()_{2\acute{e}tapes}$	Lié au modèle à deux étapes
$()_{adaptation}$	Zone de résolution numérique dans le noyau de la détonation
$()_{CJ}$	Etat Chapman-Jouguet
$()_{cin}$	Régime cinétique
$()_{diff}$	Régime diffusif
$()_{exp}$	Expérimental
$()_{fine}$	Zone de résolution numérique fine
$()_{fuel}$	Combustible dans la phase gazeuse
$()_{inf}$	Inflammation
$()_{max}$	Maximum
$()_{min}$	Minimum
$()_{mix}$	Mélange hétérogène (gaz et particules)
$()_{ox}$	Oxydant
$()_p$	Particules
$()_{rp}$	Produits de détonation
$()_{strip}$	Mode "stripping"
$()_{vap}$	Ebullition
$()_x$	Composante selon la direction x
$()_y$	Composante selon la direction y
$()_z$	Composante selon la direction z
$()_{\nu}$	Géométrie de l'écoulement $(1:\operatorname{plan},2:\operatorname{cylindrique},3:\operatorname{sphérique})$

Table des figures

1.1	Onde de détonation dans les systèmes de coordonnées liés (a) au laboratoire et (b) à l'onde	12
1.2	Intersections de la droite de Rayleigh-Michelson et de l'adiabatique de Crus- sard dans le plan (n, v)	14
1.3	Principe du modèle ZND	18
1.4	Schématisation de la structure cellulaire de l'onde de détonation (bidimen- sionnelle)	20
1.5	Classification des structures cellulaires de détonation suivant leur régula- rité, d'après Libouton et al. [20]	22
1.6	Grandeurs caractéristiques d'une détonation hélicoïdale à partir des traces de Mach, d'après Virot [34]	23
2.1	Enregistrement de la structure cellulaire obtenue lors de la détonation d'un nuage non confiné d'aluminium dans de l'oxygène, d'après Ingignoli et al. [81]	43
2.2	Enregistrements de pression pariétaux lors de la détonation d'une suspen- sion d'aluminium à richesse 1.61 dans de l'air, d'après Zhang et al. [76]	44
2.3	Simulations numériques de la structure cellulaire de détonation d'un mé- lange oxygène - aluminium dans un tube de 12 cm de diamètre, d'après Benkiewicz et Hayashi [92]. En haut : $d_{p0} = 2.5 \ \mu m$ et $\sigma = 0.3 \ \text{kg/m}^3$. En	
2.4	bas : $d_{p0} = 1 \ \mu \text{m}$ et $\sigma = 0.3 \ \text{kg/m}^3$	48
2.5	Dégénérescence de la structure cellulaire de détonation dans des mélanges oxygène - aluminium bidispersés contenant des particules de 3.5 et 2 μ m à concentrations égales, d'après Fedorov et Khmel [96]	49
3.1	Les cinq modes de désintégration de gouttelettes liquides, d'après [118] (propagation du choc de la gauche vers la droite)	60
3.2	Domaines d'existence des modes de désintégration I et II des gouttelettes, d'après [141] et [142]	62

3.3	Diamètre de Sauter moyen (1) et pourcentage de combustible évaporé (2) en fonction de la température d'injection d'un Moteur à Détonation Pulsée pour un mélange JP-10 / air, d'après [169]. Zone ombrée : plage d'obser-	71
3.4	Vation de detonation $\dots \dots \dots$	71
3.5	Structure cellulaire d'une onde détonation d'un mélange cryogénique $2H_2 + O_2$, d'après [188]. $d_{p0} = 50 \ \mu m$, $\lambda = 21.1 \ mm$	78
4.1	Discrétisation du domaine de calcul par la représentation Eulérienne en différences finies	03
12	Maillage numérique dans l'espace cartésien dans le cas d'une détonation 3D	95 95
4.3	(a) Evolution de la taille de mailles numériques en fonction de la distance et (b) évolution de la taille des mailles numériques pour une simulation avec maillage adaptatif ($N_x = 1000$ mailles, $N_{adaptation} = 400$ mailles et $N_{fine} =$	50
	600), avec profils de vitesse matérielle des gaz (c)	97
4.4	Résolution du système différentiel d'équations par le code EFAE en utilisant la méthode FCT	98
4.5	Performances du code EFAE parallélisé à partir de la librairie OPENMP .	99
4.6	Evolution de la taille du domaine de calcul par simulations successives	100
5.1	Evolution temporelle de la célérité de détonation pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange riche air - aluminium, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{n0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)	109
5.2	Evolution temporelle de la valeur du pic de pression pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange riche air - aluminium, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$,	110
5.3	diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)	110
	$= 13.5 \ \mu \mathrm{m}$)	111
5.4	Profils caractéristiques des paramètres principaux de l'écoulement à l'ins- tant $t = 10$ ms après l'initiation pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500$ g/m ³ - diamètre des particules $d_{r0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)	113
5.5	Evolution temporelle de la célérité de détonation pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange steechiométrique oxygène - aluminium $\sigma =$	
	1500 g/m^3 , diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)	114
5.6	Evolution temporelle de la valeur du pic de pression pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange stœchiométrique oxygène - aluminium, σ	
	$= 1500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)	115

5	.7	Comparaison des termes d'échanges massiques J pour les deux modèles (mélange stœchiométrique oxygène - aluminium, $\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)	. 116
5	.8	Profils caractéristiques des paramètres de l'écoulement à l'instant $t = 6$ ms après l'initiation pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique $(\sigma = 1500 \text{ g/m}^3, \text{ diamètre des particules } d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}) \dots \dots \dots \dots$. 118
6	.1	Structure cellulaire calculée dans un mélange air - aluminium riche ($\phi = 1.61, \sigma = 500 \text{ g/m}^3$), avec des particules de diamètre $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$ - Modèle à deux étapes	. 126
6	.2	Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x pour un mélange air - aluminium riche ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$ - modèle à deux étapes	. 126
6	.3	Structure cellulaire calculée dans un mélange oxygène - aluminium stœ- chiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), avec des particules de diamètre $d_{p0} = 8.6 \mu$ m - Modèle à deux étapes	. 128
6	.4	Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$ - modèle à deux étapes $\ldots \ldots \ldots$. 129
6	.5	Structure cellulaire calculée dans un mélange air - aluminium riche ($\phi = 1.61, \sigma = 500 \text{ g/m}^3$), avec des particules de diamètre $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$, modèle hybride	. 131
6	.6	Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x pour un mélange air - aluminium riche ($\phi = 1.61, \sigma = 500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$ - modèle hybride	. 132
6	.7	Régimes de combustion dans le mélange air - aluminium riche ($\sigma = 500$ g/m ³), diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu$ m, modèle hybride	. 133
6	.8	Structure cellulaire calculée dans un mélange oxygène - aluminium stœchio- métrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$, modèle hybride	134
6	.9	Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x , pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules 8.6 μ m - modèle hybride.	. 135
6	.10	Régimes de combustion dans un mélange oxygène - aluminium stœchio- métrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$, modèle hybride	. 136
6	.11	Profils (a) de pression p , (b) température des gaz T et (c) concentration de particules σ pour un mélange air - aluminium (diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu m$, concentration de particules $\sigma = 500 \ g/m^3$), à t = 10.8 ms	
		après l'initiation	. 137

6.12	Profils de concentration en particules et de rayon des particules pour un mélange air - aluminium (diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu$ m, concentration en particules $\sigma = 500 \ \text{g/m}^3$), à $t = 10.8 \ \text{ms}$ après l'initiation	. 138
6.13	Evolution de la taille des cellules de détonation pour des mélanges air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$) et oxygène - aluminium ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$) en fonction du diamètre des particules d'aluminium	. 140
6.14	Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à $t = 12.41 \text{ ms}$ après l'initiation	. 142
6.15	Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à $t = 12.51 \text{ ms}$ après l'initiation	. 143
6.16	Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à $t = 12.66 \text{ ms}$ après l'initiation	. 144
6.17	Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à $t = 12.76 \text{ ms}$ après l'initiation.	. 145
6.18	Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à $t = 12.86 \text{ ms}$ après l'initiation.	. 146
6.19	Visualisation de la zone d'induction 2D (c) par filtrage des couleurs pour localiser (a) le front de détonation et (b) le front d'induction d'une déto- nation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu$ m), à $t = 12.41 \text{ ms}$ après l'initiation	. 148
6.20	Visualisation de la zone d'induction 2D (c) par filtrage des couleurs pour localiser (a) le front de détonation et (b) le front d'induction d'une déto- nation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu$ m), à $t = 12.76$ ms après l'initiation.	. 150
6.21	Définition des longueurs d'induction et de combustion pour la combustion des particules d'aluminium derrière un front de détonation dans l'air et l'oxygène	. 151
6.22	Longueur d'induction (a) et de combustion (b) de la réaction chimique de particules d'aluminium pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium en fonction du diamètre des particules	. 152
6.23	Rapport de la longueur d'induction sur la longueur de combustion en fonc- tion du diamètre des particules pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium $\ldots \ldots$. 153

6.24	Rapport de la largeur λ des cellules de détonation sur la longueur d'induc- tion $(\frac{\lambda}{L_i})$ et de combustion $(\frac{\lambda}{L_c})$ en fonction du diamètre des particules pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium	154
6.25	Influence de la longueur d'induction sur la taille des cellules de détonation pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium $\ldots \ldots \ldots$	156
6.26	Influence de la longueur de combustion L_c sur la taille des cellules de dé- tonation pour le mélange riche air - aluminium ($\phi = 1.61$) et un mélange stœchiométrique oxygène - aluminium	157
6.27	Influence du rapport $\frac{L_i}{L_i}$ des longueurs d'induction et de la zone de com-	
	bustion sur la taille des cellules de détonation pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium .	158
6.28	Comparaison des longueurs d'induction L_i (a) et de la zone de combustion L_c (b) en fonction du diamètre d_{p0} des particules pour un mélange air - aluminium de richesse 1.61, pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride	159
6.29	Comparaison de la largeur λ des cellules de détonation en fonction du diamètre d_{p0} des particules pour un mélange air - aluminium de richesse 1.61, pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride	161
6.30	Comparaison de la largeur λ des cellules de détonation en fonction de la longueur d'induction pour un mélange air - aluminium de richesse 1.61, pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride	162
7.1	Traces de pression maximale enregistrées sur la paroi du tube pour un mélange riche air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)	168
7.2	Détonation hélicoïdale dans une tube de diamètre $D_{tube} = 22.5$ cm pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)	169
7.3	(a) Régime de détonation et (b) pas de la détonation hélicoïdale pour un mélange riche air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$) en fonction du diamètre du canal	170
7.4	Projection dans le plan (y, z) des maxima de pression pour une détonation hélicoïdale air - aluminium $(D_{tube} = 20 \text{ cm et } \Delta x = 5 \text{ mm}) \dots \dots \dots$	171
7.5	Cartographies de (a) pression, (b) température, (c) masse volumique et (d) vitesse matérielle de la phase gazeuse au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$).	173
7.6	Cartographies de (a) rayon, (b) température, (c) concentration et (d) vi- tesse matérielle des particules au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)	174

7.7	Estimation de la longueur de la zone de réaction par la cartographie du nombre de Mach "longitudinal" subsonique au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3, d_{p0} = 13.5 \mu$ m)	176
7.8	Oscillations de p_{max} , $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$ au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$),	
7.9	pour 16 ms $< t <$ 19 ms \ldots	176
	- aluminium ($\sigma = 500 ext{ g/m}^3, d_{p0} = 13.5 ext{ } \mu ext{m}$), pour 16 ms $< t < 19 ext{ ms}$	177
8.1	Comparaison de célérités de détonation calculées et expérimentales de Strauss [71] dans des mélanges oxygène - aluminium dans un tube de diamètre 26.4 mm	183
8.2	Evolution de la célérité du front incident en fonction de la distance de pro- pagation et de l'énergie d'initiation, pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$) contenant des particules de diamètre d_{p0}	105
8.3	$= 5 \ \mu m$	185
8.4	contentant des particules d'aluminium de diamètre $d_{p0} = 5 \ \mu \text{m} \dots$ Evolution de la vitesse du front incident en fonction de la distance de pro- pagation et de l'énergie d'initiation, pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$) contenant des particules de diamètre 13 $\mu \text{m} \dots \dots$	186
10.1	Evolution (a) du pic de pression et (b) de la célérité de détonation en fonction du temps, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78$ g/m ³) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$	209
10.2	Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour un mélange air - octane stœchiométrique (σ = 78 g/m ³) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu m$	209
10.3	Pression, masse volumique, température des gaz et vitesses matérielles des deux phases à l'instant $t = 1$ ms, pour un mélange air - octane stœchiomé- trique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$	210
10.4	Profil du nombre de Mach à $t = 1$ ms pour un mélange air - octane stœ- chiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$	211
10.5	Profils de concentration, température et rayon des gouttelettes liquides à $t = 1$ ms pour un mélange air - octane stechiométrique ($\sigma = 78$ g/m ³) - diamètre des gouttelettes $d_{\alpha} = 50$ µm	911
10.6	Mode d'évaporation des gouttelettes liquides à $t = 1$ ms pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μ m	212
	,	-

 de détonation ; fraction de la période d'induction et taux de combustion à t = 1 ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm
$t = 1 \text{ ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \ g/m^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu m \$
 diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm
 10.8 Cellules de détonation simulées pour un mélange air - octane stœchiométrique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm
 trique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm 215 10.9 Profils de pression et de vitesses moyennes dans la section du tube (respectivement (a) et (b)), et le long de l'axe du tube (respectivement (c) et (d)) pour un mélange air - octane stœchiométrique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm
 10.9 Profils de pression et de vitesses moyennes dans la section du tube (respectivement (a) et (b)), et le long de l'axe du tube (respectivement (c) et (d)) pour un mélange air - octane stœchiométrique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 µm
tivement (a) et (b)), et le long de l'axe du tube (respectivement (c) et (d)) pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m} \dots \dots$
pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m} \dots \dots$
 des gouttelettes d_{p0} = 50 μm
 10.10Evolution de la célérité de détonation pour un mélange air - octane stœ- chiométrique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm 217 10.11Cartographies de (a) pression, (b) masse volumique, vitesse matérielle selon x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température de la phase gazeuse à t = 7.2 ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique (σ = 78 g/m³) - diamètre des gouttelettes d_{p0} = 50 μm
chiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$ 217 10.11Cartographies de (a) pression, (b) masse volumique, vitesse matérielle selon x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température de la phase gazeuse à $t = 7.2 \text{ ms}$, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$
10.11Cartographies de (a) pression, (b) masse volumique, vitesse matérielle selon x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température de la phase gazeuse à $t = 7.2$ ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$
x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température de la phase gazeuse à $t = 7.2$ ms, pour un mélange air - octane stechiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$
$t = 7.2 \text{ ms}$, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$
- diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu \text{m}$
10.12Cartographies de (a) rayon, (b) concentration, vitesse matérielle selon x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température des gouttelettes liquides à $t = 7.2$ ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78$ g/m ³) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu m$
y (respectivement (c) et (d)) et (e) température des gouttelettes liquides à $t = 7.2$ ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$
$t = 7.2$ ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78$ g/m ³) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu m$
- diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu \text{m}$
A.1 Paramétres CJ pour les mélanges air - aluminium à $p_0 = 1$ atm 232
B.1 Paramètres CJ pour les mélanges oxygène - aluminium à $p_0=1~{\rm atm}$ 234
C.1 Paramètres CJ pour les mélanges air - octane à $p_0=1$ atm
D.1 Existence d'une onde d'expansion par conservation de la masse
D.2 Eventail de détente derrière l'onde de détonation
D.3 Profils autosemblables de Taylor et Zel'dovich lors d'une détonation plane
dans un tube fermé

Liste des tableaux

1 2	Répartition des accidents liés à des explosions de poussières, par type d'ins- tallation en 1991 et 1995, d'après Gustin [4]	2
1.1	Source d'anorçage en 1991 et 1995, d'après Gustin [4] \ldots \ldots Relations approchées donnant les valeurs des grandeurs caractéristiques de l'état CJ pour un gaz polytropique à γ constant et sous l'hypothèse d'un	2
1.0	choc fort	17
1.2	valeurs approchees des grandeurs caracteristiques de l'état ZND pour un gaz polytropique à γ constant et sous l'hypothèse d'un choc fort Belations approchées donnant les valeurs des grandeurs caractéristiques de	19
1.0	l'état CJ pour un mélange hétérogène de suspensions de particules dans une atmosphère gazeuse	27
2.1	Exemples d'inflammation d'échantillons d'aluminium obtenue à des tem- pératures inférieures à la température de fusion de l'alumine	35
2.2	Températures mesurées en tube à choc de l'inflammation de suspensions de particules d'aluminium	37
2.3	Principaux résultats sur les détonations de suspensions d'aluminium en tube, d'après [39]	41
2.4	Principaux résultats sur les détonations de suspensions de particules d'alu- minium en milieu non confiné	42
3.1	Estimation des paramètres dynamiques critiques de détonation dans un mélange hétérogène stœchiométrique air - benzène, d'après [187]	78
4.1	Caractéristiques de détonation dans l'état CJ d'un mélange stœchiométrique Al/O_2 et d'un mélange Al/Air à richesse 1.61	102
6.1	Paramètres de simulation pour le mélange de référence air - aluminium (modèle à deux étapes)	125
6.2	Paramètres de simulations pour le mélange de référence oxygène - alumi- nium (modèle à deux étapes)	128
6.3	Paramètres de simulation pour le mélange de référence air - aluminium (modèle hybride)	130

6.4	Rappels des paramètres de simulations pour le mélange de référence oxy- gène - aluminium (modèle hybride)
8.1	Ordre de grandeur des énergies E_i utilisées pour amorcer la détonation dans les mélanges oxygène - aluminium, d'après Ingignoli [40] $\ldots \ldots \ldots 183$
10.1 10.2	Propriétés de la phase liquide (octane) pour les simulations de détonation de suspensions de gouttelettes liquides
D.1	Profils autosemblables de Taylor et Zel'dovich dans le noyau et la détente d'une onde de détonation CJ stationnaire et autonome

Introduction

Si l'étude approfondie par la communauté scientifique des détonations hétérogènes mettant en jeu des particules solides est un sujet récent de recherche, il n'en reste pas moins que les phénomènes d'"explosions de poussières" sont connus par l'homme depuis des siècles. Il faut remonter à 1795 pour voir apparaître les premiers articles sur le thème par le comte Morozzo [1], suite à l'explosion d'un moulin à farine à Turin en 1785. Cependant, il est plus que probable que des explosions de poussières accidentelles se soient produites bien avant, par exemple lors du transport de grains entre l'Egypte et la Grèce (Verakis [2]). Malgré la dangerosité de ces accidents, il faut attendre le XIX^{ème} siècle pour que leurs risques soient reconnus, suite aux explosions relativement fréquentes liées à l'exploitation minière du charbon. Faraday et Lyell [3] sont alors les premiers à se pencher sur ces accidents, mais c'est la catastrophe de la mine de Courrières en France, faisant 1099 victimes au début des années 1900 qui décida la communauté scientifique à s'intéresser à l'étude de ces explosions.

La forte expansion économique consécutive à la révolution industrielle a vu naître un grand nombre de nouveaux combustibles, notamment sous forme de poussières solides ou d'aérosols, du fait de leur important potentiel énergétique. Si leur apport industriel est indéniable, la contrepartie est un accroissement des risques d'explosions. Nombreux sont les domaines susceptibles de faire intervenir de tels combustibles (industrie chimique et pharmaceutique, agroalimentaire, mécanique, minière, etc...), que cela se traduise par la manipulation directe des poussières (matières premières, produits finaux) ou en les générant lors d'un procédé de transformation par exemple. Il est à noter que le coût humain et financier est généralement très élevé lorsqu'un accident se produit. Par ailleurs, les explosions de poussières métalliques sont parmi les plus meurtrières. Les tableaux 1 et 2 présentent la répartition des accidents liés à des explosions de poussières, respectivement par type d'installation et par type de source d'amorçage, en 1991 et 1995, d'après Gustin [4].

Cependant, les détonations de particules (solides ou liquides) présentent un double avantage industriel : d'une part, les particules combustibles (charbon, métal, hydrocarbures, etc...) constituent des sources d'énergie à fort potentiel. D'autre part, le phénomène de détonation peut ouvrir de nouvelles voies technologiques quand le rendement de la combustion (au sens déflagration) atteint ses limites théoriques ou pratiques. C'est ainsi que dans le cadre d'explosions maîtrisées, on trouve de nombreuses applications, telles que l'utilisation de poussières métalliques (notamment d'aluminium) pour renforcer les performances des explosifs. On peut également citer le moteur à détonation pulsée (en anglais : Pulse Detonation Engine, PDE) qui peut fonctionner par la détonation de gouttelettes liquides en suspension injectées dans la chambre de combustion. Ce type de moteur fait l'objet de développement dans les secteurs industriels aéronautique et spatial depuis la fin des années 1990, ce qui s'est manifesté par un regain d'intérêt pour des recherches fondamentales sur les détonations en milieux hétérogènes, et ce au niveau mondial.

Installation, appareil	1991~(%)	1995~(%)
Silos, stockeurs	20	19.4
Installations de dépoussiérage	18.8	17.5
Broyage, micronisation	12.3	13.4
Transport, manipulation	10.9	11
Sécheurs	7.1	9
Fours, incinérateurs	5	4.5
Mélangeur	4.4	4.3
Machines de traitement de surface	4	3.7
Tamisage	3	2.7
Divers	12.7	14.5

TAB. 1 – Répartition des accidents liés à des explosions de poussières, par type d'installation en 1991 et 1995, d'après Gustin [4]

Types de source d'amorçage	1991~(%)	1995~(%)
Etincelle, échauffement mécanique	33.7	32.7
Braises incandescentes	12.9	12.7
Décharge d'électricité statique	9.5	8.5
Feu, incendie, brûleur	7.3	7.9
Auto-inflammation	4.8	6
Surface chaude	4.4	4.8
Travaux de soudure	4.6	4.2
Appareillage électrique	2.6	3.2
Inconnu	16.7	17
Divers	3.4	3

TAB. 2 – Répartition des accidents liés à des explosions de poussières, par type de source d'amorçage en 1991 et 1995, d'après Gustin [4]

Ainsi, cette étude s'inscrit dans une problématique de compréhension des phénomènes

qui régissent de telles détonations, les connaissances sur ces dernières étant relativement restreintes comparativement aux détonations en milieux gazeux homogènes. On s'intéresse notamment à la structure dite "cellulaire" et aux processus microscopiques et mésoscopiques au niveau du front incident. Les enjeux liés à ces travaux sont nombreux. On citera principalement la sécurisation de sites industriels, la propulsion aéronautique et spatiale ainsi que les applications militaires liées aux explosifs.

La mise en œuvre d'expériences permettant d'observer des détonations autonomes et stationnaires dans les mélanges hétérogènes se révèle très difficile et coûteuse, du fait des installations à grandes échelles qu'elles nécessitent, notamment si l'objectif est d'observer une structure "cellulaire". Il est donc d'une grande importance de développer des modèles capables de prédire les conditions expérimentales requises pour préparer de telles expériences.

Ainsi, l'objectif de ce travail est de contribuer, à l'aide de l'outil numérique, à la compréhension des processus physiques et chimiques qui entrent en jeu dans les détonations hétérogènes de suspensions de particules solides ou de gouttelettes liquides d'hydrocarbure, en atmosphère gazeuse oxydante. On cherche en particulier à simuler la structure "cellulaire" et à en comparer les caractéristiques avec celles du cas des mélanges homogènes gazeux. Dans le cadre de cette thèse, on s'intéresse particulièrement au cas des particules d'aluminium.

Ce mémoire est organisé autour de trois parties :

La **PREMIERE PARTIE** est consacrée à une étude bibliographique.

- Le Chapitre 1 rappelle les notions et théories fondamentales des détonations.
- On examine ensuite dans le *Chapitre 2* les résultats expérimentaux, numériques et analytiques existants pour les détonations hétérogènes de suspensions de particules solides en atmosphère gazeuse oxydante.
- Les résultats expérimentaux et numériques liés aux détonations hétérogènes d'aérosols de combustibles liquides en atmosphère gazeuse oxydante sont exposés au Chapitre 3.

La **DEUXIEME PARTIE** traite de l'étude des détonations hétérogènes gaz - particules d'aluminium.

- Le Chapitre 4 décrit la modélisation des détonations hétérogènes gaz particules, ainsi que les méthodes numériques qui permettent de résoudre le système d'équations de l'écoulement réactif biphasique.
- Les résultats des simulations monodimensionnelles pour les deux modèles sélectionnés se trouvent dans le *Chapitre 5*. Les modèles sont comparés et leur pertinence discutée par rapport aux cas expérimentaux de référence pour l'aluminium.
- Le Chapitre 6 aborde la structure "cellulaire" de la détonation et étudie en détail

la structure du front incident.

- Dans le *Chapitre* 7, le régime hélicoïdal de détonation est simulé pour la première fois dans les mélanges air - particules d'aluminium.
- L'initiation directe des détonations gaz particules d'aluminium est étudiée dans le *Chapitre 8* et les conditions critiques d'initiation discutées en relation avec le cas des mélanges gazeux homogènes.

La **TROISIEME PARTIE** est consacrée à l'étude des détonations hétérogènes gaz - gouttelettes liquides.

- Le *Chapitre 9* aborde les spécificités de la modélisation des détonations hétérogènes gaz oxydant - gouttelettes liquides d'hydrocarbures.
- Les résultats des simulations monodimensionnelles ainsi que l'étude de la structure cellulaire de détonation pour les mélanges air - octane sont présentés dans le *Chapitre 10*.

Enfin, le chapitre de *Synthèse et conclusions* fait l'objet de la **QUATRIEME PARTIE**.

Première partie Etude bibliographique

CHAPITRE 1

Etat des connaissances sur les détonations hétérogènes en milieu biphasique

Chapitre 1

Etat des connaissances sur les détonations hétérogènes en milieu biphasique

1.1 Généralités sur les détonations homogènes et hétérogènes

1.1.1 Rappel de quelques définitions

1.1.1.1 Explosion

On peut définir une explosion comme étant une "libération soudaine d'énergie plus ou moins confinée, plus ou moins maîtrisée, avec ou sans conséquences externes. L'explosion peut donner lieu à une onde de pression (onde de souffle), à une boule de feu. Dans le cas de l'explosion chimique, le processus de libération d'énergie peut être une déflagration ou une détonation" (source GFC, Groupement Français de Combustion [5]). Comme exemple d'explosion maîtrisée, on peut citer le traitement de surface par explosif, l'armement, la propulsion ou encore des chaînes pyrotechniques, etc... Les explosions non maîtrisées donnent lieu à des situations accidentelles, parmi lesquelles on peut citer un certain nombre de catastrophes, telles que l'explosion de l'usine AZF à Toulouse en 2001 ou encore celle en plein vol du B 747 de la TWA en 1996, consécutive à un arc électrique dans le réservoir de kérosène, etc...

1.1.1.2 Combustion

D'après le dictionnaire du GFC [5], une combustion est une "réaction chimique globalement et généralement fortement exothermique, autonome, susceptible de s'accélérer brutalement et d'être accompagnée d'émission de rayonnements. Une combustion peut être lente (phase du processus qui précède l'éventuelle accélération brutale de la réaction) ou vive (phase du processus débutant avec l'accélération brutale et caractérisée par une
vitesse réactionnelle élevée). Selon les conditions de confinement, le dégagement de chaleur de la réaction de combustion peut conduire à une expansion rapide du milieu réactionnel ou à une forte augmentation de pression. L'émission de rayonnements se situe généralement, au moins en partie, dans le visible, le proche UV et le proche IR. L'accélération brutale caractéristique de la combustion vive peut conduire à la formation d'une flamme. On peut aussi observer l'émission de fumée avec ou sans incandescence. Une combustion peut libérer des espèces chargées : électrons, ions positifs ou négatifs. Une combustion réalise donc une conversion d'énergie chimique potentielle en énergie thermique, mécanique, rayonnante, électrique. Cette conversion peut être utilisée, directement ou indirectement, pour le chauffage, la propulsion, la production d'électricité. Dans le sens usuel, la combustion est la réaction entre un combustible et l'oxygène pur, l'oxygène dilué (air) ou une espèce chimique riche en oxygène (ozone, peroxyde d'hydrogène, acide nitrique). On appelle aussi combustions des réactions très exothermiques entre divers combustibles et des comburants partiellement oxygénés (F₂O, Cl₂O, ClO₂) ou non oxygénés (F, Cl, Br, composés riches en F ou en Cl, comme ClF). Des décompositions très exothermiques d'espèces chimiques endothermiques (acétylène, hydrazine, ozone, bioxyde de chlore, azotures, trichlorure d'azote) peuvent aussi être appelées combustions. Dans le domaine de la propulsion, la normalisation française définit la combustion comme la réaction chimique exoénergétique entre un réducteur et l'oxygène ou un autre corps électronégatif."

1.1.1.3 Régimes de propagation d'une combustion

On distingue deux régimes autonomes de propagation d'une combustion :

- La déflagration (ou flamme) : elle se déplace à vitesse subsonique par rapport au mélange frais et est entretenue par la libération d'énergie issue des réactions chimiques dont la propagation est pilotée par la diffusion de la chaleur et des espèces depuis la zone de réaction chimique vers le mélange frais. L'écoulement du mélange frais devant la flamme est perturbé puisque cette dernière est subsonique.
- La détonation : elle se caractérise par le couplage fort entre une onde de choc incidente et la zone de réaction chimique. Supersonique par rapport au mélange frais (non perturbé), l'onde de choc amorce les réactions chimiques par l'échauffement généré par la compression du milieu. La libération d'énergie chimique qui s'ensuit permet d'entretenir l'onde de choc de tête.

L'instabilité de la déflagration peut générer dans le mélange frais des perturbations pouvant accélérer la flamme par divers mécanismes. Il est possible alors de passer du régime de déflagration au régime de détonation. On appelle ce phénomène Transition Déflagration Détonation, noté TDD. La TDD constitue un sujet d'étude très important, par exemple dans le développement du moteur à détonation pulsée (Pulse Detonation Engine, PDE), du fait de la nécessité de limiter les dimensions de ce dernier et donc d'atteindre rapidement un régime de détonation.

1.1.1.4 Poussière - Explosion de poussières

On désigne par poussière toute poudre constituée de particules solides suffisamment fines (en général micrométriques) pour rester en suspension un certain temps après leur dispersion dans un mélange gazeux. Le terme explosion de poussières est ainsi employé lorsque les réactions chimiques ont lieu entre un oxydant contenu dans la phase gazeuse et les particules solides combustibles. On admet généralement que la taille des particules ne doit pas excéder 500 μ m (selon la densité de la matière) pour que l'on puisse parler d'explosion de poussières. Suivant les situations et la nature du mélange, le domaine d'explosibilité en terme de concentration de particules varie d'une concentration très faible (de l'ordre de quelques g/m³, dans des locaux industriels par exemple) jusqu'à des concentrations très élevées (de l'ordre du kg/m³) dans le cas de stockage dans des silos. On comprend ainsi la difficulté d'étudier de tels phénomènes, en raison de la diversité des situations rencontrées.

Lorsque des particules sont en suspension dans une phase gazeuse, les échanges thermiques ont lieu à la surface de contact entre les deux phases. Une augmentation de la surface de contact favorise les réactions chimiques entre les deux phases. Elle dépend de six facteurs :

- la taille des particules : on utilise le rapport de la surface des particules sur leur volume $(S_p/V_p = 6/d_p)$ dans le cas de particules sphériques). Il s'ensuit qu'une diminution du diamètre entraîne une augmentation de la surface totale de contact.
- la géométrie des particules : les particules de type "flocon" (plates et allongées) présentent une plus grande surface spécifique que les particules sphériques. Si on compare le rapport $S_p/V_p = 2/e_{flocon}$ pour des flocons et $S_p/V_p = 6/d_p$ pour des particules sphériques, e_{flocon} étant dans ce cas l'épaisseur caractéristique des particules (souvent, $e_{flocon} \simeq O(1 \ \mu m)$ et $d_p \simeq O(10 \ \mu m)$), il en résulte que les particules de type flocon présente généralement une plus grande surface totale de contact que les particules sphériques.
- l'état de surface des particules : plus les particules sont rugueuses, plus leur surface de contact est élevée par rapport à des particules lisses.
- la porosité des particules : la surface de contact totale augmente avec la porosité des particules.
- le degré de dispersion des particules : pour une même masse de particules, la surface de contact est nettement plus importante dans le cas d'une suspension uniforme par rapport au cas où une partie des particules restent en dépôt au sol.
- la concentration de particules

Généralement, une explosion de poussières ne peut survenir que si les particules réactives sont finement dispersées. Cette dispersion peut se réaliser par un système expérimental approprié, par le passage d'une onde de choc, par la rupture d'une conduite, etc... Pour désigner la combustion d'un dépôt de particules en couche, on parle en général de "smouldering combustion" dans la terminologie anglo-saxonne. Cette situation ne sera pas envisagée ici.

1.1.2 Le modèle Chapman Jouguet des détonations

1.1.2.1 Le modèle

La modélisation de Chapman Jouguet assimile l'onde de détonation à une discontinuité plane et totalement réactive se propageant à la célérité D. On note W la vitesse matérielle dans le repère lié à l'onde et u la vitesse matérielle dans le repère lié au laboratoire, telles que W = -(D - u) (Figure 1.1).



FIG. 1.1 – Onde de détonation dans les systèmes de coordonnées liés (a) au laboratoire et (b) à l'onde

En écrivant les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans le repère lié à l'onde, il vient :

$$\rho_1 W_1 = \rho_0 W_0 \tag{1.1}$$

$$p_1 + \rho_1 W_1^2 = p_0 + \rho_0 W_0^2 \tag{1.2}$$

$$h_1 + \frac{W_1^2}{2} = h_0 + \frac{W_0^2}{2} \tag{1.3}$$

Dans les équations précédentes, ρ , p et h sont respectivement la masse volumique, la pression et l'enthalpie absolue, les indices 0 et 1 se rapportant respectivement aux gaz frais en amont de la discontinuité et aux gaz brûlés en aval de cette dernière.

Pour étudier l'existence de solutions physiques au système constitué par les équations (1.1), (1.2) et (1.3), on utilise généralement la représentation dans le plan (p, v), où $v = \frac{1}{\rho}$ est le volume spécifique.

En combinant les équations (1.1) et (1.2), on obtient les vitesses relatives à l'onde réactive :

$$W_0 = v_0 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \tag{1.4}$$

$$W_1 = v_1 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \tag{1.5}$$

A partir de l'expression de W_0 donnée par (1.4), on obtient la droite de Rayleigh-Michelson dans le plan (p, v), avec $\dot{m} = \rho_0 W_0$ le débit massique :

$$p_1 = -\dot{m}^2(v_1 - v_0) + p_0 \tag{1.6}$$

En substituant les équations (1.4) et (1.5) dans l'équation de conservation de l'énergie (1.3), on obtient l'équation de l'adiabatique de Crussard dans le plan (p, v):

$$h_1 - h_0 = \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1)$$
(1.7)

On introduit la chaleur de réaction $Q_{PT} = -\Delta_r h^* = h_0^* - h_1^*$ en écrivant l'enthalpie absolue h comme étant la somme de l'enthalpie de référence h^* à la température de référence T^* et de l'enthalpie sensible $\hat{h} = h - h^*$:

$$\hat{h}_1 - \hat{h}_0 - Q_{PT} = \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1)$$
(1.8)

Le mélange réactif et les conditions initiales étant fixés, la droite de Rayleigh-Michelson et l'adiabatique de Crussard sont déterminées et trois cas sont alors possibles (cf. figure 1.2) :

- La droite de Rayleigh-Michelson coupe la courbe de Crussard en deux points (F et f). Expérimentalement, seul le cas où $p > p_{CJ}$ est observé (point F). On appelle cette partie la branche des détonations fortes.
- La droite de Rayleigh-Michelson ne coupe pas la courbe de l'adiabatique de Crussard : il n'y a pas de solution pour la propagation de la détonation.
- La droite de Rayleigh-Michelson est tangente à la courbe de l'adiabatique de Crussard : l'unique solution correspond à la célérité minimale de détonation. Le point de tangence des courbes est appelé point Chapman-Jouguet.

La figure 1.2 montre les cas où une solution physique existe pour la propagation d'une onde de détonation.



FIG. 1.2 – Intersections de la droite de Rayleigh-Michelson et de l'adiabatique de Crussard dans le plan (p, v)

1.1.2.2 L'état CJ

En différenciant l'équation (1.7), sachant que h_0 , p_0 et v_0 sont constants et s désignant l'entropie, il vient :

$$dh_1 = T_1 ds_1 + \upsilon_1 dp_1 = \frac{1}{2} [dp_1(\upsilon_0 + \upsilon_1) + d\upsilon_1(p_1 - p_0)]$$
(1.9)

Ainsi, la condition de tangence entre la droite de Rayleigh-Michelson et l'adiabatique de Crussard est obtenue lorsque $ds_1 = 0$ (c étant la célérité du son) :

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial \nu}\right)_s = \frac{p_1 - p_0}{\nu_0 - \nu_1} = c_1 \tag{1.10}$$

En utilisant l'équation (1.9), il vient :

$$\frac{d^2 s_1}{dv_1^2} = \frac{v_0 - v_1}{2T_1} \frac{d^2 p_1}{dv_1^2} + \frac{1}{2T_1} \frac{d^2 p_1}{dv_1^2} > 0$$
(1.11)

Ainsi, en traçant les isentropes dans le plan (p, v), il en résulte que l'état Chapman-Jouguet CJ correspond au minimum d'entropie sur la branche des détonations, ce qui entraîne la condition de sonicité au point de tangence :

$$2T_1 \frac{ds_1}{dv_1} \frac{v_1^2}{v_0 - v_1} = \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} v_1^2 + \frac{\partial p_1}{\partial v} v_1^2 = 0 = W_1 - c_1$$
(1.12)

On a alors $W_1 = c_1$.

La solution des équations nécessite la connaissance des grandeurs citées précédemment en fonction de T et p: celles-ci dépendent de la composition. De nombreux codes thermodynamiques utilisent des grandeurs tabulées par des polynômes issus de la base de données JANAF (Chase et al. [6]) pour chaque espèce considérée pour résoudre le système constitué par les équations (1.1), (1.2) et (1.3). La résolution se fait au moyen de méthodes itératives de type Newton-Raphson. Parmi ces codes, on peut notamment citer TDS (Victorov et al. [7]) ou encore Gaseq (Morley [8]).

1.1.2.3 Le cas des gaz polytropiques

Un gaz polytropique obéit à la loi d'état des gaz parfaits pv = rT et vérifie $pv^{\gamma} = cste$, γ étant le rapport des chaleurs massiques $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ et $r = \frac{R}{W_m}$, W_m étant la masse molaire. Ainsi, dans le cas des gaz polytropiques, de nombreuses simplifications peuvent être apportées aux équations précédentes. L'enthalpie s'écrit $h = c_pT = \frac{\gamma pv}{\gamma - 1}$ et est définie à une constante près : la chaleur libérée par les réactions chimiques Q reliant h_0 et h_1 . Ainsi, le système d'équations (1.1), (1.2) et (1.3) s'écrie alors :

$$|W_0| = D - u_0 = v_0 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}}$$
(1.13)

$$|W_0| - |W_1| = u_1 - u_0 = \sqrt{(p_1 - p_0)(v_0 + v_1)}$$
(1.14)

$$\gamma_1 \frac{p_1 \upsilon_1}{\gamma_1 - 1} - \gamma_0 \frac{p_0 \upsilon_0}{\gamma_0 - 0} - Q = \frac{1}{2} (p_1 - p_0) (\upsilon_0 + \upsilon_1)$$
(1.15)

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial \nu}\right)_{s_1} = \frac{\gamma_1 p_1}{\nu_1} = \frac{p_1 - p_0}{\nu_0 - \nu_1} \tag{1.16}$$

Il est à noter que les valeurs de γ_0 et γ_1 peuvent différer fortement lorsque l'énergie issue de la réaction chimique est élevée.

D'après (1.15), le rapport $\frac{p_1}{p_0}$ s'exprime comme suit : $\frac{p_1}{p_0} = \frac{\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - \frac{\rho_0}{\rho_1} + 2Q\frac{\rho_0}{p_0}}{\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1}\frac{\rho_0}{\rho_1} - 1}$ (1.17)

Si on élimine v_1 dans les équations (1.13) et (1.14), il vient :

$$W_0^2 = (D - u_0)^2 = \frac{(p_1 - p_0) \left(\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} p_1 + p_0\right)}{\rho_0 \left[\frac{2}{\gamma_1 - 1} p_1 - \frac{2}{\gamma_0 - 1} p_0 - 2\rho_0 Q\right]}$$
(1.18)

On peut alors écrire la condition de tangence (1.16) sous la forme suivante :

$$\frac{W_1}{W_0} = \frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{\gamma_1 \frac{p_1}{p_0}}{(\gamma_1 + 1)\frac{p_1}{p_0} - 1}$$
(1.19)

Ou encore :

$$W_0 - W_1 = v_0 \frac{p_1 - p_0}{p_1(\gamma_1 + 1) - p_0}$$
(1.20)

Donc d'après (1.13), on peut écrire :

$$\rho_0 (D - u_0)^2 = (\gamma_1 + 1)p_1 - p_0 \tag{1.21}$$

On peut ainsi éliminer p_1 dans l'équation (1.18) :

$$\left(\frac{D-u_0}{c_0}\right)^4 - 2\left(\frac{D-u_0}{c_0}\right)^2 \left[\frac{\gamma_1^2 - \gamma_0}{(\gamma_0 - 1)\gamma_0} + \frac{(\gamma_1^2 - 1)Q}{c_0^2}\right] + \frac{\gamma_1^2}{\gamma_0^2} = 0$$
(1.22)

Stanyukovich [9] fournit la solution de cette équation dans le cas de détonations :

$$\frac{D-u_0}{c_0} = \sqrt{\frac{\gamma_1 - 1}{2} \left[(\gamma_1 + 1) \frac{Q}{c_0^2} + \frac{\gamma_0 + \gamma_1}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right]} + \sqrt{\frac{\gamma_1 + 1}{2} \left[(\gamma_1 - 1) \frac{Q}{c_0^2} - \frac{\gamma_0 - \gamma_1}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right]}$$
(1.23)

On peut également exprimer la chaleur de réaction Q :

$$Q = \frac{c_0^2}{\gamma_1^2 - 1} \left(\frac{\left(\frac{D - u_0}{c_0}\right)^4 + \frac{\gamma_1^2}{\gamma_0^2}}{2\left(\frac{D - u_0}{c_0}\right)^2} - \frac{\gamma_1^2 - \gamma_0}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right)$$
(1.24)

Dans le cas d'un gaz polytropique avec γ constant et sous l'hypothèse de chocs forts $(D^2 \gg c_0^2)$, le tableau 1.1 présente les valeurs des grandeurs caractéristiques principales à l'état CJ.

Chapitre 1. Etat des connaissances sur les détonations hétérogènes en milieu biphasique

c_p constant	c_p constant, $u_0 = 0, D^2 \gg c_0^2$
$\frac{D-u_0}{c_0} = \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{2}\frac{Q}{c_0^2} + 1} + \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{2}\frac{Q}{c_0^2}}$	$D = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q}$ $\rho_0 D^2$
$\frac{r_1}{p_0} = \frac{1}{\gamma + 1} \left(\frac{(D - u_0)^2 r_0}{p_0} + 1 \right)$ $\rho_1 = \frac{v_0}{v_0} + 1 \frac{1}{\gamma + 1} \frac{1}{p_0}$	$p_1 = \frac{\gamma \sigma}{\gamma + 1}$ $\rho_1 \qquad \gamma + 1$
$\frac{\frac{\gamma_{1}}{\rho_{0}}}{\frac{\gamma_{1}}{\Gamma_{1}}} = \frac{\frac{\gamma_{1}}{\gamma_{1}}}{\frac{\gamma_{1}}{\Gamma_{1}}} + \frac{\frac{\gamma_{1}}{\gamma_{1}}}{\frac{\gamma_{1}}{\Gamma_{1}}}$	$\frac{T_1}{\rho_0} = \frac{\gamma}{\gamma} D^2$
$\frac{T_1}{T_0} = \frac{p_1}{p_0} \frac{v_1}{v_0}$	$\frac{\frac{1}{T_0}}{\frac{1}{\gamma+1}} = \left(\frac{\frac{1}{\gamma+1}}{\frac{1}{\gamma+1}}\frac{1}{c_0^2}\right)$
$W_1 = c_1 = \sqrt{\gamma r T_1}$	$c_1 = \frac{\gamma D}{\gamma + 1}$
$u_1 + c_1 = D - u_0$	$u_1 = \frac{D}{\gamma + 1}$

TAB. 1.1 – Relations approchées donnant les valeurs des grandeurs caractéristiques de l'état CJ pour un gaz polytropique à γ constant et sous l'hypothèse d'un choc fort

1.1.3 Le modèle Zel'dovich - Von Neumann - Döring

1.1.3.1 Le modèle

Si le modèle Chapman-Jouguet fait l'hypothèse très simplificatrice et très éloignée de la réalité que l'onde de détonation est une discontinuité plane séparant le milieu réactif du milieu frais, il n'en demeure pas moins qu'il est d'une efficacité remarquable pour rendre compte des mesures expérimentales de la célérité du front de détonation. En pratique, le système réactif évolue sur une zone d'épaisseur finie de l'état initial à l'état final (au point CJ). Zel'dovich [10], Von Neumann [11] et Döring [12] ont établi indépendamment un modèle prenant en considération cette hypothèse, en s'appuyant sur la description physique d'une onde de détonation par Vieille [13]. On utilise couramment la notation ZND en référence à ces auteurs pour citer ce modèle.

Le modèle ZND considère également la propagation monodimensionnelle, plane et stationnaire de la détonation mais à la différence du modèle CJ, la zone de réaction a une épaisseur finie : un choc inerte comprime le mélange de façon adiabatique à haute température (pic Von Neuman noté ZND sur la figure 1.3). Il est suivi d'une zone de combustion amorcée par auto-allumage. La zone de réaction se déplace de manière couplée avec le choc (même célérité D), l'énergie libérée par la combustion entretenant l'onde de choc. Pour obtenir les caractéristiques au point ZND, on détermine l'intersection de la droite de Rayleigh-Michelson avec l'adiabatique d'Huguoniot, cette dernière étant obtenue à partir de l'équation de l'adiabatique de Crussard (1.8) dans laquelle $Q_{PT} = 0$, le choc étant inerte. La figure 1.3 illustre le principe du modèle ZND.



FIG. 1.3 – Principe du modèle ZND

1.1.3.2 Cas des gaz polytropiques

De même que pour le modèle CJ, le tableau 1.2 fournit les caractéristiques de l'état ZND pour un gaz polytropique à c_p constant et sous l'hypothèse des chocs forts.

Chapitre 1. Etat des connaissances sur les détonations hétérogènes en milieu biphasique

$c_p \text{ constant}$	$c_p \text{ constant}, u_0 = 0, D^2 \gg c_0^2$
$\frac{\rho_{ZND}}{\rho_{ZND}} = \frac{(\gamma_0 - 1)M_0^2 + 2}{(\gamma_0 - 1)M_0^2 + 2}$	$\frac{ ho_{ZND}}{ m ext{}} \approx \frac{\gamma_0 + 1}{ m ext{}}$
$\rho_0 - (\gamma_0 + 1)M_0^2$	$\rho_0 \sim \gamma_0 - 1$
$\frac{p_{ZND}}{p_{ZND}} = \frac{2\gamma_0 M_0^2 - \gamma_0 + 1}{2\gamma_0 M_0^2 - \gamma_0 + 1}$	$p_{ZND} \approx \frac{2\gamma_0 M_0^2}{2} \approx 2p_{CL}$
$p_0 \qquad \gamma_0 + 1$	$\gamma_0 + 1$ $\gamma_0 + 1$ $\gamma_0 + 1$
$\frac{I_{ZND}}{T} = \frac{p_{ZND}}{\rho_0}$	$T_{ZND} \approx \frac{2\gamma_0(\gamma_0 - 1)}{(1 + 1)^2} T_{CJ} \approx \frac{2(\gamma_1 - 1)}{T_{CJ}} T_{CJ}$
$T_0 \qquad p_0 \rho_{ZND}$	$(\gamma_0+1)^2$ γ_1
$u_{ZND} = \frac{2W_0}{\gamma_0 + 1} \left(1 - \frac{1}{M_0^2} \right)$	$u_{ZND} \approx \frac{2w_0}{\gamma_0 + 1} \approx 2u_{CJ}$
$c_{ZND} = D\left[\frac{(\gamma - 1)M_0^2 + 2}{(\gamma + 1)M_0^2}\right] \times$	$c_{ZND} = W_{CJ} \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) \left(\frac{2\gamma}{\gamma - 1}\right)^{1/2}$
$\left[\frac{(\gamma - 1)(M_0^2 - 1) + \gamma + 1}{2\gamma(M_0^2 - 1) + \gamma + 1}\right]^{1/2}$	
$M_{ZND} = \frac{ D - u_1 }{c_1} =$	$M_{ZND} = \frac{ D - u_{ZND} }{c_{ZND}} = \left(\frac{\gamma - 1}{2\gamma}\right)^{1/2}$
$\left[\frac{(\gamma-1)(M_0^2-1)+\gamma+1}{2\gamma(M_0^2-1)+\gamma+1}\right]^{1/2}$	

TAB. 1.2 – Valeurs approchées des grandeurs caractéristiques de l'état ZND pour un gaz polytropique à γ constant et sous l'hypothèse d'un choc fort

1.1.4 Structure tridimensionnelle de l'onde de détonation

Malgré le bon accord entre les théories CJ et ZND, et les observations expérimentales du point de vue des grandeurs caractéristiques du front de détonation, ces deux théories ne tiennent pas compte de la structure réelle de l'onde de détonation : il existe des instabilités tridimensionnelles locales sur le front de détonation. Campbell et Woodhead [14] ont observé pour la première fois à l'aide d'enregistrements chronostrioscopiques que la structure réelle du front de détonation est tridimensionnelle et instationnaire : ces enregistrements montrent une trace lumineuse sinusoïdale dont on sait aujourd'hui qu'elle correspond à une détonation hélicoïdale.

Mais les premiers à réellement mettre en évidence le caractère tridimensionnel, instationnaire et périodique de l'onde de détonation sont Voitsekhovsky [15] et surtout Denisov et Troshin ([16], [17] et [18]). Ils ont respectivement utilisé des enregistrements chronostrioscopiques et la méthode des traces de Mach et Sommer [19] pour révéler les détails de la structure de l'onde.

1.1.4.1 Structure cellulaire de détonation

La figure 1.4 montre la structure dite "cellulaire" d'une onde de détonation, sous forme bidimensionnelle.



FIG. 1.4 – Schématisation de la structure cellulaire de l'onde de détonation (bidimensionnelle)

- L'onde de détonation se décompose en un ensemble d'ondes de choc reliées entre elles par une configuration classique de type réflexion de Mach en point triple. Le front incident est constitué de l'onde incidente (C) et de l'onde de Mach (M). L'onde réfléchie est une onde de choc transverse (T). Les réactions chimiques s'effectuent dans une zone derrière les ondes mentionnées.
- Les points triples forment un maillage par leur trajectoire (tracée en noire sur la figure 1.4) dont l'élément constitutif est appelé "cellule" (d'où le nom de structure cellulaire). La structure cellulaire se caractérise par les dimensions d'une cellule élémentaire (sa longueur L et sa largeur λ). Expérimentalement, on enregistre la trajectoire de ces points triples par la méthode des traces de Mach, qui consiste à placer dans l'écoulement une plaque recouverte d'un dépôt de noir de carbone. Ce dépôt se transforme sous l'effet des conditions élevées de température et de pression existant aux points triples. On peut ainsi mettre en évidence les cellules de détonation et mesurer leur largeur λ et leur longueur L.
- Les ondes transverses se rapprochent deux à deux pour une partie, les autres s'éloignant deux à deux. De ce fait, les ondes se propageant l'une vers l'autre engendrent la collision des points triples. Il en résulte un changement de sens de la direction de propagation des nouvelles ondes transverses ainsi générées.
- Les collisions périodiques des points triples auto-entretiennent la propagation de la détonation. Au début de la cellule de détonation, la collision des points triples

engendre des pressions, températures et célérités maximales favorisant les réactions chimiques dans une zone proche de la tête de l'onde de détonation. Au fur et à mesure de la propagation, l'onde de choc de tête s'atténue et la zone de réaction chimique s'en éloigne. A la fin de la cellule, la nouvelle collision de points triples génère une explosion locale qui recouple les processus chimiques au niveau de l'onde de choc de tête. On considère généralement que la célérité décroît de 1.6-1.8 D_{CJ} à 0.6-0.8 D_{CJ} le long de l'axe de la cellule de détonation, en atteignant D_{CJ} environ au milieu de la longueur de la cellule de détonation. La valeur moyenne de la célérité de propagation reste néanmoins généralement proche de D_{CJ} .

Les travaux expérimentaux relatifs à l'étude de la structure cellulaire des détonations sont en nombre particulièrement fourni. Ils ont mis en avant quelques points de grande importance :

- Dans le cas des mélanges homogènes gazeux, la structure cellulaire est une propriété intrinsèque des détonations, et ce, quelle que soit la géométrie considérée.
- Les conditions initiales et le régime de détonation (fort ou autonome) influent sur la dimension des cellules de détonation, qui est une propriété caractéristique du mélange, à la condition toutefois que cette taille caractéristique (dans le cas de la détonation autonome) soit faible devant les dimensions géométriques du problème, telles que la dimension du tube ou encore, le rayon de courbure de l'onde de détonation divergente.
- Le rapport entre la largeur λ et la longueur L de la cellule est globalement constant, indépendamment des autres conditions : $\frac{\lambda}{L} \approx 0.6$.
- Lorsque la détonation est stationnaire et autonome, la structure cellulaire n'est pas totalement régulière et peut faire l'objet d'une classification qualitative, comme le montre la figure 1.5 (d'après Libouton et al. [20]). Il est à noter que la structure cellulaire dite "excellente" est généralement obtenue pour des systèmes chimiques simples (par exemple H₂ O₂), dilués par des gaz inertes monoatomiques (en particulier l'argon) ou dans des conditions où l'adaptation aux modes de vibration transversaux du tube à détonation est possible (détonation hélicoïdale).
- Lors d'une détonation forte, la structure cellulaire est généralement plus régulière et de plus faible dimension caractéristique comparativement au même mélange lors d'une détonation autonome et stationnaire (Desbordes [21]).

Par ailleurs, Shchelkin et Troshin [22] montrent que dans le cas d'une détonation gazeuse, il existe une relation simple de proportionnalité entre la largeur λ de la cellule de détonation et la longueur d'induction L_i des réactions chimiques derrière l'onde de choc de tête.

$$\lambda = kL_i \tag{1.25}$$



FIG. 1.5 – Classification des structures cellulaires de détonation suivant leur régularité, d'après Libouton et al. [20]

Lorsque la détonation a atteint un régime stationnaire et autonome :

$$\lambda_{CJ} = k L_{iCJ} \tag{1.26}$$

De nombreux auteurs ont confirmé cette relation et ont établi des valeurs du cœfficient k. Dans les conditions standards de pression et température, en utilisant un schéma cinétique détaillé, Beeson et al. [23] et Westbrook [24] ont montré que $k \sim 29$ pour les mélanges C_nH_m / air et H_2 / air. Matignon [25] a obtenu une valeur de k variant entre 10 et 100 pour des mélanges $CH_4/H_2/O_2/N_2$ et $CH_4/C_2H_6/O_2/N_2$.

Par ailleurs, on définit des conditions critiques ou minimales d'existence d'une détonation. En effet, la détonabilité d'un mélange gazeux peut être jugée par l'aptitude de la détonation à résister à une expansion de l'écoulement. De nombreuses études portent sur le sujet et plusieurs configurations sont particulièrement étudiées :

- propagation d'une onde plane et autonome de détonation avec expansion latérale des produits de détonation : la propagation n'est possible que si le rayon de courbure de l'onde est supérieur à un rayon de courbure critique R_c de l'ordre de $16\lambda_{CJ}$ (Murray et Lee [26]). Ce rayon critique est la traduction de la compétition entre la divergence de l'écoulement (qui tend à éteindre la détonation) et l'énergie libérée par les réactions chimiques (qui tend à supporter la propagation de l'onde incidente).
- transmission d'une onde de détonation plane et autonome ou forte se propageant d'un tube rigide dans un espace libre : Mitrofanov et Soloukhin [27] établissent la

nécessité d'une surface minimale pour le réamorçage, et donc un diamètre de tube critique d_c , qui est corrélé à la taille de la cellule de détonation par $d_c = 13\lambda_{CJ}$ lorsque la détonation est stationnaire et autonome.

– amorçage direct d'une détonation sphérique divergente autonome via une source ponctuelle de forte énergie : il existe alors une énergie minimale E_c de la source pour amorcer la détonation. Sur la base d'un postulat de Zel'dovich [28] selon lequel $E_c \sim L_i^3$, il a été montré que $E_c \sim A\rho_0 D_{CJ}^2 \lambda_{CJ}^3$ (Vasiliev et Grigoriev [29], Lee [30], Desbordes [31]).

On peut donc retenir que la détonabilité d'un mélange diminue lorsque la largeur de la cellule de détonation augmente.

