



HAL
open science

Modélisation des écoulements réactifs dans les microsystèmes énergétiques

Davy Kévin Ngomo Otogo

► **To cite this version:**

Davy Kévin Ngomo Otogo. Modélisation des écoulements réactifs dans les microsystèmes énergétiques. Autre [cond-mat.other]. INSA de Rouen, 2010. Français. NNT : 2010ISAM0019 . tel-00584117

HAL Id: tel-00584117

<https://theses.hal.science/tel-00584117>

Submitted on 7 Apr 2011

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

présentée par

Davy Kévin NGOMO OTOGO

en vue de l'obtention du titre de

Docteur

de

l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline : Energétique
Spécialité : Mécanique des fluides
Formation doctorale : Sciences Physiques, Mathématiques et de l'Information
pour l'Ingénieur
Laboratoire d'accueil : COmplexe de Recherche Interprofessionnel
en Aérothermochimie - CNRS UMR 6614 CORIA

Modélisation des écoulements réactifs dans les microsystèmes énergétiques

Soutenue le 16 Novembre 2010 devant le jury :

Rapporteurs :

Rémi ABGRALL Professeur à l'Université de Bordeaux I, membre de l'IUF
Arnaud MURA Chargé de Recherches CNRS, Institut Pprime Poitiers

Examineurs :

Alain MERLEN Professeur à l'Université de Lille I (Président)
Yann DOUTRELEAU Directeur de Recherches, ENSIETA, Brest
Boris KHASAINOV Ingénieur de Recherches CNRS, LCD Poitiers
Sergio PIROZZOLI Professeur à l'Université de Rome "La Sapienza", Italie

Directeurs de thèse :

Ashwin CHINNAYYA Maître de Conférences à l'Université de Rouen (Co-encadrant)
Abdellah HADJADJ Professeur à l'INSA de Rouen (Directeur de thèse)

Remerciements

Ce doctorat a été réalisé au laboratoire CORIA (COmplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie), Unité Mixte de Recherche 6614 du CNRS, de l'Université et de l'INSA de Rouen.

Je tiens à témoigner ma sincère gratitude à mes deux directeurs de thèse, à savoir M. Abdellah HADJADJ qui a eu la gentillesse de bien vouloir m'accepter au sein de son équipe de travail et m'a prodigué de sages conseils durant ces trois dernières années, et M. Ashwin CHINNAYYA, qui a sû me transmettre sa passion pour la détonation. J'ai pour eux une grande estime et un profond respect, tant l'apport sur le plan scientifique et relationnel a été important, de même que le soutien durant cette thèse qui a été sans failles.

Je suis très reconnaissant envers MM. Rémi ABGRALL et Arnaud MURA, rapporteurs du jury de cette thèse. Je tiens à remercier également M. Alain MERLEN d'avoir présidé ce jury et MM. Yann DOUTRELEAU, Boris KHASAINOV et Sergio PIROZZOLI, ainsi que M^{lle} Aurélie ALLEAUME en qualité d'examinateurs. Ce fût pour moi un honneur d'avoir présenté mes travaux devant eux.

J'aimerais également remercier les Ministères français de l'Education Nationale et gabonais de l'Economie et des Finances pour leur soutien financier respectivement durant cette thèse et mes études pré-doctorales. De même, je suis reconnaissant envers l'Université de Rouen pour m'avoir accepté en tant que moniteur de l'enseignement supérieur.

Je suis particulièrement reconnaissant envers MM. Arnab CHAUDHURI, Ouissem BEN NASR et David TAÏEB pour les fructueuses discussions que nous avons eues. Plus généralement, je remercie tous les membres du laboratoire avec lesquels j'ai eu des échanges enrichissants, que ce soit autour de la célèbre machine à café du CORIA, dans les couloirs du laboratoire ou encore à la pause du midi.

J'ai une pensée pour ma famille, plus spécialement à mes parents, Camille et Charlotte, pour leur affection et leur éternel soutien. C'est à eux que ce mémoire est dédié. Je n'oublierai pas non plus les encouragements de ma deuxième famille, Antoine et Chantal.

Davy Kévin NGOMO OTOGO

Table des matières

Nomenclature	vii
1 Introduction générale	1
1.1 Généralités	1
1.2 Ondes de choc en milieu confiné	2
1.3 Ondes de détonation : théorie et modèle	3
1.4 Modélisation du déficit de vitesse	4
1.5 Instabilités des ondes de détonation	10
1.6 Détonations dans les canaux à section réduite	12
1.7 Récapitulatif	15
1.8 Présentation de l'étude	16
2 Equations et modèles mathématiques	19
2.1 Différents régimes d'écoulement	19
2.2 Equations de Navier-Stokes pour un fluide réactif	20
2.3 Modèle cinétique	21
2.4 Relations thermodynamiques	22
2.4.1 Equation d'état d'un mélange de \mathcal{N}_{sp} espèces chimiques	23
2.4.2 Energie interne, enthalpie et capacités calorifiques d'un mélange de gaz parfaits	23
2.4.3 Vitesse du son	24
2.4.4 Table thermodynamique	25
2.5 Propriétés de transport	25
2.6 Récapitulatif	28
3 Méthodes numériques	29
3.1 Solveur aérodynamique	29
3.1.1 Schéma WENO	30
3.1.2 Schéma HLLC	33
3.1.3 Avancement en temps	35
3.2 Approximation des flux visqueux	36
3.3 Intégration des termes sources	37
3.3.1 Termes sources chimiques	37
3.3.2 Terme source visqueux pour le modèle 1D	38
3.3.3 Terme source thermique pour le modèle 1D	40

3.4	Condition de stabilité	41
3.5	Détermination de la température du fluide	41
3.6	Conditions aux limites	42
3.6.1	Conditions de parois	42
3.6.2	Conditions aux limites d'entrée/sortie	44
3.7	Outils de visualisation numérique	44
3.7.1	Strioscopie ou "schlieren" numérique	44
3.