1.1.4.2 Les détonations hélicoïdales

On parle de détonation marginale ou à une tête lorsqu'un seul et unique point triple compose le front de détonation. Si cette détonation marginale se propage dans un tube circulaire, on la qualifie alors de détonation hélicoïdale. De nombreux auteurs ont étudié le régime de propagation hélicoïdal, à diverses pressions initiales, aussi bien de manière expérimentale (Manson [32], Campbell et Woodhead [14], etc...) que numérique (Tsuboi [33], etc...), ce qui a permis de détailler de manière précise la structure et la forme du front incident pour de telles détonations. Ce régime est obtenu lorsque la largeur de la cellule de détonation et la taille du confinement sont proches. Il s'agit donc d'un régime limite de propagation de la détonation, cette dernière ne pouvant pas être stationnaire et autonome si la taille du confinement est très inférieure à la largeur de la cellule de détonation.

Les grandeurs caractéristiques d'une détonation hélicoïdale sont énoncées ci-après et décrites sur la figure 1.6 issue des travaux de thèse de Virot [34] :



FIG. 1.6 – Grandeurs caractéristiques d'une détonation hélicoïdale à partir des traces de Mach, d'après Virot [34]

- le pas P : distance axiale entre deux motifs
- l'épaisseur de bande e_{spin} : structure fine
- l'angle α : inclinaison des bandes par rapport à l'axe du tube

Cette étude n'abordant les détonations hélicoïdales que de manière globale dans le cas de mélanges hétérogènes, il ne sera pas donné plus de détails sur la structure du front de détonation et la théorie acoustique qui y est liée. De nombreux travaux ont été publiés sur le sujet dans le cas de détonations gazeuses (cf. synthèse de Virot [34], etc...).

1.1.5 Les spécificités des détonations en milieu biphasique

1.1.5.1 La condition CJ généralisée

Les détonations biphasiques présentent la particularité de faire apparaître des déséquilibres entre les phases qui entraînent des transferts de masse, quantité de mouvement et énergie entre les deux phases, du fait de la taille finie des particules. Or, l'état d'équilibre final inclut tous les équilibres chimiques, mécaniques et thermiques entre les deux phases. Cependant, les échelles des temps de relaxation dépendent des propriétés des particules, et ne sont pas les mêmes pour les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. De ce fait, si la théorie CJ pour des mélanges homogènes prédit un état d'équilibre final unique dans les produits de détonation au point sonique CJ, cette théorie ne peut pas prédire de manière précise la célérité de détonation dans le cas de mélanges contenant des particules de taille finie pour lesquelles les échelles de transferts de chaleur et de quantité de mouvement sont importantes. En conséquence, on ne peut plus considérer l'onde de détonation comme une zone d'épaisseur infiniment mince et négliger les perturbations extérieures sur l'onde de détonation (pertes aux parois, etc...). De plus, la détonation de particules solides en atmosphère gazeuse peut conduire à la production de produits en phase condensée, qui ne participent donc pas à l'expansion des gaz entretenant la propagation de l'onde de détonation. Dans ce cas, le minimum de célérité de détonation ne se trouve pas forcément au point sonique, simultanément à l'arrêt des réactions chimiques. Cette situation peut être envisagée par exemple dans des mélanges oxygène - aluminium.

On utilise alors pour les détonations biphasiques un modèle quasi-1D dans lequel interviennent des termes sources dans les équations de bilan pour modéliser les effets latéraux tels que les frottements et échanges de chaleur pariétaux (Zel'dovich et Kompaneets [35]). Le but est de déterminer les déficits de célérité de détonation. Il résulte de la compétition entre ces termes sources (puits d'énergie) et les réactions chimiques exothermiques que l'écoulement peut devenir sonique avant que l'état d'équilibre final ne soit atteint, d'où l'introduction de la "condition CJ généralisée" en tant que condition limite à l'arrière de la zone de réaction. Cette condition correspond en fait à un point singulier pour lequel, d'une part, le taux de dégagement d'énergie net issu des réactions chimiques et des processus de non-équilibre par transfert de masse, quantité de mouvement et énergie entre les deux phases devient nul, et d'autre part pour lequel $M^2 - 1 = 0$. En d'autres termes, il correspond au point sonique où les pertes d'énergie issues du caractère biphasique égalent le taux de libération d'énergie issu des réactions chimiques. On utilise le concept de thermicité Φ : dans le repère lié à l'onde de choc incidente, on exprime les changements de vitesse du milieu gazeux u à la distance de propagation x par :

$$\frac{du}{dx} = \Phi/\eta \tag{1.27}$$

 η est un paramètre sonique de l'écoulement lié à la célérité du son des gaz c ou à l'équilibre des phases, par la relation suivante :

$$\eta = 1 - \frac{u^2}{c^2} \tag{1.28}$$

La "condition CJ généralisée" sert donc de condition limite au point sonique gazeux ou éventuellement au point d'équilibre entre les deux phases à l'arrière du front incident, là où l'on cherche à déterminer les zéros simultanés de la thermicité Φ et du paramètre sonique η :

$$\Phi = 0 \ \dot{a} \ \eta = 0 \tag{1.29}$$

La thermicité fait quant à elle intervenir cinq termes :

- libération d'énergie issue des réactions chimiques de la phase gazeuse (si réactive)
- libération d'énergie issue des réactions chimiques de la phase condensée
- termes d'interaction entre les deux phases par les processus de non-équilibre (transferts de masse, quantité de mouvement et énergie)
- pertes latérales mécaniques (parois ou autres frontières latérales)
- pertes latérales thermiques

Ainsi, pour modéliser les détonations biphasiques, on écrit séparément les équations de conservation pour chaque phase dans un volume de contrôle, les deux phases étant liées entre elles par les termes d'interactions appropriés présents dans l'expression de la thermicité. La description correcte de ces termes d'interaction est un élément déterminant pour la modélisation des détonations hétérogènes biphasiques. Ce problème sera abordé plus en détail dans les chapitres 4 et 9.

1.1.5.2 L'état CJ

Dans le cas de détonations hétérogènes de suspensions de particules solides ou liquides en atmosphère gazeuse, il est nécessaire de calculer l'état du mélange total en terme de masse volumique et énergie en prenant en compte la présence des deux phases (Mitrofanov [36]). On désigne respectivement par x, v, E, h, c_v, c_p et T la fraction massique, le volume spécifique, l'énergie totale, l'enthalpie, la chaleur massique à volume constant, la chaleur massique à pression constante et la température. Les indices p et 0 se rapportent respectivement aux particules et à l'état initial, l'absence de l'indice p se rapportant aux gaz. Par ailleurs, p, R et W_m désignent respectivement la pression, la constante des gaz parfaits et la masse molaire des gaz. En supposant que les particules sont incompressibles $(c_{v_p} = c_{p_p})$ et que leur fraction volumique initiale est négligeable devant celle des gaz, il vient pour le mélange total (indice mix) :

$$v_{mix_0} = x_0 v_0 \tag{1.30}$$

$$v_{mix} = xv \tag{1.31}$$

$$x_0 = 1 - x_{p_0} \tag{1.32}$$

$$x = 1 - x_p \tag{1.33}$$

$$E_{mix_0} = x_0 E_0 + x_{p_0} E_{p_0} \tag{1.34}$$

$$E_{mix} = x(h + c_v T) + x_p(h_p + c_{v_p} T_p)$$
(1.35)

$$h_{mix} = xh + x_p h_p \tag{1.36}$$

$$p\upsilon = \frac{RT}{W_m} \tag{1.37}$$

On désigne k_{het} par l'expression suivante :

$$k_{het} = \frac{\gamma + r_{het}}{1 + r_{het}} \tag{1.38}$$

dans laquelle $\gamma = \frac{c_v + \frac{R}{W_m}}{c_v}$ est le rapport des capacités massiques des gaz respectivement à pression et volume constants, et $r_{het} = \frac{x_p c_{v_p}}{x c_v}$.

Le tableau 1.3 présente l'état CJ et la célérité de détonation pour les mélanges hétérogènes, en supposant h_{mix} et k_{het} constants, avec $c_0^2 = \gamma_0 p_0 v_0$ le carré de la célérité du son initiale. Etat CJ pour un mélange hétérogène gaz - particules solides

$$\frac{p}{p_0} = \frac{1}{k_{het} + 1} \left(\frac{\gamma_0}{1 - x_{p_0}} \frac{D^2}{c_0^2} + 1 \right)$$
$$\frac{\upsilon}{\upsilon_0} = \frac{k_{het}}{k_{het} + 1} \left(1 + \frac{(1 - x_{p_0})c_0^2}{\gamma_0 D^2} \right)$$
$$D = \sqrt{\frac{k_{het}^2 - 1}{2} (E_{mix_0} - h_{mix}) + \frac{k_{het} - 1}{2} p_0 \upsilon_{mix_0}} + \sqrt{\frac{k_{het}^2 - 1}{2} (E_{mix_0} - h_{mix}) + \frac{k_{het} + 1}{2} p_0 \upsilon_{mix_0}}$$

TAB. 1.3 – Relations approchées donnant les valeurs des grandeurs caractéristiques de l'état CJ pour un mélange hétérogène de suspensions de particules dans une atmosphère gazeuse

1.2 Les détonations hétérogènes gaz / particules solides

Les détonations hétérogènes dans des suspensions de particules solides ou en atmosphère gazeuse peuvent se diviser en quatre catégories :

- Si les particules solides contiennent la totalité du combustible et que l'oxydant se trouve dans la phase gazeuse, la détonation est dite "hétérogène". Cette appellation s'applique aussi au cas inverse (l'oxydant dans la phase solide et le combustible dans la phase gazeuse) mais qui est peu fréquent.
- Si une partie du combustible se trouve dans la phase solide, l'autre partie du combustible ainsi que l'oxydant se trouvant dans la phase gazeuse, la détonation est dite "hybride".
- Si le combustible et l'oxydant se trouvent tous les deux dans la phase gazeuse, les particules solides étant inertes, il s'agit d'une détonation gazeuse diluée par des particules.
- Si le combustible et l'oxydant sont tous deux compris dans la phase solide, il s'agit de la détonation d'un monoergol dispersé dans une atmosphère gazeuse inerte, oxydante ou réactive (voire même sans atmosphère, dans le vide).

Dans le cas des détonations hétérogènes, l'énergie nécessaire à l'entretien de la détonation est issue des réactions chimiques entre les particules solides et la phase gazeuse. L'existence de ces détonations nécessite des taux de réactions chimiques suffisamment élevés pour obtenir le couplage de la zone de réaction avec l'onde de choc incidente. Dans le cas des détonations hybrides, l'énergie nécessaire à l'entretien de la combustion provient des réactions chimiques soit entre les espèces gazeuses, soit entre les particules solides et l'oxydant de la phase gazeuse, soit entre les particules solides et les produits de combustion issus des réactions chimiques entre les composants gazeux (les trois types pouvant exister). Comme pour toute détonation, les temps chimiques caractéristiques jouent un rôle très important. Généralement, les délais d'inflammation des particules solides sont supérieurs d'au moins un ordre de grandeur comparativement à ceux des mélanges homogènes gazeux (Borisov et al. [37]) et dépendent de la surface spécifique des particules solides. En fonction du délai d'inflammation des particules solides, Veyssiere et Khasainov [38] ont mis en évidence l'existence de trois régimes stationnaires différents de propagation des détonations hybrides :

- Régime SFD ("Single Front Detonation") : les particules réagissent entre le choc et la surface sonique. Le front de détonation est entretenu à la fois par l'énergie libérée par la combustion des gaz et des particules.
- Régime PGD ("Pseudo Gas Detonation") : les particules réagissent derrière la surface sonique, créant ainsi une onde de compression. Le front de détonation est uniquement entretenu par les réactions chimiques des gaz.
- Régime DFD ("Double Front Detonation") : on observe la présence de deux fronts, le premier étant entretenu par les réactions chimiques des gaz et le second étant entretenu par l'énergie issue de la combustion des particules. Les deux fronts sont séparés par un délai constant et une surface sonique se trouve derrière chaque front.

La présence des particules au sein d'un mélange combustible gazeux peut donc avoir plusieurs conséquences : modifier la célérité de détonation (la célérité de détonation du régime SFD est comprise entre celle des régimes DFD et PGD, et celle du mélange gazeux équivalent sans particules), ou modifier les caractéristiques derrière la surface sonique issue de la combustion des gaz (régimes PGD et DFD). Ainsi, on rencontre principalement les détonations hybrides dans des applications propulsives ou dans des explosifs métallisés (par exemple : Trialen 105, ammonal) pour lesquels la combustion retardée des particules augmente la pression en aval du front, ce qui a pour conséquence d'accroître l'impulsion spécifique. Des cas de détonations hybrides peuvent aussi être rencontrés dans des problèmes liés à la sécurité industrielle ou encore le traitement de surface par projection de particules, à titre d'exemple.

Pour les détonations gazeuses diluées par des poussières, les particules solides, inertes chimiquement, absorbent de l'énergie thermique et de la quantité de mouvement à la phase gazeuse, jouant ainsi le rôle de puits d'énergie. Il en résulte l'échauffement et l'accélération des particules, voire leur fusion si leur température est suffisamment élevée. De tels effets peuvent être utilisés lorsque l'on cherche à inhiber la combustion d'un mélange gazeux en utilisant les particules comme puits d'énergie. Ceci passe par un choix adéquat des granulométrie et concentration de la phase solide.

D'un point de vue thermodynamique, l'étude des détonations en milieux biphasiques contenant des particules combustibles solides présente un grand intérêt par le potentiel énergétique élevé de ce type de milieu. On peut remarquer (par exemple, Veyssiere [39]) que les mélanges homogènes gazeux classiques CH_4 - air et C_3H_8 - air à la stechiométrie ont des enthalpies de réaction spécifiques $\Delta_r h^*$ (par unité de masse de mélange) respectivement de 2760 kJ/kg et 2795 kJ/kg. Un mélange stœchiométrique air - particules solides d'amidon possède pratiquement la même enthalpie de réaction spécifique ($\Delta_r h^* = 2675$ kJ/kg) alors que celle d'un mélange stœchiométrique air - particules solides d'aluminium est $\Delta_r h^* = 6432 \text{ kJ/kg}$, soit environ 2.5 fois plus élevée que celle des mélanges homogènes gazeux hydrocarbone - air. De plus, pour des plages de richesse allant de pauvre à modérément riche, tout ou partie des produits de détonation issus de la combustion des particules solides sont en phase gazeuse, fournissant ainsi un travail d'expansion engendrant une surpression supplémentaire. Par ailleurs, la limite inférieure de détonabilité des mélanges hétérogènes peut être obtenue pour des concentrations de l'ordre de 50-100 g/m^3 , c'est-à-dire pour de fines couches de poussières (typiquement, d'épaisseur de l'ordre du millimètre) déposées sur des parois. Ainsi, suivant les situations rencontrées, les détonations en milieu biphasique peuvent présenter des avantages énergétiques, comme par exemple augmenter le rendement d'un engin propulsif ou d'un explosif militaire, mais également présenter des inconvénients : c'est le cas lors de la sécurisation de sites industriels, la surpression issue des détonations hétérogènes accidentelles pouvant alors provoquer des dégâts supérieurs à ceux de détonations gazeuses.

Comme il a été mentionné précédemment, les temps chimiques caractéristiques des réactions hétérogènes sont en général supérieurs d'un ordre de grandeur à ceux des réactions chimiques se déroulant en milieu gazeux homogène. En première approximation, il est proportionnel au carré du diamètre des particules. De ce fait, les mélanges hétérogènes présentent une plus faible détonabilité que les milieux homogènes gazeux. Outre leur plus faible détonabilité, la réalisation d'expériences dans ces milieux se heurte à des problèmes de reproductibilité et d'homogénéité de concentration en particules. En effet, les méthodes utilisées pour la mise en suspension des particules ne permettent pas de satisfaire ces contraintes, notamment lorsque le volume expérimental requis est important, d'où la difficulté d'obtenir des résultats expérimentaux fiables et pertinents.

Dans le cadre de ce mémoire, nous n'aborderons que des détonations hétérogènes de suspensions de particules d'aluminium en atmosphère oxydante. Les travaux antérieurs sur les détonations dans les milieux biphasiques contenant des particules solides comprennent aussi des résultats sur les détonations hybrides. Des synthèses en ont été faites, par exemple par Ingignoli [40] ou plus récemment par Veyssiere [39] et par Zhang [41]. Chapitre 1. Etat des connaissances sur les détonations hétérogènes en milieu biphasique

CHAPITRE 2

Les détonations hétérogènes gaz / particules d'aluminium

Chapitre 2

Les détonations hétérogènes gaz / particules d'aluminium

2.1 Combustion de l'aluminium

2.1.1 Introduction

Du fait de son utilisation répandue dans les domaines aérospatial et militaire, l'aluminium est sujet à un grand nombre d'études depuis plusieurs décennies, portant notamment sur le délai, la température et les mécanismes d'inflammation, le temps et les mécanismes de combustion, la chimie de la combustion ou encore la structure de la zone de combustion. Dans le cadre de cette étude, on s'intéresse à la combustion de particules d'aluminium derrière une onde de choc.

Chimiquement, nombreuses sont les espèces gazeuses capables de réagir avec l'aluminium, telles que : O_2 , H_2O , CO_2 , CO, NO ou même N_2 (Jacobsen et al. [42], Bouriannes [43]). Généralement, on considère que l'aluminium brûle sous forme de vapeur, selon le modèle d'une flamme de diffusion détachée de la particule (Brzustowski et Glassman [44]). Cependant, Bouriannes [43], Drew et al. [45], Markstein [46], Gurevich et al. [47] et Bucher et al. [48] ont observé des réactions chimiques hétérogènes en phase liquide à la surface des particules.

Malgré les nombreuses études relatives à la combustion de particules d'aluminium, les mécanismes d'inflammation et de combustion ne sont pas encore clairement identifiés, notamment lorsque l'inflammation résulte du passage d'une onde de choc. Dans le cas de détonations hétérogènes, on étudie plus particulièrement le délai d'inflammation des particules (la durée entre le chauffage de la particule consécutive au passage du choc et l'inflammation de cette dernière) et le temps de combustion (durée entre l'inflammation et la fin du phénomène de combustion). Ainsi, la durée totale de la combustion correspond à la somme des délais d'inflammation et de combustion.

2.1.2 Inflammation des particules d'aluminium

Il est connu que l'aluminium, comme beaucoup de métaux, s'oxyde au contact de l'air, ce qui a pour conséquence que les particules solides sont recouvertes d'une couche d'alumine (oxyde d'aluminium de formule chimique $Al_2O_3(s)$). Il apparaît que le rapport entre le volume d'oxyde formé et le volume de métal nécessaire à sa formation est supérieur à 1. Il en résulte que cette couche d'alumine recouvre l'intégralité de la surface d'une particule. rendant ainsi cette dernière quasiment imperméable (Price [49]). La température de fusion de l'alumine est de 2327 K (Lide [50]), alors qu'elle est de 983 K pour l'aluminium. Par ailleurs, l'alumine n'existe pas en phase gazeuse (Brewer et Searcy [51]) mais se dissocie à haute température, tandis que la température de vaporisation de l'aluminium est de 2792 K. Après fusion, l'alumine liquide présente une perméabilité au gaz supérieure à celle de l'alumine solide, et ce de plusieurs ordres de grandeur (Bartlett et al. [52]). En outre, d'autres facteurs tels que la faible solubilité de l'alumine liquide dans l'aluminium liquide, la tension superficielle élevée de l'alumine liquide ainsi que la faible tension superficielle entre l'alumine liquide et l'aluminium liquide débouchent sur une rétraction en lobe du film d'alumine liquide qui recouvre la goutte d'aluminium liquide : le métal est alors mis à nu, permettant la diffusion des espèces oxydantes (Price [49]), et donc les réactions chimiques vives.

Selon les critères physiques ci-dessus et les résultats expérimentaux (Friedman et Macek [53], Kuehl [54], Mellor et Glassman [55]), il a été dans un premier temps communément admis que l'inflammation des particules d'aluminium soumises à une atmosphère ambiante à température élevée nécessite que la surface de ces dernières soit portée à une température supérieure ou égale à la température de fusion de l'alumine, provoquant ainsi des réactions hétérogènes autour de la surface de la particule. Gurevich et al. [56] émettent l'hypothèse que lorsque la température de surface est égale à la température de fusion de l'alumine, la couche d'alumine passe à l'état liquide et les espèces oxydantes diffusent jusqu'à la surface du métal, initiant ainsi les réactions chimiques. Cependant, Brzustowski et Glassman [44] suggèrent que l'alumine liquide se rétracte en lobe pour laisser place à des réactions hétérogènes à la surface du métal. Dans les deux cas, lorsque la température augmente suffisamment pour que l'aluminium s'évapore, un phénomène de combustion en phase gazeuse est observé, contrôlé par les vitesses de vaporisation de l'aluminium et de diffusion des espèces oxydantes.

Cependant, plusieurs auteurs ont en partie infirmé ce scénario, en observant l'inflammation de particules d'aluminium à des températures inférieures à la température de fusion de l'alumine. Un certain nombre de ces cas sont mentionnés dans le tableau 2.1. Pokhil et al. [57] ou encore Price [49] avancent comme explication la rupture locale de la couche d'oxyde sous l'effet des contraintes thermiques. En effet, ce phénomène est rendu possible par le fait que le rapport du cœfficient de dilatation de l'aluminium et du cœfficient de dilatation de l'oxyde est supérieur à 1. Pokhil et al. [57] relèvent que ces ruptures peuvent apparaître dès 325 K. La rupture de la couche d'alumine laisse localement l'aluminium à nu : les réactions hétérogènes peuvent donc être amorcées sous réserve que la température requise est atteinte.

Outre la température d'inflammation, le délai d'inflammation des particules est un paramètre important pour la compréhension des détonations hétérogènes de suspensions d'aluminium en atmosphère gazeuse oxydante. Le délai d'inflammation pour des particules d'aluminium est généralement supérieur d'un ordre de grandeur au moins par rapport au délai d'induction des mélanges gazeux classiques. D'autre part, Friedman et Macek [53] ont montré expérimentalement qu'en conditions statiques, le délai d'inflammation de particules sphériques augmente avec le carré du diamètre des particules. Ce résultat est dû au fait que la conduction est le mode dominant de transfert de chaleur : le rayonnement et la convection peuvent être négligés pour une particule sphérique "immobile" en atmosphère chaude. Le flux de chaleur reçu par la particule est proportionnel au diamètre des particules alors que l'énergie qu'elle absorbe lors de son échauffement et changement d'état est proportionnelle à sa masse, donc au cube de son diamètre.

Référence	T_{inf} (K)	Conditions
Merzhanov et al. [58]	1913	filaments d'aluminium dans l'oxygène
Bransford [59]	1840	échantillons d'aluminium en cours
		de refroidissement
Belyaev et al. [60]	variables	- combustion de particules d'aluminium en
		enceinte fermée dans les produits de
		combustion de propergols solides
		- pression entre 10 et 100 bar
		- température entre 1600 K et 3000 K
Pokhil et al. [57]	< 1300	dans la zone de réaction chimique d'une
		composition inconnue

TAB. 2.1 – Exemples d'inflammation d'échantillons d'aluminium obtenue à des températures inférieures à la température de fusion de l'alumine

2.1.3 Loi de combustion d'une particule d'aluminium

Même si les mécanismes détaillés de combustion d'une particule d'aluminium ne sont pas encore clairement identifiés, rendant ainsi difficile une modélisation précise, on observe des similitudes avec la combustion de gouttelettes d'hydrocarbures, notamment la présence d'une flamme de diffusion détachée. Ainsi, la plupart des modèles de combustion actuels reposent sur celui de la combustion de gouttelettes d'hydrocarbures que l'on adapte au cas de l'aluminium. Brooks et Beckstead [61] prennent en compte la présence de produits de combustion condensés. La quasi-totalité des modèles présentés reposent sur une loi cinétique globale de type Al(s)+ oxydant \rightarrow produits. Hermsen [62], Price [49] ou encore Brooks et Beckstead [61] se sont appuyés sur les différents résultats expérimentaux disponibles dans diverses conditions : atmosphères contrôlées, produits de réaction d'une flamme de prémélange gazeux, produits de combustion d'une composition de type propergol. On peut alors corréler ces résultats par une loi empirique de type régression en $d_p^n(t)$:

$$d_p^n = d_{p0}^n - fractK \tag{2.1}$$

Dans l'équation (2.1), d_p est le diamètre de la particule à l'instant t, d_{p0} est le diamètre initial de la particule, K est la constante globale de la combustion et n est un exposant dont les valeurs se trouvent généralement entre 1.5 et 2. Il est à souligner que lorsque n = 2, on retrouve une loi similaire à celle de la combustion en régime diffusif d'une gouttelette d'hydrocarbure en d_p^2 (n = 1 correspond au régime cinétique). En pratique, on utilise généralement la durée de combustion τ_p qui résulte de l'équation (2.1) :

$$\tau_p = K d_{p0}^n \tag{2.2}$$

Néanmoins, des résultats expérimentaux, dont ceux de Belyaev et al. [60] ou encore Prentice [63], suggèrent que τ_p dépend aussi de l'atmosphère environnante. Plus précisément, une loi semi empirique proposée par Belyaev et al. [60] prend en compte les fractions molaires des gaz oxydants susceptibles de réagir avec l'aluminium (O₂, H₂O, CO₂, ...).

$$\tau_p = \frac{K d_{p0}^n}{\Phi_{ox}^{0.9}}$$
(2.3)

Dans l'équation précédente, Φ_{ox} est la somme des fractions molaires initiales de gaz oxydant pouvant réagir avec l'aluminium et K est une constante globale de combustion, de l'ordre de 10⁶ s/m² généralement. Cependant, Micheli et Schmidt [64] ont mis en doute expérimentalement cette loi qui pondère de façon égalitaire les espèces réagissant avec l'aluminium : en effet, l'oxygène présente une plus grande réactivité avec l'aluminium que la vapeur d'eau ou le CO₂. C'est pourquoi Brooks et Beckstead [61] adaptent la forme de τ_p pour prendre en compte de manière différenciée l'effet de chaque oxydant sur la durée de la combustion :

$$\tau_p = K' \frac{d_{p0}^n}{\sum k'_j X_j} \tag{2.4}$$

Dans l'équation (2.4), K' est la nouvelle constante globale de la combustion, X_j est la fraction molaire de l'oxydant gazeux j, et k'_j est une constante prenant en compte l'effet propre de chaque oxydant sur la durée de la combustion.

Par ailleurs, dans le cas de la détonation des mélanges biphasiques contenant des particules solides, les temps de combustion sont au moins du même ordre de grandeur que le délai d'inflammation [60], alors qu'on néglige généralement le temps de combustion devant le délai d'induction pour les mélanges gazeux.

2.1.4 Cas de l'inflammation derrière une onde de choc

Les résultats précédents sur l'inflammation et la combustion de particules d'aluminium ont été obtenus dans des conditions variées. Il est probable que ces différentes conditions jouent un rôle important sur les processus physiques mis en jeu. Dans le cadre de cette étude, nous nous intéressons principalement aux résultats de l'inflammation de particules derrière des ondes de choc ou des ondes de détonation.

Cependant, les travaux expérimentaux spécifiques à l'inflammation et la combustion de particules d'aluminium derrière une onde de choc sont en nombre restreint. La plupart des expériences ont été réalisées dans des tubes à choc avec des suspensions de particules (et non pas avec des particules isolées comme dans la majorité des cas évoqués précédemment), de concentration généralement faible. L'inflammation des particules est généralement obtenue à partir de l'onde de choc réfléchie sur le fond du tube. De même que dans les cas évoqués au paragraphe 2.1.2, les températures d'inflammation observées sont généralement inférieures à la température de fusion de l'alumine. Les résultats les plus marquants sont regroupés dans le tableau 2.2.

Référence	T_{inf} (K)
Fox et Nicholls [65]	2000
Borisov et al. [37]	1430
Boiko et al. [66]	1000
	1300
	1800
Roberts et al. [67]	2225

TAB. 2.2 – Températures mesurées en tube à choc de l'inflammation de suspensions de particules d'aluminium

Boiko et al. [66] ont étudié l'inflammation de particules d'aluminium dans de l'oxygène pur derrière une onde de choc réfléchie, pour des températures comprises entre 1000 K et 2000 K, et des pressions comprises entre 10 bar et 30 bar. Ils ont testé des particules sphériques de diamètre compris entre 3 et 5 μ m ainsi que des particules de type flocon de longueur 20-30 μ m et d'épaisseur 2-5 μ m. Les particules de type flocon s'enflamment à 1800 K alors que trois températures différentes sont obtenues pour les particules sphériques : 1000 K, 1300 K et 1800 K, avec une faible fraction d'aluminium réagi pour les deux plus basses températures comparativement au cas où l'inflammation se produit à 1800 K. Par ailleurs, les micrographies réalisées mettent en évidence que le mécanisme principal d'inflammation est la rupture de la couche d'alumine sous l'effet des contraintes thermiques. Cependant, les avis sont divers quant aux modes de transferts thermiques à prendre en compte : si Fox et Nicholls [65] considèrent que l'échauffement des particules derrière une onde de choc résulte à la fois des modes de convection et de conduction ($\tau_{inf} \sim d_p^{1.45-2}$), Boiko et al. [66] estiment que seule joue la conduction ($\tau_{inf} \sim d_p^2$). Ces estimations contradictoires montrent la difficulté de l'étude de l'inflammation de suspensions de particules d'aluminium derrière une onde de choc ainsi que le manque de données expérimentales. Ingignoli [40] souligne par ailleurs les effets contradictoires du diamètre des particules sur leur échauffement : plus le diamètre d'une particule est élevé, plus l'énergie à lui fournir est grande pour élever sa température à une température fixée. En revanche, plus le diamètre est important, plus l'accélération de la particule est faible et donc le temps mis pour atteindre l'équilibre des vitesses entre les deux phases est grand. Ainsi, la particule reste plus longtemps soumise à des températures statiques élevées. Ces deux effets s'opposent et il en résulte que le délai d'inflammation ne varie pas nécessairement de façon monotone avec le diamètre des particules. Une estimation cohérente de la température d'inflammation des particules d'aluminium derrière une onde de détonation a été proposée par Khasainov et al. [68], Veyssiere et al. [69], Borisov et al. [70] et Ingignoli [40]: $T_{inf} = 1350$ K. Cette valeur repose sur le fait que l'inflammation peut avoir lieu bien en dessous de la température de fusion de l'alumine et qu'elle présente un accord satisfaisant entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques de Khasainov et Veyssiere [68], [69].

Selon Borisov et al. [37], Boiko et al. [66] et Roberts et al. [67], le délai d'inflammation est proportionnel au diamètre des particules à une puissance proche de 2 pour des particules de l'ordre de la dizaine de micromètres. En outre, l'inflammation des particules a généralement lieu à des températures de l'ordre de 1300 K, bien inférieures à la température de fusion de l'alumine.

Il existe deux approches pour modéliser l'inflammation de l'aluminium. La plus classique consiste, comme il vient d'être mentionné, à considérer que les réactions chimiques entre l'aluminium et l'oxydant ne démarrent qu'une fois atteinte la température d'inflammation. Cependant, une autre approche est proposée par Roberts et al. [67] selon lesquels la période d'induction est gouvernée par un régime cinétique de type Arrhenius, qui agit par oxydation de l'aluminium par des réactions chimiques hétérogènes, ces dernières étant déclenchées par le chauffage par convection des particules du fait de la température élevée des gaz environnants. Les réactions chimiques hétérogènes provoquent alors un autochauffage des particules, qui contribue à accélérer leur montée en température. Ainsi, le chauffage par réactions chimiques associé au chauffage par convection conduit au basculement vers le mode de combustion classique, qui après inflammation est limité par la diffusion des espèces oxydantes et des espèces combustibles évaporées.

2.2 Données expérimentales sur les détonations hétérogènes gaz oxydant / particules d'aluminium

2.2.1 Détonations en milieu confiné

Les premiers travaux expérimentaux pertinents quant à la détonation de suspensions d'aluminium en atmosphère gazeuse oxydante sont ceux de Strauss [71] en 1968 : le dispositif expérimental comprend un tube vertical en verre de 2.7 m de longueur et de diamètre 26.4 mm, dans lequel sont générées des suspensions de particules d'aluminium, soit de type flocon, soit de type atomisée, dans une atmosphère d'oxygène pur. L'initiation est réalisée à l'aide de détonateurs. Avec les deux types de particules utilisées, Strauss [71] a observé des célérités de propagation moyennes pratiquement constantes, ce qui laisse supposer qu'un régime quasi-stationnaire a été atteint. Cependant, les valeurs de célérités mesurées présentent un déficit important par rapport à la valeur théorique CJ (entre 100 et 200 m/s), ce qui laisse supposer au vu de la faible longueur du tube qu'un régime autonome et stable de détonation n'a pas été atteint.

En 1982, Tulis et Selman [72] ont réalisé des expériences avec des particules d'aluminium sphériques et de type flocon en suspension dans l'air, dans un tube vertical de 5.5 m de long pour un diamètre de 15.2 cm. L'utilisation de puissants détonateurs mène à des régimes proches du régime de détonation, à des célérités de propagation quasi-constantes mais néanmoins légèrement inférieures aux valeurs théoriques idéales CJ. La longueur du tube utilisé était probablement trop courte pour permettre l'établissement d'un régime stationnaire et autonome de détonation, comme le suggèrent les travaux numériques discutés plus loin dans ce mémoire.

En 1986, Veyssiere [73] utilise un tube vertical de 6 m de long et 69 mm de diamètre. Les particules d'aluminium sont mises en suspension par un écoulement laminaire à partir de l'élutriation des particules d'un lit fluidisé, assurant ainsi une suspension de qualité. Cependant, aucun régime de détonation n'a pu être atteint, aussi bien dans de l'air que dans de l'oxygène pur, probablement à cause de la taille relativement importante des particules, à savoir 13 μ m de diamètre, et un diamètre de tube également faible.

En 1992, Borisov et al. [70] étudient la détonation de particules d'aluminium dans de l'air et de l'oxygène, pour des tubes horizontaux dont la longueur est comprise entre 2 et 4.5 m, et pour des diamètres de 5.5, 12.2 et 14.5 cm. Suivant le type et la concentration des particules (sphériques de 1 μ m de diamètre, flocons de 1 × 10 × 10 μ m³), les célérités de propagation observées sont comprises entre 1400 et 1800 m/s, c'est-à-dire inférieures ou proches des célérités idéales CJ. Les auteurs estiment qu'un régime stationnaire et autonome de détonation a pu être atteint. Cependant, l'observation de régimes hélicoïdaux met en évidence le rôle du confinement en tube et nécessite d'envisager l'étude de la propagation des détonations dans des tubes de diamètre plus important. En 1995 et 1997, Pu et al. ([74], [75]) étudient l'accélération de la flamme et la transition déflagration détonation (TDD) pour des suspensions d'aluminium dans de l'air. Les tubes utilisés ont une longueur de 5 m ou 12 m pour un diamètre de 14 cm. Ils observent le long du tube une augmentation constante de la célérité de propagation après initiation faible (6 g de poudre noire). De plus, dans le tube de 12 m de long, un régime de détonation avec une célérité de propagation de l'ordre de 2000 m/s environ semble avoir été observé.

En 2001, Zhang et al. [76] observent dans un tube de 30 cm de diamètre la TDD pour des mélanges de richesse 0.65 et 1.61 dans de l'air, à 1 bar de pression initiale, l'initiation étant réalisée avec des détonateurs pyrotechniques de 300 J. Les particules d'aluminium sont de type flocon, de dimensions estimées $30 \times 30 \times 1 \ \mu\text{m}^3$. Les résultats obtenus présentent des célérités de propagation en dessous des célérités idéales CJ, mais proches de celles obtenues par Borisov et al. [70].

Veyssiere [39] a réuni les principaux résultats sur les études des détonations de suspensions d'aluminium en tube à choc (cf. tableau 2.3). Il conclut que les diverses configurations de dimensions du tube, taille et type de particules, atmosphère gazeuse et type d'initiation étudiées, ne permettent toujours pas depuis les travaux pionniers de Strauss [71] jusqu'à aujourd'hui de répondre clairement aux problèmes posés par l'établissement de régimes de détonation dans ces mélanges. On observe cependant que les tubes de plus grande section et les plus longs mènent aux déficits de célérité de propagation les plus faibles par rapport à la célérité idéale D_{CJ} . Mais dans tous les cas, l'initiation a nécessité l'utilisation de dispositifs d'amorçage "forts".

2.2.2 Initiation, détonabilité et expériences non confinées

Les résultats expérimentaux précédents montrent que la possibilité d'existence de détonations hétérogènes de suspensions de particules d'aluminium en atmosphère gazeuse oxydante, stationnaires et autonomes, n'est pas clairement établie : en effet, malgré l'observation de régimes de propagation supersoniques semblables à des détonations, à des célérités proches des valeurs idéales CJ, il est difficile d'identifier si le confinement et la source d'initiation influent ou non sur la propagation. Cette observation est d'autant plus pertinente que les expériences de Strauss [71], Borisov et al. [70] ou encore Zhang et al. ([78], [79]) ont conduit à l'observation de régimes de propagation hélicoïdaux.

Par ailleurs, l'établissement d'un régime de détonation par transition déflagration détonation (TDD) a été étudié par Pu et al. ([74], [75]) dans des mélanges air - aluminium. En effet, la TDD peut constituer un bon critère pour qualifier l'existence d'un régime de détonation dans un mélange donné. Le tube de 5 m de long n'a pas permis d'atteindre une célérité suffisamment proche de la célérité idéale CJ [74] alors que le tube de 12 m

Réf.	L_{tube}	D_{tube}	Gaz	Particules Initiation		Vitesse (m/s)
[71]	2.7 m	26.4 mm	O_2	flocon 40 μm	détonateurs	1400-1600
		$44 \mathrm{mm}$		atomisées 5 $\mu {\rm m}$		
[72]	5.5 m	$152 \mathrm{~mm}$	Air	sphériques 5 μm	3 g expl. sol.	1300-1500
				flocon ép. 1 $\mu{\rm m}$		
[70]	4.2 m	$122 \mathrm{mm}$	Air	flocon 1 μm	détonateurs	1400-1800
	2 m	$55 \mathrm{~mm}$	O_2	atomisées	explos. solide	
		$145 \mathrm{~mm}$		$(1; 11 \text{ et } 33 \ \mu \text{m})$		
[76]	37 m	$300 \mathrm{mm}$	Air	flocon	pyrotechnique	1750
				$(36 \times 36 \times 1 \ \mu m^3)$		
[75]	14 m	140 mm	Air	atomisée 6 $\mu {\rm m}$	poudre noire	2000?
[77]	13 m	80 mm	Air	atomisée 0.1 à 2 $\mu {\rm m}$	détonateur	1080-1460
					RP 83; 6 kJ	

TAB. 2.3 – Principaux résultats sur les détonations de suspensions d'aluminium en tube, d'après [39]

de long a mené à la mesure d'une célérité de propagation de 2000 m/s, ce qui laisserait supposer que le régime de détonation a été atteint [75], même s'il n'est pas stabilisé.

Afin d'éliminer les effets de paroi occasionnés par les expériences en tube à choc, quelques études ont été menées en milieu non confiné, par initiation directe. C'est le cas de Tulis [80] en 1984 qui tente d'initier la détonation de nuages de flocons d'aluminium de taille caractéristique 10 μ m (Reynolds 40XD). En utilisant un nuage cylindrique de 3 m de rayon et 10 m de long initié en son centre par 2.27 kg d'explosif solide ou un nuage "linéaire" initié à une extrémité par la même charge, l'auteur enregistre des valeurs de célérité aux frontières des nuages allant jusqu'à 1500 m/s, célérités de propagation néanmoins en dessous des valeurs idéales CJ. Toutefois, les enregistrements de pression ne permettent pas de déterminer si l'expérience a mené à un régime de détonation ou à un phénomène de combustion derrière l'onde de choc incidente.

Ingignoli et al. [81] ont utilisé des charges de 125 g de TNT pour initier des mélanges oxygène pur - aluminium, en utilisant des particules de type flocon en suspension dans un ballon cylindrique en polyéthylène de diamètre 70 cm et hauteur 90 cm (soit un volume de 0.350 m³). Dans un premier temps, l'onde de choc incidente s'atténue jusqu'à ce que la zone de combustion, formée derrière elle, supporte la propagation. Ils enregistrent à la moitié du nuage d'aluminium des célérités de propagation quasi-constantes de l'ordre de 1200 m/s, ainsi qu'une célérité de 1600 m/s lors d'un des essais. Cependant, le régime de propagation n'a d'une part pas pu être identifié et d'autre part, le dispositif expérimental s'est avéré de trop petites dimensions pour pouvoir atteindre une célérité stationnaire de propagation. Il est à noter qu'ils ont enregistré dans ces conditions une structure cellulaire qui sera évoquée au paragraphe 2.2.3.

Récemment, Zhang et al. [82] ont étudié la détonation dans l'air d'un nuage de flocons d'aluminium de 18 m de long et de section $3 \text{ m} \times 3 \text{ m}$. L'aluminium, initialement au sol, est mis en suspension par l'explosion d'un cordon de penthrite, ce qui permet d'obtenir une concentration moyenne de 290 g/m³. L'initiation est réalisée à 1 m du sol et à 1.5 m d'une extrémité du nuage, par une charge de 8 kg de C4. Des capteurs de pression sont placés tous les deux mètres au delà d'une distance de 3 m depuis la charge de C4 et une plaque enduite de noir de carbone permet d'enregistrer la structure cellulaire entre les deux derniers capteurs. A 4 m de la charge initiale, l'onde se propage à 1600 m/s et décroît à 1380 m/s à 7 m. La TDD se produit à environ 11 m et la célérité de propagation atteint un maximum de 1533 m/s avant de se maintenir à 1460 m/s sur le reste du nuage d'aluminium. Cependant, malgré la distance de propagation de 18 m, un régime de détonation idéale autonome n'a sans doute pas été atteint : en effet, la célérité théorique de détonation d'un mélange air - aluminium de concentration en particules 290 g/m³ est d'après les calculs avec le code TDS [7] d'environ 1820 m/s, soit un déficit de 360 m/s (20 %) pour cette expérience de Zhang et al. [82]. La structure cellulaire qu'ils ont obtenue sera également abordée dans le paragraphe 2.2.3.

Les détonations hétérogènes de suspensions de particules d'aluminium en atmosphère d'air ou d'oxygène pur sont donc beaucoup plus difficiles à initier que les détonations homogènes gazeuses. Le tableau 2.4 mentionne les résultats des expériences en milieu non confiné. Les valeurs des énergies d'initiation employées lors de ces expériences sont à comparer avec celles des mélanges homogènes gazeux hydrocarbures - air à la stœchiométrie, de l'ordre de 50 g de TNT.

Réf.	Dim. du nuage	Gaz	Particules	Initiation	Vitesse (m/s)
[80]	diamètre 6 m	Air	Reynolds 40XD	2.27 kg expl. sol.	1500
	hauteur 10 m		$10 \ \mu m$		
[82]	$18 \text{ m} \times 3 \text{ m} \times 3 \text{ m}$	Air	atomisée 2-3 $\mu {\rm m}$	8 kg C4	1200-1300
			flocons		1460
[81]	diamètre 70 cm	O_2	flocons	125 g TNT	1200
	hauteur 90 cm				

Тав. 2.4 –	Principaux	résultats s	sur les	détonations	de suspensio	ns de	particules	d'alu-
minium en 1	nilieu non c	onfiné						

2.2.3 Structure cellulaire

Du fait des difficultés à obtenir le régime de détonation et de la taille des installations expérimentales requises, très peu de résultats expérimentaux sont disponibles à ce jour concernant l'existence de la structure cellulaire de détonation dans les mélanges hétérogènes gaz - particules solides.

En 1999, Ingignoli et al. [81] ont enregistré une structure cellulaire lors de la détonation d'un nuage non confiné de particules d'aluminium de type flocon dans de l'oxygène pur (cf. paragraphe 2.2.2). La dimension caractéristique de la structure obtenue est de l'ordre de 5-10 cm. Cependant, elle a été enregistrée à la périphérie du nuage et il est difficile de déterminer si ces structures auraient perduré sur une distance de propagation plus importante. L'enregistrement de cette structure cellulaire sur des plaques de carbone est reproduite par la figure 2.1.



FIG. 2.1 – Enregistrement de la structure cellulaire obtenue lors de la détonation d'un nuage non confiné d'aluminium dans de l'oxygène, d'après Ingignoli et al. [81]

Pour les mélanges air - aluminium, les seules structures cellulaires obtenues expérimentalement sont celles de Zhang et al. ([76], [82]). Dans un tube de 30 cm de diamètre contenant des flocons d'aluminium de dimension $30 \times 30 \times 1 \ \mu\text{m}^3$ en suspension dans de l'air, la pression initiale du mélange étant de 1 bar et sa richesse de 1.61, Zhang et al. [76] initient la déflagration avec une énergie d'amorçage de 300 J suivie d'un processus de transition déflagration détonation (TDD). A une distance de propagation de 82.7 fois le diamètre du tube, des capteurs de pression disposés sur la paroi à des intervalles angulaires de 45 degrés enregistrent les signaux de pression. A cette distance de propagation, la célérité de l'onde est constante, de l'ordre de 1750 m/s, en accord avec la valeur théorique idéale pour un tel mélange. Quatre des huit capteurs de pression montrent clairement l'existence d'ondes transverses. La fréquence des oscillations de pression enregistrées par ces capteurs permettent alors aux auteurs de reconstituer la dimension transversale d'une cellule de détonation : $\lambda = 40$ cm. La figure 2.2 montre un exemple de ces enregistrements de pression effectués à une distance de propagation x = 24.8 m environ.



FIG. 2.2 – Enregistrements de pression pariétaux lors de la détonation d'une suspension d'aluminium à richesse 1.61 dans de l'air, d'après Zhang et al. [76]

Zhang et al. [77] ont ensuite examiné l'influence de la pression initiale sur la détonation dans un tube de suspensions de particules d'aluminium, de diamètre compris entre 100 nm à 2 μ m, dans de l'air. Le tube utilisé mesure 13 m de long pour un diamètre de 80 mm. L'amorçage d'une détonation est possible dès 1 atm de pression initiale pour les particules de 100 nm de diamètre. En revanche, il faut monter jusqu'à une pression initiale de 2.5 atm pour établir l'onde de détonation avec les particules de 2 μ m. Il est à noter que les ondes se propagent selon un mode hélicoïdal. Ainsi, les auteurs concluent qu'une augmentation de pression initiale se traduit par une augmentation de la détonabilité et une diminution de la longueur de TDD. Cette dépendance suggère alors que les mécanismes de réaction font intervenir un régime cinétique. Ils en déduisent une dépendance de λ en fonction du temps de réaction de l'aluminium et du diamètre des particules pour une détonation hélicoïdale, en d_{p0}^n/p_0^m , avec n < 2 et m > 1, ce qui diffère d'un modèle de combustion purement diffusif qui mènerait à m proche de 0 et n = 2. Ainsi, la suggestion d'un régime cinétique par Roberts et al. [67] avant le début de la phase combustion est partiellement confirmée. C'est la taille du tube dans le cas de détonations hélicoïdales qui impose la taille λ de la structure cellulaire. Il vient alors de manière semi-empirique [77] :

$$\lambda = \pi D_{tube} \sim \frac{d_{p0}^n}{p_0^m} \tag{2.5}$$

avec n < 2 et m > 1.

Zhang et al. [82] ont enregistré expérimentalement une autre structure cellulaire dans un nuage de flocons d'aluminium de 18 m de long et de section 3 m × 3 m dans les conditions décrites au paragraphe 2.2.2. A partir de 15 m de propagation, les capteurs de pression enregistrent des oscillations de pression typiques des ondes transverses, avec une période d'oscillation de 350 μ s. Les plaques de suie enregistrent une structure cellulaire de dimension transversale caractéristique $\lambda = 52$ cm. Cependant, la célérité de propagation obtenue laisse supposer que les réactions chimiques avaient lieu trop loin du front incident pour avoir un couplage fort, menant ainsi à une taille caractéristique des cellules de détonation surestimée par rapport au cas idéal, du fait d'une longueur d'induction trop élevée.

A travers ce résumé des travaux réalisés dans les mélanges hétérogènes de suspensions d'aluminium, on voit la difficulté de mener à bien des essais fiables et reproductibles permettant d'obtenir de manière certaine un régime de détonation autonome et d'en mesurer les caractéristiques. De plus, la dimension des installations requises entraîne des expériences dont la réalisation est compliquée et extrêmement coûteuse. Depuis les années 1990, des travaux ont été entrepris sur l'étude de ces détonations par simulations numériques, d'une part pour mieux analyser les processus mis en jeu et d'autre part, pour disposer d'un outil permettant de prédire les dimensions nécessaires à la réalisation d'un dispositif expérimental susceptible de fournir des résultats pertinents.

2.3 Résultats d'études numériques des détonations hétérogènes gaz oxydant / particules d'aluminium

2.3.1 Simulations 1D

Le développement de modèles 1D de détonations hétérogènes gaz - particules solides a pour but d'analyser les déficits de célérité de propagation du front constatés lors des expériences, en s'appuyant sur le modèle des détonations non-idéales de Zel'dovich [35] considérant une épaisseur finie de la zone de réaction, de manière à prendre en compte l'influence des pertes thermiques aux parois et les échanges entre les gaz et les particules.
Les premiers modèles de détonations hétérogènes contenant des particules ont été proposés par Khasainov et Veyssiere [68] dans le cas des détonations hybrides et par Lee et Sichel [83] dans le cas de détonations hétérogènes. Reposant sur la séparation des deux phases en termes de masses volumiques, vitesses et températures, les équations de bilan sont écrites pour les deux phases et interagissent entre elles à travers des termes sources d'échange de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Dans le modèle initial de Khasainov et Veyssiere [68], la combustion des particules d'aluminium est simulée par un modèle à deux étapes : une étape de chauffage des particules et une étape de combustion. Ainsi, aucun échange de masse n'a lieu entre les deux phases si la température des particules est inférieure à la température d'inflammation choisie, cette dernière étant généralement choisie très inférieure à la température de fusion de l'alumine (Borisov et al. [70], Ingignoli et al. [81], Benkiewicz et Hayashi [84]). Une fois cette température atteinte, la combustion a lieu selon un régime diffusif. Plus de détails sur le régime diffusif sont donnés au chapitre 4. Ce modèle a été optimisé et validé par des résultats expérimentaux (Khasainov et Veyssiere [85], Veyssiere et al. [69], [86] [87], Ingignoli et al. [40], [81], Borisov et al. [70]).

En utilisant des modèles séparant les deux phases en termes de masses volumiques, vitesses et températures, Fedorov et al. [88], [89], [90] ont étudié les détonations oxygène - aluminium dans des conditions variées et focalisent leurs investigations sur les conditions d'existence et de stabilité de ces détonations. En revanche, même si les célérités de propagation calculées sont assez proches de celles de Strauss [71], ils n'ont pas effectué de comparaisons approfondies avec les résultats expérimentaux disponibles (Ingignoli [81]).

En utilisant le modèle de Khasainov et Veyssiere [68], Ingignoli [40] a étudié la propagation d'ondes de détonation hétérogènes oxygène - aluminium, avec des particules sphériques de différents diamètres et des flocons, sur des distances de 6 m. Il établit que l'énergie critique d'initiation pour une onde plane est minimale autour de la stœchiométrie. De plus, elle est plus importante lorsque l'on augmente la taille du tube. Par ailleurs, l'énergie critique augmente avec le diamètre des particules, allant d'environ $5 \times 10^4 \text{ J/m}^2$ pour des particules de 2 μ m de diamètre à 10^7 J/m^2 pour 13 μ m de diamètre. Les simulations numériques 1D d'Inginoli [40] en tube à choc sont en bon accord avec ses propres résultats [81] et ceux de Strauss [71], avec toutefois une légère différence qu'il explique par la présence d'alumine sur les particules de Strauss [71]. Enfin, il est à noter que les valeurs critiques d'énergie d'initiation calculées en géométrie sphérique confirment la faible détonabilité de ces mélanges par rapport à celle des mélanges gazeux.

Benkiewicz et Hayashi [84] ont effectué des simulations numériques 1D de détonations hétérogènes oxygène - aluminium à partir d'un modèle de combustion de l'aluminium ajusté après une étude paramétrique. Il apparaît que ce modèle de combustion a une influence sur les résultats. En particulier, une augmentation de la température de décomposition de l'alumine augmente la célérité de propagation ainsi que la valeur du pic de pression. En revanche, le diamètre des particules et leur température d'inflammation limitent l'existence et le développement de l'onde de détonation, mais a peu d'influence sur la propagation de cette dernière une fois le régime de détonation éventuellement établi.

Zhang et al. [82] ont développé un modèle hybride prenant en compte des régimes cinétique et diffusif de réaction des particules. La prédominance d'un régime sur l'autre dépend de la valeur de la température des particules. Ce modèle sera expliqué en détail dans le chapitre 4. Zhang et al. [82] ont ainsi simulé la TDD dans un mélange air - aluminium, avec une concentration de particules de 1250 g/m³ et une pression initiale de 2.5 atm (correspondant à leurs expériences).

2.3.2 Simulations 2D - Structure cellulaire

Comme déjà évoqué précédemment, la mise en évidence et la compréhension de la structure cellulaire dans le cas des détonations hétérogènes est d'une grande importance. D'une part, la structure cellulaire des ondes de détonation est caractéristique d'un mélange et de la cinétique chimique pilotant la libération d'énergie. D'autre part, la connaissance de la dimension de la structure cellulaire permet d'estimer des paramètres importants tels que l'énergie critique d'initiation ou encore le rayon critique d'initiation, et donc de dimensionner une installation expérimentale. L'intérêt des simulations numériques 2D permet en outre d'étudier plus en détail la structure de l'onde de détonation au niveau du front, ce qui expérimentalement est extrêmement difficile étant donné les échelles de temps et de longueur mises en jeu. Jusqu'à ce jour, de telles simulations sont relativement rares du fait de l'intérêt récent pour le sujet, mais également à cause des moyens informatiques prohibitifs requis. En effet, contrairement au cas gazeux où les codes de calcul utilisés doivent résoudre les équations de conservation pour une seule phase, les mélanges hétérogènes nécessitent la résolution des équations pour les deux phases.

Sur la base du modèle de combustion développé pour leurs calculs 1D [91], Benkiewicz et Hayashi [92] ont réalisé des simulations numériques de la structure cellulaire d'un mélange pauvre oxygène - aluminium, pour une concentration de particules de 0.3 kg/m³ ($\phi \simeq 0.3$) et des diamètres de particules de 1 et 2.5 μ m. Le domaine de calcul correspond à un tube de longueur 60 cm et de diamètre 12 cm. Ils obtiennent des détonations se propageant dans un mode à plusieurs têtes. Ils en déduisent des largeurs caractéristiques de cellules de détonation : $\lambda = 6$ cm et $\lambda = 1.1$ cm, respectivement pour les diamètres de particules de 2.5 et 1 μ m (cf. figure 2.3). Cependant, la distance de propagation est évidemment trop courte ($x \sim 0.6$ m $\leq 10 \lambda$) pour s'assurer du caractère stationnaire et autonome de la détonation, et leurs simulations ne permettent donc pas de prédire si la structure cellulaire obtenue est susceptible d'évoluer sur des distances de propagation plus élevées. Les diagrammes de vitesses matérielles ne sont pas montrés et auraient permis de conclure quant à la stationnarité de la propagation de l'onde de détonation. De plus, les diamètres de particules utilisées et leur géométrie sphérique diffèrent de manière importante des conditions expérimentales d'Ingignoli et al. [81] où la structure cellulaire de détonation des mélanges oxygène - aluminium a été mise en évidence. Il est donc difficile de conclure quant à la validité de leur modèle de combustion.



FIG. 2.3 – Simulations numériques de la structure cellulaire de détonation d'un mélange oxygène - aluminium dans un tube de 12 cm de diamètre, d'après Benkiewicz et Hayashi [92]. En haut : $d_{p0} = 2.5 \ \mu \text{m}$ et $\sigma = 0.3 \ \text{kg/m}^3$. En bas : $d_{p0} = 1 \ \mu \text{m}$ et $\sigma = 0.3 \ \text{kg/m}^3$.

Parallèlement à nos propres simulations numériques qui sont présentées dans le chapitre 6 de ce mémoire, Fedorov et Khmel ([93], [94], [95] et [96]) ont simulé également la structure 2D des détonations oxygène - aluminium et aboutissent à une structure cellulaire numérique en bon accord avec le cas expérimental obtenu par Ingignoli et al. [81]. Leurs résultats numériques montrent de plus une dépendance de la taille caractéristique de la structure cellulaire par rapport au diamètre des particules [93] telle que :

$$\lambda = \lambda^* \left(\frac{d_{p0}}{d_p^*}\right)^{1.6} \tag{2.6}$$

où λ est la taille de la structure cellulaire, $\lambda^* = 27$ cm, d_{p0} est le diamètre initial des particules et $d_p^* = 10 \ \mu$ m.

Par ailleurs, ils ont également étudié la structure cellulaire dans le cas de deux fractions de particules de diamètres différents [96], en faisant varier la répartition des deux fractions. Ils arrivent à la conclusion que la présence de deux fractions différentes de particules influe sur l'établissement et la taille de la structure cellulaire. Plus précisément, ils obtiennent un délai de formation de la structure cellulaire plus long que pour les mélanges comportant une seule taille de particules. De plus, les pics de pression obtenus lors de la collision de points triples sont plus faibles avec deux fractions de particules. La trajectoire des points triples est modifiée et une dégénérescence de la structure cellulaire en onde plane est obtenue dans certains de leurs mélanges. Des exemples de ces structures cellulaires sont montrées sur la figure 2.4 dans le cas d'un mélange oxygène - aluminium monodispersé et sur la figure 2.5 dans le cas d'un mélange oxygène - aluminium bidispersé. La figure 2.5 correspond à un cas de dégénérescence de la structure cellulaire. Cependant, ce phénomène, dû aux faibles variations de pression visualisées numériquement, pourrait être dû à une résolution numérique insuffisante, cette dernière n'étant pas précisée.



FIG. 2.4 – Formation d'une structure cellulaire de détonation dans des mélanges oxygène - aluminium monodispersés : $d_{p0} = 1 \ \mu m$ (a) et $d_{p0} = 2 \ \mu m$ (b), d'après Fedorov et Khmel [96]



FIG. 2.5 – Dégénérescence de la structure cellulaire de détonation dans des mélanges oxygène - aluminium bidispersés contenant des particules de 3.5 et 2 μ m à concentrations égales, d'après Fedorov et Khmel [96]

Récemment, Zhang et al. [82], en utilisant le modèle hybride précédemment évoqué, ont également obtenu une structure cellulaire numérique dans un mélange air - aluminium avec une concentration de 1250 g/m³ en particules de 2-3 μ m de diamètre, à une pression initiale de 2.5 atm. La structure cellulaire obtenue présente une largeur caractéristique λ

= 33 cm. Ils observent par ailleurs une accumulation de particules à proximité du front de détonation, en accord avec les prévisions de Korobeinikov [97] sur la modification de la concentration en particules solides derrière une onde de choc.

On peut également noter qu'il y a déjà une dizaine d'années, Khasainov et al. [98] ont simulé la structure cellulaire dans le cas de mélanges hybrides. Ce sont les seuls résultats existant en ce domaine. Ces mélanges ne font pas l'objet du présent travail. Mais le modèle numérique utilisé dans ces travaux s'inspire largement des méthodes et des algorithmes développés à cette occasion.

2.4 Conclusions sur les détonations hétérogènes de suspensions d'aluminium en atmosphère gazeuse oxydante

De l'examen des résultats disponibles actuellement, il ressort que les mélanges hétérogènes contenant des suspensions de particules d'aluminium dans de l'air ou de l'oxygène présentent une faible détonabilité comparativement aux détonations homogènes gazeuses. Dans le cas des expériences de Zhang et al. [82], 8 kg d'explosif solide C4 ont été nécessaires pour amorcer la détonation non confinée d'un nuage de particules d'aluminium dans de l'air. Les énergies d'initiation sont plus faibles dans le cas de l'utilisation de tubes à choc (généralement quelques grammes d'explosifs), mais des déficits de célérité de propagation importants (pouvant atteindre plusieurs centaines de mètres par seconde) ont été observés, essentiellement dus aux pertes aux parois, conséquences des longueurs de réactions chimiques importantes. De ce fait, il apparaît que l'étude expérimentale de ces détonations est compliquée, compte tenu de la dimension des installations requises et des énergies d'initiation mises en jeu, ce qui justifie l'intérêt du développement de la simulation numérique.

Par ailleurs, l'existence de régimes hélicoïdaux et de structures cellulaires a été mise en évidence expérimentalement. La taille caractéristique de la structure cellulaire est de l'ordre de la dizaine de centimètres pour les mélanges oxygène - aluminium et de quelques dizaines de centimètres pour les mélanges air - aluminium.

De plus, la combustion des particules d'aluminium lors d'une détonation hétérogène semble faire intervenir aussi bien des régimes cinétiques que diffusifs. Il a en effet été suggéré que la taille des cellules de détonation pourrait être proportionnelle à $\frac{d_{p0}^n}{p_0^m}$, avec n> 2 et m > 1 [77]. Néanmoins, la mise au point de modèles de combustion de l'aluminium derrière une onde de choc reste un sujet de recherche à poursuivre.

On se propose dans ce mémoire d'étudier en détail la structure cellulaire et la struc-

ture fine de l'onde de détonation. Il est ainsi nécessaire d'analyser le rôle des longueurs chimiques caractéristiques et de dégager les similitudes et différences entre les détonations gazeuses homogènes et hétérogènes gaz - particules d'aluminium. Cette étude nécessite le développement de modèles de combustion suffisamment réalistes et leur confrontation avec les données expérimentales disponibles.

CHAPITRE 3

Les détonations hétérogènes gaz / gouttelettes liquides

Chapitre 3

Les détonations hétérogènes gaz / gouttelettes liquides

3.1 Introduction

L'étude des détonations de gouttelettes liquides intervient dans les années 1950, avec l'observation de détonations ou quasi-détonations d'aérosols liquides en atmosphère oxydante par Burgoyne et Cohen [99]. L'intérêt porté pour de telles détonations est lié aux applications propulsives les utilisant (Williams [100], [101]), notamment les moteurs de fusée à carburant liquide (Weber [102], Cramer [103]), la compréhension des instabilités non linéaires de combustion dans les moteurs (Dabora et Ragland [104], [105], Ragland et Dabora [106]) ou plus récemment, le Moteur à Détonation Pulsée (Pulse Detonation Engine, PDE), bien que ce dernier ait surtout été étudié avec des mélanges gazeux homogènes (cf. synthèse par Roy el al. [107]). Cependant, l'utilisation de carburants liquides présente l'avantage pratique de limiter le volume et la masse de l'engin propulsif. Par rapport aux particules solides, la détonation de gouttelettes liquides de combustible nécessite l'étude de phénomènes supplémentaires tels que l'atomisation et la désintégration des particules liquides, leur évaporation partielle ou encore le problème du processus de mélange air - combustible comportant des gradients de délai d'autoinflammation (Zeldovich [108]). La taille des gouttelettes ainsi que leur distribution spatiale et temporelle jouent un rôle important sur la détonation.

Les études effectuées à partir des années 1960 sur les détonations hétérogènes de mélanges gaz / gouttelettes liquides (Dabora et Ragland [104], [105], Ragland et Dabora [106]) ont mis en évidence un déficit de célérité de propagation comparativement à la célérité de détonation idéale CJ. En conséquence, il est apparu nécessaire d'étudier plus profondément les processus hétérogènes liés à la combustion de gouttelettes liquides derrière une onde de choc et leur rôle dans la propagation de la détonation. Différents modèles ont été élaborés, qui montrent l'influence de la taille des particules et du diamètre du tube à choc utilisé (Bowen et al. [109], [110], Gubin et Sichel [111]). Des détonations dans des suspensions de gouttelettes liquides de carburant ont été générées en configura-

tion non confinée pour étudier les conditions critiques d'initiation et de détonabilité (Bull et al. [112], Alekseev et al. [113], Beeson et al. [23], Papavassiliou et al. [114]). Enfin, quelques travaux ont été consacrés à la structure cellulaire de ces ondes de détonation hétérogènes (Papavassiliou et al. [114], Alekseev et al. [115]). En considérant les résultats de ces études, il apparaît que le comportement des gouttelettes à faible pression de vapeur saturante diffère du cas où la pression de vapeur saturante est élevée (Bar-Or et al. [116], Bull et al. [112], Papavassiliou et al. [114], Eidelman et Burcat [117]).

3.2 Premières études de détonations de gouttelettes liquides en atmosphère gazeuse

Williams ([100], [101]) en 1961 a étudié les conditions d'existence, la structure et la stabilité de détonations dans des aérosols en vue du développement d'applications propulsives. Ses premières analyses théoriques monodimensionnelles concernent un aérosol de combustible non volatile en atmosphère gazeuse. Il fait l'hypothèse que l'onde de détonation se propageant dans un aérosol est une onde de choc suivie d'une déflagration hétérogène, dans laquelle la combustion de la phase liquide a lieu intégralement à la surface des gouttelettes. Son analyse montre qu'il existe des solutions de type détonation aux équations de bilan monodimensionnelles pour la phase liquide (et donc que la détonation peut se propager indépendamment de la quantité d'oxygène présente). Néanmoins, un certain nombre de questions subsistent quant à la structure et la stabilité de telles ondes : en effet, pour un aérosol de gouttelettes de diamètre $d_{p0} = 60 \ \mu m$ dans de l'air, la longueur de la zone de combustion qui en résulte est de l'ordre de 1 m, ce qui ne permet plus de négliger les phénomènes tels que les pertes de chaleur pariétales, d'où les doutes émis sur la possibilité de ces détonations d'être stables. De ce fait, il en déduit que pour obtenir une propagation stable des détonations gaz / gouttelettes liquides, une zone de réaction plus courte et un couplage accru avec le choc incident sont nécessaires, ce qui passe par l'utilisation de gouttelettes de diamètre plus faible, ou par la fragmentation des gouttelettes initiales en plus petites gouttelettes, par l'action des forces aérodynamiques et visqueuses qui s'exercent sur elles.

Les premières expériences de détonations d'aérosols ont été réalisées par Weber [102] et Cramer [103] dans le cadre du développement de moteurs fusées à carburant liquide. En tube à choc, ils ont observé des régimes de propagation se rapprochant fortement des détonations. Cramer [103] évoque la forte probabilité pour que les gouttelettes se soient désintégrées en gouttelettes de diamètre inférieur à 10 μ m, créant ainsi un brouillard de carburant dans l'air, capable de fournir une quantité suffisante de combustible gazeux par évaporation pour entretenir la détonation. De plus, il suggère qu'une richesse élevée est nécessaire pour obtenir un phénomène proche de la détonation.

A la fin des années 1960, Dabora, Ragland et Nicholls ([104], [105] et [106]) ont étu-

dié la détonation des mélanges oxygène gazeux - diethylcyclohexane (DECH- $C_{10}H_{20}$). Le diethylcyclohexane présente une grande pureté, une faible volatilité ainsi que des propriétés se rapprochant du carburant aéronautique RP-1. Ces travaux étaient motivés par le problème des instabilités capables de mener à un régime de détonation dans les moteurs fusées à carburant liquide.

Les expériences de Dabora et al. [104] étaient réalisées avec des aérosols mono- et polydispersés, ainsi que pour des films liquides pariétaux. Dans le cas des aérosols polydispersés, les célérités de propagation sont largement inférieures aux valeurs idéales CJ. Dans le cas des gouttelettes ayant un diamètre moyen de 200 μ m, Dabora et al. [104] estiment qu'une faible proportion de combustible brûle dans la zone de réaction initiale, ce qui se traduit par une faible richesse locale derrière le choc incident. Dans le cas d'aérosols monodispersés, le déficit de célérité est de 30 % par rapport aux valeurs théoriques CJ, ce qui peut s'expliquer par le diamètre moyen encore plus élevé des gouttelettes utilisées (940 μ m). De même, de forts déficits de célérité sont également observés pour les films liquides pariétaux. Par ailleurs, les auteurs complètent l'analyse de Williams [100] en prenant en compte les variations de chaleur spécifique à travers le choc, et parviennent à des résultats très proches de celui-ci.

Les expériences de Ragland et al. [106] dans une atmosphère d'oxygène pur ont été effectuées avec des gouttelettes de 2600 μ m. Un dispositif photographique permet d'enregistrer en détail le phénomène de désintégration des gouttelettes derrière l'onde de choc. Il apparaît que le temps nécessaire à leur désintégration complète est de 500 μ s environ, et atteint 670 μ s si l'on tient également compte de leur combustion après désintégration. D'après les auteurs, les pertes de chaleur pariétales sont importantes et consomment environ 20 % de la chaleur de réaction, ce qui justifierait partiellement le déficit de la célérité de propagation de 32 %, comparativement au cas du mélange gazeux idéal équivalent.

En 1969, Dabora et al. [105] publient des résultats concernant l'influence de la taille des gouttelettes liquides (diamètres de 290, 940 et 2600 μ m) sur la détonation des mélanges oxygène gazeux / diethylcyclohexane. La détonation de l'aérosol est initiée par une onde de détonation issue d'un mélange stœchiométrique hydrogène - oxygène. Ils sont alors les premiers à mettre en évidence que le temps de formation et de relaxation d'une détonation d'aérosol vers un régime stable diminue quand le diamètre des gouttelettes diminue. Les gouttelettes de plus petit diamètre (290 et 940 μ m) présentent un déficit de célérité de détonation de l'ordre de 2 à 10 % par rapport au cas idéal gazeux, alors qu'il est de 30 à 35 % pour les gouttelettes de diamètre 2600 μ m. Les auteurs introduisent les pertes liées à la longueur de la zone de réaction pour expliquer les déficits de célérité de détonation avec la taille des particules liquides.

Ainsi, les premières études théoriques et expérimentales permettent d'établir que la structure de ces ondes de détonation est complexe et qu'elle ne se réduit pas à une onde

de choc derrière laquelle aurait lieu une combustion de gouttelettes liquides : la désintégration et l'évaporation de ces dernières jouent un rôle prépondérant et sont mêmes essentielles à l'établissement d'un régime de détonation. Dans tous les cas, les célérités de propagation relevées sont inférieures à la célérité de détonation idéale CJ du mélange gazeux équivalent. Ces déficits sont étroitement corrélés à la taille des gouttelettes dont dépend la longueur de la zone de réaction, et par conséquence, l'importance des pertes de chaleur aux parois est mise en avant.

3.3 Combustion de gouttelettes liquides derrière un choc

Soumises aux forces aérodynamiques et aux gradients thermiques, les gouttelettes sont soumises à la déformation, la désintégration et l'évaporation avant combustion. De tels processus ont été sujets à de nombreux travaux, notamment dans le cas de la détonation depuis les travaux de Williams ([100], [101]).

3.3.1 Les différents régimes de désintégration de gouttelettes liquides

3.3.1.1 Généralités

Le phénomène de désintégration de gouttelettes dans un écoulement gazeux constitue à lui seul un domaine scientifique à part entière. Par désintégration est sous-entendue la rupture mécanique de gouttelettes en plus petits éléments liquides. Nombreuses sont les études et les publications sur le sujet. Une synthèse très complète publiée par Gelfand [118] fait le point sur les systèmes gaz / gouttelettes liquides et les systèmes constitués de deux phases liquides de densités différentes. Généralement, le taux de transfert massique de la phase liquide vers la phase gazeuse est limité par le temps de désintégration des gouttelettes liquides. Dans le cas de détonations hétérogènes d'aérosols dans une atmosphère gazeuse, plusieurs phénomènes physiques influencent les paramètres dynamiques et le comportement des gouttelettes.

Les forces aérodynamiques agissent sur les gouttelettes liquides si ces dernières sont en écoulement derrière une onde de choc (Hanson et al. [119], Haas [120], Luna et Klikov [121], Hinze [122]), des ondes de compression ou de raréfaction et des écoulements accélérés ou décélérés (Falk [123], Zajac [124] et [125], Korsunov et Tischin [126], Loparev [127]) pour lesquels on observe une différence de vitesse entre les phases gazeuse et condensée. Ainsi, les paramètres caractéristiques qui vont déterminer la désintégration des gouttelettes sont principalement les nombres de Weber We et de Reynolds Re, qui comparent respectivement les tensions visqueuses dans le gaz et les forces de tension superficielle, aux forces aérodynamiques. Leurs expressions respectives sont données par les relations (3.1) et (3.2), où ρ_1 et u_1 sont la densité et la vitesse matérielle des gaz choqués, σ_l est la tension superficielle du liquide, μ est la viscosité dynamique des gaz et d_{p0} est le diamètre initial des gouttelettes :

$$We = \rho_1 u_1^2 d_{p0} \sigma_l^{-1} \tag{3.1}$$

$$Re = \rho_1 u_1 d_{p0} \mu^{-1} \tag{3.2}$$

On utilise en général un temps adimensionné τ défini par l'équation (3.3), où τ_0 est l'échelle de temps caractéristique définie par l'équation (3.4), faisant intervenir la masse volumique du liquide ρ_p .

$$\tau = t\tau_0^{-1} \tag{3.3}$$

$$\tau_0 = \frac{d_{p0}}{u_1} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_1}}$$
(3.4)

La combustion de gouttelettes liquides peut avoir lieu dans des conditions particulières, quand la pression de vapeur saturante de la phase liquide est supérieure ou égale à la pression de l'oxydant gazeux (Gooderum et Buschnell [128]). C'est la raison pour laquelle les phénomènes de désintégration de gouttelettes liquides ont du être étudiés en atmosphère gazeuse chauffée dans le cas de la pulvérisation de liquides cryogéniques (Brzustowski et Newman [129], Geery et Margets [130]).

Dans le cas de la détonation, l'existence de la structure tridimensionnelle comportant des ondes transverses peut provoquer l'agglomération locale des gouttelettes, rendant ainsi l'analyse différente de l'étude du comportement d'une seule et unique particule soumise à une onde de choc, sans interaction avec les autres éléments de la phase liquide.

Dans des applications industrielles telles que le moteur à détonation pulsée (PDE) ou les tuyères de moteurs fusées, les variations de la géométrie du tube causent des perturbations importantes de l'écoulement biphasique ou gazeux en terme de pression, masse volumique, ou encore vitesse matérielle. Ces perturbations ont des conséquences sur les interactions entre les gaz et les gouttelettes, pouvant même mener à des changements brusques de diamètre des gouttelettes lors du changement de section (Heidmann [131], Priem [132]).

Tous les phénomènes cités précédemment interviennent lors de la détonation d'aérosols en atmosphère gazeuse sans pour autant constituer une liste exhaustive. En raison de la complexité de ces phénomènes, une modélisation généralisable à tous les cas envisageables reste hors de portée. Les progrès techniques permettent de nos jours d'avoir des moyens plus efficaces pour étudier la désintégration des gouttelettes derrière une onde de choc, notamment à travers les nouvelles méthodes de diagnostics optiques. A cet effet, on utilise généralement des tubes à choc, cette technique présentant l'avantage de contrôler tous les paramètres dynamiques du gaz à partir de la connaissance du nombre de Mach de propagation et des conditions initiales de la phase gazeuse (pression, masse volumique, température et vitesse) (Engel [133]).

3.3.1.2 Modes et régimes de désintégration

Pour une observation adéquate de la désintégration des gouttelettes, il est nécessaire que le temps de leur exposition à l'action de l'écoulement gazeux Δt_g soit supérieur à l'échelle de temps caractéristique définie par (3.4) : $\Delta t_g \gg \tau_0$. Selon Gelfand [118], on peut distinguer cinq modes de désintégration possibles (numérotés de 1 à 5), que l'on regroupe en trois régimes (numérotés de I à III). Ces différents modes de désintégration des gouttelettes sont schématisés sur la figure 3.1. Le mode 1 est appelé mode vibrationnel, le mode 2 est le mode "parachute" et le mode 3 est le mode "parachute + étamine". Ces trois modes constituent le régime de désintégration transitoire (noté I). Le mode 4 constitue l'"atomisation avec arrachement d'une fine couche de liquide surfacique" (le régime II correspondant portant le même nom). Nous l'appellerons "stripping" dans ce mémoire. Enfin, le mode 5 est le mode "explosif" (régime "atomisation avec instabilité de la surface de gouttelettes dans le sens de l'écoulement", noté III).



FIG. 3.1 – Les cinq modes de désintégration de gouttelettes liquides, d'après [118] (propagation du choc de la gauche vers la droite)

Le mode vibrationnel de désintégration (noté 1 sur la figure 3.1) est caractérisé par la déformation progressive des gouttelettes avant désintégration en gouttelettes (deux ou plus) de plus petite taille. On trouve des exemples de désintégration par mode vibrationnel dans les travaux de Volinski [134], Luna et Klikov [121], Koenig [135], Gelfand [136] ou encore Wierzba [137]. Le mode "parachute" de désintégration (noté 2 sur la figure 3.1) commence par une déformation progressive de la gouttelette en un tore sur lequel s'attache un film liquide en forme de parachute. Le film se désintègre alors en gouttelettes de plus petite taille, avant que le tore ne se désintègre à son tour. On trouve des exemples de désintégration par mode "parachute" dans les travaux Falk [123] ou encore Simpkins [138].

En augmentant légèrement les contraintes aérodynamiques s'exerçant sur une gouttelette en mode "parachute" de désintégration, par rapport aux contraintes visqueuses et superficielles (nombre de Weber de l'ordre de 40-60), on bascule sur le mode "parachute + étamine" (noté 3 sur la figure 3.1). Le principal de la masse liquide se trouve alors dans l'étamine centrale, dont l'axe est dans la direction de propagation. Une plus petite quantité de liquide se trouve dans l'anneau en forme de tore, dans un espace relativement limité. Un petit film liquide relie ces deux parties entre elles.

Si on augmente encore les forces aérodynamiques s'exerçant sur la gouttelette (typiquement, quand le nombre de Weber est supérieur à 60), la désintégration devient "chaotique" et de fins films liquides sont expulsés de la gouttelette. Enfin, en augmentant encore plus les forces aérodynamiques, on bascule sur le mode 4 ("stripping") pour lequel la gouttelette se déforme dans un disque fin, formant ainsi un corps liquide de forme proche d'un ellipsoïde. Des gouttelettes se détachent alors du film liquide et se désintègrent en plus petites gouttelettes. La désintégration de la gouttelette initiale prend fin quand son noyau principal éclate en plus petits éléments. Il est à noter que ces derniers peuvent être soumis à leur tour à des désintégrations secondaires selon les mêmes modes.

Finalement, sous des charges aérodynamiques très élevées devant les contraintes visqueuses et superficielles, la gouttelette peut se désintégrer selon le mode 5 ("explosif") (Waldman et Reinecke [139],[140]), typiquement pour des nombres de Mach M supérieurs à 3. La gouttelette explose en éléments de petite taille qui peuvent à leur tour se désintégrer selon les modes précédents, pour former un aérosol extrêmement fin.

D'après Borisov et al. [141], on peut représenter les trois régimes de désintégration des gouttelettes pulvérisées dans le plan $(WeRe^{-0.5}, We_r)$, où We_r est le nombre de Weber ramené au rayon des gouttelettes (équation (3.5)).

$$We_r = \rho u^2 R_{p0} \sigma_l^{-1} = 0.5 We \tag{3.5}$$

Cette représentation est illustrée sur la figure 3.2 issue de Borisov et al. [141] et Gonor et Zolovota [142].



FIG. 3.2 – Domaines d'existence des modes de désintégration I et II des gouttelettes, d'après [141] et [142]

Les conditions d'existence des différents régimes sont les suivantes [141] :

Régime de désintégration I : $10 \le We_r \le 40$ et $0.2 \le We_r Re^{-0.5} \le 1$

Régime de désintégration II : $40 \le We_r \le 10^3$ et $1 \le We_r Re^{-0.5} \le 20$

Régime de désintégration III : $10^3 \le We_r \le 10^5$ et $20 \le We_r Re^{-0.5} \le 10^2$

Il est à noter que le régime de désintégration III, correspondant au mode "explosif", n'apparaît pas sur la figure 3.2. C'est ce mode qui caractérise la désintégration de gouttelettes liquides dans le cas de détonations hétérogènes d'aérosols en atmosphère gazeuse (Borisov et al. [143] et [144], Sichel et Chen [145]). Le régime explosif est lié à l'apparition d'instabilités de type Rayleigh-Lamb-Taylor au niveau de l'interface en accélération entre les phases gazeuse et liquide (Waldman et Reinecke [139], [146] et [140], Harper et al. [147], Reinecke et McKay [148]).

3.3.1.3 Temps caractéristiques

On peut aussi introduire le nombre de Bond, ou le nombre d'Etvos (qui lui est identique pour $\rho_p/\rho_0 \gg 1$) (Hsiang et Faeth [149]), faisant intervenir l'accélération des gouttelettes $u_p^{"}$. Leurs expressions sont données respectivement par les relations (3.6) et (3.7), ρ_0 étant la masse volumique des gaz non choqués :

$$Bo = u_p^{"} \rho_p d_{p0}^2 \sigma_l^{-1} = 4 u_p^{"} \rho_p R_{p0}^2 \sigma_l^{-1}$$
(3.6)

$$Eo = u_p^{"}(\rho_p - \rho_0) d_{p0}^2 \sigma_l^{-1}$$
(3.7)

En utilisant l'équation de mouvement d'une gouttelette dans un écoulement gazeux (3.8) (où m_p est la masse d'une gouttelette : $m_p = \frac{\pi}{6} d_{p0}^3 \rho_p = \frac{4}{3} \pi R_{p0}^3 \rho_p$, C_d est le cœfficient de traînée et S est la section maximale de la gouttelette), on peut arriver à la relation (3.9), en considérant que $\rho_p \gg \rho_0$.

$$m_p \frac{du_p}{dt} = m_p u_p^{"} = 0.5 C_d F (u_1 - u_p)^2 \rho_1$$
(3.8)

$$Bo \simeq Eo \cong 0.75 C_d We$$
 (3.9)

L'expérience montre qu'en général, $Bo \simeq Eo \simeq We$.

L'absence de régime explosif de désintégration se traduit généralement par des vitesses de développement de perturbations insuffisantes à la surface de la gouttelette. En première approximation, on peut définir un nombre de Weber critique We^* d'existence de ce régime tel que $We^* \simeq Bo \simeq Eo \geq 10^3$. La désintégration des gouttelettes venant de leur déformation, de leur accélération et de l'apparition d'instabilités à leur surface, il convient d'associer des temps caractéristiques aux différents phénomènes qui interviennent au cours du processus complet de désintégration de la gouttelette. Si t_1 et t_2 sont respectivement les temps de déformation jusqu'à un état critique et celui d'accélération dans un écoulement gazeux, d'après Taylor [150], on obtient pour une gouttelettes isolée :

$$t_1 \cong \frac{d_{p0}}{u_1} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_1}} \tag{3.10}$$

$$t_2 \cong \frac{4}{3} \frac{\rho_p}{\rho_1} \frac{d_{p0}}{u_1} C_d^{-1} \tag{3.11}$$

Le temps t_3 de développement d'une couche limite surfacique sur la gouttelette liquide est donné par la relation (3.12) (Ranger et Nicholls [151], [152] et [153]).

$$t_3 \cong 0.36 \frac{d_{p0}}{u_1} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_1}}$$
(3.12)

D'après Lamb [154], Meshkov [155], Collins et Charwat [156], Taylor [157], on définit également t_4 , un temps caractéristique lié à l'amplitude de développement de perturbations à la surface de la gouttelette liquide. Il est à noter que t_4 est identique à τ_0 défini par la relation (3.4).

$$t_4 \cong \frac{d_{p0}}{u_1} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_1}} \tag{3.13}$$

Enfin, on définit le temps t_5 à partir duquel les gouttelettes commencent leur désintégration selon le régime explosif (Waldman et Reinecke [139], Harper et al. [147], Simpkins [138], Simpkins et Bales [158]).

$$t_5 \cong 10t_1 W e^{-0.25} \tag{3.14}$$

Il est habituel d'adimensionner les temps caractéristiques précédents t_i par τ_0 (relation (3.4)). Il vient alors :

$$\tau_1^* \approx 1 \tag{3.15}$$

$$\tau_2^* \approx \frac{4}{3} C_d^{-1} \frac{\rho_p}{\rho_1}$$
 (3.16)

$$\tau_3^* \approx 0.36\tag{3.17}$$

$$\tau_4^* \approx 1 \tag{3.18}$$

$$\tau_5^* \approx 10W e^{-0.25} \tag{3.19}$$

Dans le cas de détonations hétérogènes d'aérosols en atmosphère gazeuse, on a généralement $\rho_1 \ll \rho_p$. Les gouttelettes liquides plongées dans un gaz ayant un cœfficient de traînée C_d de l'ordre de 1-2, il vient alors que $\tau_2^* \gg \tau_1^*$, en d'autres termes que le temps marquant le début de la désintégration est plus court que le temps de la phase d'accélération de la gouttelette. A partir de We > 100, τ_5^* prend des valeurs relativement faibles et à partir de $We > 10^4$, τ_5^* devient plus faible que tous les autres temps caractéristiques : la désintégration bascule alors en régime explosif. Par ailleurs, un certain nombre de résultats (Waldman et Reinecke [139], Simpkins et Bales [158] ou encore Borisov et al. [143], à titre d'exemple) tendent à montrer que l'onde de choc en elle-même n'influence pas directement le comportement de la gouttelette lors de son passage, mais que ce sont les forces aérodynamiques qui sont responsables de la désintégration de la gouttelette t_{break} adimensionné par τ_0 .

$$\tau_{break} = t_{break} \tau_0^{-1} \tag{3.20}$$

3.3.2 Applications à la détonation

Ranger et Nicholls [159] ont étudié la désintégration de gouttelettes liquides de diamètre 750 - 3000 μ m dans l'air derrière des ondes de choc, pour un nombre de Mach compris entre 1.5 et 3.5. Leurs résultats concernant l'influence des différents paramètres agissant sur le taux de désintégration et le temps de désintégration, les ont amenés à proposer un modèle basé sur le mode "stripping". Ces résultats ont été confirmés par Fox et Dabora [160] lorsque le nombre de Weber est supérieur à 20. Ils montrent également que dans le cas de la détonation d'aérosols en atmosphère gazeuse, les modèles de désintégration basés sur l'étude d'une gouttelette isolée dans un écoulement gazeux se révèlent imprécis [160] : en effet, la proximité des gouttelettes entre elles dans un aérosol joue sur le temps de désintégration en le réduisant de 55 à 90 % par rapport à celui d'une gouttelette isolée, en fonction de l'espacement entre les gouttelettes, de leur diamètre et du nombre de Mach de l'écoulement. Ainsi, il apparaît nécessaire de tenir compte de la structure multidimensionnelle de ces ondes de détonation, le couplage d'une onde de Mach avec les ondes transverses générant de forts gradients de concentration de gouttelettes pouvant mener à des interactions ou des collisions entre plusieurs éléments liquides.

La désintégration des gouttelettes est prise en compte par Borisov et al. [161] dans leur modèle théorique des détonations en milieu biphasique. Outre l'évaporation de la phase liquide, ils considèrent le mécanisme correspondant au mode "stripping" ainsi que la déformation des gouttelettes avant désintégration. Les auteurs arrivent à la conclusion que sans déformation et sans mécanisme de type "stripping", l'évaporation suivie de la combustion de la phase évaporée ne permet pas d'établir un régime de détonation pour des gouttelettes de plus de 10 μ m. Par ailleurs, le mécanisme de type "stripping" mène à des longueurs de zone de réaction suffisamment importantes pour que les pertes de chaleur pariétales dans cette zone puissent s'opposer à l'établissement d'un régime de détonation. Ainsi, pour des gouttelettes de diamètre supérieur à 100 μ m, seule la déformation suivie de la désintégration en plus petites gouttelettes permet d'expliquer les détonations observées. Par ailleurs, pour des gouttelettes de l'ordre de 1 mm, on observe des explosions locales à une distance relativement éloignée du front incident. Une partie de l'énergie libérée par ces explosions locales gagne le front incident alors qu'une onde de choc se propage en sens inverse. Ainsi, une fraction de l'énergie chimique libérée par la combustion de la phase liquide ne contribue pas à renforcer le front de détonation, ce qui peut également expliquer que l'on observe généralement des célérités de propagation inférieures à la célérité théorique idéale.

Ces conclusions ont été en grande partie confirmées par les résultats de Kauffman et al. [162] qui ont étudié l'inflammation de gouttelettes liquides de DECH de diamètre important en atmosphère oxydante. Ils observent la combustion du brouillard issu des gouttelettes initiales à la suite de leur déformation et de leur désintégration par mode "stripping". Ils observent aussi des explosions locales créant des ondes de choc dont une partie se couple avec le front incident et le courbe localement. Enfin, ils définissent une énergie d'activation dépendant du diamètre des gouttelettes et qui prend en compte le mode "stripping", l'évaporation du brouillard qui en résulte, ainsi que les processus chimiques de combustion. Cette dépendance de l'énergie d'activation vis-à-vis du diamètre des gouttelettes liquides apparaît peu réaliste car les réactions chimiques entre les vapeurs issues de la phase liquide et l'oxydant n'ont lieu que dans la phase gazeuse.

Pierce et Nicholls [163] expliquent les fluctuations périodiques de la célérité de propagation de l'onde de détonation, en prenant en compte les ondes de choc issues des explosions locales liées à la combustion des gouttelettes, après passage du choc incident, et une période d'induction avant la libération d'énergie. En effet, lorsque le front de choc incident rencontre un élément liquide, les échanges de chaleur et de quantité de mouvement entre les deux phases provoquent la diminution de la célérité de propagation. Après un temps d'induction, l'explosion locale d'une gouttelette "évaporée" génère une onde de choc sphérique dont une partie rejoint le front incident pour l'accélérer localement. Ainsi, en considérant les gouttelettes liquides comme étant réparties dans des plans successifs normaux à la direction de propagation, Pierce et Nicholls [163] développent un modèle expliquant l'atténuation périodique du front incident à chaque fois qu'il rencontre de nouvelles gouttelettes liquides.

Un modèle similaire a été proposé par Dabora [164], qui interprète ses résultats expérimentaux à partir des différences entre les détonations hétérogènes gaz / aérosol et les détonations gazeuses. En effet, dans le cas de détonations homogènes gazeuses, la libération d'énergie après un temps d'induction se fait de manière continue alors que dans le cas de détonations hétérogènes, la libération d'énergie s'opère de manière discrète et locale, et de ce fait, le couplage avec le front incident se fait par des ondes d'amplitude finie. Partant de l'hypothèse que pour entretenir la détonation, les ondes de choc issues de la combustion des gouttelettes doivent être suffisamment fortes pour contrer la tendance du front incident à s'atténuer, Dabora [164] établit une relation entre le délai d'inflammation des gouttelettes, leur temps de désintégration et un paramètre lié à la libération d'énergie.

Bar-Or et al. [116] ont étudié expérimentalement en tube à choc la détonation cylindrique de décane et d'heptane, possédant respectivement une basse et une haute pression de vapeur saturante. Pour l'heptane à haute pression de vapeur saturante, une partie du combustible se trouve initialement dans la phase gazeuse. Les auteurs observent alors une détonation gazeuse suivie d'une zone de combustion des gouttelettes liquides correspondant à un excès de combustible. En revanche, pour le décane à faible pression de vapeur saturante, les longueurs de zones de réaction sont très importantes et la propagation se fait à des célérités largement en dessous de la valeur idéale de détonation. Bar-Or et al. [116] proposent par ailleurs un modèle théorique prenant en compte ces différences dans la structure de l'onde.

3.4 Données expérimentales sur les détonations hétérogènes gaz oxydant / gouttelettes liquides réactives

Si les gouttelettes liquides de diamètre supérieur à 100 μ m environ mènent en atmosphère gazeuse à des célérités de détonation bien inférieures à la célérité idéale CJ, une diminution significative du diamètre des gouttelettes liquides devrait conduire à négliger les phénomènes de déformation, désintégration et transfert de masse par mode "stripping", du fait d'un délai d'inflammation "efficace" beaucoup plus court. De ce fait, il en résulterait un comportement proche de celui des détonations homogènes gazeuses. Il est alors légitime de s'intéresser par analogie avec ces dernières à l'existence d'une structure cellulaire pour les détonations hétérogènes gaz / gouttelettes liquides ainsi qu'aux concepts de diamètre critique d'initiation et de propagation.

3.4.1 Détonations hétérogènes en milieu confiné : effet du diamètre de tube et de la taille des gouttelettes liquides

Bowen et al. [109] se sont intéressés à la détonation d'un brouillard de décane dont la taille des gouttelettes liquides est estimée à environ 2 μ m. Un enregistrement de la luminescence des ondes permet d'observer un processus de Transition Déflagration Détonation (TDD) proche de celui d'un mélange gazeux, qui se manifeste par une auto-inflammation ou une "explosion dans l'explosion". Il en résulte une détonation forte qui se propage dans le milieu frais ainsi qu'une onde de rétonation qui se propage en sens inverse dans les produits de combustion. Toutefois, malgré le faible diamètre des gouttelettes, la célérité de détonation n'est stable que dans la partie du tube comprise entre 2 et 12 m. Les auteurs attribuent ce fait au faible diamètre du tube à choc utilisé. Ce constat les a amenés à faire varier le diamètre du tube entre 0.49 cm et 2.22 cm. Ils observent une forte dépendance de la célérité de détonation en fonction du diamètre de tube utilisé, les célérités étant plus élevées pour les tubes les plus larges, parfois même supérieures de 10 % aux valeurs idéales obtenues pour un mélange pauvre gazeux équivalent. Les auteurs n'ont toutefois pas pu clairement identifier l'origine de ces valeurs supérieures et estiment qu'elles viennent des incertitudes expérimentales quant à la richesse réelle du mélange à l'intérieur du tube.

Jusqu'au milieu des années 1970, on expliquait les déficits de célérité de détonation observés par les pertes de chaleur importantes au niveau des parois, dues à la longueur des zones de réaction, ainsi que par les ondes se propageant en sens inverse lors de la combustion des gouttelettes liquides. En 1976, Bowen et al. [110] ont établi expérimentalement que la longueur de la zone de réaction est de l'ordre de 12 mm pour la détonation de gouttelettes de décane de 2 μ m en atmosphère d'oxygène pur, de richesse comprise entre 0.2 et 0.65. Pour ces gouttelettes, la longueur de relaxation mécanique est de 1 mm, leur longueur d'induction de 0.1 mm, tandis que la zone de déformation, évaporation et de transfert de masse par mode "stripping" est d'une longueur inférieure à 1 mm.

En 1977, Gubin et Sichel [111] ont proposé une alternative à ce modèle en suggérant que les déficits de célérités sont dus à une réaction incomplète du combustible, dont une partie brûlerait derrière le plan CJ et ne contribuerait donc pas à renforcer le front de détonation incident. Pour déterminer la fraction de combustible qui "participe" effectivement à la détonation, les auteurs comparent le taux de désintégration des gouttelettes et le délai d'inflammation. Cependant, ce modèle repose sur l'hypothèse que le plan CJ est localisé à la fin de la zone d'induction et que les réactions chimiques exothermiques interviennent instantanément après désintégration et inflammation des gouttelettes. Malgré ses limites théoriques, ce modèle présente un bon accord avec les résultats expérimentaux au moins dans le cas des gouttelettes de diamètre inférieur à 20 μ m, où il conduit à des célérités de détonation proches des valeurs idéales.

3.4.2 Détonations hétérogènes en milieu non confiné

Si les applications propulsives liées au Moteur à Détonation Pulsée ont conduit la communauté scientifique à étudier les détonations hétérogènes gaz / gouttelettes liquides dans des tubes à choc, d'autres travaux ont été orientés sur les détonations d'aérosols en milieu non confiné, en vue d'applications militaires ou relatives à la sécurité industrielle. Ainsi, Bull et al. [112] étudient la détonation d'aérosols en milieu non confiné, pour différents combustibles et différents diamètres de gouttelettes liquides. Comme on pouvait le prévoir, il est plus difficile d'initier des détonations sphériques que des détonations planes. Comme pour les détonations en milieu confiné, les auteurs ont observé des déficits de célérité de détonation par rapport au cas idéal, malgré l'absence de pertes de chaleur pariétales, et ce, même pour les gouttelettes de faible diamètre. Bull et al. [112] utilisent des explosifs condensés (charges de PE-4 contenant 88 % de RDX) allant jusqu'à 500 g, pour initier la détonation. Pour des gouttelettes d'hexane (très volatile) de 6 à 17 μ m, les auteurs relèvent des célérités de détonation de l'ordre de 1580 m/s, soit environ 6 à 13 % inférieures à la valeur idéale CJ. Pour des gouttelettes de plus grande taille (50 à 90 μ m), la célérité de détonation chute à 1300 m/s. En utilisant des gouttelettes de dodécane et de décane, combustibles à faible pression de vapeur saturante, les charges utilisées ne permettent pas d'atteindre un régime de détonation. Ainsi, les auteurs arrivent à la conclusion que pour de tels liquides, il est nécessaire, lorsque les gouttelettes sont de taille supérieure à 10 μ m, qu'une partie du combustible se trouve initialement sous phase gazeuse, sans quoi la détonation ne peut s'établir. Ces travaux mettent donc en avant l'importance de la présence de combustible gazeux initial pour atteindre un régime de détonation. De plus, il apparaît qu'en dépit de l'absence de pertes de chaleur dues au confinement, la célérité de détonation idéale n'est pas atteinte, même pour des gouttelettes de petite taille.

D'autres études en milieu non confiné sont venues corroborer les observations de Bull et al. [112] quant à l'importance de la présence de combustible sous forme gazeuse avant initiation (Alekseev et al. [113], Beeson et al. [23], Papavassiliou et al. [114]). Ainsi, Alekseev et al. [113] favorisent la détonabilité d'un aérosol de kérosène en ajoutant de l'essence à haute pression de vapeur saturante. Cependant, l'additif ajouté ne se vaporise pas instantanément. Les auteurs étudient ainsi l'influence du délai d'initiation après injection de l'essence, en le faisant varier entre 0.8 et 4 s. Il apparaît qu'au delà de 1.7 s, ce délai ne joue plus sur la détonabilité et ne change que très peu l'énergie minimum pour initier le mélange. Ils observent également des oscillations de la célérité du front incident, dont la période d'oscillation est de l'ordre de 2 à 3 s. En outre, la vitesse des gouttelettes de kérosène décroît jusqu'à 700 - 900 m/s environ, pour une célérité moyenne de propagation de l'onde de l'ordre de 1000 - 1300 m/s.

3.4.3 Structure cellulaire des détonations de gouttelettes liquides en atmosphère gazeuse

S'il est plausible de penser que la détonation de gouttelettes de combustible liquide à pression de vapeur saturante élevée se rapproche des détonations gazeuses lorsque les gouttelettes sont de faible diamètre, il existe peu de résultats expérimentaux permettant de connaître la structure cellulaire de l'onde de détonation des combustibles à faible pression de vapeur saturante, notamment à température ambiante, lorsque la faible volatilité ne permet pas d'obtenir une pré-évaporation de combustible.

Papavassiliou et al. [114] ont étudié la structure cellulaire de détonations de gouttelettes de décane, peu volatile, en atmosphère composée d'oxygène et d'azote. En augmentant la température initiale du mélange, on peut passer d'un mélange hétérogène à un mélange homogène. Le mélange hétérogène est caractérisé par des gouttelettes de diamètre 5 μ m, la température initiale étant de 298 K. Le mélange homogène est obtenu en chauffant le tube à 373 K ou 458 K pendant 30 minutes. Dans tous les cas, un système de ventilation permet d'assurer une pression initiale de 1 bar, ce qui signifie également que la densité est plus faible pour les mélanges homogènes. Le tube de détonation vertical utilisé a un diamètre de 64 mm pour une longueur de 3 m. Le mélange est initié par une étincelle d'énergie 120 J et une spirale de Shchelkin de 50 cm de long facilite la TDD. Ainsi, Papavassiliou et al. [114] observent la propagation de détonations stationnaires et autonomes, pour différentes richesses du mélange oxygène - décane, et ce, y compris pour les mélanges hétérogènes à 298 K. Les célérités de propagation obtenues sont proches des valeurs théoriques des détonations idéales, des écarts allant jusqu'à 10 % étant observés pour les mélanges pauvres dont la richesse est inférieure à 0.6 environ. Les pressions obtenues dans le tube sont légèrement inférieures à celles que l'on obtiendrait pour un mélange gazeux. Lorsque le tube est chauffé (mélanges homogènes), les auteurs observent une structure cellulaire typique des détonations des mélanges gazeux composés d'éléments du groupe des alcanes. Pour les mélanges hétérogènes contenant des gouttelettes de diamètre 5 μ m, les cellules de détonation observées sont plus grandes, d'un facteur 2 environ par rapport au cas gazeux. Par analogie avec les détonations homogènes gazeuses, pour lesquelles l'énergie critique d'initiation est proportionnelle au cube de la largeur λ des cellules de détonation, un mélange hétérogène nécessite une énergie d'initiation environ supérieure d'un ordre de grandeur par rapport aux mélanges gazeux, ce qui explique la difficulté d'observer de telles détonations, notamment lorsque l'atmosphère oxydante est à base d'air, donc contient une fraction importante de gaz inerte. Si la dimension caractéristique de la structure cellulaire augmente lorsque l'on passe d'un mélange homogène à un mélange hétérogène, il est fort probable que dans les travaux antérieurs, de nombreux résultats expérimentaux n'ont pas permis d'observer une structure cellulaire du fait d'un tube à choc de diamètre trop faible. Ainsi, les connaissances sur la structure cellulaire dans le cas de mélanges hétérogènes contenant des aérosols restent très limitées et conduisent à penser que les énergies d'initiation nécessaires à la formation de la détonation sont plus importantes que pour les mélanges gazeux.

3.4.4 Initiation et détonabilité

L'énergie minimum d'initiation permet de caractériser la détonabilité d'un mélange. Dans le cas de mélanges hétérogènes d'aérosols en atmosphère gazeuse, l'initiation est facilitée par la présence d'une fraction de combustible sous phase gazeuse dans le mélange frais. Plusieurs travaux ont été consacrés à l'initiation et à la détonabilité des mélanges hétérogènes, au début des années 1990. On peut notamment citer les travaux de Benedick et al. [165], Alekseev et al. [113] ou encore Papavassiliou et al. [114].

Les essais expérimentaux de Boiko et al. [166] en tube à choc ont été consacrés à l'initiation de mélanges hétérogènes contenant des gouttelettes liquides de tridécane, de kérosène et de diesel dans une atmosphère d'air, pour différentes pressions et différentes intensités de choc. Le but était de fournir une base de données quantitatives des échelles de temps et de longueur nécessaires à la combustion des gouttelettes sous l'effet du choc incident. Cependant, les gouttelettes utilisées mesurant généralement plus de 1 mm de diamètre, la libération d'énergie issue de la combustion des gouttelettes intervenait relativement loin du front de choc, n'assurant pas ainsi un couplage avec le front de choc. Le même constat s'applique par ailleurs aux résultats de Dabora [167] qui a étudié l'effet d'additifs réactifs sur la détonabilité d'aérosols de kérosène : le diamètre relativement élevé des gouttelettes utilisées ne permet pas un couplage entre l'énergie libérée chimiquement et le front de choc incident.

Les années 2000 ont été marquées par un regain d'intérêt important pour les détonations hétérogènes en raison du développement du Moteur à Détonation Pulsée, notamment pour son fonctionnement avec des aérosols liquides de JP-10. Les travaux de Brophy et al. [168] ont porté sur les injecteurs et atomiseurs qui permettent l'initiation de détonations de mélanges JP-10 / O_2 avec des gouttelettes de diamètre généralement inférieur à 10 μ m. A l'exception des mélanges pauvres où le déficit de célérité de détonation est de 10 %, la plupart des essais mènent à des célérités proches de la valeur idéale de détonation. Par ailleurs, leurs travaux montrent à nouveau l'importance de la pré-évaporation pour l'initiation de détonations en milieu biphasique. Les auteurs approfondissent ces études dans de l'air [169] en incluant un préchauffage du combustible, avant de l'injecter à diverses températures. Ils établissent ainsi une relation entre le diamètre de Sauter moyen (SMD) des gouttelettes et la fraction de combustible pré-évaporé, en fonction de la température. Dans leur configuration expérimentale, l'initiation d'une détonation nécessite un diamètre de Sauter moyen inférieur à 3 μ m et une pré-évaporation du combustible de plus de 70 %, ce qui correspond à une température initiale d'au moins 375 K, comme le montre la figure 3.3. Les détonations observées mènent à des écarts maximum de célérité de propagation de 2 % par rapport au cas idéal. Par ailleurs, les études de Brophy et al. ([168], [169]) montrent que les Moteurs à Détonation Pulsée fonctionnent aussi bien avec de l'air que



de l'oxygène en utilisant des aérosols de JP-10.

FIG. 3.3 – Diamètre de Sauter moyen (1) et pourcentage de combustible évaporé (2) en fonction de la température d'injection d'un Moteur à Détonation Pulsée pour un mélange JP-10 / air, d'après [169]. Zone ombrée : plage d'observation de détonation

Schauer et al. [170] ont effectué des essais qui ont abouti à des régimes de détonation avec des aérosols liquides partiellement ou totalement pré-vaporisés dans des Moteurs à Détonation Pulsée, multitubes et multicycles. Fan et al. [171] soulignent la plus grande facilité d'initiation de la détonation lorsque l'engin propulsif est multicycle, du fait que le tube monte en température et favorise l'évaporation de la phase liquide. Ainsi, cela permet de diminuer la distance de TDD.

Baklanov [172] a étudié les limites de détonabilité de différents combustibles liquides dans un tube de 36 mm de diamètre et de 7 m de longueur. La plage de détonabilité est obtenue en changeant la proportion de combustible par rapport à l'oxygène jusqu'à ce que l'on observe une séparation entre l'onde de choc incidente et le front de flamme, ainsi qu'une diminution de la célérité de détonation. Même si un changement de géométrie du tube et un changement d'énergie d'initiation modifieraient les limites de la plage, cette étude met en évidence la faible plage de détonabilité des mélanges gaz / gouttelettes liquides, et donc la faible marge de manœuvre quant à la variation possible des paramètres qui caractérisent le moteur et le mélange. Cependant, des détonations peuvent tout de même se propager à des richesses très élevées (mais à basses vitesses), de l'ordre de 10, mais la taille importante des gouttelettes mises en jeu implique qu'une grande partie des microgouttelettes issues de leur désintégration brûle derrière le plan CJ, ne participant donc pas à l'entretien de l'onde de détonation, ce qui est susceptible de remettre en cause la stabilité de ces détonations et de causer un déficit important de la célérité de propagation.

Knappe et Edwards [173] ont observé avec un mélange oxygène - n-hexane, dans un tube de 102.5 mm de diamètre et 5.8 m de long, un régime de détonation similaire à une détonation galopante. Il apparaît que la stabilité de la détonation varie en fonction de la pression d'injection (le diamètre de gouttelettes diminuant lorsque cette dernière augmente) et de la richesse : la détonation stable est plus facile à atteindre lorsque le diamètre de Sauter moyen diminue, comme le montre la figure 3.4. Par ailleurs, la plage de stabilité est également plus large.



FIG. 3.4 – Célérité D et stabilité de détonation pour un mélange oxygène - n-hexane liquide en fonction de la richesse ϕ et de la pression d'injection (diamètre des particules), d'après [173]. Pression d'injection 1- 48,3 atm, 2- 34,5 atm, 3- 20,7 atm, 4- Célérité de détonation CJ, cas gazeux. A et B : plage de stabilité de détonation respectivement pour 48,3 et 34,5 atm

Knappe et Edwards [174] ont étudié également des mélanges de propane gazeux et décane liquide dans une atmosphère O_2/N_2 en variant la proportion de combustible dans la phase liquide de 0 à 100 %. La quantité d'oxygène varie également de 60 à 100 % par injection d'azote. Le diamètre de Sauter moyen des gouttelettes varie suivant les cas entre 16 et 28 μ m. L'initiation des mélanges s'effectue à l'aide d'une onde de détonation issue d'un mélange éthylène / oxygène, ce dernier étant lui-même initié par un jet de plasma. Quand l'atmosphère oxydante ne contient que de l'oxygène pur, la célérité de détonation décroît au fur et à mesure que l'on augmente la masse relative de combustible dans la phase liquide de 35 à 100 %. Quand on dilue la phase gazeuse par de l'azote, la tendance est assez difficile à observer car la dilution semble avoir plus d'influence avec le propane qu'avec le décane. De plus, il semble que les mélanges contenant de l'oxygène pur ne sont pas influencés par le diamètre de Sauter moyen, tandis que l'effet de ce dernier se fait de plus en plus important lorsque l'on augmente la quantité d'azote. Ainsi, la nécessité d'obtenir des distances d'initiation courtes et des énergies d'initiation les plus faibles possibles dans l'optique de la mise au point de ces systèmes propulsifs appuie le développement des recherches fondamentales sur l'initiation et la détonabilité de mélanges composés d'aérosols en atmosphère oxydante. Frolov et al. ([175], [176]) utilisent des décharges électriques pour initier des mélanges contenant des gouttelettes de n-hexane de 5 μ m de diamètre moyen. Leurs travaux portent sur l'influence de la durée, de la forme et de la localisation de la décharge électrique. Les auteurs mettent en avant l'intérêt d'utiliser deux décharges séparées par un délai optimisé et à différents endroits (la deuxième se situant dans une partie où les gouttelettes sont alors majoritairement évaporées) pour diminuer l'énergie nécessaire à l'initiation du mélange. De plus, l'optimisation du processus passe également par l'utilisation d'une spirale de Shchelkin.

3.5 Résultats des travaux numériques sur les détonations hétérogènes gaz oxydant / gouttelettes liquides réactives

Les résultats issus de simulations numériques sur les détonations hétérogènes d'aérosols en atmosphère gazeuse sont peu nombreux, à l'inverse des détonations homogènes gazeuses.

3.5.1 Modélisation

En 1979, Mitrofanov et al. [177] ont développé un modèle numérique assez complet tenant compte de la déformation et de l'accélération des gouttelettes, de leur désintégration en plus petites gouttelettes, avec la possibilité de multiples désintégrations. La désintégration intervient quand un seuil critique de déformation est atteint. L'étirement de la couche liquide superficielle (mode "stripping") ainsi que l'évaporation de la phase liquide sont pris en compte. Enfin, le délai d'inflammation de la gouttelette liquide est pris en compte, ce dernier ne pouvant pas être considéré négligeable devant le temps caractéristique d'évaporation et de désintégration dans certains cas limites. Trois modèles mathématiques sont comparés par Mitrofanov et al. [177] : un premier modèle prend en compte l'accélération des gouttelettes et intègre leur déformation d'après l'équation modifiée de Gordon [178] sous la forme de Borisov et al. [161] (relation (3.21)), b étant le petit semi-axe de la gouttelette liquide ellipsoïdale déformée, l'indice p se référant à la phase condensée (ici liquide).

$$\frac{d^2b}{dt^2} = -\frac{3}{16} \frac{(u-u_p)^2}{b} \frac{\rho}{\rho_p}$$
(3.21)

Le seuil critique de déformation est atteint lorsque le rapport $\frac{a}{R_p} = 3$, où a est le

grand semi-axe de la gouttelette déformée de forme ellipsoïdale et $R_p = (a^2 b)^{\frac{1}{3}}$ est le rayon sphérique équivalent des gouttelettes. Les gouttelettes se fragmentent alors en gouttelettes indéformables de rayon $R^{(1)}$ telles que le rapport des rayons des gouttelettes entre deux désintégrations $\kappa = \frac{R_p^{(1)}}{R_p}$ est égal à 0.1 ou 0.2. On définit la condition suivante :

$$We > Re^{0.5} > 10 \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu_p}{\nu}\right)^{\frac{2}{3}}$$
(3.22)

Lorsque la condition (3.22) est vérifiée, l'étirement de la couche superficielle liquide des gouttelettes est donné par la relation (3.23), correspondant au mode "stripping", V_p étant le volume des gouttelettes et J le taux d'évaporation des gouttelettes :

$$-\frac{1}{V_p}\frac{dV_p}{dt} = 2\pi (3\pi)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho}{\rho_p}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu}{\nu_p}\right)^{\frac{1}{6}} \nu_p^{\frac{1}{2}} |u - u_p|^{\frac{1}{2}} \frac{a^{\frac{3}{2}}}{V_p} \equiv J$$
(3.23)

Lorsque la condition (3.22) n'est plus vérifiée, l'évaporation des gouttelettes remplace l'étirement de la couche superficielle liquide selon la relation (3.24), K_{vap} étant la constante empirique de vaporisation :

$$\frac{d}{dt}(2R_p)^2 = K_{vap}(1+0.27Re^{0.5}) \tag{3.24}$$

Le deuxième modèle utilisé par Mitrofanov et al. [177] est basé sur le même principe que le premier mais les gouttelettes issues de la fragmentation peuvent à leur tour subir la déformation jusqu'à atteindre le seuil critique qui va mener à leur désintégration. La désintégration s'arrête après N fragmentations quand $R_p^{(N)} = \kappa R_p^{(N-1)} < R_{p*}$. Dans ce cas, on fixe le dernier rayon à $R_p^{(N)} = R_{p*}$ avec $R_{p*} = 15 \ \mu$ m, d'après les résultats de Lane [179].

Enfin, le troisième modèle de Mitrofanov et al. [177] est le même que le deuxième, avec de nouvelles expressions du cœfficient de traînée et une nouvelle équation de déformation donnée par la relation (3.25), dans laquelle σ_l est la tension superficielle des gouttelettes liquides et C_d le cœfficient de traînée de ces dernières :

$$-\frac{d^2b}{dt^2}\left(1+\frac{R_p^3}{2b^3}\right)+\frac{3}{4}\frac{R_p^3}{b^4}\left(\frac{db}{dt}\right)^2 = \frac{45C_d}{64b}\frac{\rho}{\rho_p}(u-u_p)^2+15\nu_p\frac{1}{b^2}\frac{db}{dt}-\frac{15}{2}\frac{\sigma_l}{\rho_pb^2}\left(1-\frac{b^2}{R_p^2}\right) (3.25)$$

Les trois modèles sont comparés pour un aérosol composé de gouttelettes de kérosène de 1 mm de rayon initial, dans une atmosphère d'oxygène, à richesse 0.2. L'initiation de la détonation plane 1D est réalisée par un point d'explosion d'énergie 10⁶ J/m. Le premier modèle avec $\kappa = 0.1$ montre que 97 % de la masse des gouttelettes environ est consommée par le mode "stripping", dans une zone de 7 cm, pendant un temps $t \simeq 6(R_{p0}/u)(\rho_p/\rho)^{0.5}$. Les 3 % restant sont consommés par évaporation dans une zone de 1 m. Ainsi, dans cette configuration, l'évaporation par le régime diffusif est négligeable devant le transfert de masse par mode "stripping". Changer κ de 0.1 à 0.2 n'entraîne que de faibles modifications. Le deuxième modèle se traduit par des sauts beaucoup plus raides des paramètres thermodynamiques et mécaniques, dus aux fragmentations secondaires. Le troisième modèle avec différentes valeurs de κ donne des variations plus progressives que le deuxième modèle et la valeur de R_{p*} , calculée automatiquement, est de 16 μ m. La comparaison avec les résultats de Dabora et al. [105] fait apparaître pour les trois modèles des longueurs de réaction plus courtes. Il est probable dans le cas réel que toutes les gouttelettes ne sont pas soumises à la fragmentation secondaire.

Mitrofanov et al. [177] ont également étudié le problème d'initiation de mélanges pauvres (richesse 0.63) air / aérosol de kérosène, avec des gouttelettes de diamètre 192 μ m, se rapprochant ainsi du cas expérimental de Nicholls et al. [180]. Il apparaît alors qu'en faisant varier l'énergie d'initiation et le diamètre des gouttelettes de manière appropriée, une détonation stationnaire et autonome peut s'établir. Dans certaines conditions, le délai d'inflammation des gaz évaporés ne peut être négligé devant le temps de destruction des gouttelettes, d'où l'introduction d'une équation sur la fraction de la période d'induction Y et d'un délai d'induction des réactions chimiques gazeuses t_{gaz} (ε_a étant l'énergie d'activation de ces dernières) :

$$\frac{dY}{dt} = -\frac{1}{t_{gaz}}, \quad t_{gaz} = Z_{gaz} p^{-n} exp\left(-\frac{\varepsilon_a}{RT}\right)$$
(3.26)

3.5.2 Résolution numérique

Au début des années 1980, Burcat et Eidelman ([181], [117]) ont étudié la propagation de détonations de gouttelettes d'heptane plongées dans de l'oxygène pur, à la stœchiométrie. Leur modèle prend en compte la désintégration des gouttelettes sous l'effet des forces aérodynamiques. L'évaporation à la surface des gouttelettes est également prise en compte. Le schéma cinétique de combustion de l'heptane gazeux issu de l'évaporation des gouttelettes n'est pas pris en compte, cette combustion étant supposée très rapide comparée aux temps caractéristiques de désintégration et d'évaporation (Dabora [182]). Burcat et Eidelman ([181], [117]) étudient l'influence du maillage numérique avant d'identifier le rôle de la taille des gouttelettes sur la détonation. En effet, leurs simulations laissent apparaître des oscillations physiques qu'ils isolent des oscillations purement numériques. Pour ce faire, des simulations tests sont effectuées dans de l'oxygène pur (sans phase liquide) pour faire apparaître les oscillations numériques. Ensuite, la phase liquide est ajoutée et la taille des mailles numériques est diminuée progressivement pour déterminer la taille limite à partir de laquelle les oscillations physiques, correspondant à la libération d'énergie issue de la combustion des gouttelettes, peuvent être observées. La taille de maille obtenue est alors divisée par cinq de manière à obtenir au minimum cinq mailles dans la longueur physique. Pour les détonations étudiées, une résolution numérique de $\Delta r = 2.5$ mm est suffisante. Lorsque le rayon des gouttelettes d'heptane augmente de 50 à 500 μ m, la célérité de détonation décroît de 2370 à 1000 m/s, la pression maximale tombant quant à elle de 72 à 12 bar. Il est à noter que pour les gouttelettes de 50 μ m de rayon, la détonation se propage à une célérité quasiment égale à la célérité idéale de détonation CJ. La longueur de la zone de réaction varie de 1 cm à 45 cm (pour des rayons de gouttelettes de 50 μ m et 500 μ m respectivement). Il apparaît aussi que la célérité de détonation est inversement proportionnelle à la longueur de la zone de réaction et que le taux de libération d'énergie augmente inversement au carré du rayon des gouttelettes. Cependant, ce modèle est relativement simplifié, notamment du point de vue de la désintégration des gouttelettes de grandes tailles en de nombreuses gouttelettes de taille beaucoup plus réduite. Eidelman et Burcat [117] en concluent que leur modèle est une représentation idéale correcte pour les combustibles à faible pression de vapeur saturante.

3.5.3 Initiation et détonabilité

En 1981, Zhdan [183] a étudié les régimes de détonation ainsi que l'influence de l'énergie d'initiation pour des gouttelettes de kérosène liquide dispersées dans une atmosphère d'oxygène. L'initiation se fait numériquement par une énergie équivalente à un explosif condensé. Ces simulations font apparaître des régimes subcritiques et supercritiques de détonation, ainsi qu'une énergie minimum d'initiation dépendant fortement de la taille des gouttelettes : en diminuant le diamètre de ces dernières de 700 μ m à 100 μ m, l'énergie critique d'initiation est divisée par 64. En revanche, l'énergie d'initiation semble peu dépendante du temps d'induction des réactions chimiques alors que dans le cas d'initiation de détonations sphériques de mélanges gazeux, la théorie établit une relation cubique entre l'énergie critique d'initiation et le temps d'induction (Levin [184]) : en effet, pour le mélange hétérogène oxygène - kérosène liquide, avec des gouttelettes de diamètre 300 μ m, Zhdan [183] montre que changer le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius du temps d'induction par un facteur *e* n'augmente l'énergie critique d'initiation que d'un facteur 1.9, et le diminue de 1.7 si au contraire on diminue le facteur préexponentiel d'un facteur *e*.

En 1985, Voronin et Zhdan [185] ont proposé un modèle prenant en compte la déformation, la désintégration et l'évaporation de la phase liquide pour étudier la détonation hétérogène de gouttelettes d'heptane en atmosphère composée d'air ou d'oxygène pur. L'initiation est réalisée par une onde de détonation gazeuse d'un mélange hydrogène / oxygène. Les simulations effectuées sont destinées à être comparées aux résultats expérimentaux de Lu et al. [186]. Les différences observées entre les cas numériques et expérimentaux sont partiellement expliquées par les géométries différentes des tubes d'initiation par la détonation gazeuse. Voronin et Zhdan [185] établissent que la détonation hétérogène ne peut se maintenir si la longueur de la zone d'induction chimique excède la distance entre le front incident et le point pour lequel les gouttelettes sont pleinement désintégrées.

In 1999, Vasil'ev et al. [187] ont étudié, à partir des résultats existant, l'initiation de détonations hétérogènes gaz / gouttelettes liquides en assimilant l'onde de détonation à une onde de choc suivie d'une zone de relaxation dans laquelle on considère l'accélération, la déformation et la désintégration des gouttelettes, ainsi que les transitions de phase, les réactions chimiques et les phénomènes de diffusion et convection. L'étude porte principalement sur des gouttelettes liquides de différents combustibles de diamètre compris entre 50 et 700 μ m, en atmosphère d'air ou d'oxygène, pour des aérosols poly- ou monodispersés. Le but est d'établir des relations simples sur les conditions d'initiation des détonations hétérogènes avec phase liquide, en géométrie plane, cylindrique ou sphérique. Vasil'ev et al. [187] estiment ainsi que le rayon critique d'initiation direct de détonation est indépendant de la géométrie du problème (relation (3.27)), où $E_{c\nu}$ est l'énergie critique d'initiation relative à la géométrie d'indice ν (1 pour plan, 2 pour cylindrique et 3 pour sphérique). Il convient de noter que cette relation n'est pas une démonstration théorique mais une estimation vraisemblable :

$$R_{c\nu} = \left(\frac{E_{c\nu}}{p_0}\right)^{\frac{1}{\nu}} \cong const = R_c \tag{3.27}$$

Il en résulte qu'inversement, connaissant le rayon critique, il est possible d'estimer l'énergie critique d'initiation de la détonation :

$$E_{c\nu} \cong p_0 R_c^{\nu} \tag{3.28}$$

Vasil'ev et al. [187] étendent les corrélations précédentes pour estimer le rapport du rayon critique d'initiation sur le rayon critique pour lequel l'onde détonation atteint un minimum de célérité de propagation $R_{D_{min}\nu}$.

$$R_{D_{min}\nu} \cong \frac{\nu R_c}{8} \tag{3.29}$$

A l'aide des relations (3.28) et (3.29), on exprime l'énergie d'initiation par unité de surface du front au rayon critique pour les différentes géométries.

$$\frac{E_{c1}}{2} = 0.5p_0 R_c \qquad \frac{E_{c2}}{2\pi R_{D_{min}2}} = 0.64p_0 R_c \qquad \frac{E_{c3}}{4\pi R_{D_{min}3}^2} = 0.57p_0 R_c \qquad (3.30)$$

Enfin, ils proposent une corrélation permettant de déterminer les paramètres critiques d'initiation de détonations hétérogènes gaz / gouttelettes liquides à partir de celles des détonations homogènes gazeuses correspondantes [187], à condition de connaître l'énergie d'activation du cas gazeux. Un exemple de calcul de paramètres critiques d'initiation des détonations hétérogènes air - benzène stœchiométrique est donné dans le tableau 3.1, issu de [187].

3.5.4 Etudes récentes

En 2000, Zhdan et Prokhorov [188] ont simulé pour la première fois des cellules de détonation dans un mélange cryogénique hydrogène gazeux / oxygène liquide (figure 3.5). Il apparaît que la taille des cellules de détonation est à peu près proportionnelle au diamètre des particules liquides. Cependant, ce résultat n'a été obtenu qu'à partir de deux diamètres de gouttelettes : les cellules de détonation pour des gouttelettes de diamètre 50

Chapitre 3.	Les détonations	hétérogènes gaz /	gouttelettes	liquides
1			0	

$d_{p0} \ (\mu \mathrm{m})$	R_c (m)	$E_{c1}~({ m MJ/m^2})$	$E_{c2}~({ m MJ/m})$	E_{c3} (MJ)
0	2.3	0.24	0.54	1.23
50	3.04	0.31	0.94	2.85
100	3.69	0.37	1.38	5.1
200	4.84	0.49	2.37	11.5
400	6.85	0.69	4.75	32.6
800	10.33	1.05	10.8	111.7
1000	11.94	1.21	144	172.4

TAB. 3.1 – Estimation des paramètres dynamiques critiques de détonation dans un mélange hétérogène stœchiométrique air - benzène, d'après [187]

 μ m et 100 μ m sont respectivement de largeur $\lambda = 21.1$ mm et $\lambda = 44.3$ mm. L'analyse de Zhdan et Prokhorov [188] montre également que les oscillations de célérité de détonation dépendent du diamètre des gouttelettes et que ces oscillations sont conditionnées par la taille du canal dans lequel se propage l'onde de détonation. Cependant, des simulations monodimensionnelles montrent au contraire que les fluctuations ne dépendent pas du diamètre des gouttelettes, ce qui indiquerait que ces oscillations sont dues aux instabilités bidimensionnelles du front de combustion et à l'existence des ondes transverses. On peut remarquer également que les simulations monodimensionnelles mettent en évidence que la période L_{λ} des oscillations est quasiment proportionnelle au diamètre des gouttelettes liquides : $L_{\lambda} \sim d_{p0}^{1.1}$.



FIG. 3.5 – Structure cellulaire d'une onde détonation d'un mélange cryogénique $2H_2 + O_2$, d'après [188]. $d_{p0} = 50 \ \mu m$, $\lambda = 21.1 \ mm$

En 2001, Ju et al. [189] ont effectué des simulations numériques monodimensionnelles de détonations d'aérosols d'heptane dans de l'air, en utilisant un schéma cinétique détaillé et en prenant en compte l'échauffement, l'évaporation et les effets de traînée des gouttelettes liquides, ainsi que les pertes aux parois. De leurs calculs, ils en concluent qu'il existe une taille optimale de gouttelettes pour limiter ces pertes et obtenir des déficits de célérités de détonation faibles ainsi que des plages de détonabilité plus larges.

En 2003, Chang et Kailasanath [190] ont étudié l'effet de la désintégration et de l'évaporation de gouttelettes inertes sur l'atténuation d'ondes de choc. Leur étude montre que ces deux phénomènes tendent à atténuer davantage la propagation de l'onde par rapport au cas où les simulations numériques ne tiennent pas compte de la désintégration et évaporation de la phase liquide. Or, pour établir un régime de détonation stationnaire et autonome dans un mélange de gouttelettes liquides en atmosphère gazeuse, la libération d'énergie due à la combustion de la phase liquide doit absolument compenser les pertes liées à l'atténuation de l'onde de choc incidente. Ceci implique que la longueur d'induction doit être suffisamment faible pour que les ondes de pression, issues du dégagement d'énergie suite aux multiples explosions locales, puissent se coupler avec le front de détonation.

En 2005, Cheatham et Kailasanath ([191], [192]) ont étendu ces résultats en basant leur analyse sur le choix de la force de traînée des gouttelettes. Les auteurs mettent en évidence que si ce paramètre joue un rôle important dans l'atténuation de l'onde de choc, sa contribution est négligeable dans le cas de détonations hétérogènes, le taux de libération d'énergie des réactions chimiques étant prépondérant. L'étude porte essentiellement sur des gouttelettes de petites dimensions de manière à limiter l'effet de la désintégration, pour des mélanges air - JP-10 ou oxygène - JP-10. De plus, les distances de propagation sont relativement courtes : les tubes à choc étudiés n'excèdent pas 1.5 m de longueur, pour se placer dans des conditions réalistes du point de vue des applications de propulsion. Pour des tailles de gouttelettes liquides variant entre 2.5 et 20 μ m, Cheatham et Kailasanath ([191], [192]) montrent que l'établissement d'un régime de détonation stationnaire et autonome est plus long pour les gouttelettes de plus grande dimension. Les déficits de célérité de détonation sont attribués à l'inhomogénéité du mélange combustible / oxydant. De plus, les auteurs relèvent un certain nombre de points démontrant la nécessité de pousser plus loin l'analyse des détonations hétérogènes entre des gaz et des gouttelettes liquides de combustible : en effet, la structure de l'onde, la longueur de la zone de réaction ou encore la position du point sonique varient selon les calculs, même pour des éléments liquides de petite dimension. Cheatham et Kailasanath ([191], [192]) ont également étudié l'effet de la pré-évaporation de la phase liquide en augmentant la température initiale de manière à ce qu'une partie du tube contienne du combustible sous forme gazeuse. Il apparaît une fois encore que cette condition facilite l'établissement d'un régime de détonation.

3.6 Conclusion sur les détonations de gouttelettes liquides en atmosphère gazeuse

Les connaissances sur les détonations hétérogènes dans des suspensions de gouttelettes liquides en atmosphère gazeuse oxydante sont relativement limitées comparativement aux détonations homogènes gazeuses. Cependant, l'étude des travaux antérieurs montre des connaissances qui ne sont certes pas parfaites, mais néanmoins importantes sur l'existence, l'initiation, la propagation et la structure de telles détonations, qu'elles aient lieu en milieu confiné ou non. Malheureusement, il apparaît qu'un grand nombre de travaux pionniers a caché des résultats potentiellement intéressants sur la structure tridimensionnelle de l'onde. En effet, la difficulté d'initiation ainsi que la longueur caractéristique des réactions chimiques globales suggèrent que les longueurs et diamètres de tube doivent être beaucoup plus élevés que pour l'étude de détonations homogènes gazeuses. Ainsi, il est fort probable que les détonations observées dans les premiers travaux n'aient pas atteint un régime stationnaire et autonome, et que la taille du tube ne laissait pas la possibilité de développement d'une structure cellulaire.

Cependant, certaines conditions pour aboutir à un régime de détonation autonome idéal ou quasi-idéal ont été clairement établies : les gouttelettes liquides doivent être de taille suffisamment faible (quelques dizaines de micromètres) pour permettre leur combustion dans une zone suffisamment proche du front incident, pour entretenir la propagation de la détonation. De plus, la détonation de gouttelettes de taille relativement importante (> 100 μ m) ne peut se faire que si les gouttelettes se désintègrent en plus petits éléments. Pour cela, les contraintes visqueuses et aérodynamiques doivent permettre la désintégration des gouttelettes par le mode "stripping". De nombreuses études ont par ailleurs souligné l'importance de la volatilité de la phase liquide : l'évaporation d'une fraction de la masse des gouttelettes avant l'initiation favorise l'établissement d'un régime de détonation. Ces résultats essentiels ont été démontrés aussi bien de manière expérimentale que par le biais de la simulation numérique.

Dans le cadre de la présente étude, on se propose de mettre au point un modèle numérique simplifié de combustion des gouttelettes liquides lorsque ces dernières sont de petites dimensions, afin d'analyser l'effet des longueurs chimiques caractéristiques et du diamètre des particules sur la structure cellulaire de détonation. Le but est d'étendre l'étude réalisée sur les particules solides aux gouttelettes liquides, afin d'orienter les travaux futurs.

Deuxième partie

Les détonations hétérogènes gaz particules d'aluminium
CHAPITRE 4

Modélisation numérique

Chapitre 4

Modélisation numérique

4.1 Introduction

La modélisation numérique des détonations hétérogènes gaz / particules repose sur la théorie classique des milieux hétérogènes de Nigmatulin [193] selon laquelle la phase gazeuse et la phase solide sont des milieux continus traités séparément en termes de masse volumique, de vitesse et de température. Les hypothèses utilisées sont les suivantes : la taille moyenne des particules est suffisamment grande devant les distances de la dynamique moléculaire, mais suffisamment petite devant les autres dimensions caractéristiques du problème. La fraction volumique des particules ainsi que les interactions inter-particules sont négligées. La température interne des particules est supposée uniforme et leur densité constante. Enfin, l'onde de détonation est d'une épaisseur finie et décrite par le modèle ZND, c'est-à-dire que les réactions chimiques sont thermiquement initiées par le choc.

Le modèle numérique proposé ici est une évolution du modèle développé par Khasainov et Veyssiere [85] pour des suspensions de particules d'aluminium.

4.2 Equations de bilan pour la phase gazeuse

Bilan de masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = J \tag{4.1}$$

Bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \left((\rho \mathbf{u}) \otimes \mathbf{u} \right) = -\nabla p + J \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \mathbf{f}$$
(4.2)

Bilan d'énergie

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(E+p)) = J(e_p + Q_{mélange}) - \mathbf{f} \cdot \mathbf{v_p} - q \tag{4.3}$$

Dans l'équation précédente, l'énergie totale de la phase gazeuse s'exprime comme suit :

$$E \equiv \rho(e + \frac{1}{2}\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \tag{4.4}$$

Equation d'espèces pour les gaz

$$\frac{\partial \rho_{rp}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{rp} \mathbf{u}) = (1 + \chi) J \tag{4.5}$$

La signification des termes utilisés dans les équations (4.1) à (4.5) est donnée ci-après :

p	: pression
ρ	: densité apparente des gaz
u	: vitesse matérielle des gaz
$\mathbf{v_p}$: vitesse matérielle des particules
ρ_{rp}	: masse volumique des produits de combustion de l'aluminium ($\rho_{rp_0} = 0$)
E	: énergie totale
e	: énergie interne $(e = c_p T)$
c_p	: capacité massique thermique à p constante
T	: température
$Q_{m\acute{e}lange}$: effet calorifique des réactions chimiques entre les gaz et les particules
J	: taux de transfert de masse entre les deux phases
f	: taux d'échange de quantité de mouvement entre les deux phases
q	: taux d'échange de chaleur entre les deux phases
χ	: cœfficient stœchiométrique
$()_p$: indice correspondant aux particules

4.3 Equations de bilan pour la phase solide

Bilan de masse des particules

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v_p}) = -J \tag{4.6}$$

Bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \sigma \mathbf{v} \mathbf{p}}{\partial t} + \nabla ((\sigma \mathbf{v}_{\mathbf{p}}) \otimes \mathbf{v}_{\mathbf{p}}) = \mathbf{f} - J \mathbf{v}_{\mathbf{p}}$$
(4.7)

Bilan d'énergie totale

$$\frac{\partial E_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v_p} E_p) = q - J e_p + \mathbf{f} \cdot \mathbf{v_p}$$
(4.8)

Dans l'équation précédente, l'énergie totale des particules s'exprime par la relation :

$$E_p \equiv \sigma(e_p + \frac{1}{2}\mathbf{v_p} \cdot \mathbf{v_p}) \tag{4.9}$$

Conservation du nombre de particules par unité de volume

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla \cdot (n_p \mathbf{v_p}) = 0 \tag{4.10}$$

Avec :

 $e_p = c_p T + Q_p$: énergies interne et chimique des particules σ : concentration de particules n_p : nombre de particules par unité de volume

L'équation (4.10) exprime que l'agglomération ou la fragmentation des particules ne sont pas prises en compte.

Le couplage entre les deux systèmes d'équations s'opère par l'intermédiaire des termes d'échanges des membres de droite. La formulation de ces termes sous une forme aussi réaliste que possible tout en permettant des calculs numériques est le but de la modélisation. Si on fait la somme des équations (4.1) et (4.6) d'une part, et des équations (4.2) et (4.7) d'autre part, il en résulte que la masse totale et l'impulsion totale sont conservées. L'énergie totale peut quant à elle augmenter grâce à la combustion des particules.

4.4 Interactions entre les phases gazeuse et solide

Dans les équations de bilan des deux phases, les membres de droite font intervenir les termes d'interaction entre les gaz et les particules : le transfert de masse J, la force de traînée des particules \mathbf{f} et le flux de chaleur q entre les deux phases.

4.4.1 Cinétique de combustion et transfert de masse

4.4.1.1 Modèle à deux étapes

Les transferts de masse et d'énergie entre le gaz et les particules sont gouvernés par la diffusion et la cinétique chimique. Deux modèles ont été examinés dans ce travail. Nous examinons tout d'abord le modèle à deux étapes élaboré par Veyssiere et Khasainov ([86] et [69]), comportant une période d'induction suivie d'une période de combustion. La période d'induction est gouvernée par une loi de type Arrhenius, modélisant un régime cinétique, qui exclut ainsi tout transfert de masse entre les particules et les gaz :

$$\frac{dQ_p}{dt} = \frac{6\sigma}{d_{p0}} Q_{m\acute{e}lange} Z_{Arr} \exp\left(-\frac{E_a}{RT_p}\right)$$
(4.11)

Avec :

- Q_p : énergie libérée par les particules durant la phase d'induction
- d_{p0} : diamètre initial des particules
- Z_{Arr} : facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius
- E_a : énergie d'activation des réactions entre les gaz et les particules
- R : constante universelle des gaz
- T_p : température des particules

Le terme $\frac{dQ_p}{dt}$ de l'équation (4.11) s'ajoute au membre de droite de l'équation de bilan d'énergie des particules (équation (4.8)), avant inflammation de ces dernières. Cette modélisation résulte de l'approche de Roberts et al. [67] selon laquelle la période d'induction est gouvernée par un régime cinétique de type Arrhenius à la surface des particules, lorsque leur température T_p est inférieure à la température d'inflammation de l'aluminium T_{inf} :

$$T_p < T_{inf} : \frac{dQ_p}{dt} \ge 0 \tag{4.12}$$

Ces réactions chimiques sont issues du chauffage des particules par convection du fait de la température élevée des gaz environnants. Lorsque la température d'inflammation est atteinte, ces réactions chimiques cessent pour laisser place au régime de combustion classique par diffusion des espèces :

$$T_p \ge T_{inf} : \frac{dQ_p}{dt} = 0 \tag{4.13}$$

Selon le critère d'inflammation proposé par Merzhanov [58], la période d'induction prend fin lorsque le dégagement de chaleur donné par la loi d'Arrhenius (4.11) dépasse le taux de chaleur absorbée par les particules pour monter en température : les particules sont alors enflammées et le terme $\frac{dQ_p}{dt}$ de l'équation (4.11) est annulé dans l'équation de bilan d'énergie des particules (4.8). La période d'induction est suivie par la période de combustion. Le transfert de masse entre les gaz et les particules durant cette phase est alors gouverné par le régime diffusif. Le terme source J s'écrit :

$$J = J_{diff} = 3\sigma \frac{1 + 0.276 R e^{0.5}}{\tau_p}$$
(4.14)

où τ_p est le temps de régression du diamètre de la particule (temps de combustion) :

$$\tau_p = \frac{K d_{p0}^2}{\Phi_{or}^{0.9}} \tag{4.15}$$

Avec :

 J_{diff} : taux de combustion lié au régime diffusif

- *Re* : nombre de Reynolds
- K : constante empirique de combustion
- Φ_{ox} : fraction molaire des espèces capables d'oxyder l'aluminium

L'équation (4.14) prend en compte l'augmentation du taux de combustion par effet d'érosion dû aux différences de vitesses entre les particules et les gaz. Le nombre de Reynolds Re dans l'équation (4.14) est exprimé comme suit :

$$Re = d_p \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}\mathbf{p}|}{\nu} \tag{4.16}$$

Avec :

 d_p : diamètre des particules

 $\nu~$: viscosité cinématique des gaz

Le taux de transfert de masse est inversement proportionnel au temps de combustion des particules τ_p . Ce temps de combustion correspond à une loi classique de régression de type d_{p0}^2 pour la combustion de particules, qui est contrôlée par un processus de diffusion. Le modèle proposé par Price [49] prend en compte la fraction molaire Φ_{ox} des espèces capables d'oxyder les particules d'aluminium (O₂, H₂O, ...) et fait intervenir une constante empirique de combustion K. Ingignoli [40] a montré que pour des particules de type flocon, $K = 1.6 \times 10^6 \text{ s/m}^2$ tandis que pour des particules sphériques, on peut utiliser la valeur $K = 4 \times 10^6 \text{ s/m}^2$. La première valeur de la constante de combustion K pour des particules de type flocon a été obtenue par comparaison de célérités de détonation expérimentales et numériques pour des mélanges hybrides (suspensions de particules d'aluminium dans un mélange gazeux explosif). On remarque par ailleurs que les particules de type flocon brûlent presque 2.5 fois plus vite que des particules sphériques de masse identique.

Il est clair que ce modèle de combustion des particules est simplifié mais il présente néanmoins l'avantage de permettre d'étudier facilement l'influence respective de la zone d'induction et de la zone de combustion sur la structure de détonation.

4.4.1.2 Modèle hybride

Un modèle plus représentatif de la réalité physique consiste à prendre en compte la compétition entre les régimes de cinétique et de diffusion lors de la combustion des particules. Cette compétition a été décrite par Frank-Kamenetzkii [194]. Une application de ce schéma dans le cas de détonations air - particules d'aluminium, a été proposée par Zhang et al. [82]. Nous le dénommerons "modèle hybride" dans la suite de ce mémoire.

Dans ce modèle, le terme d'interaction J de transfert de masse entre les gaz et les particules combine les deux régimes (cinétique et diffusif) par l'intermédiaire d'un mécanisme de compétition parallèle. J s'écrit donc :

$$J = \left(\frac{1}{J_{diff}} + \frac{1}{J_{cin}}\right)^{-1} \tag{4.17}$$

Le terme de diffusion J_{diff} est identique à celui utilisé pour le modèle à deux étapes. Il est défini par l'équation (4.14). Le terme cinétique J_{cin} est exprimé sous la forme d'une loi d'Arrhenius :

$$J_{cin} = \pi d_p^2 n_p Z_{hyb} \exp\left(-\frac{E_a}{RT_p}\right)$$
(4.18)

Avec :

 Z_{hyb} : facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius

Pour un nombre de particules n_p donné, le rayon des particules est donné par la relation :

$$\frac{d_p}{2} = \sqrt[3]{\frac{\sigma}{\frac{4}{3}\pi\rho_p n_p}} \tag{4.19}$$

Avec :

 ρ_p : masse volumique des particules

Ce modèle ne fait plus intervenir de critère d'inflammation pour les particules. En effet, juste derrière le choc, la température des particules est relativement faible, ce qui implique que $J_{cin} \ll J_{diff}$: il en résulte que $J \simeq J_{cin}$ d'après l'équation (4.17). Inversement, plus loin derrière le choc incident, la relaxation de la température des particules vers la température élevée des gaz implique que $J_{cin} \gg J_{diff}$. Dans ce cas, on a $J \simeq J_{diff}$ d'après l'équation (4.17). Le taux de réaction est donc contrôlé par l'étape la plus lente.

4.4.2 Taux d'échange de quantité de mouvement

Les vitesses des gaz et des particules sont équilibrées par la force de traînée \mathbf{f} donnée par l'équation :

$$\mathbf{f} = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{\sigma}{d_p} C_d (\mathbf{u} - \mathbf{v_p}) |\mathbf{u} - \mathbf{v_p}|$$
(4.20)

La force de traînée **f** fait intervenir le cœfficient de traînée C_d :

$$C_d = \frac{24}{Re} + \frac{4.4}{\sqrt{Re}} + 0.42 \tag{4.21}$$

Le premier terme représente la loi de Stockes qui est valide pour $Re \ll 1$. En revanche, pour $Re \gg 1$, $C_d \longrightarrow 0.42$. D'autres coefficients de traînée ont été étudiés par Gregoire et al. [195]. Ils en ont conclu que C_d n'a pas une influence significative sur les résultats.

4.4.3 Flux de chaleur entre les deux phases

Le flux de chaleur q entre les gaz et les particules est essentiellement de type convectif, même si les transferts radiatifs ne peuvent être négligés :

$$q = \frac{6\sigma}{\rho_p d_p} \left[\frac{Nu\lambda_g (T - T_p)}{d_p} + \varepsilon \sigma_{Boltz} (T^4 - T_p^4) \right]$$
(4.22)

Avec :

 $\begin{array}{ll} Nu & : \mbox{ nombre de Nusselt} \\ \lambda_g & : \mbox{ conductivité thermique des gaz} \\ \varepsilon & : \mbox{ émissivité} \\ \sigma_{Boltz} : \mbox{ constante de Boltzmann} \end{array}$

Le nombre de Nusselt Nu intervenant dans l'expression de q est fonction du nombre de Reynolds Re et du nombre de Prandtl Pr:

$$Nu = 2 + 0.6 Pr\sqrt{Re} \tag{4.23}$$

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda_g} \tag{4.24}$$

 $\mu = \rho \nu$: viscosité dynamique des gaz

4.5 Paramètres thermodynamiques et équation d'état

On considère que les réactions chimiques sont beaucoup plus rapides que le processus de diffusion. De ce fait, on écarte l'hypothèse selon laquelle de l'aluminium combustible pourrait se trouver dans la phase gazeuse. Cette dernière ne peut donc comprendre que les espèces présentes initialement et les produits de détonation. On introduit alors la fraction massique x_{rp} des produits de combustion dans la phase gazeuse :

$$x_{rp} = \frac{\rho_{rp}}{\rho} \tag{4.25}$$

Avec :

 $\boldsymbol{x_{rp}}$: fraction massique des produits de combustion dans la phase gazeuse

Les paramètres thermodynamiques des gaz sont calculés en pondérant la part de chaque espèce présente par sa fraction massique correspondante :

$$c_p = (1 - x_{rp})c_{p_0} + x_{rp}c_{p_{rp}} \tag{4.26}$$

$$c_v = (1 - x_{rp})c_{v_0} + x_{rp}c_{v_{rp}} \tag{4.27}$$

$$\frac{1}{W_m} = (1 - x_{rp})\frac{1}{W_{m_0}} + x_{rp}\frac{1}{W_{m_{rp}}}$$
(4.28)

$$\gamma = (1 - x_{rp})\gamma_0 + x_{rp}\gamma_{rp} \tag{4.29}$$

Avec :

 c_{p_0} : capacité thermique massique à p constante des gaz frais $c_{p_{rp}}$: capacité thermique massique à p constante des produits de combustion c_{v_0} : capacité thermique massique à v constant des gaz frais $c_{v_{rp}}$: capacité thermique massique à v constant des produits de combustion W_{m_0} : masse molaire des gaz frais à l'état initial $W_{m_{rp}}$: masse molaire des produits de combustion

Le terme $1 - x_{rp}$ représente la fraction massique des gaz frais.

L'équation d'état de la phase gazeuse est donnée par :

$$p = \rho R \left(\frac{1 - x_{rp}}{W_{m_0}} + \frac{x_{rp}}{W_{m_{rp}}} \right) T$$
(4.30)

$$e = \left[c_{v_0}(1 - x_{rp}) + c_{v_{rp}}x_{rp}\right]T$$
(4.31)

4.6 Traitement numérique du système d'équations

4.6.1 Discrétisation du problème et stabilité du schéma numérique

De nombreuses méthodes de discrétisation sont couramment utilisées parmi lesquelles les trois principales sont les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Le code EFAE élaboré par B. Khasainov (EFAE = Enhanced Fuel-Air Explosion) est basé sur la méthode des différences finies en représentation Eulérienne : les points constituant le maillage sont fixes et le fluide (gaz et particules) est convecté à travers les différentes cellules. A la différence de la représentation Lagrangienne, la représentation d'Euler présente la particularité de pouvoir convecter de très petites quantités de particules d'une cellule à l'autre avec des vitesses n'ayant pas de signification physique, mais uniquement issues du phénomène de diffusion numérique. On définit chaque grandeur scalaire (pression, densité, température, concentration des espèces et des particules) au centre des cellules : ces valeurs représentent leur moyenne au sein de chaque cellule. Les vitesses sont quant à elles définies sur les interfaces et sont rapportées au centre de chaque maille. La figure 4.1 représente la discrétisation du domaine de calcul par la représentation Eulérienne en différences finies.

Le code EFAE repose sur un schéma explicite : les grandeurs sont calculées uniquement en fonction des valeurs issues du pas de temps précédent. Si les méthodes implicites sont réputées pour être très stables, on utilise dans cette étude le critère de Courant-Friedrichs-Lewy (Hirsch [196]) pour assurer la stabilité :

$$CFL = \left\| \frac{(u+c)\Delta t}{\Delta x} \right\|_{max} < 1$$
(4.32)

CFL : nombre de Courant

u : vitesse des particules

c : célérité du son

 Δt : pas de temps

 Δx : dimension de la cellule numérique

Ainsi, en définissant le nombre de Courant, on limite le pas de temps. Ce critère de stabilité repose sur le fait que les perturbations ne peuvent sortir d'une cellule numérique en un seul pas de temps.



FIG. 4.1 – Discrétisation du domaine de calcul par la représentation Eulérienne en différences finies

Les différences finies peuvent engendrer quatre types d'erreur lors de la discrétisation et de l'implémentation des équations (Oran et Boris [197]) :

- Erreurs locales : elles sont liées à la précision de l'échantillonnage des variables (simple précision, double précision, etc...)
- Erreurs d'amplitudes : la diffusion numérique lisse et amortit le profil d'une grandeur au cours du temps
- Erreurs de phases : mauvaise évaluation de la vitesse de propagation d'une grandeur qui dévie alors de sa position théorique
- Erreur de Gibbs : incertitude spatiale de la représentation discrète d'une fonction continue, notamment lors de forts gradients

Ces erreurs, liées à la méthode des différences finies, peuvent être réduites en ce qui concerne les erreurs de phase et d'amplitude. De même, une résolution numérique fine permet de diminuer les erreurs de Gibbs.

Par ailleurs, quatre critères essentiels définissent la qualité d'un schéma numérique. Ce dernier doit être :

- conservatif
- causal (prise en compte des contraintes physiques limitant la transmission des informations)
- positif ou monotone (pas de création d'extrema par la convection seule)
- stable

Pour trouver le meilleur compromis entre ces quatre critères, on utilise en général des techniques non linéaires de type algorithmes FCT (Flux-Corrected Transport), PPM (Piecewise-Parabolic Method), HOG (High-Order Godunov) ou encore TVD (Total-Variation Diminishing) [197]. Il est à noter qu'un schéma numérique aux différences finies d'ordre 2 limite la diffusion numérique mais ceci au détriment de la positivité.

4.6.2 Maillage Numérique

4.6.2.1 Représentation

Quelle que soit la géométrie du problème (plan, cylindrique, sphérique) et le nombre de dimensions (1D, 2D et 3D), le code EFAE utilise un maillage rectiligne dans l'espace cartésien. Même dans le cas d'un calcul 3D dans un tube circulaire (cf. Fig. 4.2), cette discrétisation est employée : elle permet en effet de garder une résolution constante dans la section droite et d'éviter le point central pathologique. Outre sa simplicité, dans le cas de la détonation hélicoïdale, ce maillage permet de garder une bonne résolution dans la zone proche de la paroi, où se situe le point triple. Néanmoins, une telle représentation présente l'inconvénient d'avoir un périmètre mouillé égal à $4D_{tube}$, à la place de πD_{tube} . Pour s'en rendre compte, il suffit de considérer un tube de section circulaire avec une faible résolution, par exemple $N_y = N_z = 3$ ou 4.

Dans ce mémoire, les simulations numériques (1D, 2D ou 3D) portent sur des détonations se propageant de la gauche vers la droite, dans des tubes semi-infinis dont le côté gauche est fermé et dont les parois sont assimilées à des obstacles indéformables et parfaitement glissants. Le maillage utilisé est lié au repère du laboratoire : en effet, l'étude d'une détonation stationnaire et autonome nécessite de connaître les grandeurs dans tout le domaine, contrairement à l'étude du front de détonation pour laquelle on pourrait se permettre de n'utiliser qu'un repère lié au choc, dans lequel les gaz frais entreraient en amont et ressortiraient en aval. Ainsi, le code EFAE considère les gaz frais au repos en



amont du choc (p_0, T_0) et une vitesse matérielle nulle à l'extrémité fermée du tube en aval.

FIG. 4.2 – Maillage numérique dans l'espace cartésien dans le cas d'une détonation 3D

4.6.2.2 Maillage adaptatif

Cependant, dans le repère lié au laboratoire, il est pratiquement impossible de mailler uniformément tout l'espace, notamment dans le cas de simulations 3D. En effet, une grande distance de propagation ainsi qu'une résolution fine dans la zone de réaction sont incompatibles avec un tel maillage : le nombre de points de calculs serait beaucoup trop élevé pour espérer effectuer une simulation dans un temps raisonnable avec les moyens informatiques actuels. A titre d'exemple, considérons un maillage représentatif pour un mélange aluminium - oxydant : $\Delta x = 1$ mm. En prenant en compte la vitesse de propagation de la détonation (2000 m/s comme ordre de grandeur), la distance de relaxation au régime autonome après amorçage et le temps de développement d'une structure cellulaire, la propagation doit être considérée sur une distance de 30 m environ. Ainsi, un calcul 1D nécessiterait 30 000 mailles, ce qui reste raisonnable. Mais un calcul 2D dans un canal de 1 m de diamètre (requis par la taille estimée des cellules de détonation dans les mélanges particules solides / atmosphère oxydante, d'après le chapitre 2.2) nécessiterait alors 30 millions de mailles, ce qui déboucherait sur 30 milliards de mailles pour une simulation

3D, ce qui est tout à fait prohibitif.

Une technique de maillage adaptatif est donc utilisée pour pouvoir associer grande distance de propagation et bonne résolution numérique dans la zone de réaction chimique : physiquement, lorsqu'une détonation se propage à un régime stationnaire et autonome à la célérité D, la zone de détente derrière le front s'étend avec la même célérité D (zone de repos) sur une zone de longueur Dt/2 (cf. annexe D). Ainsi, si la zone de réaction chimique nécessite un maillage fin, on peut réduire le nombre de points dans la zone de détente. De ce fait, le code EFAE prend en compte un paramètre N_{fine} , le long de l'axe du tube, qui correspond au nombre de mailles, constant, que l'on attribue à la tête de l'onde de détonation. La résolution y est la plus fine, constante et isotrope ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$). Le nombre de mailles restantes $N_{adaptation} = N_x - N_{fine}$ est utilisé pour résoudre les équations entre l'origine du tube et la zone de maillage fin. La taille des mailles numériques augmente géométriquement en s'éloignant du front de détonation, jusqu'à une valeur maximale définie par Dt/100. La taille des mailles numériques est définie par $\frac{\Delta x(i)}{\Delta x(i+1)} = q_m$, avec $|q_m-1| \ll 1$. Il est à noter que q_m augmente au cours du calcul. En théorie, la zone d'adaptation derrière la zone de la détonation ne peut pas modifier la structure de l'écoulement de tête, cette dernière se propageant à des célérités supersoniques.

Un exemple pour une simulation air - particules d'aluminium avec maillage adaptatif est indiqué sur la figure 4.3. Dans cet exemple, la distance parcourue par le front est discrétisée en 1000 mailles, les plus fines étant localisées au niveau du front de détonation (figure 4.3-a). Cette zone contient au minimum 600 mailles fines (figure 4.3-b). Le maillage adaptatif permet donc de garder une résolution fine dans la zone des réactions chimiques dans laquelle les échelles de longueur caractéristiques sont de faible dimension. Loin derrière le front de détonation, les profils des grandeurs thermomécaniques de l'onde ne varient presque pas, d'où l'utilisation de mailles beaucoup plus grandes et moins nombreuses. Par ailleurs, dans cet exemple, à partir de 33 m environ, les limites de l'adaptation sont atteintes pour un tel maillage.

Il est à noter que l'utilisation d'un maillage adaptatif ne modifie pas la célérité de propagation de la détonation, ni l'allure des profils physiques. Cependant, si la distance de propagation est trop grande, un lissage des courbes peut survenir dans les zones où la taille des mailles est la plus élevée ($|q_m - 1| \simeq 0.02$, ce qui limite la capacité d'adaptation pour les grandes distances), ou même conduire à de légers écarts par rapport à la solution sans adaptation. Ce phénomène est tout à fait normal et fréquent lors de l'utilisation d'un maillage adaptatif.

4.6.3 Intégration par la méthode FCT (Flux-Corrected Transport)

La méthode FCT consiste à ajuster les flux à chaque interface, d'après les contraintes physiques, en utilisant la méthode des temps fractionnés (pré-estimation des grandeurs



FIG. 4.3 – (a) Evolution de la taille de mailles numériques en fonction de la distance et (b) évolution de la taille des mailles numériques pour une simulation avec maillage adaptatif ($N_x = 1000$ mailles, $N_{adaptation} = 400$ mailles et $N_{fine} = 600$), avec profils de vitesse matérielle des gaz (c)

sur le premier demi-pas de temps). Cette méthode permet une précision d'ordre 2 en temps. Le stencil à trois points intégré à l'algorithme donne une précision d'ordre 4 sur la phase et produit une diffusion numérique minimum (Boris et al. [198]). La figure 4.4 montre les différentes étapes de résolution du système d'équations du code EFAE, d'après Oran et Boris [197].

Par ailleurs, Hirsch [199] souligne que dans le cas de schémas numériques utilisant des solveurs de Riemann (TVD et dérivés), une condition supplémentaire doit être appliquée afin que la condition d'entropie ne soit pas mise en défaut. Dans le cas des algorithmes FCT (qui n'utilisent pas de solveur de Riemann), aucune publication ne mentionne si cette condition est vérifiée ou non. Ainsi, Virot [34] a effectué la vérification de la condition d'entropie pour le problème classique du tube à choc, en utilisant deux conditions initiales différentes, et a trouvé que cette condition n'est pas mise en défaut.



FIG. 4.4 – Résolution du système différentiel d'équations par le code EFAE en utilisant la méthode FCT

4.6.4 Initialisation du problème

Le code EFAE nécessite un fichier d'entrée formaté qui permet de définir tous les paramètres physiques et numériques nécessaires à la résolution du problème. A l'instant initial, le système est constitué du milieu frais (gaz - particules et/ou gaz pur) à la pression p_0 et à la température T_0 . On peut regrouper les paramètres en différentes catégories :

- Géométrie du problème : taille du domaine, obstacles, ouvertures, etc...
- Paramètres de résolution : maillage, CFL, paramètres d'adaptation
- Ecriture des données : fichiers de données, de sauvegardes, grandeurs de sortie, etc...
- Amorçage : sources ponctuelles, saut de pression
- Propriétés des gaz (pression, température, thermodynamique, cinétique chimique)
- Propriétés des particules (taille, concentration, thermodynamique, cinétique chimique)

4.6.5 Performances et temps de calcul

4.6.5.1 Parallélisation du code EFAE

Le code EFAE peut être utilisé dans une version parallèle à partir de la librairie OPENMP qui permet de répartir le travail sur plusieurs processus moins coûteux en temps de calcul, que l'on peut exécuter en parallèle sur des processeurs pointant vers un espace de mémoire commun. A titre informatif, il existe une librairie dite MPI pour laquelle chaque processus dispose de sa zone de mémoire.

La figure 4.5 montre les temps de calcul sur un cluster dont les nœuds comportent deux quad-cores AMD 64 bits à 2.3 GHz et 16 Go de RAM, et le gain par rapport à une simulation mono-processeur, en fonction du nombre de processeurs utilisés, lors de la détonation 2D plane d'un mélange air - particules d'aluminium ($N_x = 1000$, $N_y = 800$, $\Delta x_{min} = \Delta y = 2.5$ mm). Le nombre de Courant est fixé à CFL = 0.2. On observe les temps de calcul pour que la détonation se propage jusqu'à des distances de 20 m et 35 m à partir d'un fichier de sauvegarde (figure 4.5-a). On constate que la simulation utilisant 1 seul processeur est beaucoup plus longue que les simulations à respectivement 2, 3 et 4 processeurs. Le gain en temps de calcul par rapport à une simulation monoprocesseur est linéaire (figure 4.5-b). Toutefois, le gain n'est pas égal au nombre de processeurs (il est de 3.4 environ pour la simulation à quatre processeurs), ce qui montre l'importance de la partie séquentielle du code (par exemple, l'écriture des résultats) et du temps de communication entre les différents processeurs lors de la parallélisation du code de calcul.

Sur la figure 4.5 apparaissent également des simulations jusqu'à une distance de propagation de 35 m environ, pour un et deux processeurs. Le gain est identique à celui obtenu pour une distance de propagation de 20 m (figure 4.5-b).



FIG. 4.5 – Performances du code EFAE parallélisé à partir de la librairie OPENMP

4.6.5.2 Changement du domaine de calcul

On s'intéresse généralement dans le présent mémoire aux régimes de détonation stationnaires et autonomes, ainsi qu'à la structure cellulaire. De ce fait, cela requiert une distance de propagation suffisamment élevée, d'une part pour atteindre le régime stationnaire et autonome, d'autre part pour que des perturbations locales puissent apparaître et former une configuration de Mach avec la présence de points triples. Ainsi, il n'est pas nécessaire d'effectuer les simulations 2D ou 3D directement dans le domaine de calcul final : en effet, la structure de la détonation stationnaire et autonome ne dépend pas de la source d'amorçage. Il est donc préférable en termes de temps de calcul d'initier la détonation dans un domaine plus réduit (1D ou 2D de dimensions faibles) jusqu'à obtention d'une configuration de Mach. Le code EFAE permet d'écrire des fichiers de sauvegarde qui peuvent être utilisés pour effectuer d'autres simulations, en changeant éventuellement la taille du domaine de calcul. La figure 4.6 montre l'évolution de la taille du domaine de calcul par simulations successives :



FIG. 4.6 – Evolution de la taille du domaine de calcul par simulations successives

- Simulation 1D jusqu'à obtention d'un régime stationnaire et autonome : figure 4.6-a
- Simulation 2D dans un domaine de dimension relativement faible mais suffisamment importante pour contenir des instabilités locales et le développement d'ondes transverses : figure 4.6-b

- ...

- (Simulations 2D en augmentant progressivement la taille du domaine pour obtenir

des cellules de détonation)

- ...

- Simulation 2D dans un domaine de dimension adéquate : figure 4.6-c
- (Simulation 3D dans un domaine de dimension adéquate : figure 4.6-d)

A titre d'exemple, on considère un calcul 3D avec le maillage suivant : $N_x = 1000$, $N_y = 100$ et $N_z = 100$. Le nombre de mailles total est donc de 10⁷. En démarrant avec une simulation 1D jusqu'à ce qu'un régime de détonation stationnaire et autonome soit atteint, on n'utilise que $N_x = 1000$ mailles, au lieu de 10⁷ dans le cas 3D. Les simulations 1D et 2D préliminaires permettent d'économiser en temps de calcul. Il a été vérifié que l'on obtient les mêmes structures cellulaires en utilisant des domaines initiaux différents.

4.7 Calibration du modèle numérique sur les résultats expérimentaux existant

4.7.1 Positionnement du problème

L'une des difficultés de la simulation numérique de détonations hétérogènes impliquant des mélanges gaz / particules d'aluminium réside dans le choix des paramètres de la cinétique de combustion de l'aluminium en vue, en particulier, d'étudier la structure cellulaire de détonation dans de tels mélanges. La taille des particules joue un rôle clé sur la structure de la détonation, ainsi que le montrent les équations de combustion de l'aluminium (4.11), (4.14), (4.15) et (4.18) définies précédemment. De plus, les temps caractéristiques liés aux périodes d'induction et de combustion sont différents de ceux du cas gazeux. En effet, dans le cas d'une détonation homogène gazeuse, le délai d'inflammation (induction) est suffisamment grand par rapport au temps de combustion. Au contraire, la détonation hétérogène impliquant des particules micrométriques présente un temps de combustion généralement plus grand que le délai d'inflammation.

Ainsi qu'il a déjà été indiqué (cf chapitre 2.2), les résultats expérimentaux sur la détonation de mélanges air - aluminium et oxygène - aluminium mettant en évidence la structure cellulaire de détonation sont très limités. Pour un mélange air - aluminium, Zhang et al. [76] ont observé une structure cellulaire de largeur caractéristique $\lambda = 40$ cm en utilisant des particules de type flocon à une concentration $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, correspondant à une richesse de 1.61. Ce résultat a été obtenu dans les conditions normales de pression et de température. Ingignoli et al. [81] ont observé quant à eux une structure cellulaire pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique, correspondant à une concentration de particules $\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$. Le résultat a lui aussi été obtenu à pression et température ambiantes. Si la structure cellulaire n'est pas complètement identifiable, on observe néanmoins une largeur caractéristique λ entre 5 et 10 cm. Ainsi, ces deux cas expérimentaux permettent d'ajuster en première approximation la cinétique de la déto-

nation hétérogène. Il est à noter que ces résultats expérimentaux ont été obtenus avec des particules de type flocon (mais d'origines différentes).

Le modèle numérique développé utilise des particules de type sphérique. Pour se rapprocher des particules de type flocon, on calcule le rayon sphérique équivalent à la même masse et le cœfficient de traînée est adapté pour approcher les valeurs de la célérité sur celles obtenues expérimentalement [40]. On obtient des particules de diamètre 13.5 μ m dans le cas de l'air [76] et de 8.6 μ m dans le cas de l'oxygène [81].

Le tableau 4.1 rassemble pour les deux mélanges étudiés les caractéristiques du front de détonation dans l'état Chapman Jouguet (CJ), calculées à partir du code thermochimique TDS [7]. Il est à noter que ces valeurs "efficaces" correspondent bien à celles des produits de détonation contenant à la fois des espèces gazeuses et solides, notamment l'alumine (jusqu'à 46 % en fraction massique) issue des réactions chimiques entre l'aluminium et l'oxydant. Ainsi, la phase solide est bien prise en compte dans le calcul des paramètres thermodynamiques du mélange à l'équilibre. Les résultats du tableau 4.1 donnent en particulier $c_{v_{CJ}} = \frac{R}{W_{m_{CJ}}(\gamma_{CJ}-1)} = 1756 \text{ J/kg/K}$ et $c_{p_{CJ}} = \gamma_{CJ}c_{v_{CJ}} = 1923 \text{ J/kg/K}$ pour le mélange oxygène - aluminium, et $c_{v_{CJ}} = 1751 \text{ J/kg/K}$ et $c_{p_{CJ}} = 1967 \text{ J/kg/K}$ pour le mélange air - aluminium.

Mélange	Al / O_2	Al / Air	
$\sigma ~({ m kg/m^3})$	1.50	0.50	
D_{CJ} (m/s)	1592	1742	
γ_{CJ}	1.0951	1.1234	
$W_{m_{CJ}}$ (kg/mol)	4.9795×10^{-2}	3.8493×10^{-2}	
p_{CJ} (bar)	34.7	24.5	
T_{CJ} (K)	3897	3639	
Fractions massiques			
Al ₂ O _{3/s/}	0.458	0.252	
Al ₂ O	0.109	0.132	
Al	0.053	0.042	
Al_2O_2	0.020	0.006	
AlO	0.185	0.025	
AlO ₂	0.048	0.001	
0	0.088	0.002	
O ₂	0.041	0.000	
N ₂	0.000	0.538	

TAB. 4.1 – Caractéristiques de détonation dans l'état CJ d'un mélange stœchiométrique Al/O_2 et d'un mélange Al/Air à richesse 1.61

4.7.2 Calibration de la cinétique chimique du modèle

Trois paramètres sont à déterminer pour fixer la cinétique de combustion des particules d'aluminium :

- $-E_a$: énergie d'activation de la réaction chimique entre l'aluminium et l'oxydant (équation (4.11) pour le modèle à deux étapes et équation (4.18) pour le modèle hybride)
- $-Z_{Arr}$ ou Z_{hyb} : facteurs préexponentiels de la loi d'Arrhenius (4.11) pour le modèle à deux étapes (Z_{Arr}) et équation (4.18) pour le modèle hybride (Z_{hyb})
- -K: constante empirique de combustion de la loi de Price (équation (4.15))

L'énergie d'activation est fixée à $E_a = 17\ 000\ \text{cal/mol}$ en accord avec les résultats de Merzhanov et al. [58] sur la combustion de fils d'aluminium dans l'oxygène. Il est à noter que la même valeur de l'énergie d'activation E_a sera utilisée pour les deux comburants utilisés : en effet, dans le cas d'une atmosphère oxydante constituée d'air ou d'oxygène pur, dans les deux cas, les réactions chimiques font intervenir les particules d'aluminium et les molécules d'oxygène de la phase gazeuse. La valeur $E_a = 17\ 000\ \text{cal/mol}$ que nous utilisons ci-après est relativement proche de celle de Zhang et al. [76] $E_a = 95.5\ \text{kJ/mol}$ $\simeq 22\ 800\ \text{cal/mol}$ appliquée lors de la construction de leur modèle hybride.

Comme mentionné précédemment, la valeur de la constante empirique de combustion K dépend de la géométrie des particules. Dans le cadre de cette étude, les particules modélisées étant de type flocon, la valeur $K = 1.6 \times 10^6 \text{ s/m}^2$ estimée par Ingignoli [40] sera utilisée.

Ainsi, la seule constante d'ajustement pour calibrer le modèle sur les résultats expérimentaux est le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius des équations (4.11) et (4.18), respectivement pour les modèles à deux étapes et hybride. Les valeurs suivantes sont adoptées :

- $Z_{Arr} = 100 \text{ m}^4/\text{s}$ pour les mélanges air aluminium
- $Z_{Arr}=700~{\rm m}^4/{\rm s}$ pour les mélanges oxygène aluminium
- $Z_{hyb} = 7.5 \times 10^4 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ pour les mélanges air aluminium
- $Z_{hyb} = 3 \times 10^6 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ pour les mélanges oxygène aluminium

CHAPITRE 5

Résultats de simulations monodimensionnelles des détonations gaz - particules d'aluminium

Chapitre 5

Résultats de simulations monodimensionnelles des détonations gaz - particules d'aluminium

5.1 Introduction

On compare dans cette partie les caractéristiques de détonation des modèles à deux étapes et hybride. On effectue pour cela des simulations 1D planes dans des conditions correspondant aux expériences de Zhang et al. [76] pour les mélanges air - aluminium et d'Ingignoli et al. [81] pour les mélanges oxygène - aluminium (cf. 4.7.1).

La fiabilité des résultats dépend fortement de la stationnarité de la détonation, donc de la dimension du domaine de calcul. Dans le cas de détonations hétérogènes gaz - particules solides, les temps caractéristiques qui entrent en jeu sont supérieurs d'au moins un ordre de grandeur par rapport à ces mêmes temps caractéristiques pour les mélanges gazeux homogènes. De ce fait, la distance de propagation doit être suffisamment importante pour l'onde de détonation puisse être considérée comme stationnaire et autonome, et pour que la structure cellulaire ait eu le temps de se développer. Il est donc crucial de choisir une taille de maille adaptée d'une part à la physique du problème considéré (longueurs chimiques, distance de propagation, taille des particules, etc...), et d'autre part aux contraintes numériques (temps de calcul, mémoire, etc...). Pour les calculs du présent chapitre, on a effectué des simulations sur des longueurs de 35 m pour l'air et 12 m pour l'oxygène. Des calculs tests ont également été effectués en double-précision pour s'assurer que les résultats ne dépendent pas du format des nombres informatiques.

On utilise 1000 mailles avec adaptation (taille minimale de maille $\Delta x = 1 \text{ mm}$) pour le mélange air - aluminium, et 800 mailles avec adaptation (taille minimale de maille $\Delta x =$ 0.375 mm) pour le mélange oxygène - aluminium. L'initiation est due à une source d'explosion ponctuelle à l'extrémité gauche fermée du tube libérant à t = 0 une énergie $E_i =$ $45 \times 10^5 \text{ J/m}^2$ dans une seule maille située dans du gaz pur. Les particules d'aluminium sont présentes à partir de x = 10 cm : pour des raisons numériques, il est préférable que l'onde de souffle consécutive à l'explosion ponctuelle se propage et s'atténue d'abord dans l'atmosphère purement gazeuse (limitée à une courte distance) avant d'entrer dans la zone hétérogène constituée de gaz chargé avec les particules d'aluminium. Cet aménagement n'a pas de conséquences sur les résultats aux grandes distances de propagation.

5.2 Mélange air - aluminium

Les facteurs préexponentiels des lois d'Arrhenius sont les suivants :

 $-~Z_{Arr} = 100 {
m ~m/s} \ -~Z_{hyb} = 7.5 imes 10^4 {
m ~kg/m^2/s}$

5.2.1 Célérité de détonation

La figure 5.1 montre l'évolution de la célérité de détonation dans le cas de l'air pour les deux modèles de combustion de l'aluminium. Elle est calculée à partir du déplacement au cours du temps du pic de Von-Neumann. On constate dans les deux cas qu'elle se stabilise autour d'une valeur moyenne à partir de t = 1.3 ms environ (soit une distance de propagation de 2.5 m environ sur une longueur totale de 35 m). La longueur et la durée de la période transitoire diminuent lorsque le diamètre des particules diminue.

On observe de nettes fluctuations de la célérité de détonation pour le modèle à deux étapes ($D_{2\acute{e}tapes}$ compris entre 1747 et 1806 m/s, à partir de t = 1.3 ms), pour une valeur moyenne de 1785 m/s, soit une surestimation de 2.5 % environ par rapport à $D_{CJ} = 1742$ m/s. Cet écart est sans doute lié à l'ajout d'énergie libérée durant la période d'induction par la loi d'Arrhenius de l'équation (4.11) du modèle à deux étapes, via le paramètre $Q_{m\acute{e}lange}$. Les fluctuations instantanées de D peuvent être beaucoup plus importantes dans le cas de détonations gazeuses. D'après la figure 5.1, dans le modèle à deux étapes, elles peuvent excéder de 3.7% environ la valeur de D_{CJ} (1806 m/s contre $D_{CJ} = 1742$ m/s).

Le modèle hybride présente quant à lui une célérité de détonation beaucoup plus stable, avec des fluctuations plus faibles (D compris entre 1724 et 1769 m/s), pour une valeur moyenne de $D_{hybride} = 1740$ m/s à partir de t = 1.3 ms, soit environ 0.1% en dessous de D_{CJ} . A titre de comparaison, on rappelle que la mesure expérimentale d'une célérité de détonation D s'effectue avec une précision de l'ordre de 0.5 %. Les fluctuations de D pour le modèle hybride n'excèdent pas 1.5 % d'écart avec D_{CJ} . Ce résultat peut venir de la résolution numérique dans les zones d'induction et de combustion. En effet, la zone d'induction du modèle hybride est plus courte que celle du modèle à deux étapes, et les longueurs de combustion du même ordre de grandeur (cf. chapitre 6, figure 6.28). Il convient cependant de rappeler que le modèle 1D présente intrinsèquement des instabilités, ce qui permet de relativiser les fluctuations de célérité de propagation observées, notamment pour le modèle à deux étapes.



FIG. 5.1 – Evolution temporelle de la célérité de détonation pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange riche air - aluminium, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)

5.2.2 Pic de pression

La figure 5.2 montre l'évolution temporelle du maximum de pression pour les deux modèles. De même que pour la célérité de détonation, les fluctuations sont plus importantes pour le modèle à deux étapes, avec des valeurs plus élevées du pic de pression. Dans le cas du modèle à deux étapes, la valeur moyenne du pic de pression est de 44.9 bar, soit environ 1.8 p_{CJ} , avec des valeurs comprises entre 44.1 et 46.6 bar. Le modèle hybride conduit à une valeur moyenne de pression de 41.5 bar, soit environ 1.7 p_{CJ} , avec des valeurs comprises entre 41.1 et 41.6 bar. Les valeurs plus élevées obtenues avec le modèle à deux étapes peuvent également s'expliquer par l'excédent d'énergie fournie par la loi d'Arrhenius définissant la période d'induction.

Les fluctuations de pression sont essentiellement issues de la loi d'Arrhenius des équations (4.11) et (4.18). Elles sont nettement plus importantes avec le modèle à deux étapes. Il est à noter que dans le calcul avec le modèle hybride, la zone d'induction comporte environ 40 mailles, ce qui écarte à priori la résolution numérique comme cause possible de l'atténuation des fluctuations. Les plus faibles valeurs de p_{max} dans le cas du modèle hybride sont probablement dues à une inflammation progressive contrairement à l'inflammation dans le modèle à deux étapes qui résulte d'un basculement brusque du régime cinétique vers le régime diffusif avec l'apparition instantanée du taux de combustion. De plus, le taux de combustion maximal calculé par le modèle hybride est deux fois plus faible environ que celui calculé par le modèle à deux étapes. Il sera montré au chapitre 6 que les zones de réactions totales (induction + combustion) sont de l'ordre de 45 cm pour ls deux modèles (cf. figure 6.28).



FIG. 5.2 – Evolution temporelle de la valeur du pic de pression pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange riche air - aluminium, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)

5.2.3 Taux d'échanges de masse entre les gaz et les particules

La différence majeure entre les deux modèles réside dans la définition des critères d'échanges de masse respectifs entre les phases solide et gazeuse, liés à l'inflammation des particules. Le modèle à deux étapes sépare clairement la phase d'induction (régime cinétique) de la phase de combustion (régime diffusif) conformément aux équations (4.11), (4.14) et (4.15). Le modèle hybride combine les deux régimes en parallèle suivant les équations (4.14), (4.17) et (4.18), la prédominance d'un régime étant automatiquement contrôlée par la définition du terme d'échange total J. Il faut toutefois vérifier la cohérence entre les deux modèles sur le terme J. La figure 5.3 représente les différents termes d'échanges massiques pour les deux modèles, dans le repère lié à l'onde de détonation. Les profils de température et d'évolution du rayon des particules sont ajoutés comme indicateur de l'inflammation des particules solides. Les courbes en trait plein sont celles liées au modèle hybride alors que les courbes en pointillées concernent le modèle à deux étapes.

On remarque que les rayons de particules régressent de façon très similaire, l'inflammation ayant toutefois lieu légèrement plus tôt dans le cas du modèle hybride (3.5 cm derrière le front contre 4.5 cm pour le modèle à deux étapes). La température des particules croît de façon quasiment identique pour les deux modèles jusqu'à 4 cm environ derrière le front de détonation avant d'atteindre un palier autour de 4000 K pour le modèle hybride contre 2000 K pour le modèle à deux étapes, ce dernier limitant artificiellement T_p à 2000 K, à l'inverse du modèle hybride qui n'impose aucune limite de température de la phase solide. Malgré cet écart, l'allure observée qualitativement est globalement la même. On remarque de plus que pour les deux modèles, la longueur de la zone de combustion est de 40 cm, soit environ 10 fois plus longue que la longueur d'induction.

Avant l'inflammation des particules, le terme d'échange J du modèle à deux étapes est nul. Il intervient au moment de l'inflammation, quand le rayon des particules commence à décroître. On observe alors que son début se situe dans la zone de transition de régime du modèle hybride, c'est-à-dire quand J_{cin} et J_{diff} sont du même ordre de grandeur. Néanmoins, dans le cas du modèle à deux étapes, J atteint une valeur maximale supérieure à celle du modèle hybride (environ $6 \times 10^4 \text{ kg/m}^3/\text{s}$ contre environ $2 \times 10^4 \text{ kg/m}^3/\text{s}$, c'est-à-dire une différence d'un facteur 3).

Les échanges de masse totaux J ont la même allure après inflammation des particules. Le terme du modèle à deux étapes est légèrement inférieur à celui du modèle hybride mais les deux courbes restent très proches jusqu'à une distance de 40 cm derrière le front.

Ainsi, malgré les définitions différentes des échanges de masse pour les deux modèles, on obtient des allures similaires et tout à fait cohérentes au niveau des valeurs et des transitions d'un régime à l'autre.



FIG. 5.3 – Comparaison des termes d'échanges massiques J pour les deux modèles (mélange riche air - aluminium, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)

5.2.4 Profils caractéristiques des paramètres d'écoulement

La figure 5.4 compare les profils des paramètres thermomécaniques de la détonation à l'instant t = 10 ms pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride. Le front de détonation se situe approximativement à x = 18 m, c'est-à-dire à une distance suffisamment grande pour que le régime stationnaire et autonome de propagation soit atteint. Les profils de vitesse matérielle montrent un bon accord avec la solution autosemblable (cf. annexe D) pour les détonations stationnaires et autonomes : u = 0 entre 0 < X < 0Dt/2 et u croît linéairement jusqu'à u_{CJ} en X = Dt. Il est ainsi possible de comparer les profils de pression (Fig. 5.4-a), de rayon des particules (Fig. 5.4-b), de vitesse matérielle des gaz (Fig. 5.4-c) et des particules (Fig. 5.4-d), de température des gaz (Fig. 5.4-e) et des particules (Fig. 5.4-f), de masse volumique des gaz (Fig. 5.4-g) et de concentration de particules (Fig. 5.4-h) issus des deux modèles. Etant donné qu'à l'instant t = 10 ms, le front de détonation avec le modèle à deux étapes s'est propagé à une distance plus grande qu'avec le modèle hybride, du fait de la célérité plus importante pour le modèle à deux étapes (cf. figure 5.1), les profils des paramètres sont tracés sur la figure 5.4 avec comme abscisse la distance au front de détonation X = Dt - x (X = 0 correspondant à la position du front à t = 10 ms). Les profils des paramètres des particules ne sont représentés que sur une zone de 50 cm, étant donnée la très faible concentration de ces dernières au delà de cette distance.

A l'exception des profils de température des particules, tous les profils étudiés sont similaires en termes d'allure générale et de variation au niveau du front de détonation. Certaines valeurs de pics diffèrent légèrement, notamment la pression, liées aux différents modèles de combustion pris en compte, mais les écarts restent suffisamment faibles pour que l'on considère les deux modèles comme fournissant des résultats similaires. On remarque un écart au niveau du pic de concentration de particules (environ 2 kg/m³ pour le modèle à deux étapes contre environ 1.75 kg/m³ pour le modèle hybride). Deux facteurs peuvent expliquer cet écart : d'une part, le nombre de particules par unité de volume au niveau du front est légèrement supérieur dans le cas du modèle à deux étapes (non représenté sur la figure 5.4). Cette valeur supérieure pour le modèle à deux étapes est sans doute due à la pression plus importante sur le front de détonation par rapport au modèle hybride. D'autre part, la combustion des particules démarre légèrement plus tôt pour le modèle hybride, ce qui entraîne une diminution plus précoce du rayon des particules.

La majeure différence entre les deux modèles se manifeste au niveau de la température des particules. En effet, dans le modèle à deux étapes, pour des raisons numériques, la température des particules a été limitée à 2000 K, sachant que la température d'inflammation des particules se situe autour de 1350 K. Ce critère est satisfaisant puisque la seule condition à respecter est que cette température limite soit supérieure à la température d'inflammation typique des particules d'aluminium. En revanche, elle est sans effet sur la détonation car après inflammation, les particules d'aluminium brûlent selon un régime diffusif, ce dernier étant indépendant de la température de la phase solide. La limitation de la température des particules n'a pas été imposée dans le modèle hybride car celui-ci ne nécessite pas de séparer les régimes cinétique et diffusif de combustion.



FIG. 5.4 – Profils caractéristiques des paramètres principaux de l'écoulement à l'instant t = 10 ms après l'initiation pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500$ g/m³ - diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu$ m)

5.3 Mélange oxygène - aluminium

Les facteurs préexponentiels des lois d'Arrhenius sont les suivants :

 $-~Z_{Arr} = 700 {
m ~m/s} \ -~Z_{hub} = 3 imes 10^6 {
m ~kg/m^2/s}$

5.3.1 Célérité de détonation

L'évolution temporelle de la célérité de détonation pour les deux modèles est représentée sur la figure 5.5. Dans les deux cas, on observe un régime stationnaire à partir de t = 2ms environ (soit une distance de propagation de 3.4 m environ). Cependant, la dispersion est plus importante pour le modèle à deux étapes : D évolue entre 1625 et 1663 m/s, avec une valeur moyenne de 1643 m/s, soit supérieure de 3.2 % à $D_{CJ} = 1592$ m/s.

Le modèle hybride présente également de faibles oscillations autour de la valeur moyenne : D évolue entre 1580 et 1610 m/s, avec une valeur moyenne de 1593.7 m/s, soit 0.1 % d'écart avec D_{CJ} .

De même que pour le mélange air - aluminium, le modèle hybride présente un meilleur accord avec la célérité de détonation idéale D_{CJ} .



FIG. 5.5 – Evolution temporelle de la célérité de détonation pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange stœchiométrique oxygène - aluminium, $\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)

5.3.2 Pic de pression

L'évolution temporelle de la valeur du pic de pression pour les deux modèles est représentée sur la figure 5.6. Par rapport au mélange air - aluminium (figure 5.2), une plus grande coïncidence apparaît pour le mélange oxygène - aluminium : à partir de t = 2 ms environ, la pression maximale évolue autour d'une valeur moyenne relativement proche pour les deux modèles, avec des fluctuations plus importantes pour le modèle à deux étapes. Dans ce cas, p_{max} évolue entre 52.4 et 55.5 bar autour d'une valeur moyenne de 53.7 bar, soit 1.55 p_{CJ} (plus faible que pour le mélange air - aluminium). Les oscillations de pression du modèle à deux étapes semblent plus ou moins périodiques, avec une période de l'ordre de la milliseconde. Les fluctuations du pic de pression sont en revanche plus aléatoires pour le modèle hybride. p_{max} évolue de façon apériodique entre 53.5 et 54.9 bar, avec une valeur moyenne de 54 bar, soit 1.56 p_{CJ} (également plus faible que pour le mélange air - aluminium). Il est à noter qu'une simulation en double-précision ne modifie pas les résultats.

Les deux modèles semblent en meilleur accord pour le mélange oxygène - aluminium que pour le mélange air - aluminium : les fluctuations de pression sont nettes dans les deux cas et la valeur moyenne obtenue en régime stationnaire est du même ordre de grandeur.



FIG. 5.6 – Evolution temporelle de la valeur du pic de pression pour les modèles à deux étapes et hybride (mélange stœchiométrique oxygène - aluminium, $\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)

5.3.3 Termes d'échanges de masse entre les gaz et les particules

De même que pour le mélange air - aluminium, on compare pour les deux modèles les termes d'échanges de masse entre les gaz et les particules (figure 5.7) selon la distance au

front de détonation (repère lié à l'onde : X = Dt - x). La température ainsi que le rayon des particules sont également représentés.



FIG. 5.7 – Comparaison des termes d'échanges massiques J pour les deux modèles (mélange stœchiométrique oxygène - aluminium, $\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)

La régression du rayon des particules présente la même allure pour les deux modèles, avec une zone de combustion légèrement plus courte pour le modèle hybride. Cependant, cette légère différence intervient quand le rayon des particules est de l'ordre de 10 % de sa valeur initiale, donc quand 99.9 % de la masse solide a brûlé : cette observation est donc sans incidence majeure sur la structure de la détonation. Par ailleurs, contrairement au cas du mélange air- aluminium, l'inflammation des particules a lieu plus tôt pour le modèle à deux étapes (0.9 cm derrière le front de détonation contre 1.1 cm pour le modèle hybride, basé sur la diminution du rayon des particules). L'accord entre les deux modèles est cependant satisfaisant. Jusqu'à une distance de 0.8 cm environ derrière le front, les deux courbes représentant la température des particules des deux modèles se superposent parfaitement. Ensuite, de même que pour le mélange air - aluminium, on observe un comportement différent lié à la définition du changement de régime. Le palier atteint est toujours de 2000 K pour le modèle à deux étapes contre 4000 K environ pour le modèle hybride.

L'apparition du régime diffusif consécutif à l'inflammation des particules a lieu dans le cas du modèle à deux étapes avant la période de transition entre les deux régimes du modèle hybride. La valeur maximale du terme d'échange global de masse J est du même ordre de grandeur ($3 \times 10^5 \text{ kg/m}^3$ /s pour le modèle à deux étapes, contre $2 \times 10^5 \text{ kg/m}^3$ /s pour le modèle hybride). Durant la période de combustion, le terme J présente une allure similaire dans les deux cas jusqu'à 17 cm environ derrière le front. Au delà, les valeurs diffèrent mais le rayon des particules est suffisamment faible pour que l'on puisse négliger l'apport d'énergie apportée par la combustion de la phase solide à cette distance du front, dans l'entretien de la détonation. Cependant, si les termes d'échanges massiques pour les deux modèles sont du même ordre de grandeur à leur maximum respectifs (~ 10^5 kg/m³/s), le terme lié au modèle hybride demeure 1.5 fois plus faible environ que pour le modèle à deux étapes.

5.3.4 Profils caractéristiques des paramètres d'écoulement

De même que pour le mélange air - aluminium, la figure 5.8 compare les profils des paramètres caractéristiques de la détonation du mélange oxygène - aluminium pour les deux modèles, en fonction de la distance au front de détonation, à l'instant t = 6 ms après initiation (soit à une distance de propagation d'environ 10 m). Comme précédemment, l'accord est bon entre les deux modèles, à l'exception de la température et de la concentration des particules (respectivement sur les figures 5.8-f et 5.8-h). Cette observation sur la concentration des particules est due à l'inflammation et consommation plus rapides pour le modèle à deux étapes. De plus, la valeur de la température des gaz est inférieure de 150-200 K environ pour le modèle hybride (figure 5.8-e) et quelques différences sont également présentes sur la vitesse de la phase solide (figure 5.8-d), en restant néanmoins en accord satisfaisant.

Cependant, on remarque une température d'inflammation qui paraît faible, de l'ordre de 800 K (figure 5.8-f) (au lieu de 1350 K pour l'air), ce qui peut s'expliquer par la concentration de particules cinq fois plus élevée que dans l'air (le taux de combustion lié au régime cinétique étant proportionnel à σ) et par le choix du facteur préexponentiel des lois d'Arrhenius. On peut également noter une légère différence sur l'évolution du rayon des particules (figure 5.4-b) dans une zone comprise entre 17 et 20 cm derrière le front, mais sans incidence sur la détonation puisque dans cette zone, $R_p^3 \ll R_{p0}^3$.

5.4 Conclusions sur les deux modèles de combustion des particules d'aluminium

D'un point de vue thermomécanique et cinétique, les deux modèles fournissent des résultats similaires. Cependant, le modèle à deux étapes surestime légèrement la valeur de la célérité de la détonation, du fait d'un excès d'énergie libérée par la loi d'Arrhenius caractérisant le régime cinétique durant la période d'induction. Le modèle hybride, plus représentatif de la réalité physique des phénomènes, permet de s'affranchir d'un critère arbitraire d'inflammation des particules pour passer d'un régime à l'autre : les deux régimes, cinétique et diffusif, sont liés par l'intermédiaire d'un mécanisme de compétition parallèle (cf. équation (4.17)), la prédominance de l'un sur l'autre étant physiquement assurée par la température des particules. En outre, les résultats obtenus concernant la célérité moyenne de détonation sont en excellent accord avec la célérité de détonation idéale D_{CJ} .


FIG. 5.8 – Profils caractéristiques des paramètres de l'écoulement à l'instant t = 6 ms après l'initiation pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$, diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$)

Les termes d'échanges massiques entre les gaz et les particules, qui constituent la majeure différence entre les deux modèles, conduisent à des résultats comparables : le basculement automatique du régime cinétique vers le régime diffusif pour le modèle hybride intervient globalement au même moment que pour le modèle à deux étapes, et le terme d'échange global J est du même ordre de grandeur pour les deux modèles, avec une évolution similaire derrière le front de détonation.

Malgré une légère surestimation de D_{CJ} , le modèle à deux étapes présente l'intérêt de séparer de manière simple les phases d'induction et de combustion, et donc d'étudier leur influence séparément. Ceci peut faciliter la compréhension du rôle de chacune de ces phases sur la structure de la détonation hétérogène. Cet aspect sera examiné au chapitre 6.

CHAPITRE 6

La structure cellulaire des détonations gaz - particules d'aluminium

Chapitre 6

La structure cellulaire des détonations gaz - particules d'aluminium

6.1 Introduction

Ce chapitre porte sur l'étude de la structure cellulaire des détonations hétérogènes gaz - particules d'aluminium. Il s'appuie sur les résultats des simulations numériques 2D pour les mélanges air - aluminium et oxygène - aluminium pris comme référence, et ce, aussi bien avec le modèle à deux étapes qu'avec le modèle hybride.

Le problème des différentes échelles caractéristiques de longueur est examiné ainsi que ses conséquences sur la résolution numérique pour obtenir des résultats fiables.

Les particularités de la structure cellulaire dans le cas de détonations hétérogènes sont analysées et confrontées avec les longueurs chimiques caractéristiques (longueurs d'induction et de combustion).

6.2 Modèle à deux étapes

6.2.1 Mélange air - aluminium

6.2.1.1 Conditions initiales

Pour le mélange air - aluminium, les conditions initiales des simulations numériques sont les mêmes que celles des résultats expérimentaux de Zhang et al. [76]. Les particules d'aluminium sont de type flocon, de diamètre sphérique équivalent $d_{p0} = 13.5 \ \mu$ m, à une concentration $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, correspondant à une richesse $\phi = 1.61$. La pression initiale est de $p_0 = 1$ atm.

L'énergie d'activation est fixée à la valeur $E_a = 17000$ cal/mol et le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius (4.11) est ajusté à la valeur $Z_{Arr} = 100$ m/s. La constante de combustion utilisée est celle déterminée par Ingignoli [40] pour des particules de type flocon : $K = 1.6 \times 10^6 \text{ s/m}^2$. Pour le diamètre de particules considéré, le temps de combustion est environ égal à $\tau_b = 321 \ \mu \text{s}$ d'après la relation (4.15), soit une longueur caractéristique $\tau_b D_{CJ} \simeq 55.8 \text{ cm}$.

L'initiation de la détonation est réalisée par un point d'explosion en x = 0 d'énergie $E_i = 4.5 \text{ MJ/m}^2$.

Les expériences de Zhang et al. [76] indiquent que la taille des cellules de détonation obtenue dans ces conditions est de l'ordre $\lambda = 40$ cm.

6.2.1.2 Contraintes sur la dimension du domaine de calcul

Il ressort de ces calculs préliminaires, et de la nécessité d'effectuer des simulations numériques sur une distance de propagation L_{tube} élevée et dans un canal de diamètre D_{tube} suffisamment important pour contenir plusieurs cellules de détonation (garantissant ainsi une évaluation correcte de la taille de la structure cellulaire), que les simulations numériques 2D cylindriques doivent être effectuées jusqu'à une distance de propagation x = 35 m (soit 87.5 λ) avec un diamètre du canal variant entre $D_{tube} = 0.5$ m et $D_{tube} =$ 1.5 m.

6.2.1.3 Le maillage numérique

Pour combiner les contraintes sur les dimensions du domaine de calcul et la nécessité d'avoir une résolution numérique fine sur le front de détonation, on utilise pour ces simulations numériques un maillage adaptatif attaché au front de détonation. Ainsi, la longueur initiale du domaine de calcul (avant adaptation) est fixée à 1 m, discrétisée en un nombre de mailles $N_x = 400$, soit une résolution numérique $\Delta x = 2.5$ mm (soit environ 160 mailles dans la largeur de la cellule de détonation $\lambda = 40$ cm). Lors de l'adaptation du maillage, on utilise $N_{fine} = 200$ mailles au niveau du front de détonation et $N_{adaptation}$ = 200 mailles dans le reste du domaine de calcul (cf. paragraphe 4.6.2.2).

La même résolution est utilisée pour discrétiser le diamètre du canal : $\Delta y = 2.5$ mm, ce qui, pour le cas présent, résulte en un nombre de mailles compris entre $N_y = 200$ mailles (cas $D_{tube} = 0.5$ m) et $N_y = 600$ mailles (cas $D_{tube} = 1.5$ m).

Avec un tel maillage, on est ainsi assuré d'avoir une résolution numérique minimale $\Delta r = 2.5$ mm au niveau du front de détonation.

Le tableau 6.1 résume les conditions initiales et les paramètres numériques pertinents choisis pour ces simulations.

Conditions		Paramètres numériques		
Réf. exp.	Zhang et al. [76]	$L_{tube}^{1}(\mathrm{m})$	1	
p_0 (bar)	$1 \mathrm{atm}$	D_{tube} (m)	1.5	
$d_{p0} \ (\mu \mathrm{m})$	13.5	N_x	400	
$\sigma~({ m kg/m^3})$	500	N_y	600	
$Z_{Arr}~({ m m/s})$	100	Nadaptation	200	
$E_a \; (cal/mol)$	17000	N_{fine}	200	
$K (s/m^2)$	1.6×10^6	$\Delta r \ (\text{mm})$	2.5	
λ_{exp} (cm)	40			

TAB. 6.1 – Paramètres de simulation pour le mélange de référence air - aluminium (modèle à deux étapes)

6.2.1.4 Résultats et discussion

La figure 6.1 montre la structure cellulaire obtenue avec un maillage de 400 × 600 cellules numériques (contenant 200 mailles dans la zone d'adaptation) à une distance de propagation de plus de 20 m pour un diamètre de tube égal à 1.5 m. Il s'agit d'un enregistrement des traces des maxima de pression, permettant de reconstituer les traces expérimentales que l'on obtiendrait en utilisant des plaques recouvertes de noir de carbone. On obtient à la suite des différentes simulations effectuées des cellules de détonation de largeur $\lambda = 37.5$ cm, en accord avec les résultats expérimentaux de Zhang et al. [76] : $\lambda_{exp} = 40$ cm.

On observe une très bonne régularité de ces cellules. Le rapport $\frac{\lambda}{L}$ de leur largeur sur leur longueur est de l'ordre de 0.47, inférieur à celui généralement constaté pour les gaz. L'épaisseur des frontières et de l'ordre de 10 cm. Par ailleurs, le maillage utilisé $N_y = 600$ assure une bonne résolution des cellules de détonation, avec en moyenne 150 mailles dans la largeur de chaque cellule.

Pour s'assurer que la taille des cellules de détonation obtenues est pertinente à la distance de propagation x à laquelle elles sont observées, des simulations numériques 1D sont effectuées pour s'assurer que la détonation est stationnaire et autonome à cette distance. Pour le mélange air - aluminium étudié, on utilise la même résolution numérique $(L_{tube} = 1 \text{ m}, N_x = 400, N_{adaptation} = 200)$ que pour les simulations 2D. La figure 6.2 montre les profils de pression (Fig. 6.2-a) et de vitesse matérielle des gaz (Fig. 6.2-b) obtenus. Il apparaît alors que la détonation est pratiquement stationnaire et autonome à partir de 10 m de propagation environ. Par ailleurs, la comparaison des figures 6.1 et 6.2 montre que les maxima de pression associés aux points triples, obtenus par des simulations 2D, sont supérieurs aux maxima de pression calculés par le modèle 1D, ce qui est

¹valeur initiale à t = 0, avant adaptation



FIG. 6.1 – Structure cellulaire calculée dans un mélange air - aluminium riche ($\phi = 1.61$, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), avec des particules de diamètre $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$ - Modèle à deux étapes

la conséquence de l'existence des points triples et des ondes transverses caractéristiques de la structure multidimensionnelle, ce qui n'est pas pris en compte par le modèle 1D. Par ailleurs, les profils de vitesse matérielle des gaz moyennée dans la section du tube, correspondant à la simulation 2D de la figure 6.1, confirment le caractère stationnaire et autonome de la détonation.



FIG. 6.2 – Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x pour un mélange air - aluminium riche ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$ - modèle à deux étapes.

La comparaison avec les mélanges gazeux homogènes met en évidence des spécificités de la structure cellulaire des mélanges hétérogènes contenant des suspensions de particules solides :

- Les valeurs de λ pour les mélanges hétérogènes sont supérieures d'un à deux ordres de grandeur à celles des mélanges gazeux avec l'air à p = 1 atm.
- Les frontières des cellules de détonation sont beaucoup plus épaisses.

6.2.2 Mélange oxygène - aluminium

6.2.2.1 Conditions initiales

Pour le mélange oxygène - aluminium, les simulations numériques ont été réalisées dans les mêmes conditions initiales que celles des expériences d'Ingignoli et al. [81]. Les particules d'aluminium de type flocon ont un diamètre équivalent de 8.6 μ m. Le mélange est stœchiométrique, ce qui correspond à une concentration de particules $\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$. La pression initiale est de $p_0 = 1$ atm.

L'énergie d'activation reste fixée à $E_a = 17000$ cal/mol, les réactions chimiques ayant lieu entre l'aluminium et l'oxygène comme pour le mélange air - aluminium. Il est à noter que la loi de Price (équation (4.15)) assure automatiquement une combustion cinq fois plus rapide dans l'oxygène pur par rapport à l'air grâce à la présence de la fraction molaire d'oxydant dans la loi de combustion. Par ailleurs, les particules étant également de type flocon, la constante de combustion est la même que pour le mélange air - aluminium : $K = 1.6 \times 10^6$ s/m². Le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius de l'équation (4.11) est ajusté à $Z_{Arr} = 700$ m/s, soit sept fois plus rapide que pour le mélange air - aluminium (en théorie, la combustion devrait être cinq fois plus rapide).

On utilise une source ponctuelle d'énergie $E_i = 45 \times 10^5 \text{ J/m}^2$ pour initier la détonation en x = 0. Du fait que les mélanges oxygène - aluminium sont plus réactifs que les mélanges air - aluminium, le choix fait pour la valeur de E_i est au moins de 5 fois l'énergie critique de détonation.

6.2.2.2 Paramètres numériques

Les simulations sont effectuées jusqu'à une distance de propagation x = 7 m, et pour des diamètres de tube D_{tube} compris entre 7.5 et 30 cm. En utilisant un maillage adaptatif sur une longueur de 30 cm discrétisée en un nombre de mailles $N_x = 800$, on obtient une résolution numérique $\Delta x = 0.375$ mm. Les paramètres d'adaptation du maillage sont les suivants : $N_{fine} = 400$ et $N_{adaptation} = 400$.

Pour garder une résolution isotrope au niveau du front de détonation ($\Delta r = \Delta x = \Delta y$ = 0.375 mm), le diamètre du tube est discrétisé en $N_y = 200$ (pour $D_{tube} = 7.5$ cm) jusqu'à $N_y = 800$ (pour $D_{tube} = 30$ cm). Il est à noter que la résolution numérique est environ sept fois plus fine que pour le mélange air - aluminium, ce qui est cohérent avec la période d'induction sept fois plus rapide et la période de combustion cinq fois plus rapide.

Le tableau	6.2 rappelle les	s conditions	initiales	simulées	et les	paramètres	numériques
choisis.							

Conditions		Paramètres numériques		
Réf. exp.	Ingignoli et al. [81]	L_{tube} (m)	0.30	
p_0 (bar)	$1 \mathrm{atm}$	D_{tube} (m)	0.30	
$d_{p0}~(\mu { m m})$	8.6	N_x	800	
$\sigma~({ m kg/m^3})$	1500	N_y	800	
Z_{Arr} (s ⁻¹)	700	$N_{adaptation}$	400	
$E_a \; ({\rm cal/mol})$	17000	N_{fine}	400	
$K~({ m s/m^2})$	1.6×10^{6}	$\Delta r \ (\mathrm{mm})$	0.375	
λ_{exp} (cm)	5-10			

TAB. 6.2 – Paramètres de simulations pour le mélange de référence oxygène - aluminium (modèle à deux étapes)

6.2.2.3 Résultats et discussion

On obtient des cellules de détonation de largeur $\lambda = 7.5$ cm, en accord avec les résultats expérimentaux d'Ingignoli et al. [81] : $\lambda_{exp} = 5\text{-}10$ cm. La structure cellulaire obtenue dans le tube de diamètre $D_{tube} = 30$ cm est montrée sur la figure 6.3. Les cellules de détonation présentent une très bonne régularité et l'épaisseur des frontières est de l'ordre de 4 cm. Le rapport $\frac{\lambda}{L}$ est de l'ordre de 0.43, proche de celui obtenu pour le mélange air - aluminium.



FIG. 6.3 – Structure cellulaire calculée dans un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), avec des particules de diamètre $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$ - Modèle à deux étapes

Cette structure cellulaire présente qualitativement un aspect similaire à celles obtenues avec le mélange air - aluminium. Pour les mélanges oxygène - aluminium, Benkiewicz et Hayashi [92] ainsi que Khmel et Fedorov [94] ont également obtenu une structure cellulaire à partir de simulations numériques. Cependant, Benkiewicz et Hayashi [92]) ont obtenu leurs résultats à des distances de propagation beaucoup plus faibles, pour lesquelles il semble évident que le caractère stationnaire et autonome de la détonation n'était pas encore atteint (dans notre cas, le régime stationnaire et autonome est atteint partir de 3.5 m environ). En outre, les cellules de détonation qu'ils ont calculées ($\lambda = 6$ cm pour $d_{p0} = 2.5 \ \mu {
m m}$; $\sigma = 300 \ {
m g/m^3}$ et $\lambda = 1.1$ - 1.4 cm pour $d_{p0} = 1 \ \mu {
m m}$; $\sigma = 500 \ {
m g/m^3}$) correspondent à des conditions expérimentales très différentes de celles d'Ingignoli et al. [81] pour les mélanges oxygène - aluminium. Ce désaccord peut provenir des différences entre leurs modèles et la présente modélisation, notamment en ce qui concerne la cinétique de combustion de l'aluminium. En ce qui concerne les cellules de détonation obtenues par Khmel et Fedorov [94], on peut noter qu'elles sont très floues, ce qui peut être dû à une résolution numérique insuffisante, cette dernière n'étant pas mentionnée. De plus, la distance de propagation assez courte qu'ils ont considérées n'a peut-être pas permis non plus à la structure cellulaire de se développer assez distinctement.

La figure 6.4 montre les profils de pression (Fig. 6.4-a) et de vitesse matérielle des gaz (Fig. 6.4-b) obtenus avec une simulation numérique 1D utilisant le même maillage suivant la direction de propagation ($N_x = 800$ mailles, taille minimale des mailles $\Delta x = 0.375$ mm). Il apparaît alors que la détonation est stationnaire et autonome à partir de 3.5 m de propagation environ. Il est à noter que l'observation des profils de vitesse matérielle des gaz moyennée dans la section du tube, dans le cas de la simulation 2D de la figure 6.3, montre aussi que la détonation est stationnaire et autonome à la distance de propagation considérée.



FIG. 6.4 – Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$ - modèle à deux étapes

6.3 Modèle hybride

Comme il a été mentionné précédemment, le modèle hybride utilise la même énergie d'activation E_a pour la loi d'Arrhenius et la même constante empirique de combustion K dans la loi de Price car elles sont représentatives de phénomènes physiques clairement identifiés : l'énergie d'activation E_a est liée à la réaction chimique entre les molécules d'oxygène et les particules d'aluminium, K étant lié à la forme de ces dernières (sphériques, flocon, etc...). La constante Z_{hyb} de l'équation (4.18) est prise à la même valeur que dans le chapitre 4.7.2.

6.3.1 Mélange air - aluminium

6.3.1.1 Rappel des conditions, paramètres numériques

Les conditions sont les mêmes que pour le paragraphe 6.2.1, basées sur les expériences de Zhang et al. [76]. Le modèle hybride basculant progressivement du régime cinétique vers le régime diffusif, on utilise un maillage plus fin que pour le modèle à deux étapes, de manière à obtenir un nombre de mailles suffisant dans la zone de transition entre les deux régimes.

Par ailleurs, les simulations sont effectuées à une distance de propagation x de l'ordre de 35 m et dans un canal de diamètre D_{tube} allant jusqu'à 2 m.

Les conditions initiales ainsi que le jeu de paramètres numériques sont indiqués dans le tableau 6.3.

Condi	tions	Paramètres numériques		
Réf. exp.	Zhang et al. [76]	L_{tube} (m)	1	
p_0 (bar)	$1 \mathrm{atm}$	D_{tube} (m)	2	
$d_{p0}~(\mu{ m m})$	13.5	N_x	1000	
$\sigma~({ m kg/m^3})$	500	N_y	2000	
$Z_{hyb} \ ({\rm kg.m^{-2}.s^{-1}})$	7.5×10^4	Nadaptation	500	
$E_a~{ m (cal/mol)}$	17000	N_{fine}	500	
$K~({ m s/m^2})$	1.6×10^6	$\Delta r \ (\mathrm{mm})$	1	
λ_{exp} (cm)	40			

TAB. 6.3 – Paramètres de simulation pour le mélange de référence air - aluminium (modèle hybride)

6.3.1.2 Résultats et discussion

La figure 6.5 montre la structure cellulaire obtenue dans un canal de diamètre D_{tube} = 2 m, avec un maillage de 1000 × 2000. La comparaison avec la figure 6.1 montre que le modèle hybride génère une structure cellulaire légèrement plus irrégulière qu'avec le modèle à deux étapes, et à des frontières de cellules légèrement plus floues.



FIG. 6.5 – Structure cellulaire calculée dans un mélange air - aluminium riche ($\phi = 1.61$, $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), avec des particules de diamètre $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$, modèle hybride

Cet effet est sans doute dû à la définition de la zone d'induction par une loi d'Arrhenius. En effet, pour le modèle à deux étapes, la loi d'Arrhenius utilisée lors de la phase d'induction (équation (4.11)) n'intervient que dans l'équation de bilan de l'énergie des particules (équation (4.8)). En revanche, pour le modèle hybride, la loi d'Arrhenius du régime cinétique de combustion (équation (4.18)) intervient dans les équations de bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie pour les deux phases (équations (4.1)-(4.3) et (4.6)-(4.8)) ainsi que dans l'équation d'espèces pour les gaz (équation (4.5)), à travers le terme source J défini par l'équation (4.17). On a ainsi une plus grande dépendance du modèle hybride vis-à-vis de la loi d'Arrhenius lors de la phase d'induction comparativement au modèle à deux étapes. Par ailleurs, le rapport $\frac{\lambda}{L}$ varie environ de 0.43 à 0.5, soit, en moyenne, à une valeur proche de celle obtenue pour le modèle à deux étapes.

La figure 6.6 montre les profils de pression (Fig. 6.6-a) et de vitesse matérielle des gaz (Fig. 6.6-b) obtenus avec une simulation numérique 1D utilisant le même maillage suivant la direction de propagation ($N_x = 1000$, taille minimale des mailles $\Delta x = 1$ mm). Ces profils confirment que la détonation est pratiquement stationnaire et autonome à partir de 12 m de propagation environ (les simulations 1D et 2D utilisant la même énergie d'amorçage). De même que pour le paragraphe 6.2, les profils moyennés de u_x confirment le caractère stationnaire et autonome de la détonation.





FIG. 6.6 – Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x pour un mélange air - aluminium riche ($\phi = 1.61$, $\sigma = 500$ g/m³), diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$ modèle hybride.

La figure 6.7 permet d'examiner l'influence des modes cinétique et diffusif sur le transfert de masse à l'instant t = 10 ms (soit à une distance de propagation $x \simeq 18$ m). Le repère est lié au choc incident (X = D.t - x = 0 sur le choc). Juste derrière le front de détonation, le taux de combustion lié au régime diffusif est de l'ordre de 10^5 kg/m³/s, alors que le régime cinétique croît d'une valeur très faible jusqu'à 10^4 kg/m³/s environ, c'est-à-dire inférieure au minimum d'un ordre de grandeur par rapport au régime diffusif. D'après l'équation (4.17), le transfert de masse total est contrôlé par le transfert de masse lié au régime le plus lent, ici le régime cinétique. Sur la figure 6.7, on constate que jusqu'à une distance de 3.5 cm, les courbes de transfert de masse du régime cinétique J_{cin} et du transfert total J sont superposées, ce qui justifie les hypothèses faites pour le modèle à deux étapes sur la prédominance d'un régime cinétique lors de la période d'induction.

A partir d'une distance de 6 cm environ derrière le front, le taux de combustion est complètement contrôlé par le régime diffusif. En effet, le régime cinétique devient supérieur au régime diffusif, avec des valeurs de l'ordre de $10^5 - 10^6 \text{ kg/m}^3/\text{s}$, le régime diffusif décroissant quant à lui de 10^4 à $10^2 \text{ kg/m}^3/\text{s}$ (à une distance de 20 cm environ). Ainsi, conformément à l'équation (4.17), le régime diffusif J_{diff} contrôle le transfert de masse total J. Les deux courbes correspondantes sont superposées sur la figure 6.7, ce qui est cohérent. De ce fait, l'hypothèse de prédominance du régime diffusif après l'inflammation des particules faites pour le modèle à deux étapes est bien valide.

Dans la zone de transition entre les deux régimes (de X = Dt - x = 4 cm à X = Dt - x= 6 cm environ), on remarque qu'à partir de 4 cm, le rayon des particules commence à décroître, pour une température de la phase solide de l'ordre de 1000 K. A une distance de 5 cm environ, on a $J_{diff} \simeq J_{cin}$ et la température des particules est de l'ordre de 1100 K. Enfin, à une distance de 6 cm, lorsque le régime de combustion se superpose au régime diffusif, la température des particules est de l'ordre de 1300-1400 K, avec un gradient local maximal. De ce fait, lors de la transition du régime cinétique vers le régime diffusif, on a une température de particules de l'ordre de 1000-1400 K environ, ce qui est cohérent avec les valeurs de températures d'inflammation que l'on peut trouver dans la littérature [40] et avec les hypothèses du modèle à deux étapes.



FIG. 6.7 – Régimes de combustion dans le mélange air - aluminium riche ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$, modèle hybride

6.3.2 Mélange oxygène - aluminium

6.3.2.1 Rappel des conditions, paramètres numériques

On se place dans les conditions initiales des expériences d'Ingignoli et al. [81] décrites au paragraphe 6.2.2 pour le mélange oxygène - aluminium. Les simulations sont réalisées jusqu'à une distance de propagation x = 11 m et dans un tube de diamètre D_{tube} allant jusqu'à 30 cm.

Le tableau 6.4 rappelle les conditions initiales simulées et les paramètres numériques choisis.

Cond	litions	Paramètres numériques		
Réf. exp.	Ingignoli et al. [81]	L_{tube} (m)	0.30	
p_0 (bar)	$1 \mathrm{atm}$	D_{tube} (m)	0.30	
$d_{p0} \ (\mu \mathrm{m})$	8.6	N_x	800	
$\sigma~({ m kg/m^3})$	1500	N_y	800	
Z_{hyb} (kg.m ⁻² .s ⁻¹)	3×10^6	Nadaptation	400	
$E_a \; ({ m cal/mol})$	17000	N_{fine}	400	
$K ({ m s/m^2})$	1.6×10^{6}	$\Delta r \ (\mathrm{mm})$	0.375	
λ_{exp} (cm)	5-10			

TAB. 6.4 – Rappels des paramètres de simulations pour le mélange de référence oxygène - aluminium (modèle hybride)

6.3.2.2 Résultats et discussion

La figure 6.8 montre la structure cellulaire obtenue dans un canal de 30 cm avec un maillage adaptatif de 800 × 800. La largeur λ des cellules de détonation est approximativement égale à 10 cm, ce qui est en accord avec le cas expérimental d'Ingignoli et al. [81]. On remarque d'une part que la structure cellulaire obtenue présente une bonne régularité, et d'autre part, que les frontières sont épaisses et floues, ce qui est probablement dû à la loi d'Arrhenius de la période d'induction, qui joue un rôle plus important que dans le modèle à deux étapes. Par ailleurs, le rapport $\frac{\lambda}{L}$ est environ de 0.45, au lieu d'environ 0.43 pour le modèle à deux étapes.



FIG. 6.8 – Structure cellulaire calculée dans un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$, modèle hybride

La figure 6.9 montre les profils de pression (Fig. 6.9-a) et de vitesse matérielle des gaz (Fig. 6.9-b) obtenus avec une simulation numérique 1D utilisant le même maillage suivant la direction de propagation ($N_x = 800$, taille minimale des mailles $\Delta x = 0.375$ mm). Ils confirment que la détonation est pratiquement stationnaire et autonome à partir de 5 m de propagation environ. De même que pour le paragraphe 6.2, les profils moyennés de u_x confirment le caractère stationnaire et autonome de la détonation.



FIG. 6.9 – Profils (a) de pression p et (b) de vitesse matérielle des gaz u_x , pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules 8.6 μ m - modèle hybride.

De même que pour le mélange air - aluminium, on peut vérifier que les régimes cinétique et diffusif prédominent respectivement durant la période d'induction et la période de combustion. Leur influence sur les échanges de masse entre les phases solide et gazeuse est représentée sur la figure 6.10, à l'instant t = 6 ms après l'initiation (ce qui correspond à une distance de propagation x de l'ordre de 10 m). Juste derrière le front de détonation, le terme d'échange lié au régime diffusif prend une valeur J_{diff} de l'ordre de 5 × 10⁵ kg/m³/s, alors que le terme lié au régime cinétique J_{cin} croît, sur une distance de 1 cm, d'une valeur nulle jusqu'à une valeur de même ordre (10⁵ kg/m³/s). Il en résulte d'après l'équation (4.17) que le terme global d'échange de masse J est sensiblement égal au régime cinétique J_{cin} pendant la période d'induction (de X = Dt - x = 0 à X = Dt - x = 1 cm environ).

Après inflammation, lorsque le rayon des particules commence à décroître, le terme d'échange lié au régime cinétique J_{cin} continue de croître pour atteindre une valeur de l'ordre de 10⁸ kg/m³/s alors que le terme lié au régime diffusif J_{diff} diminue jusqu'à une valeur de 10² kg/m³/s environ à une distance de 20 cm derrière le front de détonation. De ce fait, conformément à l'équation (4.17), le terme d'échange global J est sensiblement égal au terme d'échange lié au régime diffusif J_{diff} dans la zone de combustion.

Ainsi, la période d'induction est bien gouvernée par le régime cinétique, alors que

la période de combustion, après inflammation des particules, est contrôlée par le régime diffusif, ce qui confirme la cohérence du modèle pour le mélange oxygène - aluminium.



FIG. 6.10 – Régimes de combustion dans un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$), diamètre des particules $d_{p0} = 8.6 \ \mu\text{m}$, modèle hybride

6.4 Spécificité des détonations hétérogènes gaz / particules solides

Les structures cellulaires obtenues aux paragraphes 6.2 et 6.3 mettent en évidence des frontières entre les différentes cellules, soit épaisses, soit "floues", avec des niveaux de pression relativement élevés. Ces observations diffèrent de celles sur les cellules des détonations des mélanges gazeux homogènes, d'où la nécessité d'examiner en détail la structure du front et des cellules de détonation.

La figure 6.11 montre les profils de pression p (Fig. 6.11-a), de température des gaz T_g (Fig. 6.11-b) et de concentration de particules σ (Fig. 6.11-c) pour le mélange air aluminium du paragraphe 6.2.1, à l'instant t = 10.8 ms après initiation, dans un tube de diamètre $D_{tube} = 75$ cm. Il convient de noter qu'à cet instant, la distance de propagation est supérieure à 19 m, ce qui assure le caractère stationnaire et autonome de la détonation, les profils de vitesses matérielles derrière le point CJ étant autosemblables (cf. figure 6.2). On observe clairement les points triples, zones de haute pression, derrière le front incident (Fig. 6.11-a). On remarque que les zones de concentration maximale de particules sont localisées dans ces zones à haute pression autour des points triples. En revanche, les profils de température des gaz montrent que ces zones correspondent au minimum de température derrière le front de détonation, alors que les zones à basse pression derrière le front. Ceci indique que les réactions chimiques entre les gaz et les particules ne débutent pas dans les zones à haute pression autour des points triples, mais dans les zones à basse pression, ce qui constitue une différence majeure avec les détonations en milieu homogène gazeux.



(c) concentration de particules $\log(\sigma)$

FIG. 6.11 – Profils (a) de pression p, (b) température des gaz T et (c) concentration de particules σ pour un mélange air - aluminium (diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu \text{m}$, concentration de particules $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), à t = 10.8 ms après l'initiation

La figure 6.12, où la concentration en particules et le rayon des particules sont représentés ensemble, confirme cette observation. L'inflammation des particules se produit en premier dans les zones à basse pression (et à faible concentration de particules). Cette différence avec le cas homogène gazeux peut s'expliquer par le fait que dans le cas de détonations hétérogènes gaz / particules solides, l'inflammation des particules est contrôlée par le taux d'échange global de chaleur entre les gaz et les particules. En effet, avant l'inflammation de ces dernières, la relaxation des vitesse u_p et température T_p de la phase solide aux valeurs de celles des gaz résulte de la compétition entre l'énergie absorbée par le phénomène de relaxation et l'énergie libérée par les réactions des particules à travers le terme $\frac{dQ_p}{dt}$ (équation (4.11)). Dans les zones à haute pression liées aux points triples, la concentration en particules est trop élevée pour permettre leur inflammation rapide alors que dans les zones à basse pression, la concentration de particules est suffisamment faible pour que leur inflammation puisse avoir lieu rapidement $(\frac{dQ_p}{dt}$ étant suffisamment grand pour s'opposer à l'énergie absorbée pour augmenter u_p et T_p), assurant un couplage fort des réactions chimiques avec le front. De plus, il est possible que dans les zones à haute concentration en particules, le mélange soit localement trop riche pour se situer dans la plage d'inflammabilité du mélange air - aluminium. En effet, il apparaît clairement d'après la figure 6.12 que la concentration en particules n'est pas uniforme derrière le front : elle est déterminée par la structure de l'écoulement. L'existence de ces gradients de concentration en particules peut être directement imputée aux différences de vitesse entre la phase gazeuse et la phase solide : en particulier, les ondes transverses jouent un rôle déterminant pour convecter les particules solides vers les zones proches des points triples.



concentration (axe vertical) et rayon (échelle de couleur) des particules

FIG. 6.12 – Profils de concentration en particules et de rayon des particules pour un mélange air - aluminium (diamètre des particules $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$, concentration en particules $\sigma = 500 \text{ g/m}^3$), à t = 10.8 ms après l'initiation Il semblerait dans les simulations numériques de Benkiewicz et Hayashi [92], pour des mélanges oxygène - particules d'aluminium, que l'on observe aussi ce comportement des particules d'aluminium derrière une onde de détonation multidimensionnelle, mais les auteurs ne semblent pas y avoir porté attention. Ces constatations conduisent à penser que cette particularité des détonations hétérogènes gaz / particules solides joue un rôle clé sur la structure cellulaire de détonation dans ce type de milieu biphasique.

6.5 Influence du diamètre des particules sur la taille des cellules de détonation

Compte tenu du rôle que jouent les particules sur la structure de l'onde de détonation, il convient d'examiner l'influence de leur diamètre sur la structure cellulaire. En effet, le diamètre des particules intervient dans les phases d'induction et de combustion à travers les équations (4.11), (4.14) et (4.15) qui déterminent la libération d'énergie derrière le front.

De nouvelles simulations 2D ont été effectuées pour des mélanges air - aluminium et oxygène - aluminium en faisant varier le diamètre des particules solides. Du fait de la plus faible détonabilité de l'aluminium dans une atmosphère d'air que dans une atmosphère composée d'oxygène pur, le diamètre maximal des particules dans le cas de l'air est de 13.5 μ m (cas de référence), afin de ne pas utiliser des énergies d'initiation déraisonnables. Ainsi, dans cette série de calculs, le diamètre des particules varie entre :

- 2.7 et 13.5 $\mu {\rm m}$ pour les mélanges air aluminium
- 4 et 24 μ m pour les mélanges oxygène aluminium

Pour garantir des résultats pertinents sur les structures cellulaires obtenues, on utilise pour chaque simulation un maillage adapté tel que chaque cellule de détonation contienne un nombre suffisant de mailles dans sa largeur et dans la zone d'induction. De plus, on fait varier le diamètre du tube pour qu'il contienne un nombre suffisant de cellules de détonation. De ce fait, on utilise une résolution numérique et des domaines de calcul variant de $\Delta r = 0.1$ mm et $D_{tube} = 0.15$ m pour certains mélanges oxygène - aluminium, à $\Delta r =$ 2.5 mm et $D_{tube} = 1.5$ m pour certains mélanges air - aluminium, ce qui permet d'avoir en moyenne environ 150 mailles dans la largeur des cellules de détonation et au minimum 10 mailles dans la zone d'induction. Ces précautions assurent donc que les cellules de détonation ainsi obtenues ne dépendent ni de la résolution numérique, ni de la configuration géométrique de la simulation. Seuls jouent les processus physiques.

Les résultats sont rassemblés sur la figure 6.13. On constate que pour les mélanges air - aluminium et oxygène - aluminium, la taille des cellules de détonation est proportionnelle au diamètre des particules à la puissance 1.4, avec un cœfficient de corrélation supérieur à 0.99.

$$\lambda \sim d_{p0}^{1.4} \tag{6.1}$$

Ce résultat s'écarte nettement d'une dépendance en d_{p0}^2 que l'on pourrait déduire à priori du modèle de combustion diffusif.



FIG. 6.13 – Evolution de la taille des cellules de détonation pour des mélanges air aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$) et oxygène - aluminium ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$) en fonction du diamètre des particules d'aluminium

De leur côté, Khmel et al. [94] ont proposé une dépendance de la taille de la cellule de détonation en $d_{p0}^{1.6}$ dans des mélanges oxygène - aluminium. Plus récemment, Zhang et al. [77] ont proposé une relation semi-empirique pour des mélanges air - aluminium faisant intervenir de plus la pression initiale : $\lambda \sim \frac{d_{p0}^n}{p_0^m}$, avec n < 2 et m > 1. Cette dépendance est suggérée par des résultats expérimentaux récents de Zhang et al. [77]. En tout état de cause, les différentes valeurs de l'exposant de la loi de dépendance du diamètre des particules ne sont pas très éloignées les unes des autres. Les écarts constatés peuvent être attribués aux différences entre les modèles cinétiques choisis pour la combustion des particules d'aluminium.

En première estimation, on s'attendait à une dépendance en d_{p0}^2 due à la longueur importante de la zone de combustion. La dépendance plus faible obtenue en $d_{p0}^{1.4}$ laisse donc apparaître une plus grande complexité, d'où l'importance d'étudier plus en détails le comportement et l'évolution des paramètres thermomécaniques de l'onde de détonation, et de dégager plus clairement l'influence des périodes d'induction et de combustion sur la structure cellulaire.

6.6 Comportement du front de détonation dans les mélanges hétérogènes gaz / particules d'aluminium

Cette partie est consacrée à l'analyse des cartographies des paramètres mécaniques et thermodynamiques d'une onde de détonation hétérogène issue d'un mélange air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$) se propageant dans un canal de 75 cm de diamètre, aux instants t = 12.41 ms (figure 6.14), t = 12.51 ms (figure 6.15), t= 12.66 ms (figure 6.16), t = 12.76 ms (figure 6.17) et t = 12.86 ms (figure 6.18) après l'amorçage. La distance de propagation est supérieure à 20 m, ce qui assure le caractère stationnaire et autonome de la détonation. Le choix des instants d'observation permet d'étudier la structure de l'onde dans des configurations bien précises le long d'une cellule de détonation :

- t = 12.41 ms : collision de points triples, début de formation de deux cellules dans la largeur du canal
- -
 $t=12.51~{\rm ms}$: les points triples évoluent sans collision dans la première moitié des cellules
- -t = 12.66 ms : nouvelle collision des points triples, arrivée à la moitié des cellules
- -
 $t=12.76~{\rm ms}$: les points triples évoluent à nouveau sans collision dans la deuxième moitié des cellules
- $t=12.86~{\rm ms}$: nouvelle collision des points triples, qui marquent la fin de l'établissement des cellules et le démarrage du processus de formation de deux nouvelles cellules



FIG. 6.14 – Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$), à t = 12.41 ms après l'initiation.



FIG. 6.15 – Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$), à t = 12.51 ms après l'initiation.



FIG. 6.16 – Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$), à t = 12.66 ms après l'initiation.



FIG. 6.17 – Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à t = 12.76 ms après l'initiation.



FIG. 6.18 – Profils des paramètres thermomécaniques d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$), à t = 12.86 ms après l'initiation.

6.6.1 La collision des points triples

6.6.1.1 Les zones à haute pression

Les zones de collision de points triples correspondent aux zones de plus haute pression lors de la propagation de la détonation. Sur la figure 6.14-a, on les localise à x = 22.10 m et y = 0.25 m et 0.60 m environ. Conformément à l'analyse de la figure 6.11, il apparaît à nouveau que ces zones de collision correspondent aux taux de dégagement d'énergie par combustion faibles, la température des gaz (figure 6.14-c) et des particules (figure 6.14-d) étant peu élevées (de l'ordre de 750 K pour les particules et 2000 K pour les gaz). Les particules étant à une température inférieure aux valeurs classiques des températures d'inflammation de l'aluminium (1350 K comme ordre de grandeur), leur combustion n'a pas encore débuté, comme le démontre le profil de leur rayon (figure 6.14-b). Comme cela a été évoqué précédemment, les particules sont en trop grande concentration (figure 6.14-f) pour atteindre la température d'auto-inflammation : les ondes transverses les convectent dans les zones de points triples dans lesquelles la compétition entre l'énergie libérée par la combustion des particules voisines est insuffisante pour les chauffer à leur température seuil de combustion. D'autre part, les zones de collision de points triples correspondent aux zones de plus haute masse volumique des gaz (figure 6.14-e), ce qui signifie que l'effet de haute pression joue davantage que l'effet de "plus basse" température, ce qui témoigne de la prédominance de l'énergie mécanique engendrée par les collisions de points triples devant les effets thermiques dans cette même zone.

Par ailleurs, les vitesses matérielles longitudinales des gaz et des particules, données respectivement par les figures 6.14-g et 6.14-h, présentent un maximum au niveau des zones de collision des points triples (plus une zone au niveau de la paroi inférieure du tube, certainement due à une réflexion antérieure qui se propage au niveau du front de détonation). Ces zones à hautes vitesses longitudinales correspondent à la conversion de l'énergie mécanique issue de la collision des points triples en énergie cinétique, la conversion en énergie thermique étant limitée par la montée en température plus lente des particules. On observe de même des vitesses transversales élevées autour des points triples pour les gaz et les particules (respectivement, figures 6.14-i et 6.14-j), d'une part par l'effet de la collision des points triples qui convertit l'énergie mécanique en énergie cinétique, d'autre part par l'action directe des ondes transverses qui convectent les gaz et particules vers les zones haute pression. Cependant, les gradients de vitesses tendent à converger vers les points triples. Il se peut que l'instant choisi t = 12.41 ms corresponde au début de la collision des points triples. De ce fait, la convection de la matière et des énergies vers ces zones n'est pas encore totalement terminée.

6.6.1.2 Le front de détonation

Les cartographies de pression, températures et densités permettent d'observer la forme et l'épaisseur du front. D'une part, ce dernier est plissé et présente un rayon de courbure plus faible au niveau des points triples. De plus, cette zone de plissement au niveau des points triples est en retrait par rapport aux autres zones du front. D'autre part, les cartographies de pression et de rayon des particules mettent en évidence une longueur d'induction plus faible en dehors des points triples. Un traitement numérique par filtrage des couleurs permet de localiser le front de détonation à partir de la cartographie de pression et le front d'induction à partir de celle du rayon des particules. Les figures 6.19-a et 6.19-b montrent respectivement le front de détonation et le front d'induction après traitement numérique (filtrage des couleurs et retouche). En utilisant un algorithme sur les couleurs conservant le "minimum" des nuances de gris, on obtient par superposition des deux figures la zone d'induction 2D (figure 6.19-c). On en déduit ainsi que la longueur d'induction est de l'ordre de 2-3 cm au niveau des zones de plus basse pression alors qu'elle atteint 7-8 cm au niveau des points triples.



FIG. 6.19 – Visualisation de la zone d'induction 2D (c) par filtrage des couleurs pour localiser (a) le front de détonation et (b) le front d'induction d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à t = 12.41 ms après l'initiation.

En comparaison avec le cas des mélanges gazeux homogènes, les détonations air - particules d'aluminium présentent un front d'induction "inversé" dans la mesure où ses plus faibles dimensions longitudinales se situent dans les zones à basse pression. Le plissement du front de détonation s'explique par le dégagement d'énergie inhomogène en aval. Dans les zones de collision des points triples, seul le travail issu de l'onde de pression générée par la collision des ondes contribue à renforcer le front, les réactions chimiques n'étant pas amorcées. Dans les zones à basse pression, l'énergie chimique issue de la combustion des particules est plus élevée sur une grande zone derrière le front de détonation. On distingue sur le profil de température des gaz deux grandes zones à plus de 4000 K, en forme de demi-ellipses, qui contribuent à renforcer le front. Ce processus est d'autant plus intense que la libération d'énergie a lieu sur une zone proche du front, comme en témoigne la faible longueur d'induction sur la figure 6.19-c. Cette analyse révèle donc la compétition entre les taux de libération des énergies mécaniques et chimiques pour courber le front de détonation. Au niveau des points triples, les particules jouent le rôle de puits d'énergie thermique lors de la période d'induction, ce qui conduit à son allongement. En dehors des points triples où la pression est moins élevée, la plus faible concentration des particules permet de libérer plus rapidement l'énergie chimique par combustion et de raccourcir la période d'induction, ce qui permet d'obtenir un meilleur couplage avec le front. Cet aspect est caractéristique des détonations hétérogènes.

Les mêmes conclusions peuvent être tirées de l'examen des cartographies aux autres instants de collisions (t = 12.66 ms et 12.86 ms) au cours du développement des deux cellules de détonation.

6.6.2 Les points triples le long des ondes transverses

6.6.2.1 Les grandeurs thermomécaniques

Aux instants t = 12.51 ms (Fig. 6.15) et t = 12.76 ms (Fig. 6.17), les points triples évoluent le long des ondes transverses générant les cellules de détonation correspondantes. D'après la figure 6.17-a, les très hautes pressions issues de la collision des points triples à l'instant t = 12.41 ms (Fig. 6.14) tendent à se répartir sur le front de détonation le long des ondes incidentes et des ondes de Mach.

Derrière le front de détonation, à l'instant t = 12.76 ms (Fig. 6.17), la température des gaz est maximale autour des points situés à x = 22.7 m et y = 0, 0.4 et 0.75 m environ. Ces trois zones chaudes correspondent à l'inflammation retardée des particules présentes dans les zones de collision des points triples (x = 22.5 m environ) de l'instant t = 12.66ms (figure 6.16-a). En effet, les localisations radiales sont les mêmes pour les deux instants et l'écart de position longitudinale (environ 0.20 m) entre les deux zones est légèrement supérieur à la distance $D_{CJ} \times 10$ ms = 0.17 m, ce qui est cohérent avec l'existence de vitesses matérielles supérieures à D_{CJ} dans les zones de collisions de points triples. Par ailleurs, la température des particules (figure 6.17-d) et leur concentration (figure 6.17-f) sont globalement uniformes derrière le front de détonation.

On constate que les vitesses des gaz et des particules, aussi bien radiales que longitudinales (figures 6.17-g à 6.17-j), sont maximales au niveau des zones où la collision des points triples a eu lieu précédemment, à t = 12.66 ms (au déplacement longitudinal près). Ces maxima d'énergie cinétique sont dus à la libération d'énergie chimique retardée des particules lors de la collision des points triples, qui contribue à renforcer le front localement.

Ainsi, lors de la propagation des points triples entre deux collisions, les pressions tendent à s'équilibrer sur le front. Cependant, les réactions chimiques ont lieu au niveau des zones où les collisions des points triples s'étaient produites à l'instant précédent, les particules étant plus longues à atteindre leur température d'inflammation du fait de leur forte concentration à cet instant-là. En conséquence, les vitesses matérielles locales augmentent, ce qui tend à modifier la forme du front de détonation. Il est à noter que les mêmes observations peuvent être tirées de l'analyse de la figure 6.15.

6.6.2.2 Le front de détonation

Contrairement aux instants de collision des points triples, la courbure du front de détonation est inversée aux instants t = 12.51 ms (Fig. 6.15) et t = 12.76 ms (Fig. 6.17) : le front est en avance lorsque sa coordonnée radiale se situe au niveau des précédentes collisions de points triples. Ce phénomène tient simplement au fait que les zones de réactions chimiques sont inversées également : lors de la collision des points triples, les réactions chimiques ont lieu dans les zones de basse pression qui se déplacent alors plus vite, les réactions n'étant pas encore amorcées dans les zones à haute pression. Mais lorsque les particules atteignent leur température d'inflammation quelques instants plus tard, elles tendent à réaccélérer le front localement, ce qui va dans un premier temps ré-équilibrer la courbure, puis l'inverser au fur et à mesure que le front se renforce à ce niveau. Lors de la nouvelle collision de points triples, les réactions chimiques auront à nouveau lieu dans les zones à basse pression, ce qui va de nouveau inverser la courbure du front. On explique ainsi les oscillations de courbures inversées par rapport aux détonations de mélanges homogènes gazeux.

La figure 6.20 montre la zone d'induction 2D à l'instant t = 12.76 ms, après filtrage des couleurs et retouche de l'image par la même méthode que pour l'image (6.19). La longueur de la zone d'induction 2D tend à s'équilibrer au cours de la propagation du front entre les collisions de points triples, les concentrations de particules, températures et pression s'équilibrant également.



FIG. 6.20 – Visualisation de la zone d'induction 2D (c) par filtrage des couleurs pour localiser (a) le front de détonation et (b) le front d'induction d'une détonation hétérogène air - particules d'aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), à t = 12.76 ms après l'initiation.

6.7 Influence du diamètre des particules d'aluminium sur les longueurs d'induction et de combustion

La relation (6.1) indique que la taille des cellules de détonation des mélanges air - particules d'aluminium et oxygène - particules d'aluminium ne dépend pas uniquement de la longueur de la zone de combustion comme on aurait pu le penser en première approximation, mais de manière plus complexe des deux périodes d'induction et de combustion.

Il convient donc d'estimer de manière plus précise les longueurs d'induction et de combustion de la réaction des particules d'aluminium en atmosphère composée d'air ou d'oxygène. Pour ce faire, on réalise des simulations numériques 1D avec le modèle à deux étapes, pour les deux mélanges, en utilisant les mêmes diamètres de particules que ceux qui ont été utilisés pour établir la corrélation (6.1) de la figure 6.13. Comme avant, on considère pour ces simulations des détonations idéales, c'est-à-dire sans pertes de chaleur pariétales. Les définitions des longueurs d'induction et de combustion sont schématisées sur la figure 6.21, à partir des profils de pression, de température et rayon des particules.



FIG. 6.21 – Définition des longueurs d'induction et de combustion pour la combustion des particules d'aluminium derrière un front de détonation dans l'air et l'oxygène

On définit la longueur d'induction L_i comme étant la longueur entre la position du front incident et le point d'inflammation des particules (Fig. 6.21-b). La position du front incident est localisée comme étant le point pour lequel le gradient de pression est maximal dans le front. Le point d'inflammation est défini comme étant le point pour lequel le gradient de température des particules est maximal.

La longueur de combustion L_c est définie (Fig. 6.21-c) comme étant la longueur entre le point pour lequel le rayon des particules commence à décroître et le point pour lequel leur rayon devient égal à 10 % de sa valeur initiale : en effet, à ce point, la masse des particules consommée est supérieure à 99.9 %.

6.7.1 Influence du diamètre des particules sur les longueurs chimiques caractéristiques

La figure 6.22 montre les variations des longueurs d'induction (Fig. 6.22-a) et de combustion (Fig. 6.22-b) en fonction du diamètre des particules pour les mélanges air - particules d'aluminium et oxygène - particules d'aluminium. La longueur d'induction L_i croît quasi-linéairement avec le diamètre des particules pour les deux mélanges, ce qui est en accord avec la définition de la phase d'induction du modèle à deux étapes (cf. équation (4.11)). La longueur de combustion L_c est proportionnelle à d_{p0}^n , avec n proche de 1.8, et peut être comparée avec la définition de la phase de combustion donnée par les équations (4.14) et (4.15), faisant intervenir d_{p0}^2 .

$$L_i \sim d_{p0} \tag{6.2}$$

$$L_c \sim d_{p0}^{1.8}$$
 (6.3)



FIG. 6.22 – Longueur d'induction (a) et de combustion (b) de la réaction chimique de particules d'aluminium pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium en fonction du diamètre des particules

6.7.2 Comparaison des longueurs chimiques

La figure 6.23 représente le rapport des longueurs d'induction et de combustion $\frac{L_i}{L_c}$ en fonction du diamètre des particules d'aluminium, pour les deux mélanges. On observe que pour les diamètres de particules considérés, la longueur d'induction est nettement inférieure à la longueur de combustion. Le rapport $\frac{L_i}{L_c}$ varie en effet de 12 % à 26 % pour le mélange air - particules d'aluminium et de 33 % à 44 % pour le mélange oxygène particules d'aluminium.



FIG. 6.23 – Rapport de la longueur d'induction sur la longueur de combustion en fonction du diamètre des particules pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium

6.7.3 Lien entre les longueurs chimiques et la structure cellulaire

La comparaison des résultats des simulations numériques 1D et 2D semble indiquer que la taille des cellules de détonation dépend des deux phases d'induction et de combustion. En effet, la longueur d'induction est proportionnelle au diamètre des particules (relation (6.2)) et la longueur de combustion est proportionnelle au diamètre des particules à la puissance 1.8 (relation (6.3)), alors que la largeur des cellules de détonation varie proportionnellement au diamètre des particules à la puissance 1.4 (relation (6.1)). Cette dépendance de la taille de la structure cellulaire en fonction des deux régimes (cinétique et diffusif) est en accord avec les conclusions de Zhang et al. [77] pour les mélanges air - particules d'aluminium. L'examen de la figure 6.24, représentant les rapports de la largeur des cellules normalisées par les longueurs d'induction $(\frac{\lambda}{L_i})$ et de combustion $(\frac{\lambda}{L_c})$, en fonction du diamètre des particules, semble indiquer que ces deux rapports peuvent être approximés par une fonction linéaire et qu'ils sont quasiment indépendants du diamètre
des particules. En outre, le rapport $\frac{\lambda}{L_i}$ semble peu dépendant du mélange gazeux (mais la dispersion reste néanmoins assez forte). Ces observations laissent penser que le lien entre les longueurs chimiques et la structure cellulaire ne dépend directement que des longueurs chimiques.



FIG. 6.24 – Rapport de la largeur λ des cellules de détonation sur la longueur d'induction $\left(\frac{\lambda}{L_i}\right)$ et de combustion $\left(\frac{\lambda}{L_c}\right)$ en fonction du diamètre des particules pour le mélange riche $(\phi = 1.61)$ air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium

6.8 Influence des longueurs chimiques caractéristiques sur la structure de la détonation

6.8.1 Simulations numériques complémentaires

Les observations précédentes conduisent à étudier directement l'influence des zones d'induction et de combustion sur la taille des cellules de détonation, en faisant varier les paramètres de la cinétique chimique de l'aluminium. Comme il a été précisé précédemment, le seul paramètre du schéma cinétique de combustion de l'aluminium (équations (4.11), (4.14) et (4.15)) faisant l'objet d'ajustement pour le modèle à deux étapes est la facteur préexponentiel Z_{Arr} de la loi d'Arrhenius de la période d'induction. En effet, la constante empirique de combustion K (équation (4.11)) ainsi que l'énergie d'activation E_a ont été choisies en accord avec les données physiques de la littérature (cf. chapitre 4.7.2). C'est pourquoi l'étude numérique qui suit ne porte que sur le facteur préexponentiel Z_{Arr} de l'équation (4.11). Les diamètres de particules utilisés sont les mêmes que ceux de la figure 6.13. Les simulations numériques 1D permettent ainsi d'obtenir les valeurs des longueurs chimiques caractéristiques en faisant varier le facteur préexponentiel Z_{Arr} sur une plage incluant sa valeur nominale définie précédemment dans le tableau 6.1, pour le mélange air - particules d'aluminium et dans le tableau 6.2 pour le mélange oxygène - particules d'aluminium :

- Z_{Arr} varie de 25 $\rm s^{-1}$ à 1500 $\rm s^{-1}$ pour les mélanges air aluminium
- Z_{Arr} varie de 100 s⁻¹ à 1500 s⁻¹ pour les mélanges oxygène aluminium

Les calculs effectués indiquent que pour chaque valeur de Z_{Arr} , on observe une relation linéaire entre la longueur d'induction et le diamètre des particules, ainsi qu'une dépendance en d_{p0}^n de la longueur de la zone de combustion avec le diamètre des particules, n restant proche de 2, en conformité avec les équations (6.2) et (6.3). Chaque longueur caractéristique est déterminée à partir de la moyenne de nombreux relevés (en général, plus de 200) pris à différents instants de propagation à partir de l'instant pour lequel la détonation est stationnaire et autonome. Ainsi, couplé à une résolution numérique suffisamment fine pour que la zone d'induction contienne au moins 10 mailles, on obtient des valeurs moyennes cohérentes et qui ne sont pas influencées par les fluctuations du front de détonation.

Parallèlement, pour un certain nombre de diamètres de particules correspondant à ceux de la figure 6.13 ($d_{p0} = 6, 9, 11$ et 13.5 μ m), des simulations 2D, effectuées en faisant varier le facteur préexponentiel Z_{Arr} dans les mêmes proportions que pour les simulations 1D précédentes, permettent d'obtenir les tailles de cellules de détonation correspondantes. Ces simulations 2D n'ont été réalisées que dans le cas du mélange air - aluminium, car la concentration de particules plus faible que celle du mélange oxygène - aluminium permet des temps de calcul plus accessibles.

6.8.2 Influence de la longueur d'induction

La figure 6.25 montre l'influence de la longueur d'induction sur la taille des cellules de détonation à longueur de combustion constante pour chaque diamètre de particules. Sur cette figure sont reportés également les résultats de la figure 6.13. On constate que la taille des cellules de détonation croît à peu près linéairement avec la longueur d'induction, et ce de manière quasiment indépendante du diamètre des particules. Par analogie avec les mélanges homogènes gazeux, il semble logique d'établir une corrélation linéaire, du même type que celle de Shchelkin et al. [22], entre la taille de la cellule de détonation et la longueur d'induction monodimensionnelle pour les détonations de particules d'aluminium micrométriques dans une atmosphère d'air ou d'oxygène :

$$\lambda_{CJ} = k L_{iCJ} \tag{6.4}$$

Il ressort de nos calculs, que la valeur de k pour les mélanges air - aluminium et oxygène - aluminium est de l'ordre de 7.

Rappelons que dans les conditions standards de pression et température, en utili-

sant un schéma cinétique détaillé, Beeson et al. [23] et Westbrook [24] ont montré que $k \simeq 29$ pour les mélanges C_nH_m / air et H_2 / air. Matignon [25] a obtenu une valeur de k variant entre 10 et 100 pour des mélanges $CH_4/H_2/O_2/N_2$ et $CH_4/C_2H_6/O_2/N_2$.



FIG. 6.25 – Influence de la longueur d'induction sur la taille des cellules de détonation pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium

6.8.3 Influence de la longueur de combustion

La figure 6.26 utilise les mêmes résultats de simulations numériques que la figure 6.25. Elle représente l'influence de la longueur de la zone de combustion sur la taille des cellules de détonation. La série correspondant à un diamètre de particules $d_{p0} = 6 \ \mu m$ (carrés rouges sur la figure 6.26) n'apporte aucun résultat : en effet, pour cette série, seul le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius change. Ainsi, la longueur de combustion est globalement constante et la longueur d'induction varie. La largeur des cellules de détonation varient donc uniquement par effet de L_i . Ces remarques sont également valables pour les séries où le diamètre des particules est respectivement égal à $d_{p0} = 9 \ \mu m$, $11 \ \mu m$ et $13.5 \ \mu m$.

L'observation de la série "Air; d_p : 2.7µm à 13.5µm" met en avant une dépendance linéaire de la largeur λ des cellules détonation en fonction de la longueur de combustion. Cependant, dans cette série, seul le diamètre initial d_{p0} des particules varie, le facteur préexponentiel étant fixé à $Z_{Arr} = 100 \text{ s}^{-1}$. De ce fait, la longueur d'induction et la longueur de combustion dépendant toutes deux du diamètre des particules solides, leurs valeurs varient toutes deux également pour cette série. En conséquence, il n'est pas possible de conclure si la linéarité obtenue est une dépendance pure de λ en fonction de L_c ou un effet combiné de L_i et L_c . Il en est de même pour la série "O₂; d_p : 4µm à 24µm".



FIG. 6.26 – Influence de la longueur de combustion L_c sur la taille des cellules de détonation pour le mélange riche air - aluminium ($\phi = 1.61$) et un mélange stœchiométrique oxygène - aluminium

6.8.4 Influence du rapport $\frac{L_i}{L_c}$

Les mêmes conclusions peuvent être tirées de la figure 6.27, représentant les variations de la taille des cellules de détonation en fonction du rapport $\frac{L_i}{L_c}$ des longueurs d'induction et de combustion. Pour chaque série de diamètre de particule ($d_{p0} = 6, 9, 11$ et 13.5 μ m), une dépendance linéaire apparaît. Toutefois, pour ces calculs, seul le facteur préexponentiel Z_{Arr} a été changé : ainsi, L_i varie alors que L_c demeure constant. Cette dépendance linéaire n'est autre que celle que l'on a établie précédemment (équation (6.4)).

Enfin, les simulations numériques pour les mélanges air - aluminium et oxygène aluminium (respectivement en vert et orange sur la figure 6.27) n'apportent pas de conclusion nouvelle : pour chacune de ces séries de calcul, le diamètre des particules varie à Z_{Arr} constant. De ce fait, la longueur d'induction et de combustion varient toutes les deux par effet du diamètre des particules. On observe donc un effet combiné de L_i et L_c , et non une dépendance pure en fonction de L_c .

Pour évaluer plus précisément l'influence de la période de combustion, il faudrait effectuer d'autres simulations numériques, à longueur d'induction L_i constante, en ne faisant varier que la longueur de la zone de combustion L_c . Ceci implique de changer la constante de combustion K de la loi de Price (équation (4.15)). Cependant, l'intérêt de ce changement est discutable. En effet :

- La constante de combustion K a été choisie en fonction des données de la littérature

qui ont été calibrées sur des expériences. En revanche, le facteur préexponentiel Z_{Arr} est un paramètre ajustable;

 Modifier la constante de combustion K revient à changer la géométrie des particules, ce qui rend les comparaisons hasardeuses : en effet, la détonabilité des particules est grandement influencée par leur géométrie, notamment à travers leur surface spécifique [40];



FIG. 6.27 – Influence du rapport $\frac{L_i}{L_c}$ des longueurs d'induction et de la zone de combustion sur la taille des cellules de détonation pour le mélange riche ($\phi = 1.61$) air - aluminium et le mélange stœchiométrique oxygène - aluminium

6.9 Confirmation par le modèle hybride

Les résultats précédents obtenus avec le modèle à deux étapes sur la structure cellulaire des détonations air - aluminium doivent être confrontés avec ceux obtenus par le modèle hybride, plus réaliste et sans critère d'inflammation. Il s'agit alors d'étudier l'influence du diamètre des particules sur les grandeurs chimiques caractéristiques et la taille des cellules de détonation.

6.9.1 Les longueurs chimiques caractéristiques

A l'aide de simulations 1D avec le modèle hybride, on estime les longueurs caractéristiques chimiques pour les mélanges air - aluminium par la même méthode qu'au paragraphe 6.7 (cf. Fig. 6.21). Pour réaliser ces estimations, une méthode rigoureuse est employée : pour chaque cas (diamètre de particules), on calcule la longueur d'induction et de combustion toutes les 0.5 ms sur une distance de propagation de l'ordre de 35 m, soit une quarantaine d'estimations, en s'assurant de plus que chaque résultat contient un nombre de mailles numériques suffisant dans la zone d'induction (au minimum 10-20). On réalise ensuite la moyenne des estimations à partir de l'instant pour lequel on considère que la détonation est stationnaire et autonome. On s'affranchit ainsi des oscillations physiques et numériques pour ne garder qu'une estimation physique pertinente. La figure 6.28 présente les longueurs d'induction (figure 6.28-a) et de combustion (figure 6.28-b) en fonction du diamètre des particules, compris entre 1.5 μ m et 17 μ m, pour les deux modèles.



FIG. 6.28 – Comparaison des longueurs d'induction L_i (a) et de la zone de combustion L_c (b) en fonction du diamètre d_{p0} des particules pour un mélange air - aluminium de richesse 1.61, pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride

6.9.1.1 Longueur d'induction

On note tout d'abord la cohérence qualitative des résultats entre les deux modèles. On obtient une loi quasiment linéaire entre la longueur d'induction et le diamètre des particules : $L_i \sim d_{p0}^{n_i}$, avec n_i de l'ordre de 1.1. Si cette relation linéaire en fonction du diamètre initial des particules est préssentie pour le modèle à deux étapes à travers l'équation (4.11) définissant la période d'induction, le résultat n'apparaît pas de manière explicite pour le modèle hybride : en effet, la figure 6.7 montre que le transfert de masse total Jpeut être assimilé à J_{cin} défini par l'équation (4.18) lors de la période d'induction. Or, J_{cin} est proportionnel au carré du diamètre des particules à l'instant t (et non au carré du diamètre initial). Ensuite, J dépend à la fois de J_{cin} et J_{diff} . En dépit d'équations dont la dépendance à la taille des particules est différente, on retrouve la même allure qualitative, ce qui confirme d'une part la validité du modèle à deux étapes, et les résultats obtenus sur la longueur d'induction d'autre part.

Cependant, on remarque que la longueur d'induction est supérieure dans le cas du modèle à deux étapes, l'écart grandissant avec le diamètre initial des particules. Or, les cellules de détonation obtenues lors de la calibration du modèle hybride sont de largeurs supérieures à celles obtenues dans les mêmes conditions pour le modèle à deux étapes, alors que la relation (6.4) entre λ et L_i déduite du modèle à deux étapes laissait présupposer le contraire. De ce fait, il en découle que le changement de modèle pour la combustion des particules ne permet que de confirmer les résultats de manière qualitative et non quantitative.

6.9.1.2 Longueur de la zone de combustion

En ce qui concerne la longueur de combustion, on a un très bon accord entre les deux modèles : les courbes sont cohérentes entre elles aussi bien en terme d'allure que de valeurs numériques. Les longueurs de combustion sont légèrement plus élevées pour le modèle hybride, ce qui semble normal d'après le calibrage de ce modèle à $\lambda = 40$ cm contre $\lambda = 37.5$ cm pour le modèle à deux étapes. Il convient en effet de rappeler que les deux longueurs chimiques jouent un rôle sur la taille de la cellule de détonation d'après l'équation (6.1). Dans les deux cas, on obtient la relation $L_c \sim d_{p0}^{n_c}$, avec n_c de l'ordre de 1.8, soit proche de 2. Ainsi, les deux modèles sont cohérents qualitativement et quantitativement. Cette cohérence était prévisible dans la mesure où la période de combustion est régie par la même équation (4.14) pour les deux modèles, sachant que dans le cas du modèle hybride, $J \approx J_{diff}$ dans une grande partie de la zone de combustion, d'après la figure 6.7.

6.9.1.3 Interprétation

L'analyse de la figure 6.7 montre que le rayon des particules pour le modèle hybride commence à décroître significativement lors de la période de transition (c'est-à-dire lorsque J dépend simultanément de J_{cin} et J_{diff}). Cependant, la longueur de combustion étant plus grande que la longueur d'induction, la présence de la période de transition pour le modèle hybride génère plus de différence entre les modèles pour la période de d'induction que pour la période de combustion. Ainsi, les deux modèles utilisant la même équation pour le régime diffusif, la différence entre les deux est faible.

Au contraire, la période d'induction du modèle à deux étapes repose sur la libération d'une énergie intervenant dans l'équation de bilan de l'énergie. Pour le modèle hybride, la période d'induction se caractérise par une phase où $J \approx J_{cin}$. Les deux modélisations de la période d'induction sont donc totalement différentes, ce qui peut expliquer les écarts obtenus. De plus, le modèle hybride bascule progressivement de la phase d'induction vers la phase de combustion, alors que la transition est instantanée pour le modèle à deux étapes.

6.9.2 Taille de la structure cellulaire

De même que précédemment pour le modèle à deux étapes, l'estimation des longueurs chimiques caractéristiques pour le modèle hybride permet d'examiner si la structure cellulaire peut être corrélée avec les paramètres intervenant dans les mécanismes de combustion de l'aluminium. On réalise pour cela des simulations 2D avec les mêmes diamètres de particules que ceux utilisés pour l'estimation des longueurs chimiques. Pour chaque simulation, une attention toute particulière est portée sur les paramètres physiques et numériques du problème : les structures cellulaires obtenues ne doivent dépendre ni de la taille du canal (plusieurs cellules dans la largeur), ni du maillage (au minimum 10-20 mailles dans la zone d'induction et 100 mailles dans la largeur de la cellule de détonation).

6.9.2.1 Corrélation avec le diamètre des particules

Comme le montre la figure 6.29, on obtient des résultats similaires à ceux obtenus pour le modèle à deux étapes. La largeur des cellules de détonation λ est proportionnelle au diamètre initial des particules à la puissance 1.4 environ : $\lambda \sim d_{p0}^{1.4}$ dans les deux cas. Cette tendance est la conséquence qualitative des résultats obtenus sur les longueurs d'induction et de combustion : les corrélations sur L_i et L_c en fonction de d_{p0} étant les mêmes pour les deux modèles, il n'est pas surprenant de trouver la même allure pour $\lambda(d_{p0})$. Du point de vue quantitatif, les cellules de détonation du modèle hybride sont de largeurs légèrement supérieures à celles du modèle à deux étapes, mais les valeurs obtenues restent néanmoins assez proches.



FIG. 6.29 – Comparaison de la largeur λ des cellules de détonation en fonction du diamètre d_{p0} des particules pour un mélange air - aluminium de richesse 1.61, pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride

6.9.2.2 Corrélation avec la longueur d'induction

La figure 6.30 confirme la corrélation linéaire (6.4) entre la largeur des cellules de détonation et la longueur de la zone d'induction, établie par Shchelkin et al. [22] dans les mélanges gazeux et étendue aux mélanges air - aluminium et oxygène - aluminium avec le modèle à deux étapes.

Le cœfficient k est plus élevé pour le modèle hybride (de l'ordre de 11), en accord avec les résultats rassemblés sur les figures 6.28-a et 6.29 : les tailles de cellules étant plus grandes pour le modèle hybride avec des longueurs d'induction plus faibles, il est normal d'obtenir un cœfficient de proportionnalité plus élevé. Cependant, le cœfficient k, étant de l'ordre de 7 pour le modèle à deux étapes, dans des conditions variées (air/oxygène, richesse, divers facteurs préexponentiels testés, etc...), nous pensons qu'il est raisonnable de retenir l'ordre de grandeur pour k :

$$k = O(10) \tag{6.5}$$



FIG. 6.30 – Comparaison de la largeur λ des cellules de détonation en fonction de la longueur d'induction pour un mélange air - aluminium de richesse 1.61, pour le modèle à deux étapes et le modèle hybride

6.9.3 Conclusions sur le modèle hybride

Le modèle hybride a permis de confirmer les résultats obtenus à l'aide du modèle à deux étapes, sur les points suivants :

- le rôle des particules sur les dimensions de la structure cellulaire
- le rôle des particules sur les longueurs chimiques caractéristiques
- l'influence de la longueur de la zone d'induction sur les dimensions de la structure cellulaire

Ainsi, le modèle hybride, qui est plus réaliste que le modèle à deux étapes dans son approche de la modélisation de la combustion de l'aluminium derrière le choc incident, et qui n'introduit pas de critère prédéfini sur l'inflammation des particules, apparaît être un outil particulièrement adapté à l'étude des détonations hétérogènes de suspensions de particules d'aluminium.

Cependant, un certain nombre de points n'ont pas été abordés et demandent confirmation :

- le rôle précis joué par la zone de combustion sur la structure cellulaire
- l'accord des résultats entre les deux modèles pour les mélanges oxygène aluminium
- l'influence d'autres paramètres du problème (concentration en particules, pression et température initiales, etc...)

Chapitre 6. La structure cellulaire des détonations gaz - particules d'aluminium

CHAPITRE 7

Le régime hélicoïdal

Chapitre 7

Le régime hélicoïdal de détonation

7.1 Introduction

Les équations issues de la modélisation décrite au chapitre 4, pour les mélanges contenant des suspensions de particules d'aluminium, ont été utilisées dans le cas monodimensionnel (cf. chapitre 5) et dans le cas bidimensionnel (cf. chapitre 6). Ces équations se généralisent dans le cas 3D dont fait l'objet le présent chapitre. On utilise le modèle hybride pour les mélanges air - aluminium, ces derniers nécessitant des temps de calcul moins élevés que ceux des mélanges oxygène - aluminium, en raison d'une concentration en particules plus faible et d'une résolution numérique pouvant être moins fine.

7.2 Existence d'un régime hélicoïdal de détonation

7.2.1 Traces de pression maximale sur la paroi du tube

On se place tout d'abord dans les conditions initiales du mélange air - aluminium de Zhang et al. [76]. La théorie prévoit que dans le cas d'une détonation dans un tube, la détonation peut se propager avec une structure cellulaire si les dimensions du tube sont suffisamment grandes pour contenir au moins une cellule de détonation $(D_{tube} \ge \lambda)$. En diminuant la taille du tube, la structure cellulaire n'est plus à même de se développer et peut déboucher sur un régime hélicoïdal de détonation, puis sur une propagation quasi-monodimensionnelle si la taille du tube diminue encore. La cellule de détonation de référence pour le mélange considéré est de dimension transversale $\lambda = 40$ cm [76]. Plusieurs simulations 3D ont donc été réalisées pour différents diamètres de tube, la plus grande dimension considérée étant égale à $D_{tube} = 40$ cm, la taille de maille minimale étant $\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 2.5$ mm. Ces simulations ont montré que lorsque le diamètre du tube est compris entre 10 et 22.5 cm de diamètre, la détonation se propage selon un régime hélicoïdal.

La figure 7.1 représente l'évolution du régime de détonation vers le régime hélicoïdal pour $D_{tube} = 22.5$ cm, par l'enregistrement des maxima de pression sur la paroi du tube

(ce dernier est "déroulé à plat" pour montrer les traces), au delà de 16 m de propagation. Une simulation 2D a tout d'abord été effectuée entre le point d'initiation et l'abscisse x = 16 m. Les valeurs courantes des différentes variables sont alors utilisées pour initialiser la détonation 3D. Jusqu'à x = 25 m environ, deux points triples se propagent sur la surface du tube pour former une cellule de détonation (il est à noter qu'un observateur regardant le tube de côté ne verrait en projection qu'une demi-cellule). Au delà de x = 25 m, un unique point triple se propage selon un régime hélicoïdal de détonation.

Les enregistrements montrent alors que le pas P de la détonation hélicoïdale est constant, de l'ordre de 0.9 m, ce qui correspond exactement au périmètre mouillé du tube. En effet, en utilisant un système de coordonnées cartésiennes, le périmètre mouillé du tube est égal à $4D_{tube}$ (= 0.9 m dans ce cas), pour n'importe quel maillage, comme expliqué au paragraphe 4.6.2.1. L'angle formé entre les bandes inscrites par le point triple et l'axe du tube est d'environ 45 degrés, ce qui confirme la stationnarité de la détonation hélicoïdale. Enfin, il est à noter que le sens de rotation de la détonation hélicoïdale est aléatoire et ne peut être connu à priori. Sur la figure 7.1, l'onde transverse tourne dans le sens horaire lorsque l'on regarde le tube de face depuis les grandes valeurs de x.



FIG. 7.1 – Traces de pression maximale enregistrées sur la paroi du tube pour un mélange riche air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$)

7.2.2 Représentation de la détonation hélicoïdale dans le tube

La représentation tridimensionnelle de la structure rotative de la détonation hélicoïdale n'est pas chose aisée, en raison de la complexité de cette structure. On trace dans ce but les contours des isobares. La figure 7.2 montre des isobares de pression 3D pour le mélange air - aluminium considéré, pour les instants compris entre t = 16 ms et t = 16.42 ms, par pas de 0.06 ms. Les isobares de pression sont choisies sur une plage allant de 20 à 90 bar, par pas de 5 bar. Pour permettre de visualiser l'écoulement à l'intérieur du tube, un effet de transparence a été utilisé pour tracer les cartographies de la figure 7.2. On retrouve le fait que la détonation hélicoïdale tourne dans le sens horaire.



FIG. 7.2 – Détonation hélicoïdale dans une tube de diamètre $D_{tube}=22.5~{\rm cm}$ pour un mélange air - aluminium ($\sigma=500~{\rm g/m^3},~d_{p0}=13.5~\mu{\rm m})$

7.2.3 Domaine d'existence

Afin de s'assurer de la cohérence des résultats précédents, d'autres simulations 3D ont été réalisées avec deux résolutions numériques différentes : l'une, deux fois plus fine $(\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 1.25 \text{ mm})$ et l'autre, deux fois moins fine $(\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 5 \text{ mm})$. La figure 7.3 montre les domaines d'existence des différents régimes de détonation (figure 7.3-a) et la valeur du pas P lorsque la détonation est hélicoïdale (figure 7.3-b), en fonction du diamètre du canal, pour les trois résolutions considérées. Sur la figure 7.3-b sont également représentées les droites $4D_{tube}$ (correspondant au pas théorique) et la corrélation linéaire du pas en fonction du diamètre du tube pour les valeurs obtenues.

On remarque d'après la figure 7.3-a que pour D_{tube} compris entre 0.1 m et 0.225 m, la détonation est hélicoïdale et que la solution obtenue ne dépend pas de la résolution numérique ($\Delta r = 2.5 \text{ mm}$ ou $\Delta r = 5 \text{ mm}$ pour $D_{tube} \in [0.15 \text{ m}, 0.225 \text{ m}]$; $\Delta r = 1.25 \text{ mm}$, $\Delta r = 2.5 \text{ mm}$ ou $\Delta r = 5 \text{ mm}$ pour $D_{tube} = 0.10 \text{ m}$). La transition du mode hélicoïdal vers le mode cellulaire de détonation intervient à $D_{tube} \simeq 0.25 \text{ m}$ pour $\Delta_r = 2.5 \text{ mm}$ et à $D_{tube} \simeq 0.33 \text{ m}$ pour $\Delta_r = 5 \text{ mm}$. Ce découplage de la limite entre les deux régimes est peu important compte tenu du changement de la résolution numérique par un facteur 2. Pour $D_{tube} < 0.10 \text{ m}$, les simulations montrent que la détonation se propage de manière quasi-monodimensionnelle, et ce pour les trois maillages considérés. A $\Delta r = 1.25 \text{ mm}$, les simulations n'ont été effectuées que pour $D_{tube} \leq 0.10 \text{ m}$, les temps de calcul étant très élevés pour des diamètres de tube plus grands. Sur la figure 7.3-b apparaît également la droite $4D_{tube}$ (c'est-à-dire le périmètre mouillé du tube) correspondant au pas théorique pour un tube de section circulaire discrétisé par un maillage cartésien.



(a) Régime de détonation

(b) Pas de la détonation hélicoïdale

FIG. 7.3 – (a) Régime de détonation et (b) pas de la détonation hélicoïdale pour un mélange riche air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$) en fonction du diamètre du canal

A l'exception des couples $(D_{tube} = 30 \text{ cm}, \Delta x = 2.5 \text{ mm})$ et $(D_{tube} = 30 \text{ cm}, \Delta x = 5 \text{ mm})$, les régimes de détonation obtenus sont les mêmes pour les trois résolutions

numériques (figure 7.3-a). Le cas conflictuel à $D_{tube} = 30$ cm s'explique par le fait que la structure cellulaire peut s'adapter à la taille du canal. Ainsi, si la taille de la cellule de référence est de 40 cm, en réduisant légèrement le tube à 37.5 cm de diamètre, la structure cellulaire existe toujours. De même, le basculement du régime cellulaire de détonation vers le régime hélicoïdal dépend du confinement et des processus physiques et chimiques mis en jeu au niveau du front de détonation, notamment dans la zone des points triples. De ce fait, le changement de maillage pour $D_{tube} = 30$ cm a suffi pour conduire à deux régimes de propagation différents. Finalement, ce résultat laisse supposer que l'on doit considérer $D_{tube} = 25$ cm comme le seuil de déclenchement du régime hélicoïdal, puisque cette valeur correspond à une meilleure résolution.

Ainsi que l'indique la figure 7.3-b, les pas de détonation hélicoïdale obtenus sont sensiblement les mêmes pour les différentes résolutions numériques considérées. Pour chaque simulation, la valeur du pas retenue a été obtenue en moyennant les pas P observés sur les enregistrements des traces effectués sur toute la distance de propagation de la détonation, ce qui permet de réduire l'incertitude sur leur valeur. On rappelle que si dans la théorie, pour un tube circulaire, le pas de la détonation hélicoïdale doit être $P = \pi D_{tube}$, dans notre cas, il doit être de $P \simeq 4.D_{tube}$, correspondant au périmètre mouillé lorsque l'on utilise un maillage cartésien (cf. chapitre 4, figure 4.2). Or, à l'exception du cas $D_{tube} =$ 22.5 cm, les pas obtenus diffèrent de $4.D_{tube}$, les écarts les plus importants étant pour les plus faibles diamètres de tube. La pente moyenne obtenue est de l'ordre de 2.83, ce qui représente un écart de 29 % environ par rapport à la pente théorique (de valeur 4). Ces écarts sont probablement dus au fait que les maxima de pression enregistrés par les traces ne sont pas exactement situés à la paroi du tube, mais peuvent être décalés de quelques mailles numériques. Une illustration de ce problème est montré sur la figure 7.4.



FIG. 7.4 – Projection dans le plan (y, z) des maxima de pression pour une détonation hélicoïdale air - aluminium $(D_{tube} = 20 \text{ cm et } \Delta x = 5 \text{ mm})$

Le maximum de pression est tracé en projection dans le plan (y, z) à partir du moment où la détonation devient hélicoïdale pour $D_{tube} = 20$ cm et $\Delta x = 5$ mm. Il apparaît que le point triple s'éloigne assez fortement de la paroi, notamment dans la zone (y > 0.10m; z < 0.05 m).

7.2.4 Comparaison avec les résultats existants

Lors de leurs expériences, Zhang et al. [76] ont reconstitué, dans les mêmes conditions que nos simulations, une cellule de détonation de largeur $\lambda = 40$ cm dans un tube de diamètre $D_{tube} = 30$ cm et de longueur $L_{tube} = 40$ m. Les distances de propagation et diamètres de tube dans les présentes simulations sont du même ordre de grandeur. Ils ont estimé le diamètre minimum de propagation d'une détonation hélicoïdale dans ces conditions : $D_{tube} = 12$ cm. De ce fait, leurs expériences montrent l'existence d'un régime hélicoïdal pour des diamètres de tube compris entre 12 cm et 30 cm. D'après la figure 7.3a, on peut considérer pour nos simulations que la détonation se propage selon un régime hélicoïdal pour des diamètres de tube compris entre 8.75 et 25 cm. Ainsi, les présentes simulations sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de Zhang et al. [76]. Les diamètres légèrement plus faibles obtenus par le calcul numérique peuvent s'expliquer par le fait que les pertes latérales n'ont pas été prises en compte, ce qui favorise la propagation de la détonation.

Par ailleurs, Zhang et al. [76] ont obtenu sur les parois du tube des niveaux de pression compris entre 80 et 95 bar lors du passage des ondes transverses, ce qui est cohérent nos résultats numériques (cf. Fig. 7.4, ou Fig. 7.8 au paragraphe 7.3.2.1). La fréquence de passage de l'onde transverse est difficile à déterminer d'après leurs enregistrements de pression (cf. paragraphe 2.2, Fig. 2.2). On peut néanmoins l'estimer à $f \simeq 4500$ Hz, soit environ 2.5 fois plus élevé que pour nos simulations dans le tube de diamètre $D_{tube} = 22.5$ cm (cf. paragraphe 7.3.2.1).

7.3 Etude de la propagation du front de détonation sur la paroi du tube

Dans le cas de la détonation hélicoïdale, le point triple se propage de façon rotative dans une zone proche de la paroi du tube. C'est pourquoi il est intéressant d'étudier les paramètres thermomécaniques sur la paroi du tube. Cette dernière est montrée "déroulée" pour mieux visualiser le déplacement du point triple.

7.3.1 Cartographies 2D des paramètres thermomécaniques

7.3.1.1 Phase gazeuse

La détonation hélicoïdale est simulée dans un tube de diamètre $D_{tube} = 22.5$ cm, jusqu'à une distance de propagation de l'ordre de 30 m. Les paramètres de résolution numérique sont les suivants : $N_x = 2500$ et $N_y = N_z = 90$, soit $\Delta r = 2.5$ mm. On choisit également $N_{adaptation} = N_{fine} = 1250$. Le point triple se propageant au niveau de la paroi du tube, il est judicieux d'étudier le front de détonation sur la surface intérieure du tube. Afin de s'affranchir des "effets de bord" numériques, les résultats sont présentés à un diamètre de 22 cm (soit 0.98 D_{tube} environ). La figure 7.5 montre en fonction de x les cartographies de pression, température, masse volumique et vitesse matérielle de la phase gazeuse, près de la surface du tube, à $\sqrt{y^2 + z^2} = 22$ cm. On remarque que le point triple (pression maximale) est associé au maximum de masse volumique, mais pas de température et vitesse longitudinal.



FIG. 7.5 – Cartographies de (a) pression, (b) température, (c) masse volumique et (d) vitesse matérielle de la phase gazeuse au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$)

7.3.1.2 Phase solide

Les cartographies en fonction de x du rayon, de la température, de la concentration et de la vitesse matérielle des particules sont montrées sur la figure 7.6 à la même distance de la paroi. On observe que, de même que pour les simulations 2D de la structure cellulaire, le maximum de pression dans le cas de la détonation hélicoïdale coïncide avec le maximum de concentration de particules, mais pas avec le maximum de température.



FIG. 7.6 – Cartographies de (a) rayon, (b) température, (c) concentration et (d) vitesse matérielle des particules au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$)

7.3.1.3 Analyse

L'onde de Mach et le choc incident présentent une allure qualitative semblable à celle des mélanges gazeux (Schott [200], Voitsekhovskii et al. [201], Virot [34]). En revanche, contrairement au cas des mélanges gazeux, le maximum de pression correspond à une valeur minimale des températures des gaz et particules sur le front de détonation, du fait de l'inflammation retardée des particules : la raison en est due au fait que la concentration de ces dernières est maximale au niveau du point triple, ce qui retarde leur montée en température. Le rayon des particules est donc également maximum (égal à sa valeur initiale) au niveau du point triple. Ainsi, l'observation faite dans le cas des cellules de détonation 2D reste valable dans le cas des détonations hélicoïdales, et ce malgré l'absence de collisions de points triples (ce qui constitue une différence majeure entre les cas 2D et 3D avec régime hélicoïdal de propagation). Les niveaux de pression 3D sont cependant moins élevés que dans le cas 2D, du fait de l'absence de collision de points triples.

Les cartographies de masse volumique des gaz et de vitesses et températures des deux phases montrent une période environ égale à 52-55 % du pas hélicoïdal : en effet, la période obtenue est de l'ordre de 47.5-50 cm, contre un pas de détonation hélicoïdale P = 90 cm.

La longueur de la zone de réaction peut être estimée à l'aide de la cartographie du nombre de Mach $M = \frac{D - u_x}{c}$. Celui-ci est représenté sur la figure 7.7, où seules les zones correspondant à un écoulement subsonique sont tracées. On constate que la longueur de la zone de réaction est minimale au niveau du point triple, ce qui suggère une longueur de combustion minimale, sachant que la longueur d'induction est maximale (inflammation retardée des particules). Cependant, la faible longueur de la zone de combustion est certainement due à l'arrêt des réactions chimiques. En effet, les cartographies de rayon et concentration des particules montrent que derrière la zone de réaction (dans une zone autour de $x \simeq 29.45$ m et $y \simeq 0.40$ m), il reste une faible concentration de particules, de rayon de l'ordre de 3 μ m. En aval de cette zone se trouve une autre zone subsonique de réactions chimiques (demi-bande dont la base se situe aux alentours de x = [29.2, 29.4]m] et rejoignant le front de choc suivant y croissant, à partir de y = 0.40 m), à haute température de gaz et particules. Cette zone correspond en fait à l'hélice de la détonation en aval du front incident, cette dernière réamorçant les réactions chimiques du fait de températures élevées. Il est à noter qu'on retrouve la même périodicité que précédemment $(\simeq 50 \text{ cm})$ pour le nombre de Mach.

7.3.2 Oscillations périodiques de pression et célérité de détonation

7.3.2.1 Oscillations de pression

La figure 7.8 montre les oscillations de p_{max} , $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$ (oscillations radiales) dans le tube pour 16 ms < t < 19 ms (soit 28 < x < 33 m environ). La transformée de Fourier permet d'estimer la fréquence de rotation de l'onde de détonation à partir des oscillations de $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$:

- $f_y = 1945.1 \text{ Hz}$ - $f_z = 1943.8 \text{ Hz}$

soit une fréquence moyenne f = 1944.4 Hz. On en déduit une valeur du pas de la détonation hélicoïdale (à partir de la célérité moyenne du front) P = D/f = 89.6 cm,



FIG. 7.7 – Estimation de la longueur de la zone de réaction par la cartographie du nombre de Mach "longitudinal" subsonique au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$)

qui est en excellent accord avec la valeur P = 90 cm mesurée à partir des traces de Mach correspondantes (cf. figure 7.3-b). Il est à noter que cette valeur correspond à $4D_{tube}$.



FIG. 7.8 – Oscillations de p_{max} , $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$ au niveau de la paroi du tube (0.98 D_{tube}) pour un mélange air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \mu \text{m}$), pour 16 ms < t < 19 ms

Le déphasage de $y_{p_{max}}$ par rapport à $z_{p_{max}}$ est de 1.59 rd, soit environ $\frac{\pi}{2}$.

En revanche, les oscillations de p_{max} associées à $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$ sont beaucoup plus irrégulières en période et en amplitude. On peut toutefois déceler une période d'oscillation moyenne de l'ordre de 2-3 fois celle de $y_{p_{max}}$ et $z_{p_{max}}$. Ces oscillations peuvent être attribuées d'une part à la contribution de la loi d'Arrhenius du régime cinétique J_{cin} et d'autre part au fait que le maximum de pression n'est pas forcément localisé sur la paroi du tube (cf. Fig. 7.4).

7.3.2.2 Oscillations de célérité de détonation

La célérité du front incident évolue de manière oscillatoire. Pour la calculer, on calcule la vitesse du point correspondant au maximum de pression moyennée dans la section du tube, cette vitesse étant elle-même moyennée tous les 20 cm de propagation. La figure 7.9 présente les oscillations de la célérité de détonation pour 16 ms < t < 19 ms (soit 28 < x < 33 m environ).

La célérité moyenne obtenue est de 1773 m/s, soit un écart de 1.8 % par rapport à $D_{CJ} = 1742$ m/s, et les fluctuations restent dans une plage allant de 1550 m/s à 1990 m/s, soit des écarts allant de -11 % et +14.2 % par rapport à D_{CJ} . Le régime hélicoïdal de détonation se traduit par des oscillations d'amplitude relativement importante de la célérité de propagation, ce qui peut être attribué au fait que les oscillations de pression maximale très importantes influencent le taux des réactions chimiques juste derrière le front de détonation.



FIG. 7.9 – Evolution de la célérité de détonation hélicoïdale pour un mélange riche air - aluminium ($\sigma = 500 \text{ g/m}^3$, $d_{p0} = 13.5 \ \mu\text{m}$), pour 16 ms < t < 19 ms

7.4 Conclusion sur le régime hélicoïdal

Le régime hélicoïdal de détonation a été simulé pour la première fois dans des mélanges hétérogènes contenant des suspensions de particules d'aluminium. L'outil numérique permet d'analyser des phénomènes que l'expérience ne peut mettre en avant avec les moyens actuels. Ceci conduit à envisager des travaux futurs pour comprendre et expliquer les différentes observations expérimentales qui ont abouti à un régime hélicoïdal de détonation. Par ailleurs, l'effet de la pression initiale du mélange devra être pris en compte, et confronté aux résultats expérimentaux de Zhang et al. [77], qui ont proposé une dépendance semi-empirique telle que $\lambda = \pi D_{tube}$ proportionnel à $\frac{d_{p0}^n}{p_0^m}$.

CHAPITRE 8

Initiation directe des détonations gaz - particules d'aluminium et conditions critiques d'amorçage

Chapitre 8

Initiation directe des détonations gaz particules d'aluminium et conditions critiques d'amorçage

Ce chapitre a pour but d'étudier les conditions critiques d'initiation (énergie d'amorçage, rayon critique, etc...) des détonations hétérogènes gaz - particules d'aluminium à partir de la connaissance de la structure cellulaire.

8.1 Initiation des détonations hétérogènes planes

Une première étape consiste à effectuer des simulations monodimensionnelles, avec le code numérique EFAE, pour étudier l'initiation et la propagation de détonations dans des mélanges oxygène - aluminium. On utilise le modèle à deux étape décrit au chapitre 4.

8.1.1 Hypothèses

L'initiation se fait par source ponctuelle d'énergie à l'instant initial t = 0. On considère des mélanges où les particules sont uniformément dispersées dans l'atmosphère oxydante. Les réactions chimiques entre les particules d'aluminium et les molécules oxydantes ayant lieu en proche surface des particules, la taille et la forme de ces dernières jouent un rôle prépondérant dans la détonation des mélanges hétérogènes gaz/particules. A cet effet, différents types de particules sont considérée dans les simulations :

- Des particules sphériques, de diamètres respectifs 2, 3.5, 5, 8.6 et 13 $\mu \mathrm{m}$
- Des particules de type flocon

Il est à noter que les particules de type flocon présentent un taux de combustion plus élevé que les particules sphériques de même masse, en raison d'une surface spécifique plus élevée. Le code EFAE prend en compte des particules de type flocon en les remplaçant "fictivement" par des particules sphériques de même masse, mais en gardant des paramètres physiques propres aux particules de type flocon (cœfficient de traînée, différentes valeurs de la constante K dans la loi de combustion). Ainsi, lors des simulations avec des particules de type flocon, leur diamètre équivalent en masse est égal à $d_{p0} =$ 8.6 μ m. La concentration massique des particules d'aluminium varie sur une page allant de 0 à 4000 g/m³, un mélange stœchiométrique oxygène - aluminium correspondant à une concentration $\sigma \simeq 1500$ g/m³.

8.1.2 Rappels des résultats antérieurs

Ingignoli [40] a effectué des simulations en configuration plane pour la détonation de mélanges oxygène - aluminium se propageant dans un tube de longueur $L_{tube} = 6$ m, et pour différents diamètres de ce dernier. Différents types de particules (sphériques de diamètre d_{p0} variant de 2 à 13 μ m, flocons) ont été utilisés, pour des concentrations montant jusqu'à $\sigma = 4000$ g/m³, l'initiation étant réalisée au moyen d'une source ponctuelle d'énergie.

8.1.2.1 Tubes de diamètre fini

La définition du temps de combustion $\tau_p = \frac{K d_{p0}^2}{\Phi_{ox}^{0.9}}$ intervenant lors du régime de diffusion implique que la taille des particules a une influence importante sur la longueur de la zone de réaction. De ce fait, il en résulte que dans le cas d'un tube de diamètre fini, les frottements et transferts de chaleur pariétaux doivent être pris en compte comme pour des détonations non idéales.

Les simulations ont été réalisées pour différents diamètres de tube et de particules et les célérités du front de détonation calculées ont été comparées à celles obtenues expérimentalement par Strauss [71] dans les mêmes conditions (tube de diamètre intérieur 26.4 mm, avec des particules sphériques de 5 μ m et des particules de type flocon). La figure 8.1 montre le bon accord qualitatif entre les résultats numériques et expérimentaux. Il apparaît que les déficits de célérités de détonation obtenues par rapport aux valeurs idéales CJ peuvent être expliqués par les pertes de chaleur et frottements pariétaux.

On note cependant que les valeurs obtenues numériquement sont supérieures à celles obtenues expérimentalement (ces dernières étant proches de celles calculées avec des particules plus larges, de diamètre 13 μ m). Cette différence peut s'expliquer probablement par le fait que le tube de verre utilisé par Strauss [71] lors de ses expériences se désintègre localement après le passage de l'onde de détonation, sur une zone dont la longueur caractéristique est inférieure à l'épaisseur de la zone de réaction. De ce fait, l'expansion rapide des produits de combustion derrière le front peut induire une augmentation des pertes latérales, diminuant ainsi la célérité de détonation.

Le tableau 8.1 résume les différents ordres de grandeurs d'énergie critique d'amorçage obtenus par Ingignoli [40], en fonction du type de particules utilisées. L'énergie critique d'amorçage augmente avec le diamètre initial des particules, ce qui se justifie par des



FIG. 8.1 – Comparaison de célérités de détonation calculées et expérimentales de Strauss
[71] dans des mélanges oxygène - aluminium dans un tube de diamètre 26.4 mm

longueurs de réaction qui augmentent également avec d_{p0} : on a alors des pertes d'énergie plus importantes au niveau des parois. Ingignoli [40] montre aussi que cette énergie d'amorçage dépend de plusieurs facteurs :

- la concentration des particules σ : l'énergie critique d'amorçage est minimale autour de la stœchiométrie
- le diamètre du tube D_{tube} : l'énergie critique d'amorçage augmente lorsque le diamètre du tube diminue

Cette deuxième observation se justifie également par les pertes au parois (frottements, chaleur) dans le cas de tubes de diamètre fini : lorsque D_{tube} diminue, le rapport de la surface d'échange entre le tube et le mélange, et le volume occupé par ce dernier, augmente en fonction de $\frac{1}{D_{tube}}$, d'où un accroissement des pertes au parois.

$d_{p0} \ (\mu \mathrm{m})$	2	3.5	5	8.6	13	flocons
$E_i ({ m J/m^2})$	5.10^{4}	10^{5}	10^{6}	5.10^{6}	10^{7}	5.10^{5}

TAB. 8.1 – Ordre de grandeur des énergies E_i utilisées pour amorcer la détonation dans les mélanges oxygène - aluminium, d'après Ingignoli [40]

8.1.2.2 Tubes de diamètre infini

Ingignoli [40] a également réalisé des simulations dans un tube de diamètre infini (donc sans pertes aux parois) pour des mélanges oxygène - aluminium, afin de vérifier le bon accord entre les paramètres caractéristiques de détonation obtenus et les valeurs thermodynamiques idéales. Naturellement, les déficits de célérité de détonation par rapport à la valeur CJ disparaissent lorsque les pertes aux parois sont nulles. Les valeurs qu'il a obtenues pour D, p et T au point CJ sont alors très proches des valeurs théoriques idéales.

Il a également estimé la longueur de la zone des réactions chimiques pour des particules de diamètre 2 μ m, 3.5 μ m et 13 μ m, en calculant la distance entre l'onde incidente et le plan sonique. Suivant les concentrations utilisées, il a obtenu les longueurs suivantes :

 $- d_{p0} = 2 \ \mu \text{m}$: entre 1.5 et 5 cm

 $- d_{p0} = 3.5 \ \mu \mathrm{m}$: entre 5 et 9 cm

– $d_{p0}=13~\mu{\rm m}$: entre 23 et 50 cm

A la stœchiométrie, les résultats d'Ingignoli [40] montrent que la longueur de réaction est d'environ 8 cm pour les particules de type flocon. Dans ce mémoire, les valeurs obtenues pour des particules de type flocon dans les mélanges oxygène - aluminium sont comprises entre 0.5 cm et 25 cm environ suivant la masse des flocons (diamètre sphérique équivalent compris entre 4 et 24 μ m). Ces valeurs ont été estimées en additionnant les longueurs d'induction L_i et de combustion L_c de la figure 6.22 (cf. chapitre 6).

8.2 Résultats pour les détonations sphériques

L'initiation de détonations en milieu non confiné a été étudiée en configuration sphérique 1D. Le rayon de propagation du front incident issu du point d'explosion est considéré jusqu'à une distance de 4 m. Pour un mélange donné (concentration en particules et diamètres des particules), les différentes énergies d'initiation considérées peuvent mener soit à la formation d'une détonation, soit à l'atténuation de l'onde de choc incidente. La figure 8.2 montre l'évolution de la célérité de détonation pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$) contenant des particules de 5 μ m de diamètre, en fonction de la distance de propagation, pour différentes valeurs de l'énergie d'initiation.

Pour une énergie d'initiation $E_i = 2.35 \times 10^4$ J, la célérité du front incident diminue jusqu'à la vitesse des ondes sonores du fait d'un taux de libération d'énergie trop faible de la part des réactions chimiques entre les particules d'aluminium et l'oxygène. L'initiation de la détonation a échoué. En augmentant la valeur de l'énergie d'initiation à $E_i = 2.50 \times 10^4$ J (ce qui correspond approximativement à 5.5 g de TNT), on observe une diminution de la vitesse de propagation du front jusqu'à 850 m/s environ, à une distance de l'ordre de r = 0.5 m. Au-delà de cette distance, la vitesse de propagation augmente légèrement jusqu'à r = 1 m environ, avant de ré-augmenter beaucoup plus fortement pour atteindre un régime de détonation quasiment stationnaire à partir de 2-3 m. La valeur de la célérité de détonation atteinte est très légèrement inférieure à la valeur CJ théorique de la détonation idéale (écart de 3 %). Si on augmente encore l'énergie d'initiation, on observe un comportement similaire mais la valeur minimale de vitesse de propagation obtenue avant augmentation devient de plus en plus élevée et l'augmentation de pression intervient également plus rapidement. Au-delà d'une certaine valeur ($E_i > 7 \times 10^5$ J environ), la vitesse de propagation du front diminue de manière pratiquement monotone jusqu'à sa valeur stationnaire, en passant néanmoins par un minimum.



FIG. 8.2 – Evolution de la célérité du front incident en fonction de la distance de propagation et de l'énergie d'initiation, pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique $(\sigma = 1500 \text{ g/m}^3)$ contenant des particules de diamètre $d_{p0} = 5 \ \mu\text{m}$

Le comportement observé pour les mélanges hétérogènes oxygène - aluminium est analogue à celui observé pour les détonations homogènes gazeuses en milieu non confiné par Lee et al. [30] : on retrouve les régimes d'initiation subcritique, critique et supercritique qui dépendent de la compétition entre le taux de libération d'énergie issu des réactions chimiques et les pertes d'énergie dues à l'expansion volumique des produits de combustion.

A partir de cette observation, pour une taille de particules donnée, il est possible pour différentes concentrations de déterminer l'énergie critique d'initiation. La figure 8.3 représente l'énergie critique d'initiation en fonction de la concentration en particules pour un mélange oxygène - aluminium contenant des particules de diamètre 5 μ m. On obtient alors une courbe en forme de "U", avec un minimum autour de la stœchiométrie, similaire à celle que l'on obtient lors de la détonation de mélanges gazeux homogènes. Pour des particules plus grosses, du fait qu'elles réagissent plus lentement, le même type de calcul conduirait à des énergies d'amorçage plus élevées. Chapitre 8. Initiation directe des détonations gaz - particules d'aluminium et conditions critiques d'amorçage



FIG. 8.3 – Energie critique d'initiation calculée en fonction de la concentration de particules lors de la détonation sphérique d'un mélange oxygène - aluminium contentant des particules d'aluminium de diamètre $d_{p0} = 5 \ \mu \text{m}$

8.3 Conditions critiques d'initiation des détonations hétérogènes Al/Air et Al/O₂ sphériques

8.3.1 Corrélation entre l'énergie critique d'amorçage et la taille de la structure cellulaire

Compte tenu des comportements qualitativement similaires mis en évidence entre les mélanges hétérogènes et homogènes gazeux concernant l'initiation de détonations, il apparaît légitime de transposer les critères semi-empiriques des mélanges gazeux aux mélanges hétérogènes gaz/particules. En supposant une source ponctuelle d'explosion idéale, Benedick et al. [202] ont montré que le rayon critique d'initiation de détonation R_c devrait être égal à la longueur caractéristique d'explosion R_0 , cette dernière étant définie comme suit :

$$R_0 = \left(\frac{E_0}{p_0}\right)^{1/3} \tag{8.1}$$

Lee et al. [203] ont montré :

$$\frac{R_0}{c_0} \sim \frac{\lambda}{c_{CJ}}$$

$$E_c \sim p_0 \left(c_0 \frac{\lambda}{c_{CJ}} \right)$$
(8.2)

De plus, dans le cas de détonations sphériques, Desbordes [31] a établi une corrélation entre le rayon critique de prédétonation R_c et la largeur de cellule de détonation λ :

$$R_c = 20\lambda \tag{8.3}$$

D'après Ingignoli et al. [204], on peut alors estimer l'énergie critique d'initiation d'après la relation suivante :

$$E_c = 8000 p_0 \lambda^3 \tag{8.4}$$

Vasiliev et Grigoriev [29] et Lee [30] ont obtenu des corrélations similaires en considérant les conditions critiques de transmission d'une détonation plane dans un volume infini.

$$E_c = 83\rho_0 D^2 \lambda^3 \tag{8.5}$$

8.3.2 Mélanges oxygène - particules d'aluminium

Rappelons que seules les données expérimentales concernant la structure cellulaire dans le cas d'un mélange hétérogène oxygène - aluminium ont été obtenues par Ingignoli et al. [81]. En utilisant un mélange stœchiométrique de particules d'aluminium de type flocon en suspension dans de l'oxygène, la structure cellulaire obtenue a une dimension caractéristique de 5-10 cm. Si on applique les relations (8.3) et (8.4) au cas expérimental d'Ingignoli et al. [81], on obtient un rayon critique de prédétonation qui serait de l'ordre de $R_c = 1$ m et une énergie critique d'initiation qui serait de l'ordre de $E_c = 10^5$ J. La valeur ainsi calculée de E_c est comprise entre celle issue des simulations numériques précédentes $(2.50 \times 10^4 \text{ J})$ et l'énergie de la charge utilisée lors des expériences par Ingignoli et al. [81] (6.78×10^5 J) lors de ses expériences qui ont mené à l'enregistrement de la structure cellulaire. Il en résulte que les valeurs issues des relations (8.3) et (8.4) constituent des ordres de grandeur réalistes pour les valeurs critiques des paramètres dynamiques de détonation de particules d'aluminium de 5 μ m dans une atmosphère d'oxygène pur :

$$R_c = 1 \text{ m}$$

$$E_c = 10^5 \text{ J}$$
(8.6)

Il est clair que l'énergie critique d'initiation et le rayon critique de prédétonation dépendent fortement du diamètre des particules. La figure 8.4 montre les résultats issus de simulations numériques pour un mélange stœchiométrique oxygène - aluminium ($\sigma =$ 1500 g/m³) en utilisant des particules de 13 μ m (au lieu de 5 μ m pour les simulations précédentes), et pour deux énergies d'initiation différentes. L'utilisation d'une énergie d'initiation $E_i = 4.52 \times 10^6$ J (qui correspond à 1 kg de TNT) mène à l'échec de l'établissement d'un régime de détonation. En augmentant l'énergie d'initiation à $E_i = 13.56 \times$ 10^6 J (équivalent à 3 kg de TNT), la vitesse de propagation du choc évolue selon le même comportement qu'en utilisant des particules de 5 μ m de diamètre (voir figure 8.2) : après une diminution jusqu'à une valeur D = 1000 m/s environ, la vitesse du choc incident croît à partir de x = 2 m. Cependant, à la fin du domaine de calcul, la vitesse constatée est bien inférieure à D_{CJ} (25 % d'écart) et on n'atteint pas un régime de propagation stationnaire et autonome pour la distance considérée. Néanmoins, il est probable qu'un domaine de calcul plus large aurait permis d'atteindre à un régime stationnaire et autonome.



FIG. 8.4 – Evolution de la vitesse du front incident en fonction de la distance de propagation et de l'énergie d'initiation, pour un mélange oxygène - aluminium stœchiométrique ($\sigma = 1500 \text{ g/m}^3$) contenant des particules de diamètre 13 μ m

Utilisant cette valeur d'énergie critique d'initiation, la corrélation $E_c \sim \lambda^3$ donne une estimation de la taille minimale des cellules de détonation correspondantes. On obtient alors $\lambda \simeq 25$ cm pour des particules d'aluminium de 13 μ m de diamètre. Il résulte de ces estimations que pour ce mélange hétérogène, la largeur des cellules de détonation serait proportionnelle au carré du diamètre des particules d'aluminium, ce qui serait en accord avec le taux de combustion empirique : ce dernier est inversement proportionnel au carré du diamètre des particules. En réalité, cette dépendance est beaucoup plus complexe, comme cela a été montré au chapitre 6.

8.3.3 Mélanges air - particules d'aluminium

Dans des mélanges air - aluminium, Zhang et al. [76] ont enregistré expérimentalement une structure cellulaire de largeur caractéristique $\lambda = 40$ cm environ. Si on extrapole l'analyse précédente dans le cas de mélanges air - aluminium, il s'ensuit que les valeurs correspondantes du rayon de prédétonation et de l'énergie critique d'initiation sont respectivement :

$$R_c = 8 \text{ m}$$

$$E_c = 5.12 \times 10^7 \text{ J (soit l'équivalent de plus de 11 kg de TNT)}$$
(8.7)

Ces valeurs élevées expliquent probablement pourquoi la formation d'une détonation n'a pas été observée lors des expériences de Tulis [80] : 2.27 kg d'explosif solide seulement ont été utilisés pour tenter d'initier la détonation d'un nuage d'aluminium cylindrique non confiné de 3 m de longueur dans une atmosphère constituée d'air. En augmentant la longueur du nuage de poussière d'aluminium à 10 m, le régime de détonation n'a pas pu être atteint non plus. En effet, la dimension transversale du nuage d'aluminium n'était que de 1 m, ce qui est certainement insuffisant du fait qu'une expansion précoce de l'écoulement se produit derrière le front incident empêchant ainsi le couplage du front de choc et de la zone de réaction, couplage nécessaire à l'établissement de la détonation.

Par ailleurs, l'ordre de grandeur $E_c = 5.12 \times 10^7$ J obtenu (relation (8.7)) est cohérent avec les expériences de Zhang et al. [82] pour lesquelles 8 kg de C4 ont été nécessaires pour initier la détonation d'un nuage de flocons d'aluminium dans l'air. Cette observation confirme le bien fondé de notre modèle pour estimer E_c .

8.3.4 Conclusion

La comparaison des énergies d'initiation qui ressortent de cette étude avec celles utilisées pour les détonations en milieu homogène gazeux confirment la faible détonabilité des mélanges hétérogènes biphasiques composés d'une atmosphère gazeuse oxydante et de particules solides : dans le cas de mélanges homogènes gazeux hydrocarbone - oxygène, Matsui [205] a proposé des énergies critiques d'initiation de 10^{-3} à 1 J alors que pour des mélanges homogènes gazeux hydrogène - air stœchiométriques, Makeev et al. [206] proposent une énergie critique de 4×10^3 J, ce qui ne correspond qu'à 1 g de TNT. Il existe donc un rapport d'au moins trois ordres de grandeur avec les énergies de plusieurs kilogrammes de TNT nécessaires dans le cas de détonations dans des mélanges biphasiques contenant des particules de diamètre O(10 μ m).
Chapitre 8. Initiation directe des détonations gaz - particules d'aluminium et conditions critiques d'amorçage

Troisième partie

Les détonations hétérogènes gaz - gouttelettes liquides

CHAPITRE 9

Modélisation numérique

Chapitre 9

Modélisation numérique

9.1 Introduction

De même que pour les mélanges gaz - particules solides, on cherche à disposer d'un outil numérique permettant d'une part d'analyser la structure du front de détonation et de l'écoulement arrière, et d'autre part, de simuler la détonation de mélanges gaz - gouttelettes dans des situations et configurations variées.

Néanmoins, la modélisation des mélanges gaz - gouttelettes présente des difficultés supplémentaires liées à la présence de phénomènes qui n'apparaissent pas dans les détonations gaz - particules solides : en effet, il faut prendre en compte les processus de vaporisation des gouttelettes, les transferts de masse, quantité de mouvement et énergie, et éventuellement intégrer des modèles pour leur déformation et atomisation en plus petits éléments.

On a choisi d'utiliser le même code de calcul (EFAE) que pour les mélanges gaz particules solides. Les modèles sélectionnés ont donc été introduits dans ce code. Les premiers calculs effectués auront pour objet la validation du modèle.

9.2 Hypothèses

Comme pour les mélanges gaz - particules solides, la modélisation du milieu hétérogène s'appuie sur le modèle de Nigmatulin [193] (séparation des phases gazeuse et condensée en terme de masses volumiques, vitesses et températures), et en adoptant les mêmes hypothèses (voir chapitre 4). On considère des gouttelettes de faible diamètre. La température interne de ces dernières est supposée uniforme (la convection limite leur température). La détonation est décrite par le modèle ZND. Pour prendre en compte les spécificités de la phase liquide, on adjoint les hypothèses suivantes :

– Les gouttelettes liquides ne se déforment pas et sont incompressibles

- Les gouttelettes ne se désintègrent pas en plus petits éléments (conservation du nombre de gouttelettes) : cette hypothèse repose sur le fait que les gouttelettes sont de petite dimension
- La volatilité du liquide n'est pas prise en compte (pas de combustible évaporé avant le choc d'initiation)
- L'évaporation a lieu selon le mode diffusif classique auquel on ajoute le mode "stripping" (cf. chapitre 3) pour tenir compte des effets mécaniques de l'écoulement sur les gouttelettes avant relaxation des vitesses matérielles (nombre de Weber élevé)
- Les réactions chimiques entre le combustible évaporé et les gaz oxydants sont décrites par une cinétique à deux étapes, comportant une phase d'induction et une phase de combustion
- Le volume occupé par les gouttelettes liquides est négligeable devant le volume total

Il s'agit donc d'un modèle simplifié, mais qui permet une première approche du problème tout en conservant des temps de calcul raisonnables.

9.3 Equations de bilan

Les équations de bilan sont identiques à celles des mélanges gaz - particules solides, mais le bilan des espèces gazeuses doit tenir compte des fractions d'oxydant, de combustible évaporé et des produits de détonation. Dans les équations ci-après, les notations adoptées sont les mêmes que pour les mélanges gaz - particules solides (cf. chapitre 4).

9.3.1 Equations de bilan pour la phase gazeuse

Bilan de masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = J \tag{9.1}$$

Bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \left(\left(\rho \mathbf{u} \right) \otimes \mathbf{u} \right) = -\nabla p + J \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \mathbf{f}$$
(9.2)

Bilan d'énergie

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(E+p)) = -q + J(e_p + Q_{mélange}) - \mathbf{f} \cdot \mathbf{vp}$$
(9.3)

9.3.2 Equations de bilan pour la phase liquide

Bilan de masse

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v_p}) = -J \tag{9.4}$$

Bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \sigma \mathbf{v}_{\mathbf{p}}}{\partial t} + \nabla ((\sigma \mathbf{v}_{\mathbf{p}}) \otimes \mathbf{v}_{\mathbf{p}}) = \mathbf{f} - J \mathbf{v}_{\mathbf{p}}$$
(9.5)

Bilan d'énergie

$$\frac{\partial E_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v_p} E_p) = q - J e_p + \mathbf{f} \cdot \mathbf{v_p}$$
(9.6)

Aux équations de bilan (9.4), (9.5) et (9.6) s'ajoute l'équation de conservation du nombre de gouttelettes, qui demeure valide du fait que la désintégration des gouttelettes n'est pas prise en compte.

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla \cdot (n_p \mathbf{v_p}) = 0 \tag{9.7}$$

9.3.3 Equations spécifiques au bilan de masse des espèces gazeuses

En amont du choc incident, la phase gazeuse ne contient que de l'oxydant, c'està-dire $x_{ox} = 1$. En aval du choc incident, la phase gazeuse comprend en général trois espèces : les gaz frais (indice "ox"), le combustible évaporé (indice "fuel") et les produits de détonation (indice "rp"). On définit les concentrations des différentes espèces ρ_i à partir de leur fraction massique x_i :

$$\rho_{ox} = x_{ox}\rho \tag{9.8}$$

$$\rho_{fuel} = x_{fuel}\rho\tag{9.9}$$

$$o_{rp} = x_{rp}\rho \tag{9.10}$$

Les fractions massiques x_i vérifient la condition suivante :

$$x_{ox} + x_{fuel} + x_{rp} = 1 (9.11)$$

A la différence des particules solides d'aluminium, dont la réaction commence après avoir atteint les conditions critiques d'inflammation, les gouttelettes liquides s'évaporent pour former du combustible sous forme gazeuse. C'est ce dernier qui va réagir avec l'oxydant gazeux. Il faut alors distinguer l'étape intermédiaire entre les gaz frais et les produits de détonation, en considérant un mélange qui contient une phase liquide combustible non évaporée, le combustible évaporé et les gaz frais. On introduit alors une équation de bilan pour le combustible évaporé :

$$\frac{\partial \rho_{fuel}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{fuel} \mathbf{u}) = J - [fuel]$$
(9.12)

Dans l'équation (9.12), le taux de production de vapeur combustible est contrôlé par l'évaporation de la phase liquide (terme J) et par le taux de réaction entre l'oxydant et la vapeur combustible (terme [fuel]).

Le bilan de masse des produits de détonation et de l'oxydant s'écrivent alors dans le cas des gouttelettes liquides (χ étant le cœfficient stœchiométrique), respectivement sous la forme des équations (9.13) et (9.14) :

$$\frac{\partial \rho_{rp}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{rp} \mathbf{u}) = (1 + \chi) [fuel]$$
(9.13)

$$\frac{\partial \rho_{ox}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{ox} \mathbf{u}) = -\chi[fuel]$$
(9.14)

Le coefficient stochiométrique χ est ajusté suivant la nature de l'atmosphère (environ 15 pour l'air et 3 pour l'oxygène).

9.4 Interactions entre les phases gazeuse et liquide

Les échanges de masse entre les gouttelettes et les gaz diffèrent fortement de ceux des détonations gaz - particules solides. En effet, pour les suspensions contenant des particules d'aluminium, les réactions chimiques commencent immédiatement après l'inflammation des éléments solides. Dans le cas des gouttelettes liquides, les processus se déroulent en deux temps [177], [188] :

- Vaporisation des gouttelettes liquides : production d'espèces gazeuses combustibles
- Combustion en phase gazeuse

Par voie de conséquence, les termes d'interaction entre les phases sont modifiés par la manière dont on modélise le facteur J. En revanche, les termes \mathbf{f} et q demeurent inchangés.

9.4.1 Taux de production de vapeur

On considère un mécanisme diffusif classique caractérisé par un temps de vaporisation obéissant à une loi classique en d_p^2 (typique des hydrocarbures). On introduit le temps de vaporisation τ_{vap} ainsi que la constante de vaporisation K_{vap} , telles que :

$$\tau_{vap} = K_{vap} d_{p0}^2 \tag{9.15}$$

Pour tenir compte des interactions entre les gouttelettes et l'écoulement, on considère, en accord avec les résultats de Mitrofanov et al. [177] et Zhdan et Prokhorov [188] (cf. chapitre 3), que le taux de vaporisation est modifié de manière préférentielle par le mode "stripping". Celui-ci dépend de la valeur du nombre de Weber We et du nombre de Reynolds Re dont on rappelle les formules :

$$We = \rho \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}_{\mathbf{p}}|^2 d_p}{\sigma_l} \tag{9.16}$$

$$Re = d_p \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v_p}|}{\nu} \tag{9.17}$$

Le nombre de Weber We caractérise le rapport des forces d'inertie et la tension superficielle. Le nombre de Reynolds Re caractérise quant à lui le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses.

9.4.1.1 Régime diffusif

Lorsque $We < Re^{0.5}$ ou $Re^{0.5} < 10 \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu_p}{\nu}\right)^{\frac{2}{3}}$, le taux de vaporisation évolue suivant la relation (9.18), sous réserve que la température des gouttelettes liquides est supérieure à leur température d'ébullition.

$$J = J_{diff} = 3\sigma \frac{1 + 0.276 R e^{0.5}}{\tau_p}$$
(9.18)

Dans la relation (9.18), le taux de vaporisation comporte un terme correctif pour tenir compte des effets convectifs dus aux différences de vitesse entre les deux phases.

9.4.1.2 Mode "stripping"

Lorsque $We > Re^{0.5} > 10 \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu_p}{\nu}\right)^{\frac{2}{3}}$, le taux de vaporisation est déterminé par le mode "stripping" suivant la loi [177] :

$$J = J_{strip} = \frac{3}{2}\sqrt{3\pi}\sigma\nu_p^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho}{\rho_p}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu}{\nu_p}\right)^{\frac{1}{6}} \frac{\sqrt{|\mathbf{u} - \mathbf{vp}|}}{R_p^{\frac{3}{2}}}$$
(9.19)

9.4.2 Réactions chimiques dans la phase gazeuse

Comme pour les détonations gazeuses classiques, on considère une période d'induction et une période de combustion.

9.4.2.1 Période d'induction

La période d'induction est pilotée par une loi d'Arrhenius sur le délai d'inflammation des réactions chimiques t_{qaz} , défini comme suit :

$$t_{gaz} = Z_{gaz} exp\left(\frac{\varepsilon_a}{RT}\right) \tag{9.20}$$

avec :

 Z_{gaz} : facteur préexponentiel

 ε_a : énergie d'activation

On introduit alors Y la fraction du délai d'inflammation restant telle que Y = 1sur le front de détonation (milieu gazeux chimiquement non activé) et Y = 0 à la fin de la période d'induction (début des réactions chimiques). Le décompte du délai d'inflammation t_{gaz} débute selon l'équation (9.21), dès lors que les gouttelettes commencent leur vaporisation. Numériquement, on utilise la condition $x_{fuel} > 0$ pour commencer le décompte.

$$\frac{dY}{dt} = -\frac{1}{t_{gaz}} \tag{9.21}$$

9.4.2.2 Période de combustion

L'hypothèse selon laquelle la combustion serait immédiate à la fin de la période d'induction est trop simplificatrice (Paplinski [207]). C'est pourquoi on introduit un schéma cinétique simplifié (Westbrook et Dryer [208]) pour modéliser le taux de réaction [*fuel*] du combustible gazeux avec le gaz ambiant, lorsque Y = 0 (c'est-à-dire lorsque que les gaz sont activés, selon la loi (9.21)) :

$$[fuel] = -\frac{(10^6)^{1-b_{fuel}-b_{ox}}A_c}{(W_{m_{fuel}})^{b_{fuel}-1}(W_{m_{ox}})^{b_{ox}}}[\rho_{fuel}]^{b_{fuel}}[\rho_{ox}]^{b_{ox}}exp\left(-\frac{E_{AC}}{RT}\right)$$
(9.22)

Avec :

 $\begin{array}{lll} A_c & : \mbox{facteur préexponentiel} \\ E_{AC} & : \mbox{énergie d'activation} \\ \rho_{fuel} & : \mbox{concentration massique en combustible gazeux} \\ \rho_{ox} & : \mbox{concentration massique en oxydant} \\ b_{fuel} & : \mbox{exposant associé à } \rho_{fuel} \\ b_{ox} & : \mbox{exposant associé à } \rho_{ox} \\ W_{m_{fuel}} & : \mbox{masse molaire du combustible} \\ W_{m_{ox}} & : \mbox{masse molaire de l'oxydant} \end{array}$

Le facteur préexponentiel A_c est exprimé en $\left[\frac{mol}{cm^3}\right]^{1-b_{fuel}-b_{ox}} \cdot \frac{1}{s}$ tel qu'il apparaît dans [208].

9.4.3 Conséquence sur les paramètres thermodynamiques

La présence de combustible évaporé nécessite de calculer les paramètres thermodynamiques en prenant en considération cette fraction supplémentaire. Chaque espèce présente dans la phase gazeuse est donc pondérée par sa fraction massique pour calculer les paramètres thermodynamiques de la phase gazeuse "totale" :

$$c_p = x_{fuel}c_{p_{fuel}} + x_{rp}c_{p_{rp}} + (1 - x_{fuel} - x_{rp})c_{p_0}$$
(9.23)

$$c_v = x_{fuel}c_{v_{fuel}} + x_{rp}c_{v_{rp}} + (1 - x_{fuel} - x_{rp})c_{v_0}$$
(9.24)

$$\frac{1}{W_m} = x_{fuel} \frac{1}{W_{m_{fuel}}} + x_{rp} \frac{1}{W_{m_{rp}}} + (1 - x_{fuel} - x_{rp}) \frac{1}{W_{m_0}}$$
(9.25)

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \tag{9.26}$$

Le terme $1 - x_{fuel} - x_{rp}$ représente x_{ox} .

9.5 Equations d'état

Le volume occupé par les gouttelettes étant négligeable, on introduit l'hypothèse du gaz parfait. Le système d'équations est fermé par l'équation d'état des gaz :

$$p = \frac{\rho RT}{W_m} \tag{9.27}$$

$$e = c_v T \tag{9.28}$$

Dans les équations (9.27) et (9.28) interviennent respectivement la masse molaire des gaz W_m , et leur capacité thermique massique à v constant c_v . W_m et c_v prennent en considération toutes les espèces présentes dans la phase gazeuse, d'après leurs définitions respectives par les équations (9.24) et (9.25).

CHAPITRE 10

Détonations hétérogènes gaz gouttelettes liquides d'octane

Chapitre 10

Détonations hétérogènes gaz gouttelettes liquides d'octane

10.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de valider le modèle décrit au chapitre 9 par des simulations numériques effectuées dans des conditions pour lesquelles des résultats expérimentaux sont disponibles. On considère comme cas de référence pour valider le modèle les expériences d'Alekseev et al. [115] qui ont étudié l'initiation directe de la détonation d'un aérosol non confiné de gouttelettes d'octane C₈H₁₈ de diamètre 50 μ m, à la stœchiométrie. L'aérosol se présentait sous la forme d'un nuage ayant une longueur de 15-17 m et un rayon de 6-8 m, pour un volume total de 1100 m³. L'initiation était réalisée au moyen d'une charge d'explosif condensé (1 kg de TNT) ou d'une détonation gazeuse propane - air. Pour les deux moyens d'initiation utilisés, Alekseev et al. [115] ont observé des cellules de détonation de largeur $\lambda_{exp} = 4-5$ cm.

10.2 Paramètres de calcul

10.2.1 Conditions initiales

10.2.1.1 Phase gazeuse

On se place dans des conditions de pression et de température ambiantes dans une atmosphère d'air :

 $- p_0 = 1.013$ bar $- T_0 = 298$ K $- \rho_0 = 1.18$ kg/m³

10.2.1.2 Phase liquide

Le tableau 10.1 résume les propriétés des gouttelettes d'octane choisies pour les simulations.

Propriétés de l'octane				
Concentration	: <i>σ</i>	= 0.07844	kg/m^3	
Masse volumique d'octane	: ρ_p	=703	$\rm kg/m^3$	
Diamètre	: d_{p0}	= 50	$\mu { m m}$	
Capacité thermique	: c_{p_p}	= 2295.4	$\rm J/kg/K$	
Température d'ébullition	: T_{vap}	= 399	Κ	
Chaleur latente de vaporisation	: L_{vap}	$s=3.06 imes10^{5}$	J/kg	
Viscosité dynamique	: μ_p	$= 5.1 \times 10^{-4}$	Pa.s	
Tension superficielle	: σ_l	= 0.02162	N/m	

TAB. 10.1 – Propriétés de la phase liquide (octane) pour les simulations de détonation de suspensions de gouttelettes liquides

10.2.2 Paramètres thermodynamiques du mélange

Les paramètres thermodynamiques des différents composants servant à calculer l'état thermodynamique du mélange total (d'après les équations du paragraphe (9.4.3)) sont indiqués dans le tableau 10.2.

Gaz frais	Combustible évaporé	Produits de détonation
(air)	(octane gazeux)	
$c_v = 738.9~\mathrm{J/kg/K}$	$c_{v_{fuel}} = 1585.5~\mathrm{J/kg/K}$	$c_{v_{rp}}=1836.2~\mathrm{J/kg/K}$
$W_m=28.85~{ m g/mol}$	$W_{m_{fuel}}=0.114~{ m g/mol}$	$W_{m_{rp}}=27.83~{ m g/mol}$
$\gamma=1.39$	$\gamma_{fuel} = 1.046$	$\gamma_{rp}=1.1627$

TAB. 10.2 – Paramètres thermodynamiques des réactifs et des produits de détonation d'un mélange air - octane stœchiométrique

10.2.3 Paramètres de cinétique chimique

Les paramètres intervenant dans la modélisation de la cinétique chimique concernent d'une part l'évaporation des gouttelettes via le terme d'échange de masse J, et d'autre part l'oxydation du combustible sous forme gazeuse par l'oxygène contenu dans l'atmosphère ambiante (incluant une période d'induction et une période de combustion).

10.2.3.1 Evaporation des gouttelettes

L'évaporation des gouttelettes liquides a lieu soit par le mode dit "stripping" (équation (9.19)), soit par régime diffusif classique (équation (9.18)), en fonction de la condition sur

le nombre de Weber. Dans le cas de l'évaporation par mode "stripping", J_{strip} ne dépend que de l'état mécanique des gouttelettes à un instant donné. Ainsi, seule la constante de vaporisation K_{vap} intervenant dans l'expression de τ_{vap} (équation (9.15)) nécessite d'être définie. Nous avons adopté la valeur proposée par Mitrofanov et al. [177] : $K_{vap} = 4 \times 10^6 \text{ s/m}^2$ pour des particules ou gouttelettes sphériques.

10.2.3.2 Période d'induction de la phase gazeuse

La définition de la période d'induction pour la phase gazeuse nécessite de fixer les paramètres de la loi d'Arrhenius régissant le délai d'inflammation t_{gaz} . L'énergie d'activation ε_a choisie est celle proposée par Voronin et Zhdan [209]. Cependant, le facteur préexponentiel choisi Z_{qaz} est inférieur d'un ordre de grandeur environ par rapport au leur.

 $- Z_{gaz} = 6.67 \times 10^{-11} \text{ s}$ $- \varepsilon_a = 36 \ 200 \ \text{cal/mol}$

10.2.3.3 Taux de combustion

Le calcul du taux de combustion du combustible évaporé défini par l'équation (9.22) nécessite de fixer quatre paramètres : le facteur préexponentiel et l'énergie d'activation (respectivement A_C et E_{AC}), ainsi que les deux exposants b_{fuel} et b_{ox} . Les valeurs choisies pour ces paramètres sont celles proposées par Westbrook et Dryer [208], à l'exception de A_C dont la valeur est prise inférieure d'environ deux ordres de grandeur à celle de Westbrook et Dryer [208].

$$egin{aligned} &-A_C = 5.5 imes 10^9 \ [rac{mol}{cm^3}]^{1-b_{fuel}-b_{ox}}.rac{1}{s} \ &-E_{AC} = &30 \ 000 \ ext{cal/mol} \ &-b_{fuel} = & 0.25 \ &-b_{ox} = & 1.5 \end{aligned}$$

10.2.4 Etat CJ

On détermine l'état CJ correspondant à la détonation idéale du mélange, en considérant les réactions chimiques complètes et instantanées. Cet état sert de référence pour analyser les résultats des simulations numériques. En outre, il permet également de calculer la valeur de la chaleur de réaction $\Delta_r h^*$, qui est un paramètre des calculs. L'état CJ est calculé à partir du code TDS [7] pour les conditions initiales ci-dessus :

- $D_{CJ} = 1824 \text{ m/s}$
- $p_{CJ} = 19.8$ bar
- $-T_{CJ} = 2906 \text{ K}$
- $W_{mCJ} = 0.0278 \; {
 m kg/mol}$
- $-\gamma_{CJ} = 1.16$

10.2.5 Initiation de la détonation

L'initiation de la détonation est réalisée suivant le modèle du point d'explosion. Pour les calculs monodimensionnels, on a utilisé une source ponctuelle d'énergie $E_i = 1.5 \times 10^6 \text{ J/m}^2$. Pour les calculs 2D, on a utilisé une énergie d'initiation $E_i = 3 \times 10^5 \text{ J/m}^2$. Cette valeur est plus faible que dans le cas monodimensionnel du fait que la réflexion de l'onde de souffle sur les parois du tube favorise la formation des ondes transverses et l'établissement d'un régime de détonation.

10.3 Calculs monodimensionnels

10.3.1 Domaine de calcul et résolution numérique

Les simulations sont effectuées avec les paramètres suivants, en géométrie 1D plane, avec adaptation, jusqu'à une longueur de propagation de 2 m :

 $-N_x = 1000, N_{fine} = N_{adaptation} = 500$ $-\Delta x = 0.75 \text{ mm}$ - CFL = 0.35

On rappelle que N_{fine} correspond au nombre de mailles gardant la résolution numérique initiale dans la zone située derrière le front de détonation et que $N_{adaptation}$ correspond au nombre de mailles de taille variable discrétisant le reste du milieu.

10.3.2 Résultats

La figure 10.1 montre l'évolution du pic de pression au front de choc incident et de la célérité de détonation en fonction du temps, et la figure 10.2 les profils de vitesse matérielle des gaz et de pression en fonction de la distance de propagation. La pression au niveau du front de détonation (figure 10.1-a) et la célérité de propagation (figure 10.1-b) se stabilisent à partir de t = 0.25 ms environ (soit $x \simeq 0.50$ m), respectivement aux alentours de 35.4 bar et 1757 m/s.

La célérité de détonation oscille entre 1745 m/s et 1798 m/s, autour de la valeur moyenne de 1757 m/s (respectivement -0.7 % et 2.3 % d'écart avec la valeur moyenne). Cette valeur moyenne est nettement inférieure à la célérité de la détonation Chapman Jouguet $D_{CJ} = 1824$ m/s. Le déficit moyen est de 3.6 % par rapport à D_{CJ} . Il est dû à une combustion incomplète des gouttelettes liquides ($d_{p0} = 50 \ \mu$ m) dans le front de détonation et à leur combustion en aval du point CJ. Ce problème sera discuté plus loin (cf. paragraphe 10.3.3).



FIG. 10.1 – Evolution (a) du pic de pression et (b) de la célérité de détonation en fonction du temps, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

Pour estimer le temps nécessaire à l'établissement d'une détonation stationnaire et autonome, il faut de plus examiner les profils de pression et de vitesse matérielle des gaz (cf. figure 10.2).



FIG. 10.2 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

Les profils de pression et vitesse matérielle des gaz (respectivement sur les figures 10.2-a et 10.2-b) montrent que la détonation peut être considérée comme stationnaire et autonome à partir de x = 1.50 m environ ($t \approx 82$ ms). Sur la figure 10.1-a, on constate que la valeur du pic de pression au front de détonation continue à fluctuer même lorsque la détonation est stationnaire et autonome. Ce phénomène est tout à fait normal et est inhérent à l'instabilité intrinsèque du modèle 1D et de l'utilisation de lois d'Arrhenius.

La pression moyenne sur le front de détonation est de 35.4 bar, et oscille entre 33.7 et 36.7 bar, soit respectivement -4.8 % et 3.7 % d'écart par rapport à la pression moyenne. Ces oscillations de pression sont dues à la présence des deux loi d'Arrhenius dans le schéma cinétique de combustion des gouttelettes évaporées.

10.3.3 Analyse des résultats

10.3.3.1 Profils macroscopiques

La figure 10.3 présente les profils de pression, masse volumique et température des gaz ainsi que les vitesses matérielles des gaz et des particules. On peut remarquer que l'équilibre des vitesses entre les deux phases intervient à x = 0.40 m environ, soit 1.40 m derrière le front de détonation. Le profil de vitesse matérielle des gouttelettes présente des gradients plus faibles que dans le cas des particules d'aluminium.



FIG. 10.3 – Pression, masse volumique, température des gaz et vitesses matérielles des deux phases à l'instant t = 1 ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78$ g/m³) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu$ m

Pour étudier plus en détail l'évolution des paramètres physiques derrière le front incident, on se place dans le repère lié à l'onde de détonation (X = Dt - x et X = 0 sur) le front). La zone de réaction (définie entre X = 0 et $X_{M=1}$) s'étend sur une longueur de 16.3 cm, comme le montre le profil du nombre de Mach $M = \frac{D-u_x}{c}$ de la figure 10.4.



FIG. 10.4 – Profil du nombre de Mach à t = 1 ms pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

10.3.3.2 Evaporation des gouttelettes liquides

La figure 10.5 montre les profils de concentration, température et rayon des gouttelettes liquides au niveau du front de détonation.



FIG. 10.5 – Profils de concentration, température et rayon des gouttelettes liquides à t = 1 ms pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{v0} = 50 \ \mu\text{m}$

Il apparaît que l'évaporation des gouttelettes intervient majoritairement dans une zone de longueur 8.5 mm environ dans laquelle le rayon diminue de sa valeur initiale jusqu'à R_p = 7.5 μ m environ. Au delà de cette zone, le taux d'évaporation devient quasiment nul. A la fin de la zone de réaction (X = 16.3 cm), le rayon des particules est environ de 7.35 μ m et ne diminue pratiquement plus. Ainsi, 97.5 % de la masse des gouttelettes liquides est évaporée avant le point CJ. Les 2.5 % de la masse qui ne s'évapore pas créent un déficit sur $\Delta_r h^*$, contribuant ainsi au déficit de célérité de détonation de 3.6 % par rapport à la valeur idéale. En outre, même en arrière du point CJ, une fraction non négligeable des gouttelettes n'est pas évaporée.

La présence d'une fraction de gouttelettes liquides résiduelle derrière le point CJ peut être expliquée par les modes d'évaporation (cf. figure 10.6). En effet, le taux d'évaporation est élevé lorsqu'il est contrôlé par le mode "stripping" (*J* compris entre 10 et 2.5 × $10^4 \text{ kg/m}^3/\text{s}$), ce qui se produit sur une zone d'un peu moins de 5 cm. Au delà de cette zone, la condition $We > Re^{0.5} > 10 \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu_p}{\nu}\right)^{\frac{2}{3}}$ n'est plus vérifiée, et la température des particules est inférieure à la température d'évaporation de l'octane, ce qui a pour effet de stopper les processus d'évaporation. Ainsi, l'évaporation incomplète de la phase liquide est due à la température des gouttelettes qui est trop faible pour supporter le régime diffusif lorsque la condition $We > Re^{0.5} > 10 \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\nu_p}{\rho}\right)^{\frac{2}{3}}$ n'est plus vérifiée.



FIG. 10.6 – Mode d'évaporation des gouttelettes liquides à t = 1 ms pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

Dans le cas de la détonation de gouttelettes liquides de kérosène de 1 mm de diamètre dans de l'oxygène pur, Mitrofanov et al. [177] ont conclu que seulement 3% de la phase liquide s'évapore selon le régime diffusif, ce qui est cohérent avec nos présents résultats. Cependant, leur modèle prenait en compte la déformation et la désintégration des gouttelettes. Mais les différences avec nos modèles et tailles de gouttelettes ne permettent qu'une comparaison qualitative. De ces remarques, il ressort que pour atteindre des réactions chimiques complètes (correspondant à la célérité de détonation CJ), il faudrait prendre en compte la fragmentation des gouttelettes liquides dès que leur rayon initial est supérieur à une valeur typiquement de l'ordre de 10μ m. Les résultats expérimentaux montrent qu'il est possible d'avoir des déficits quasiment nuls dans les systèmes considérés.

10.3.3.3 Phase de combustion

La figure 10.7 montre les profils de fractions massiques d'oxydant, de combustible évaporé et des produits de détonation dans la zone de réaction. La fraction du délai d'inflammation restant Y et le taux de combustion [fuel] sont également représentés. On constate que la période d'induction est très courte (environ 1 mm), ce qui signifie que les réactions chimiques débutent de manière quasiment immédiate après la vaporisation des gouttelettes. Le taux de combustion [fuel] croît sur une zone de 1 cm environ (cf. Fig. 10.7-b) et atteint un maximum de l'ordre de $3.25 \times 10^4 \text{ kg/m}^3/\text{s}$ à X = 3 mm. Il est limité par l'évaporation des gouttelettes liquides : en effet, la fraction massique de combustible gazeux x_{fuel} augmente jusqu'à son maximum au moment de l'inflammation, avant de décroître lors de la combustion, ce qui signifie que sa consommation est plus grande que sa production par évaporation. Par ailleurs, la fraction massique en oxydant x_{O_2} à la fin de la combustion n'est pas nulle, du fait que le mélange est stœchiométrique et l'évaporation incomplète. Enfin, la fraction massique des produits de détonation x_{rp} atteint une asymptote (proche de l'unité) à partir de X = 3 cm environ. Il est à noter que le taux de combustion [fuel] a une valeur finie, ce qui confirme l'hypothèse selon laquelle il est nécessaire d'incorporer un schéma cinétique pour la phase de combustion du gaz.

Il est à noter que Paplinski [207] a obtenu, dans le cas de la détonation d'un mélange stœchiométrique de gouttelettes d'heptane dans de l'air, une période d'induction des gaz de l'ordre du millimètre et une asymptote pour x_{fuel} à X = 1.2 cm environ. Cependant, il a utilisé des gouttelettes de 200 μ m de diamètre et a incorporé la désintégration de ces dernières dans son modèle lors des simulations.



FIG. 10.7 – Fractions massiques de l'oxydant, du combustible évaporé et des produits de détonation ; fraction de la période d'induction et taux de combustion à t = 1 ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

10.4 Structure cellulaire

10.4.1 Paramètres des simulations 2D

Le mélange et les paramètres le décrivant sont ceux du paragraphe 10.2. Pour faciliter l'initiation du mélange sans utiliser des énergies d'amorçage trop élevées, les simulations 2D sont effectuées dans un canal très étroit ($D_{tube} = 6$ mm) en ne considérant pas les pertes aux parois. Cette configuration permet de générer des instabilités menant à des surpressions locales qui favorisent l'inflammation des gouttelettes liquides. On utilise une énergie d'initiation $E_i = 3 \times 10^5 \text{ J/m}^2$. Une fois un régime stationnaire et autonome atteint, une nouvelle simulation est effectuée dans un canal plus large de sorte qu'il puisse contenir plusieurs cellules de détonation. Les conditions initiales sont fixées à partir d'un fichier de sauvegarde issu de la simulation dans le canal étroit. Les simulations sont effectuées avec adaptation du maillage, sur une distance de propagation de 16 m, en utilisant les paramètres suivants :

 $- D_{tube} = 0.30 \text{ m}$ $- N_x = 1000, N_y = 400, N_{fine} = N_{adaptation} = 500$ $- \Delta x = \Delta y = 0.75 \text{ mm}$ - CFL = 0.35

10.4.2 La structure cellulaire

10.4.2.1 Caractéristiques générales

Après une distance de propagation de 5 m environ, on observe l'apparition d'une structure cellulaire. La figure 10.8 montre les traces obtenues pour le mélange stœchiométrique air - octane. On remarque que la structure cellulaire obtenue est irrégulière, et a une allure qualitative assez semblable à celle des détonations de mélanges gazeux homogènes. Les frontières des cellules sont en outre bien définies comparativement à celles des structures cellulaires des détonations gaz - particules d'aluminium. L'irrégularité des cellules de détonation est probablement due à la présence des deux lois d'Arrhenius qui gouvernent respectivement les périodes d'induction et de combustion de l'octane évaporé. Par ailleurs, les énergies d'activation utilisées sont proches de celles des gaz (donc élevées) pour lesquels la structure cellulaire est également irrégulière.

Les zones noires sur la figure 10.8 correspondent au bord des plaques successives d'enregistrement des cellules issues des simulations, juste avant le passage du front de détonation. Par soucis de commodité, il a été préféré de montrer les cellules de détonation sur des distances d'un mètre, plutôt que plaque par plaque. On remarque de plus que le front de détonation est parfois très irrégulier.

La largeur λ moyenne des cellules de détonation obtenues est de l'ordre de 4-5 cm.

On remarque de plus que certaines d'entre elles peuvent atteindre une largeur proche de 10 cm. Ces résultats sont en très bon accord avec les observations d'Alekseev et al. [115] obtenues sur les plaques de suies lors de leurs expériences.

Le rapport $\frac{\lambda}{L}$ de la largeur des cellules de détonation sur leur longueur est compris entre 0.5 et 0.65. Rappelons que ce rapport est plutôt de l'ordre de 0.6 pour les gaz et de 0.45-0.5 pour les mélanges gaz - particules solides d'aluminium (cf. chapitre 6). Les cellules de détonation obtenues présentent donc un aspect et des caractéristiques plus proches de ceux des gaz que des mélanges hétérogènes à base de particules solides.



FIG. 10.8 – Cellules de détonation simulées pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

10.4.2.2 Influence de la distance de propagation

Lors des calculs monodimensionnels (cf. paragraphe 10.3), les détonations de mélanges air - octane ont été simulées jusqu'à une distance de 2 m. Dans le présent paragraphe, la structure cellulaire de la figure 10.8 est représentée jusqu'à une distance de 15 m, pour pouvoir effectuer des comparaisons avec les expériences d'Alekseev et al. [115] dans lesquelles la longueur de l'aérosol de gouttelettes était de l'ordre de 15-17 m. Il est donc souhaitable de s'assurer à nouveau que la détonation est bien stationnaire et autonome sur des distances de cet ordre, et de vérifier également que le maillage adaptatif n'a pas atteint ses limites d'utilisation ($q_m = \frac{\Delta x(i)}{\Delta x(i+1)} < 1.2 - 1.4$).



FIG. 10.9 – Profils de pression et de vitesses moyennes dans la section du tube (respectivement (a) et (b)), et le long de l'axe du tube (respectivement (c) et (d)) pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

Le résultat de ces calculs bidimensionnels est reporté sur la figure 10.9. On peut considérer que la détonation est stationnaire et autonome sur l'ensemble de la distance parcourue. On constate que la pression et les vitesses, moyennées dans la section du tube, sont plus faibles que le long de l'axe. Ceci est dû à la présence sur l'axe du tube des points triples et de la collision de ces derniers. Par ailleurs, les pics de pression sont plus faibles que dans le cas monodimensionnel.

La figure 10.10 montre l'évolution de la célérité de propagation au cours du temps. La célérité moyenne de propagation calculée est de 1770 m/s, soit un déficit de 3 % par rapport à $D_{CJ} = 1825$ m/s. Cet écart est plus faible que lors des simulations monodimensionnelles (cf. figure 10.1) et peut s'expliquer par les ondes de choc générées lors des collisions de points triples qui favorisent la réaccélération du front de détonation.



FIG. 10.10 – Evolution de la célérité de détonation pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

10.4.3 Cartographies des paramètres thermomécaniques

Nous avons examiné l'évolution des paramètres thermomécaniques derrière le front de détonation en traçant des cartographies de ces paramètres. La figure 10.11 montre les cartographies de pression, masse volumique, vitesses matérielles longitudinales et radiales, et température pour la phase gazeuse, à l'instant t = 7.2 ms après l'initiation (soit une distance de propagation de 12.77 m environ), pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78$ g/m³, $d_{p0} = 50 \ \mu$ m).

Les cartographies de l'évolution du rayon des gouttelettes, de leur concentration, de leurs vitesses matérielles longitudinales et radiales, ainsi que de leur température pour le même instant sont montrés sur la figure (10.12).

L'analyse des profils de la phase gazeuse montre un comportement qualitatif similaire à celui des détonations gazeuses : à l'inverse des détonations gaz - particules d'aluminium, les zones de haute température et de haute pression coïncident et sont localisées au niveau des points triples, ce qui suggère que le taux de combustion est maximum dans ces zones. Inversement, les zones à basse pression correspondent à des zones de basse température, ce qui est clairement visible sur les figures 10.11-a, 10.11-e et 10.12-e, pour x = 12.77 m et y = 0.10 m. La masse volumique et les vitesses pour la phase gazeuse sont également maximales au niveau des points triples.



FIG. 10.11 – Cartographies de (a) pression, (b) masse volumique, vitesse matérielle selon x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température de la phase gazeuse à t = 7.2 ms, pour un mélange air - octane stœchiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$



FIG. 10.12 – Cartographies de (a) rayon, (b) concentration, vitesse matérielle selon x et y (respectivement (c) et (d)) et (e) température des gouttelettes liquides à t = 7.2 ms, pour un mélange air - octane stechiométrique ($\sigma = 78 \text{ g/m}^3$) - diamètre des gouttelettes $d_{p0} = 50 \ \mu\text{m}$

L'observation des cartographies de rayon et de concentration des gouttelettes liquides sur les figures 10.12-a et 10.12-b montre, d'une part, que l'évaporation des gouttelettes est très rapide et s'effectue dans une zone de l'ordre de 3 cm environ, et, d'autre part, que le taux d'évaporation est sensiblement uniforme sur tout le front de détonation. Ainsi, contrairement aux détonations de suspensions de particules d'aluminium, le caractère biphasique des détonations d'aérosols n'est pas clairement impliqué dans la structure de l'onde de détonation. Les ondes transverses ne créent pas de forts gradients de concentration de gouttelettes liquides : le temps caractéristique d'évaporation des gouttelettes est inférieur à celui de relaxation des particules de rayon initial correspondant. Il est à noter que dans la pratique, l'octane est un liquide volatile. Lors de leurs expériences, Alekseev et al. [115] ont gardé un délai de 2.5 s entre la formation de l'aérosol et l'initiation, afin qu'une fraction du carburant liquide s'évapore pour faciliter l'initiation. Cette dernière aurait probablement été plus difficile avec un liquide moins volatile.

Enfin, on peut remarquer que les maxima de vitesses matérielles des gouttelettes liquides (figures 10.12-c et 10.12-d) sont localisés relativement loin du front, à des abscisses où la masse liquide est déjà fortement évaporée. Il s'agit cependant de gouttelettes résiduelles (faible concentration) dont le rayon est relativement faible. Leur vitesse est proche de celle des gaz.

Quatrième partie Synthèse et conclusions

Synthèse et conclusions

Le but de cette étude était de contribuer à une meilleure compréhension des processus physico-chimiques qui gouvernent la propagation des détonations dans les mélanges hétérogènes gaz - particules solides et gaz - gouttelettes liquides, en particulier en examinant les propriétés caractéristiques de la structure "cellulaire" dans ce type de milieu.

Nos travaux se sont orientés vers l'utilisation de la simulation numérique, pour plusieurs raisons :

- la taille très importante des installations requises pour procéder à des expériences pertinentes, ce qui conduit à des montages lourds à mettre en œuvre et à des expériences coûteuses.
- le nombre très restreint de résultats concernant la structure cellulaire de ces milieux.
- La nécessité de développer la simulation numérique comme outil d'investigation de la structure des détonations dans les milieux hétérogènes, de manière comparable à ce qui a été entrepris pour les milieux gazeux homogènes.

Les simulations numériques ont donc été réalisées avec le code EFAE du LCD. Deux catégories de milieux ont été examinées :

- les suspensions de particules d'aluminium dans de l'air ou de l'oxygène
- les aérosols de gouttelettes d'hydrocarbures dans l'air

I - 1 Dans le cas des suspensions de particules d'aluminium, nous avons étudié deux modèles de combustion de l'aluminium, l'un dit "à deux étapes", l'autre dit "hybride", que nous avons testés à partir des résultats expérimentaux disponibles (un mélange oxygène - aluminium et un mélange air - aluminium). Dans le cas du mélange air - aluminium, les expériences de référence sont celles de Zhang et al. [76]. Les particules sont des flocons de diamètre équivalent $d_{p0} = 13.5 \ \mu$ m, à une concentration $\sigma = 500 \ \text{g/m}^3$ (richesse $\phi =$ 1.61). Les expériences d'Ingignoli et al. [81] sont prises comme référence pour le mélange oxygène - aluminium, avec des particules de type flocon de diamètre équivalent $d_{p0} = 8.6 \ \mu$ m, le mélange étant stœchiométrique ($\sigma = 1500 \ \text{g/m}^3$). Le modèle à deux étapes sépare la période d'induction (régime cinétique) de la phase de combustion (régime diffusif) par l'intermédiaire d'un critère d'inflammation, ce qui permet l'étude séparée de l'influence de chacune des deux périodes. Le modèle hybride, plus réaliste, combine les deux régimes par un mécanisme de type résistances électriques en parallèle, s'affranchissant de tout critère d'inflammation. Il est apparu que :

- La loi d'Arrhenius du modèle à deux étapes mène à une surestimation de la célérité de détonation. Pour le mélange air - aluminium et le mélange oxygène - aluminium, les excès de célérité de propagation sont respectivement de 2.5 % et 3.2 %. En revanche, le modèle hybride présente des célérités de détonation en accord avec les valeurs thermodynamiques, l'écart étant de 0.1 % pour les deux mélanges.
- Le modèle à deux étapes présente des fluctuations de pression plus importantes que le modèle hybride. De plus, les pressions moyennes obtenues sont similaires entre les deux modèles dans le cas du mélange oxygène - aluminium. Pour le mélange air - aluminium, les pressions obtenues sont plus importantes pour le modèle à deux étapes.
- Les profils des paramètres thermomécaniques sont en bon accord entre les deux modèles, et ce pour les deux mélanges.
- Malgré les définitions différentes de la cinétique chimique de l'aluminium, les deux modèles fournissent des taux de combustion similaires.
- Par ailleurs, l'analyse des régimes cinétique et diffusif permet d'estimer la résolution numérique nécessaire à l'étude de telles détonations : $\Delta r = O(1 \text{ mm})$ constitue un ordre de grandeur correct pour la taille des mailles numériques.

 ${\bf I}$ - ${\bf 2}$ A partir de ces modèles, nous avons cherché à simuler la structure "cellulaire" des détonations pour les deux mélanges considérés. Les calculs effectués nous ont permis de tirer les conclusions suivantes :

- Pour le mélange air aluminium, le modèle à deux étapes et le modèle hybride donnent respectivement des cellules de détonation de largeurs caractéristiques $\lambda =$ 37.5 cm et 40 cm, la valeur expérimentale de référence étant $\lambda_{exp} = 40$ cm.
- Pour le mélange oxygène aluminium, la largeur des cellules de détonation de référence est de l'ordre de 5-10 cm. Le modèle à deux étapes et le modèle hybride permettent d'obtenir des cellules de détonation, respectivement de largeur caractéristique $\lambda = 7.5$ cm et 10 cm.
- Le rapport $\frac{\lambda}{L}$ de la largeur des cellules de détonation sur leur longueur est compris entre 0.43 et 0.5, soit inférieur à celui généralement constaté pour les gaz ($\frac{\lambda}{L}$ de l'ordre de 0.6).
- Le diamètre des particules d'aluminium influe fortement sur les longueurs chimiques caractéristiques : $L_i \sim d_{p0}$ et $L_c \sim d_{p0}^{1.8}$. Par ailleurs, son influence sur la structure cellulaire montre que cette dernière dépend à la fois des périodes d'induction et de combustion, d'après la corrélation obtenue : $\lambda \sim d_{p0}^{1.4}$.
- Les ondes transverses jouent un rôle fondamental dans les processus physico-chimiques en convectant les particules d'aluminium vers les points triples, générant ainsi d'importants gradients de concentration dans la zone du front de détonation. Ainsi, les réactions chimiques étant pilotées par la compétition entre l'énergie libérée par la

combustion des particules et l'énergie nécessaire à leur chauffage, il s'ensuit que l'inflammation a lieu en premier dans les zones à basse pression, où la concentration de particules est plus faible. Cet aspect constitue une différence essentielle par rapport aux mélanges homogènes gazeux.

- La corrélation entre la taille des cellules de détonation et le délai d'induction, établie par Shchelkin et al. [22] dans le cas des mélanges gazeux homogènes, est étendue aux mélanges gaz - particules d'aluminium, indépendamment de la richesse, de la taille des particules et de l'oxydant : $\lambda \sim kL_i$, avec k de l'ordre de 10.

 ${\bf I}$ - ${\bf 3}$ Le régime hélicoïdal de détonation a été simulé pour la première fois dans les mélanges de particules d'aluminium en suspension dans une atmosphère gazeuse oxydante.

- Pour le mélange air aluminium dans les conditions de Zhang et al. [76], le régime hélicoïdal est obtenu pour une plage de diamètre de tube D_{tube} s'étendant de 10 à 30 cm, avec un pas moyen de la détonation hélicoïdale $P = 4.6 D_{tube}$ (soit 1.15 fois le périmètre du tube).
- Il est possible de simuler de manière satisfaisante un régime hélicoïdal de détonation avec une section droite de tube contenant un nombre réduit de mailles (20×20), avec une résolution numérique $\Delta r = 5$ mm. Il est cependant préférable d'avoir une résolution au moins inférieure ou égale à $\Delta r = 2.5$ mm.
- Les conclusions sur l'inflammation retardée des particules dans les points triples sont conservées pour les simulations du régime hélicoïdal.

I - 4 L'initiation directe des détonations gaz - particules d'aluminium et l'étude des conditions critiques d'amorçage ont permis de montrer que les pertes aux parois dans les détonations hétérogènes en milieu confiné permettent d'expliquer les déficits de célérité de propagation observés expérimentalement.

- En milieu non confiné, les régimes subcritique, critique et supercritique sont observés et l'énergie critique d'initiation en fonction de la richesse présente une allure en forme de "U", ce qui est similaire aux détonations homogènes gazeuses.
- Les corrélations sur le rayon critique de détonation et l'énergie critique d'initiation établies dans le cas des gaz peuvent être étendues aux mélanges hétérogènes gaz particules d'aluminium, soulignant par ailleurs la faible détonabilité de ces mélanges. Les énergies obtenues par les corrélations ($R_c = 1 \text{ m et } E_c = 10^5 \text{ J pour Al/O}_2$; $R_c = 8 \text{ m et } E_c = 5.12 \times 10^7 \text{ J pour Al/Air}$) sont en accord avec les expériences et les simulations existantes.

II - 1 Dans le cas des aérosols de gouttelettes d'hydrocarbures, on a incorporé dans le code un modèle d'évaporation basé sur le mode "stripping" (atomisation avec
arrachement d'une fine couche de liquide surfacique) et sur le régime diffusif, couplé à une cinétique chimique à deux étapes comportant une période d'induction et une phase de combustion. Les simulations ont été effectuées dans le cas de référence correspondant aux expériences d'Alekseev et al. [115] pour un mélange air - octane stœchiométrique contenant des gouttelettes de diamètre 50 μ m.

- Le déficit de célérité de propagation obtenu est de 3.6 % : il s'explique par une évaporation incomplète des gouttelettes liquides et par une combustion qui peut avoir lieu derrière le point CJ. L'importance de la désintégration des gouttelettes liquides de ce diamètre est mise en avant pour obtenir un régime idéal de détonation.
- L'évaporation des gouttelettes liquides a lieu essentiellement par le mode "stripping" sur une zone de quelques centimètres, les conditions de températures ne permettant pas d'obtenir une évaporation complète renforcée par le régime diffusif.

II - 2 La structure cellulaire de détonation a été simulée dans les conditions des expériences d'Alekseev et al. [115]. Il est apparu que :

- La structure cellulaire du mélange considéré est très irrégulière et la dimension des cellules de détonation est en accord avec les expériences d'Alekseev et al. [115] : $\lambda \simeq 4$ -5 cm.
- Par ailleurs, l'allure générale de la structure élémentaire est proche de celle des gaz et le rapport $\frac{\lambda}{L}$ est compris entre 0.5 et 0.65.
- Le comportement de l'onde de détonation est similaire à celui d'un mélange homogène gazeux : l'inflammation a lieu en premier aux points triples et les ondes transverses ne génèrent pas de gradients de concentration de gouttelettes comparables à ceux des particules solides.

III Suite à ces travaux, de nombreux points restent à clarifier concernant les processus qui régissent la structure des ondes de détonations hétérogènes.

- L'influence de la zone de combustion sur la structure cellulaire n'est pas clairement identifiée pour les détonations hétérogènes gaz - particules d'aluminium.
- L'influence de la pression initiale doit être prise en compte dans la définition du régime cinétique pour les particules d'aluminium afin de tester le modèle sur les cas expérimentaux à pression élevée de Zhang et al. [77], en particulier pour des régimes hélicoïdaux. Cette étape est nécessaire afin de poursuivre l'étude numérique des détonations hélicoïdales en milieu biphasique (y compris pour les mélanges contenant des gouttelettes). L'objectif est de déterminer les mécanismes de mise en rotation de l'écoulement.
- Le développement des modèles d'évaporation et de combustion doit être poursuivi dans le cas des détonations hétérogènes gaz - gouttelettes liquides d'hydrocarbures, afin d'étendre le domaine d'application du code (gouttelettes de diamètre important, nature du combustible liquide, etc...) en vue d'une étude plus détaillée de ces

détonations : influence de la phase d'évaporation et de la phase de combustion sur la structure cellulaire, existence et étude du régime hélicoïdal, ou encore le rôle des gouttelettes liquides.

En outre, le code de calcul EFAE a été en évolution permanente au cours de ces travaux. En particulier, la parallélisation des boucles a permis de considérablement réduire les temps de calculs, ce qui a ouvert la possibilité de complexifier les modèles physico-chimiques afin de les rendre plus réalistes, et d'accroître la précision des résultats (meilleure résolution numérique, diminution du nombre de Courant, etc...). Par ailleurs, plusieurs voies sont envisageables en vue de futures évolutions, telles la résolution des équations de Navier-Stokes ou encore l'incorporation de la turbulence.

L'objectif de disposer d'un outil prédictif pour le dimensionnement des installations expérimentales est atteint.

ANNEXES

Annexe A

Paramètres CJ pour les mélanges air - aluminium à $p_0 = 1$ atm





FIG. A.1 – Paramètres CJ pour les mélanges air - aluminium à $p_0=1$ atm

Annexe B

Paramètres CJ pour les mélanges oxygène - aluminium à $p_0 = 1$ atm





FIG. B.1 – Paramètres CJ pour les mélanges oxygène - aluminium à $p_0=1~{\rm atm}$

Annexe C

Paramètres CJ pour les mélanges air - octane à $p_0 = 1$ atm





FIG. C.1 – Paramètres CJ pour les mélanges air - octane à $p_0=1$ atm

Annexe D

Solution autosemblable de Taylor et Zel'dovich (cas 1D plan avec fond fermé)

On considère une détonation plane qui se propage depuis le fond fermé d'un tube à la célérité D_{CJ} dans un mélange au repos. A l'instant t, la détonation s'est propagée depuis r = 0 (à t = 0) de la distance $R = D_{CJ}t$. La masse de mélange consommée par unité de surface peut s'écrire $m = \rho_0 D_{CJ}t$. Derrière le front de détonation, on a $\rho = \rho_{CJ} > \rho_0$. La conservation de la masse implique donc l'existence d'une onde d'expansion juste derrière le front de détonation, dans les produits, pour réduire ρ (figure D.1) :



FIG. D.1 – Existence d'une onde d'expansion par conservation de la masse

$$\int_0^R \rho dV = \int_0^R \rho_0 dV \tag{D.1}$$

Il s'ensuit alors que dans le cas d'une propagation autonome et stationnaire, le front de détonation est immédiatement suivi par une onde d'expansion, dont la tête (notée C⁺(TD)) située au niveau du front se propage à la même célérité que ce dernier, soit $(u + c)_{CJ} = D_{CJ}$. Dans le cas de la détonation CJ, cette détente est une détente centrée qui a pour invariant de Riemann $J^-(x > 0)$, soit $u - \frac{2c}{\gamma - 1} = cste$. A l'instant t, la condition CJ est vérifiée en r = R(t). Pour 0 < r < R(t), le mélange est dans un état quelconque. On a alors :

$$u_{CJ} - \frac{2c_{CJ}}{\gamma - 1} = u - \frac{2c}{\gamma - 1}$$
 (D.2)

De plus, à un instant t donné, on a les conditions limites suivantes : -r = 0 : u = 0 $-r = R = D_{CJ}t : u = u_{CJ} = D_{CJ}/(\gamma + 1)$ et $c = c_{CJ} = \gamma D_{CJ}/(\gamma + 1)$

On cherche alors un point de la détente autre qu'en r = 0, tel que u = 0. En combinant cette condition à l'équation (D.2), on obtient :

$$c = c_{CJ} - \frac{(\gamma - 1)u_{CJ}}{2} = \frac{D_{CJ}}{2}$$
 (D.3)

Il en résulte qu'à un instant t, la queue de la détente (notée QD) s'est propagée de $r(t) = D_{CJ}t/2$, que l'on note ainsi :

$$r_{QD} = R(TD)/2 \tag{D.4}$$

Entre la queue de détente (QD) et le fond fermé du tube (ce dernier jouant le rôle d'un piston qui se retire par rapport à l'onde à la célérité D_{CJ}), on a donc un champ uniforme. Pour $0 \le r(t) \le \frac{R(t)}{2}$, il vient :

$$u = 0 = u_N$$

$$c = D_{CJ}/2 = c_N$$

$$p = p_N$$

$$\rho = \rho_N$$
(D.5)

Les gaz sont au repos dans le noyau. Dans l'éventail de détente $\frac{R(t)}{2} \le r(t) \le R(t)$, on écrit l'équation d'une C⁺ :

$$r = (u+c)t \tag{D.6}$$

Les conditions limites dans l'éventail de détente sont les suivantes, respectivement pour la $C^+(TD)$ et la $C^+(QD)$:

$$R = (u_{CJ} + c_{CJ})t \tag{D.7}$$

$$r_N = c_N t \tag{D.8}$$

D'après la relation (D.7), on écrit $t = \frac{R}{u_{CJ} + c_{CJ}}$ que l'on reporte dans l'équation (D.6). Il vient alors : $\frac{r}{R} = \frac{u+c}{D_{CJ}} = z$, que l'on peut également écrire :

$$D_{CJ}z = u + c \tag{D.9}$$

La nouvelle variable z ainsi introduite varie entre 0.5 et 1 dans la détente. En $z = z_N$ = 0.5, on a :

$$u - u_N = u = \frac{2(c - c_N)}{\gamma - 1}$$
 (D.10)

On obtient le profil de vitesse dans la détente $(0.5 \le z \le 1)$ en combinant les équations (D.5), (D.9) et (D.10). La répartition de u(z) est linéaire (figure D.2) :



$$u(z) = \frac{D_{CJ}}{\gamma + 1}(2z - 1) = u_{CJ}(2z - 1)$$
(D.11)

FIG. D.2 – Eventail de détente derrière l'onde de détonation

Il en résulte que la frontière avale $(C^+(QD))$ de l'expansion se propage deux fois moins vite que la frontière amont $(C^+(TD))$, c'est-à-dire l'onde de détonation.

En combinant les équations (D.9) et (D.11), on obtient également une répartition linéaire de c(z) dans la détente :

$$c(z) = \frac{D_{CJ}}{\gamma + 1} [(\gamma - 1)z + 1] = c_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]$$
(D.12)

De même, en appliquant les relations de l'isentropique, on obtient dans la détente :

$$p(z) = p_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma - 1}}$$

$$\rho(z) = \rho_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]^{\frac{2}{\gamma - 1}}$$

$$T(z) = T_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]^{2}$$
(D.13)

On peut de même calculer les valeurs des profils dans le noyau ($0 \le z \le 0.5$). On regroupe les résultats dans le tableau D.1.

Noyau $(0 \le z \le 0.5)$	Détente $(0.5 \le z \le 1)$
u=0	$u(z) = \frac{D_{CJ}}{\gamma+1}(2z-1) = u_{CJ}(2z-1)$
$c=D_{CJ}/2$	$c(z) = \frac{D_{CJ}}{\gamma+1} [(\gamma-1)z+1] = c_{CJ} \left[\frac{\gamma-1}{\gamma}z + \frac{1}{\gamma}\right]$
$p = p_{CJ} \left[\frac{\gamma + 1}{2\gamma} \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma - 1}}$	$p(z) = p_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma - 1}}$
$\rho = \rho_{CJ} \left[\frac{\gamma + 1}{2\gamma} \right]^{\frac{2}{\gamma - 1}}$	$\rho(z) = \rho_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]^{\frac{2}{\gamma - 1}}$
$T = T_{CJ} \left[\frac{\gamma + 1}{2\gamma} \right]^2$	$T(z) = T_{CJ} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} z + \frac{1}{\gamma} \right]^2$

TAB. D.1 – Profils autosemblables de Taylor et Zel'dovich dans le noyau et la détente d'une onde de détonation CJ stationnaire et autonome

Les profils obtenus pour $0 \le z \le 1$ sont dits de Taylor et Zel'dovich. Ils sont autosemblables par la variable de similitude z. Ils sont représentés sur la figure D.3.



FIG. D.3 – Profils autos emblables de Taylor et Zel'dovich lors d'une détonation plane dans un tube fermé

Bibliographie

- C. Morozzo. Account of a violent explosion which happened in a flour warehouse at Turin. Le répertoire des Arts et Manufactures, (Vol. 2, pp. 416-432), 1795.
- [2] H.C. Verakis and J. Nagy. A brief history of dust explosions. Industrial Dust Explosions, ASTM STP 958, K.L., édité par Casdollar and M. Hertzberg, American Society of Testing and Materials, Philadelphie, PA, pp. 342-350, 1970.
- [3] M. Faraday and C. Lyell. *Phil. Mag.*, (26, 16), 1845.
- [4] J.L. Gustin. Risques d'explosions de poussières Caractérisation. Techniques de l'Ingénieur, (Référence SE5030), 2004.
- [5] G.F.C. Les mots de la combustion. Groupement Français de Combustion Section Française du Combustion Institute, (Edition G.F.C.), 1993.
- [6] M.W. Chase, C.A. Davies, J.R. Davies, D.J. Fulrip, R.A. McDonald, and A.N. Syverud. JANAF thermochemical tables. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, (Vol. 14), 1985.
- [7] S.B. Victorov and S.A. Gubin. A double-front structure of detonation wave as the result of phase transition. *Shock Waves*, (Vol. 15, No. 2, pp. 113-128), 2006.
- [8] C. Morley. Gaseq. www.arcl02.dsl.pipex.com, 2005.
- [9] K.P. Stanyukovich. Unsteady Motion of Continuous Media, (Pergamon Press, New York), 1960.
- [10] Ya.B. Zeldovich. On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems. Journal of Experimental and Technical Physics, (Vol. 10, pp. 542-568), 1940.
- [11] J. Von Neumann. Theory of detonation waves. Progress Report of the National Defense Research Comittee, (PB 31090), 1942.
- [12] W. Döring. Über den detonationsvorgang in gasen. Annalen der Physik, (Vol. 435, pp. 421-436), 1943.
- [13] P. Vieille. Sur le rôle des discontinuités dans les phénomènes de propagation. Mémoire des Poudres et Salpètres, (Vol. 10, p. 177), 1900.
- [14] C. Campbell and D.N. Woodhead. Striated photographic records of explosion waves (the ignition gases by explosion waves : Part I. Carbon monoxide hydrogen mixture). *Journal of the Chemical Society*, (pp. 1572-1578), 1927.
- [15] B.V. Voitsekhovsky. Sur la détonation hélicoïdale. Doklady, (Vol. 114, No. 4, pp. 717-720), 1957.

- [16] Y.N. Denisov and Y.K. Troshin. Pulsating and spinning detonations in channels. Dokl. Akad. Nauk. S.S.S.R., (Vol. 125, p. 110), 1959.
- [17] Y.N. Denisov and Y.K. Troshin. Structure of gaseous detonations in channels. Z. Tech. Phys., (Vol. 30, p. 450), 1960.
- [18] Y.N. Denisov and Y.K. Troshin. On the mechanism of detonative combustion. 8th Symposium (International) on Combustion, (The Combustion Institute, p. 600), 1962.
- [19] E. Mach and J. Sommer. Uber die fortpflanzungsgeschwindigkeit von explosionsschall-wellen. Akad. der Wissenschaften, (Wien, Math. Naturwiss-Klasse Sitzungsberichte teil II, p. 101), 1877.
- [20] J.C. Libouton, A. Jacques, and P.J. Van Tiggelen. Cinétique, structure et entretien des ondes de détonation. Actes du Colloque International Berthelot-Vieille-Mallard-Le Chatelier, (Vol. 2, pp. 437-442), 1981.
- [21] D. Desbordes. Aspects stationnaires et transitoires de la détonation dans les gaz : relation avec la structure cellulaire du front. Thèse de doctorat es Sciences Physiques, (Université de Poitiers), 1990.
- [22] K.I. Shchelkin and Ya.K. Troshin. Gas-Dynamics of Combustion [in Russian]. Izd. Akad. Nauk SSSR, Moscow, 1963.
- [23] H.D. Beeson, R.D. McClenagan, C.V. Bishop, F.J. Benz, W.J. Pitz, C.K. Westbrook, and J.H.S. Lee. Detonability of hydrocarbon fuels in air. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, (Vol. 133, pp. 19-36), 1991.
- [24] C.K. Westbrook. Use of chemical kinetics to predict critical parameters of gaseous detonations. *Combustion and Flame*, (Vol. 46, pp. 191-210), 1982.
- [25] C. Matignon. Etude de la détonation de deux mélanges stæchiométriques (CH₄/H₂/O₂/N₂ et CH₄/C₂H₆/O₂/N₂) - Influence de la proportion relative des deux combustibles et de la température initiale élevée. Thèse de Docteur Ingenieur, ENSMA, Université de Poitiers (France), 2000.
- [26] S.B. Murray and J.H.S. Lee. The influence of physical boundaries on gaseous detonation waves. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, (Vol. 106, AIAA, pp. 329-355), 1986.
- [27] V.V. Mitrofanov and R.I. Soloukhin. The diffraction of multifront detonation waves. Sov. Phys. Dokl., (Vol. 9, p. 1055), 1964.
- [28] Ya.B. Zeldovich, S.M. Kogarko, and N.H. Simonov. Experimental study of spherical detonation in gas. *Journal of Experimental and Technical Physics*, (Vol. 26, pp. 1744-1772), 1956.
- [29] A.A. Vasiliev and V.V. Grigoriev. Critical conditions for gas detonations in sharply expanding channels. *Fizika Gorenyia i Vzryva*, (Vol. 16, pp. 117-125), 1980.
- [30] J.H.S. Lee. Dynamic parameters of gaseous detonations. Annu. Rev. Fluid Mech., (Vol. 16, pp. 311-336), 1968.

- [31] D. Desbordes. Correlation between shock flame predetonation zone size and cell spacing in critically initiated spherical detonations. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, (Vol. 106, pp. 166-180), 1986.
- [32] N. Manson. On the structure of so-called helical detonation waves in gaseous mixture. C. R. Hebd. Sceances Akad. Sci., (available on gallica.bnf.fr, Vol. 222, pp. 46-48), 1946.
- [33] N. Tsuboi and A.K. Hayashi. Detailed structure of spinning detonation in circular tube. *Combustion and Flame*, (Vol. 149, pp. 144-161), 2007.
- [34] F. Virot. 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. Thèse de Docteur Ingenieur, ENSMA, Université de Poitiers (France), 2009.
- [35] Ya.B. Zeldovich and A.S. Kompaneets. Theory of detonation. Academic Press, (London, pp. 133-205), 1960.
- [36] V.V. Mitrofanov. Detonation waves in heterogeneous media. [in Russian], (Novosibirsk (89 pages)), 1988.
- [37] A.A. Borisov, B.E. Gelfand, and E.I. Timofeev. Ignition of dust suspensions behind shock waves. Progress in Astronautics and Aeronautics, Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations, AIAA, (Vol. 94, pp. 332-339), 1983.
- [38] B. Veyssiere and B.A. Khasainov. The propagation regimes of non-ideal detonations in combustible gaseous mixtures with reactive solid particles. *Kimicheskaya Fizika*, (Vol. 10, No. 11, pp. 1533-1544), 1991.
- [39] B. Veyssiere. Detonations in gas-particles mixtures. Journal of Propulsion and Power, (Vol. 22, No. 6, pp. 1269-1288), 2006.
- [40] W. Ingignoli. Etude de la formation et de la propagation des détonations dans des suspensions de particules d'aluminium en atmosphère oxydante ou réactive. Thèse de Docteur Ingénieur, ENSMA, Université de Poitiers (France), 1999.
- [41] F. Zhang. Detonation in reactive solid particle-gas flow. Journal of Propulsion and Power, (Vol. 22, No. 6, pp. 1289-1309), 2006.
- [42] M Jacobsen, A.R. Copper, and J. Nagy. Explosivity of metal powders. Rapport d'étude RI 6561, US Bureau of Mines, 1964.
- [43] R. Bouriannes. Contribution à l'étude de la combustion de l'aluminium dans les mélanges oxygène - argon, dans l'azote et dans l'air. Thèse de doctorat es Sciences Physiques, (Université de Poitiers), 1972.
- [44] T.A. Brzustowski and I. Glassman. Vapor phase diffusion flames in combustion of magnesium and aluminium : II. Experimental observations in oxygen atmospheres. *Progress in Aeronautics and Astronautics, AIAA*, (Vol. 15, pp. 41-73), 1964.
- [45] C.M. Drew, A.S. Gordon, and R.H. Knipe. Study of quenched aluminium particle combustion. *Progress in Aeronautics and Astronautics, AIAA*, (Vol. 15, pp. 17-39), 1964.

- [46] G.H. Markstein. Heterogeneous reaction processes in metal combustion. 11st Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, (pp. 219-234), 1983.
- [47] M.A. Gurevich, G.E. Ozerova, and A.A. Yurinov. Effect of an oxide film on the inflammation characteristics of aluminium. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 14, No. 4, pp. 448-451), 1977.
- [48] P. Bucher, R.A. Yetter, F.L. Dryer, E.P. Vicenzi, T.P. Parr, and D.M. Hanson-Parr. Flame structure measurement of single, isolated aluminium particles burning in air. 26th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, (pp. 1899-1908), 1996.
- [49] E.W. Price. Combustion of metalized propellants. Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, New York, (Vol. 90, pp. 479-513), 1984.
- [50] D.R. Lide. Handbook of Chemistry and Physics. 78th edition. Standard Reference Data, National Institute of Standards and Technology, CRC Press Inc. Associated Editor, 1998.
- [51] L. Brewer and A.W. Searcy. The gaseous species of the Al-Al₂O₃ system. *Journal of the American Society*, (Vol. 73, pp. 5308-5314), 1951.
- [52] R.W. Bartlett, J.N. Ong Jr, W.M. Fassell Jr, and C.A. Papp. Estimating aluminium particle combustion kinetics. *Combustion and Flame*, (Vol. 7, No. 1, pp. 227-234), 1963.
- [53] R. Friedman and A. Macek. Ignition and combustion of aluminium particles in hot ambient gases. *Combustion and Flame*, (Vol. 6, pp. 9-19), 1962.
- [54] D.K. Kuehl. Ignition and combustion of small diameter aluminium wires. Western States Combustion Institute, (Papers WWS/CI 64-21), 1964.
- [55] A.M. Mellor and I. Glassman. Vapor phase diffusion flames in the combustion of magnesium and aluminium; part III. Experimental observations in carbon dioxide atmospheres. *Progress in Aeronautics and Astronautics*, (Vol. 15, pp. 159-176), 1964.
- [56] M.A. Gurevich, G.E. Ozerova, and A.M. Stepanov. Heterogeneous ignition of an aluminium particle in oxygen and water vapor. *Fizika Goreniya i Vzryva*, (Vol. 6, No. 3, pp. 326-335), 1970.
- [57] P.F. Pokhil, V.S. Logachev, and V.M. Mal'tsev. The mechanism of metal particle combustion. *Fizika Goreniya i Vzryva*, (Vol. 6, No. 3, pp. 407-410), 1970.
- [58] A.G. Merzhanov, Yu.M. Grigorijev, and Yu.A. Gal'Chenko. Aluminium ignition. Combustion and Flame, (Vol. 29, pp. 1-14), 1977.
- [59] J.W. Bransford. Ignition and combustion temperatures determined by laser heating. Flammability and sensitivity of materials in oxygen - enriched atmospheres, (Vol. 2, ASTM STP 910, Benning M.A. ed., American Society for Testing and Materials, Philadelphia, pp. 78-97), 1986.

- [60] A.F. Belyaev, Y.V. Frolov, and A.I. Korotkov. Combustion and ignition of particles of finely disperse aluminium. *Fizika Goreniya i Vzryva*, (Vol. 4, No. 3, pp. 323-329), 1968.
- [61] K.P. Brooks and M.W. Beckstead. Dynamics of aluminium combustion. Journal of Propulsion and Power, (Vol. 11, No. 4, pp. 769-780), 1995.
- [62] R.W. Hermsen. Aluminium combustion efficiency in solid rocket motor. AIAA Paper, (paper 81-0038, Saint Louis, Missouri), 1981.
- [63] F.L. Prentice. Combustion of aluminium droplets in various oxidizing gases including CO₂ and water vapor. *Proceedings of the 10th JANAF combustion meeting*, (VIII, Chemical Propulsion Information Agency, LAUREL Md., CPIA pub. 243, pp. 279-296), 1973.
- [64] P.L. Micheli and W.G. Schmidt. Behavior of aluminium in solid rocket motors. Aerojet Solid Propulsion Co, (AFRPL-TR-76-58, SACRAMENTO, CA), 1977.
- [65] T.W. Fox and J.A. Nicholls. Shock wave ignition of metal powders. NASA Grant NGR 23-005-536, 1979.
- [66] V.M. Boiko, V.V. Lotov, and A.N. Papyrin. Ignition of gas suspensions of metallic powders in reflected shock waves. *Fizika Goreniya i Vzryva*, (Vol. 25, No. 2, pp. 67-74), 1989.
- [67] T.A. Roberts, R.L. Burton, and H. Krier. Ignition and combustion of aluminium / magnesium alloy particles in O₂ at high pressures. *Combustion and Flame*, (Vol. 92, pp. 125-143), 1993.
- [68] B.A. Khasainov and B. Veyssiere. Analysis of the steady double-front detonation structure for a detonable gas laden with aluminium particles. *Archivum Combustionis*, (Vol. 7, No. 3-4, pp. 333-352), 1987.
- [69] B. Veyssiere and B.A. Khasainov. A model for steady, plane, double-front detonation (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminium particles in suspension. *Combustion and Flame*, (Vol. 85, pp. 241-253), 1991.
- [70] A.A. Borisov, B.A. Khasainov, B. Veyssiere, E.L. Saneev, I.B. Fomin, and S.V. Khomik. On the detonation of aluminium dust in air and oxygen. *Soviet Journal of Chemical Physics*, (Vol. 10, No. 2, pp. 369-402), 1992.
- [71] W.A. Strauss. Investigation of the detonation of aluminium powder oxygen mixture. AIAA Journal, (Vol. 6, Number 9, pp. 1753-1756), 1968.
- [72] A.J. Tulis and J.R. Selman. Detonation tube studies of aluminium particles dispersed in air. 19th Symposium (International) on Combustion, (The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 655-663), 1982.
- [73] B. Veyssiere. Structure of the detonations in gaseous mixtures containing aluminium particles in suspension. *Dynamics of Explosions*, (Vol. 106, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, New York, pp. 522-544), 1986.
- [74] Y.K. Pu, S. Hu, and J. Jarosinski. Combustion tube studies of dust flame acceleration. Shock Waves, (Vol. 5, No. 1-2, pp. 103-108), 1995.

- [75] Y.K. Pu, K.Y. Li, and J. Jarosinski. Transition to detonation in aluminium dust-air mixtures under weak ignition conditions. *Proceedings of the 16th ICDERS*, (edited by Wydawnicto akapit, Krakow, Poland, pp. 259-262), 1997.
- [76] F. Zhang, H. Gronig, and A. Van de Ven. DDT and detonation waves in dust-air mixtures. *Shock Waves*, (Vol. 11, pp. 53-71), 2001.
- [77] F. Zhang, S.B. Murray, and K.B. Gerrard. Aluminium particles air detonation at elevated pressures. *Shock Waves*, (Vol. 15, pp. 313-324), 2006.
- [78] F. Zhang and H. Gronig. Transition and structure of dust detonations. Dynamics Structure of Detonations in Gaseous and Dispersed Media, (edited by A.A. Borisov, Kluwer Academic, Norwell, MA, pp. 157-213), 1991.
- [79] F. Zhang, P. Greilich, and H. Gronig. Propagation mechanism of dust detonation. Shock Waves, (Vol. 2, No. 2, pp. 81-88), 1992.
- [80] A.J. Tulis. On the unconfined detonation of aluminium powder air clouds. In : 1st International Colloquium on Explosibility of Industrial Dusts, (Baranow, Poland, pp. 178-186), 1984.
- [81] W. Ingignoli, B. Veyssiere, and B.A. Khasainov. Study of detonation initiation in unconfined aluminium dust clouds. In Roy, G.D., Frolov, S.M., Kailasanath, K., Smirnov, N.N. (eds) Gaseous and Heterogeneous Detonations, Ed. ENAS Publishers, Moscow, ISBN 5-89055-015-0, pp. 337-350, 1999.
- [82] F. Zhang, K.B. Gerrard, R.C. Ripley, and V. Tanguay. Unconfined aluminium particles-air detonation. *Proceedings of the 26th International Symposium on Shock Waves*, (15-20 July, Goettingen, Germany), 2007.
- [83] D. Lee and M. Sichel. The Chapman-Jouguet condition and structure of detonation in dust-oxidizer mixtures. *Dynamics of Explosion*, (Edited by J.R. Bowen, J.C. Leyer, R.I. Soloukhin, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 106, AIAA, pp. 505-521), 1986.
- [84] K. Benkiewicz and A.K. Hayashi. Parametric studies of an aluminium combustion model for simulations of detonation waves. *AIAA Journal*, (Vol. 44, No. 3, pp. 608-619), 2006.
- [85] B.A. Khasainov and B. Veyssiere. Initiation of detonation regimes in hybrid twophase mixtures. *Shock Waves*, (Vol. 6, pp. 9-15), 1996.
- [86] B. Veyssiere and B.A. Khasainov. Structure and multiplicity of detonation regimes in heterogeneous hybrid mixtures. *Shock Waves*, (Vol. 4, pp. 171-186), 1995.
- [87] B. Veyssiere, P. Arfi, and B.A. Khasainov. Detonations of starch suspensions in gaseous O₂N₂ and stoichiometric H₂O₂ mixtures. *Combustion and Flame*, (Vol. 117, pp. 477-492), 1999.
- [88] A.V. Fedorov. Structure of heterogeneous detonation of aluminium particles dispersed in oxygen. *Fizika Goreniya i Vzryva*, (Vol. 28, No. 3, pp. 72-83), 1992.

- [89] A.V. Fedorov, V.M. Fomin, and T.A. Khmel. Real detonation waves in oxygenaluminium mixtures. 7th International Colloquium on Dust Explosions, (edited by C. Michelsen research AS, Bergen, Norway, pp. 4.33-4.45), 1996.
- [90] A.V. Fedorov, T.A. Khmel, and V.M. Fomin. Non-equilibium model of steady detonations in aluminium particles-oxygen mixtures. *Shock Waves*, (Vol. 9, No. 5, pp. 313-318), 1999.
- [91] K. Benkiewicz and A.K. Hayashi. Aluminium dust ignition behind reflected shock wave : two-dimensional simulations. *Fluid Dynamics Research*, (Vol. 30, pp. 269-292), 2002.
- [92] K. Benkiewicz and A.K. Hayashi. Two-dimensional numerical simulations of multiheaded detonations in oxygen aluminium mixtures using an adaptative mesh refinement. *Shock Waves*, (Vol. 13, pp. 385-402), 2003.
- [93] A.V. Fedorov and T.A. Khmel. Numerical simulation of formation of cellular heterogeneous detonation of aluminium particles in oxygen. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 41, No. 4, pp. 435-448), 2005.
- [94] T.A. Khmel and A.V. Fedorov. Numerical investigation of detonation cell size dependence on flow scales in aluminium particle - oxygen suspensions. International Colloquium on Application of Detonations to Propulsion, St. Petersburg, Russia, Ed. Torus Press, Moscow, pp. 120-124, 2004.
- [95] T.A. Khmel and A.V. Fedorov. Formation of plane and cellular heterogeneous detonations in bi-fractional particle-gas mixtures. *Pulsed and Continuous Detonations*, (In : Roy, G. et al. (eds.), TORUS PRESS Ltd, Moscow, pp. 225-231), 2006.
- [96] A.V. Fedorov and T.A. Khmel. Cellular detonations in bidispersed gas-particle mixtures. *Shock Waves*, (Vol. 18, No. 4, pp. 277-280), 2008.
- [97] V. Korobeinikov. Formation of zones with high particle concentrations in dusty gases. Dynamics of Deflagrations and Reactive Systems, (Vol. 134, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, New York, pp. 287-292), 1990.
- [98] B.A. Khasainov, B. Veyssiere, and W. Ingignoli. Numerical simulation of detonation cell structure in hydrogen-air mixture loaded by aluminium particles. *High Speed Deflagration and Detonation : Fundamentals and Control*, (edited by G.D. Roy, S.M. Frolov, D.W. Netzer, and A.A. Borisov, Elex-KM Publishers, Moscow, ISBN 5-93815-003-5, pp. 163-174), 2001.
- [99] J.H. Burgoyne and L. Cohen. Effect of drop size on flame propagation in liquid aerosols. *Proceedings of the Royal Society of London*, (A 225, London, pp. 375-392), 1954.
- [100] F.A. Williams. Detonation in dilute sprays. Detonation and two-phase flow, (Progress in Astronautics and Rocketry, Vol. 6, Academic Press, New York), 1961.
- [101] F.A. Williams. Structure of detonations in dilute sprays. *Physics of Fluids*, (Vol. 4, No. 11, pp. 1434-1443), 1961.

- [102] W.F. Weber. Spray combustion in the presence of a traveling wave. Proceedings of the Combustion Institute, (Vol. 8, Williams and Wilkins, Baltimore, pp. 1129-1940), 1962.
- [103] F.B. Cramer. The onset of detonation in a droplet combustion field. Proceedings of the Combustion Institute, (Vol. 9, Academic Press, New York, pp. 482-484), 1963.
- [104] E.K. Dabora and K.W. Ragland. A study of heterogeneous detonations. Astronautica Acta, (Vol. 12, No. 1, pp. 9-16), 1966.
- [105] E.K. Dabora, K.W. Ragland, and J.A. Nicholls. Drop size effects in spray detonations. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Vol. 12, Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 19-26), 1969.
- [106] K.W. Ragland, E.K. Dabora, and J.A. Nicholls. Observed structure of spray detonations. *Physics of Fluids*, (Vol. 11, No. 11, pp. 2377-2388), 1968.
- [107] G.D. Roy, S.M. Frolov, A.A. Borisov, and D.W. Netzer. Pulse detonation propulsion : challenges, current status, and future perspective. *Progress in Energy and Combustion Science*, (Vol. 30, No. 6, pp. 545-672), 2004.
- [108] Ya.B. Zeldovich, V.B. Librovich, G.M. Makhviladze, and G.I. Sivashinsky. On the development of detonation in a non-uniformly preheated gas. *Acta Astronautica*, (Vol. 15, pp. 313-321), 1970.
- [109] J.R. Bowen, K.W. Ragland, F.J. Steffes, and T.G. Loflin. Heterogeneous detonation supported by fuel fogs or films. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Pittsburgh, PA : The Combustion Institute, p. 1131-1139), 1971.
- [110] J.R. Bowen, K.W. Ragland, and F.J. Steffes. Proceedings of the 13th Symposium (International) on Combustion, (Vol. 13, Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1131-1139), 1976.
- [111] S.A. Gubin and Sichel M. Calculation of the detonation velocity of a mixture of liquid fuel droplets and a gaseous oxidizer. *Combustion, Science and Technology*, (Vol. 17, No. 3-4, pp. 109-117), 1977.
- [112] D.C. Bull, M.A. McLeod, and G.A. Mizner. Detonation of unconfined fuel aerosols. Gas Dynamics of Detonations and Explosions, (Edited by J.R. Bowen, N. Manson, A.K. Oppenheim, and R.I. Soloukhin, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 75, AIAA, New York, pp. 48-60), 1981.
- [113] V.I. Alekseev, S.B. Dorofeev, V.P. Sidorov, and B.B. Chaivanov. Experimental study of large-scale unconfined fuel spray detonations. *Dynamic Aspects of Explosion Phenomena*, (edited by A.L. Khul, J.C. Leyer, A.A. Borisov and W.A. Sirignano, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 154, AIAA, Washington, DC, pp. 95-104), 1993.
- [114] J. Papavassiliou, A. Makris, Knystautas R., J.H.S. Lee, C.K. Westbrook, and W.J. Pitz. Measurements of cellular structure in spray detonation. *Dynamic Aspects of Explosion Phenomena*, (Edited by A.L. Khul, J.C. Leyer, A.A. Borisov and W.A.

Sirignano, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 154, AIAA, Washington, DC, pp. 148-169), 1993.

- [115] V.I. Alekseev, S.B. Dorofeev, and V.P. Sidorov. Direct initiation of detonations in unconfined gasoline sprays. *Shock Waves*, (Vol. 6, No. 2, pp. 67-71), 1996.
- [116] R. Bar-Or, M. Sichel, and J.A. Nicholls. The propagation of cylindrical detonations in monodisperse sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Vol. 18, Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1599-1606), 1981.
- [117] S. Eidelman and A. Burcat. The mechanism of a detonation wave enhancement in a two-phase combustible medium. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Eighteenth Symposium (International) on Combustion, pp. 1661-1670), 1981.
- [118] B.E. Gelfand. Droplet breakup phenomena in flows with velocity lag. Progress in Energy and Combustion Science, (Vol. 22, pp. 201-265), 1996.
- [119] A.R. Hanson, E.G. Domich, and H.S. Adams. Shock tube investigation of the breakup of drops by air blasts. *Physics of Fluids*, (Vol. 6, pp. 1070-1080), 1963.
- [120] F.S. Haas. AIChE J., (Vol. 10), 1964.
- [121] R.E. Luna and W.A. Klikov. SC-RR-66-2716, 1966.
- [122] J.O. Hinze. Appl. Sci. Res., (A1), 1948.
- [123] A.Y. Falk. NASA CR-134825, 1975.
- [124] L.J. Zajac. NASA CR-134478, 1973.
- [125] L.J. Zajac. NASA CR-134479, 1973.
- [126] Yu.A. Korsunov and A.P. Tischin. Izv. Akad. Nauk. U.S.S.R., Mech. Zhidk. i Gaza, (Vol. 2), 1971.
- [127] V.P. Loparev. Izv. Akad. Nauk. U.S.S.R., Mech. Zhidk. i Gaza, (Vol. 3), 1975.
- [128] P.B. Gooderum and D.M. Buschnell. J. Spacecraft and Rockets, (Vol. 7), 1970.
- [129] T.A. Brzustowski and J.A. Newman. AIAA Paper, (pp. 70-80), 1980.
- [130] E.L. Geery and M.J. Margets. J. Spacecraft and Rockets, (Vol. 6), 1969.
- [131] M. Heidmann. NASA TN D-6806, 1972.
- [132] R.J. Priem. Chem. Eng. Prog. Symp. Ser, (Vol. 62), 1966.
- [133] O.G. Engel. J. Nat. Bur. Standards, (Vol. 60), 1958.
- [134] M.S. Volinski. Dokl. Akad. Nauk. U.S.S.R., (Vol. 68), 1949.
- [135] L. Koenig. J. Atmos. Sci., (Vol. 22), 1965.
- [136] B.E. Gelfand, S.A. Gubin, and S.M. Kogarko. Sov. Inz. Phys. J., (Vol. 27), 1974.
- [137] A. Wierzba. Deformation and breakup of liquid drops in a gas stream at nearly critical Weber numbers. *Experiments in Fluids*, (Vol. 9, pp. 59-64), 1990.
- [138] P.G. Simpkins. AIAA Paper, (pp. 71-325), 1971.
- [139] G.D. Waldman and W.G. Reinecke. Avco Corp. AVATD 0172-69-RR, 1969.

- [140] G.D. Waldman and W.G. Reinecke. AIAA Paper, (pp. 75-152), 1975.
- [141] A.A. Borisov, B.E. Gelfand, S. Natanzon, M., and O.M. Kossov. Sov. Inz. Phys. J., (Vol. 40), 1981.
- [142] A.L. Gonor and N.V. Zolotova. Izv. Akad. Nauk. U.S.S.R., Mech. Zhidk. i Gaza, (Vol. 2), 1981.
- [143] A.A. Borisov, B.E. Gelfand, S.A. Gubin, S.M. Kogarko, and A.L. Podgrebenkov. Sov. J. Fiz. Goreniya i Vzryva, (Vol. 6), 1970.
- [144] A.A. Borisov, B.E. Gelfand, S.A. Gubin, S.M. Kogarko, and A.L. Podgrebenkov. Sov. J. Appl. Mech. i Tech. Phys., (Vol. 5), 1970.
- [145] M. Sichel and Y.C. Chen. UM Report, Ann Arbor, MI, 1979.
- [146] G.D. Waldman and W.G. Reinecke. AIAA J., (Vol. 10), 1972.
- [147] E.Y. Harper, I.D. Chang, and G.W. Grube. J. Fluid Mech., (Vol. 52), 1972.
- [148] W.G. Reinecke and W.L. McKay. AIAA J., (Vol. 14), 1976.
- [149] L.P. Hsiang and G.M. Faeth. Drop properties after secondary breakup. International Journal of Multiphase Flow, (Vol. 13, No. 5, pp. 721-735), 1993.
- [150] G.I. Taylor. The scientific papers of Sir G.I. Taylor. Cambridge University Press, Cambridge, (p. 457), 1963.
- [151] A.A. Ranger and J.A. Nicholls. *AIAA Paper*, (pp. 68-83), 1968.
- [152] A.A. Ranger and J.A. Nicholls. International Journal of Heat and Mass Transfer, (Vol. 15), 1972.
- [153] A.A. Ranger and J.A. Nicholls. AIAA Journal, (Vol. 8), 1970.
- [154] H. Lamb. *Hydrodynamics*. Dover Publications, New York, 1932.
- [155] E.E. Meshkov. Izv. Akad. Nauk U.S.S.R., Mech. Zhidk. i Gaza, (Vol. 5), 1969.
- [156] R. Collins and A.F. Charwat. Isr. J. Technol., (Vol. 9), 1971.
- [157] G.I. Taylor. Proc. R. Soc. Ser. A, (Vol. 201), 1950.
- [158] P.G. Simpkins and E.L. Bales. J. Fluid Mech., (Vol. 55, No. 4), 1972.
- [159] A.A. Ranger and J.A. Nicholls. Aerodynamic shattering of liquid drops. AIAA Journal, (Vol. 7, No. 2, pp. 285-290), 1969.
- [160] G.E. Fox and E.K. Dabora. Breakup of liquid drops due to convective flows in shocked sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Vol. 14, Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1365-1373), 1973.
- [161] A.A. Borisov, B.E. Gelfand, S.A. Gubin, S.M. Kogarko, and A.L. Podgrebenkov. The reaction zone of two-phase detonations. *Astronautica Acta*, (Vol. 15, pp. 411-418), 1970.
- [162] C.W. Kauffman and J.A. Nicholls. Shock wave ignition of liquid fuel drops. AIAA Journal, (Vol. 9, No. 5, pp. 880-885), 1971.

- [163] T.H. Pierce and J.A. Nicholls. Time variation in the reaction-zone structure of two-phase spray detonations. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Vol. 14, Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1277-1284), 1973.
- [164] E.K. Dabora. A model for spray detonations. Acta Astronautica, (Vol. 6, pp. 269-280), 1979.
- [165] W.B. Benedick, S.R. Tieszen, R. Knystautas, and J.H.S. Lee. Detonation of unconfined large-scale fuel spray-air clouds. AAIA Progress in Astronautics and Aeronautics, (Vol. 133, pp. 297-310), 1991.
- [166] V.M. Boiko, V.V. Lotov, and A.N. Papyrin. Ignition of liquid fuel drops in shock waves. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, (Vol. 132, pp. 205-219), 1991.
- [167] E.K. Dabora. Lean detonation limit of sensitized kerosene sprays in air. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, (Vol. 133, pp. 311-324), 1991.
- [168] C.M. Brophy, D.W. Netzer, and D. Forester. Detonation studies of JP-10 with oxygen and air for pulse detonation engine development. AIAA Paper, (Vol. 98-4003), 1998.
- [169] C.M. Brophy, D.W. Netzer, J.O. Sinibaldi, and R.G. Johnson. Detonation of a JP-10 aerosol for pulse detonation engine applications. *High-Speed Deflagration and Detonation : Fundamentals and Control*, (Edited by G. Roy, S. Frolov, D. Netzer, and A. Borisov, ELEX-KM Publishers, Moscow, pp. 207-222), 2001.
- [170] F. Schauer, J. Studrud, R. Bradley, V. Katta, and J. Hoke. Detonation studies and performance results for a research pulse detonation engine. *Confined Detonations* and Pulse Detonation Engines, (Edited by G. Roy, S. Frolov, R. Santoro, and S. Tsyganov, Torus Press, Moscow, pp. 287-302), 2003.
- [171] W. Fan, C. Yan, X. Huang, Q. Zhang, and L. Zheng. Experimental investigation on two-phase pulse detonation engine. *Combustion and Flame*, (Vol. 133, No. 4, pp. 441-450), 2003.
- [172] D.I. Baklanov, L.G. Gvozdeva, and N.B. Scherbak. Detonation of hydrocarbon-air mixtures in a pulse detonation chamber. *Confined Detonations and Pulse Detonation Engines*, (Edited by G. Roy, S. Frolov, R. Santoro, and S. Tsyganov, Torus Press, Moscow, pp. 271-286), 2003.
- [173] B.M. Knappe and C.F. Edwards. Proceedings of the 15th ONR Propulsion Meeting, (Edited by G.D. Roy, A. Gupta, College Park, MA : University of Maryland), 2002.
- [174] B.M. Knappe and C.F. Edwards. Results of decane/propane split-fuelled spray detonations. *Proceedings of the Sixteenth ONR Propulsion Meeting*, (Edited by G.D. Roy and M. Gundersen, Office of Naval Research, Arlington, V.A., pp. 117-122), 2003.
- [175] S.M. Frolov, V.Ya. Basevich, V.S. Aksenov, and S.A. Polikhov. Initiation of confined spray detonation by electric discharges. *Confined Detonations and Pulse Detonation*

Engines, (Edited by G. Roy, S. Frolov, R. Santoro, and S. Tsyganov, Torus Press, Moscow, pp. 157-174), 2003.

- [176] S.M. Frolov, V.Ya. Basevich, V.S. Aksenov, and S.A. Polikhov. Spray detonation initiation by controlled triggering of electric dischargers. *Journal of Propulsion and Power*, (Vol. 21, No. 1, pp. 54-64), 2005.
- [177] V.V. Mitrofanov, A.V. Pinaev, and S.A. Zhdan. Calculations of detonation waves in gas-droplet systems. Acta Astronautica, (Pergamon Press 1979, Vol. 6, pp. 281-296), 1979.
- [178] G.D. Gordon. Mechanism and speed of breakup of drops. J. Appl. Phys., (Vol. 30, No. 11, pp. 1759-1761), 1959.
- [179] W.R. Lane. Shatter of drops in streams of air. Ind. Engng Chem., (Vol. 43, No. 6, pp. 1312-1317), 1951.
- [180] J.A. Nicholls, M. Sichel, R. Fry, and D.R. Glass. Theoretical and experimental study of cylindrical shock and heterogeneous detonation waves. *Acta Astronautica*, (Vol. 1, No. 3, pp. 385-404), 1974.
- [181] A. Burcat and S. Eidelman. Evolution of a detonation wave in a cloud of fuel droplets : Part II. Influence of fuel droplets. *AIAA Journal*, (Vol. 10, No. 10 pp. 1233-1236), 1980.
- [182] E.K. Dabora. Energy and power requirements for direct initiation of spray detonations. *Proceedings of the 12th International Shock-Tube Symposium*, (A. Lifshitz and J. Rom editors, Magnes Press, Jerusalen, p. 685), 1980.
- [183] S.A. Zhdan. Calculation of the initiation of a heterogeneous detonation with a charge of condensed explosive. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 17, No. 6, pp. 674-679), 2001.
- [184] V.A. Levin. Doctoral dissertation. Moscow State University, 1975.
- [185] D.V. Voronin and S.A. Zhdan. Calculation of heterogeneous detonation initiation for a hydrogen-oxygen mixture in an explosion tube. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 20, No. 4, pp. 461-465), 1985.
- [186] P.L. Lu and N.S. Slagg. Acta Astron., (Vol. 6, p.815), 1979.
- [187] A.A. Vasiliev, S.A. Zhdan, and V.V. Mitrofanov. Detonation initiation in gaseous and heterogeneous systems. *Gaseous and Heterogeneous Detonations : Science to Applications*, (edited by G. Roy, S. Frolov, K. Kailasanath, N. Smirnov, ENSA Publishers, Moscow, pp. 25-38), 1999.
- [188] S.A. Zhdan and E.S. Prokhorov. Calculation of the cellular structure of detonation of sprays in a H₂-O₂ system. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 36, No. 6, pp. 777-784), 2000.
- [189] Y. Ju and C.K. Law. Detonation propagation and quenching in gas-particle mixtures. AIAA Paper, (p. 477, Jan. 2001), 2001.

- [190] E.J. Chang and K. Kailasanath. Shock waves interactions with particles and fuel droplets. *Shock Waves*, (Vol. 12, No. 4, pp. 333-342), 2003.
- [191] S. Cheatham and K. Kailasanath. Numerical modelling of liquid-fueled detonation in tubes. *Combustion, Theory and Modelling*, (Vol. 9, No. 1, pp. 23-48), 2005.
- [192] S. Cheatham and K. Kailasanath. Single-cycle performance of idealized liquid-fueled pulse detonation engines. AIAA Journal, (Vol. 43, No. 6, pp. 1276-1283), 2005.
- [193] R.I. Nigmatulin. Prikl. Matemat. Mekh., Vol. 34, pp. 1097-1112. 1970.
- [194] D.A. Frank-Kamenetzkii. Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics. Plenum Press, New York, 1969.
- [195] Y. Gregoire, M.O. Sturtzer, B.A. Khasainov, and B. Veyssiere. Investigation on the dispersion of solid particles by high explosive. *Proceedings of the 27th International Symposium on Shock Waves*, (19-24 July, S. Petersburg, Russia), 2009.
- [196] C. Hirsch. Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol. 1 : Fundamentals of Numerical Discretization, (John Wiley and Sons), 1988.
- [197] E.S. Oran and J.P. Boris. Numerical Simulation of Reactive Flow. 2nd edition. Cambridge University Press, 2001.
- [198] J.P. Boris, A. Landsberg, E.S. Oran, and J.H. Gardner. LCPFCT : Flux-Corrected Transport algorithm for solving generalized continuity equations. *Naval Research Laboratory Report*, (NRL/MR/6410-93-7192), 1993.
- [199] C. Hirsch. Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol. 2 : Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows, (John Wiley and Sons), 1988.
- [200] G.L. Schott. Observations of the structure of spinning detonation. The Physics of Fluids, (Vol. 8, No. 5, pp. 850-865), 1965.
- [201] B.V. Voitsekhovsky, V.V. Mitrofanov, and M.E. Topchian. Investigation of the structure of detonation waves in gases. *International Symposium on Combustion*, (Vol. 12, pp. 829-837), 1969.
- [202] W.B. Benedick, C.M. Guirao, R. Knystautas, and J.H.S. Lee. Critical charge for the direct initiation of detonation in gaseous fuel-air mixtures. AAIA Progress in Astronautics and Aeronautics, (Vol. 106, pp. 181-202), 1986.
- [203] J.H. Lee, R. Knystautas, C. Guirao, and C. Chan. Progress report on the study of H₂-air combustion problems associated with LWR safety. *McGill University*, (Montreal, Canada), 1983.
- [204] W. Ingignoli, B. Veyssiere, and B.A. Khasainov. Shock initiation of detonations in aluminium - oxygen mixtures. In Roy, G.D., Frolov, S.M., Sinibaldi, J. (eds) Pulsed and Continuous Detonations, ISBN 5-94588-040-X, pp. 218-224, Torus Press, Moscow, 2006.
- [205] H. Matsui. On the measure of the relative detonation hazards of gaseous fuel oxygen and air mixtures. In : 17th Symposium (International) on Combustion, (Leeds University, Leeds, 20-25 August, pp. 1269-1280), 1979.

- [206] V.I. Makeev, Yu.A. Gostintsev, V.V. Strogonov, Yu.A. Bokhon, Yu.N. Chernushkin, and V.N. Kulikov. Combustion and detonation of hydrogen-air mixtures in free space. *Comb. Explos. Shock Waves*, (Vol. 19, Number 5, pp. 548-550), 1983.
- [207] A. Paplinski. About modelling and control of mechanisms of mass loss by fuel droplets in nonstationnary detonation wave. *Scientific Aspects of Armament and Safety Technology*, (Vol. 1, WAT, Warszawa, pp. 105-119), 2008.
- [208] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion, Science and Technology*, (Vol. 27, p. 81), 1981.
- [209] D.V. Voronin and S.A. Zhdan. Calculation of heterogeneous detonation initiation in tube by explosion of hydrogen-oxygen mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 20, No. 4, pp. 112-116), 1984.

Contribution à l'étude de la structure des détonations dans les milieux biphasiques Résumé

Les processus physico-chimiques de propagation des détonations dans les mélanges hétérogènes gaz-particules solides ou gaz-gouttelettes liquides ont été analysés à partir de simulations numériques de la structure cellulaire de détonation. Dans le cas des suspensions de particules d'aluminium, deux modèles de combustion ont été incorporés au code de calcul EFAE du LCD. En utilisant un seul paramètre d'ajustement pour se calibrer sur les résultats expérimentaux existants, on obtient des valeurs raisonnables de la largeur caractéristique de la structure cellulaire $\lambda = 40$ cm pour le mélange Al/Air et $\lambda = 5$ -10 cm pour le mélange Al/O₂. L'influence du diamètre des particules d_{p0} a été mise en évidence sur les longueurs de zones d'induction L_i et de combustion L_c ($L_i \sim d_{p0}$ et $L_c \sim d_{p0}^{1.8}$) et sur la structure cellulaire : $\lambda \sim d_{p0}^{1.4}$. Contrairement au cas des détonations gazeuses, l'inflammation des particules n'a pas lieu derrière les points triples, mais dans les zones de basse pression où la concentration en particules est plus faible, permettant ainsi leur inflammation rapide. Le régime hélicoïdal de détonation a été simulé pour la première fois dans les mélanges de particules d'aluminium en suspension dans atmosphère gazeuse oxydante. Les valeurs du rayon critique de détonation R_c et de l'énergie critique d'initiation E_c (obtenues par extension des corrélations établies dans les gaz) ont été prédites : $R_c = 1$ m, $E_c = 10^5$ J (Al/O₂) et $R_c = 8$ m, $E_c = 5.12 \times 10^7$ J (Al/Air). Elles sont confirmées par les expériences existantes. Dans le cas d'aérosols de gouttelettes d'hydrocarbures, un modèle d'évaporation basé sur le mode dit de "stripping" derrière un choc et sur le régime diffusif, couplé à une cinétique chimique à deux étapes (induction-combustion), a été incorporé au code. Les premières simulations de la structure cellulaire pour les mélanges air-octane mènent à une taille de cellule en accord avec les résultats expérimentaux existants ($\lambda = 4-5$ cm).

Contribution to the study of the detonation structure in heterogeneous two-phase media

Abstract

Physical and chemical processes involved in propagation of detonations in solid particles-gas or liquid droplets-gas mixtures have been studied, by numerical simulations of the detonation cellular structure. In the case of suspensions of aluminium particles, two combustion models have been incorporated to the numerical code EFAE of the LCD. Calibration of only one best-fitting parameter against existing experimental results yields reasonable values of the characteristic width of the cellular structure ($\lambda = 40$ cm for Al/Air and $\lambda = 5-10$ cm for Al/O₂). The particle diameter d_{p0} has an influence on both induction L_i and combustion L_c zone lengths ($L_i \sim d_{p0}$ and $L_c \sim d_{p0}^{1.8}$) and on the cell width: $\lambda \sim d_{p0}^{1.4}$. Contrary to gaseous detonations, chemical reactions do not start behind the triple points, but in the low-pressure zones, where particle concentration is lower thus enabling their fast ignition. The detonation spinning regime has been simulated for the first time in the case of suspensions of aluminium particles in a gaseous oxidizing atmosphere. The values of the critical detonation radius R_c and of the critical initiation energy E_c have been estimated (by extrapolating the correlations established for gases): $R_c =$ 1 m and $E_c = 10^5$ J for Al/O₂ mixtures while $R_c = 8$ m and $E_c = 5.12 \times 10^7$ J for suspensions of Al in air. These values agree reasonably with available experimental data. In the case of hydrocarbon spray detonations, an evaporation model based on the "stripping" mode and on the diffusion regime has been incorporated in the code, coupled with a two-step kinetics chemistry (induction and combustion). First simulations of the cellular structure indicate that the characteristic cellular width is of the order of $\lambda = 4$ -5 cm for octane-air mixtures, in agreement with existing experimental results.

Mots-clés

détonation hétérogène, structure cellulaire de détonation, milieux biphasiques, particules d'aluminium, gouttelettes liquides, régime hélicoïdal, détonabilité, simulation numérique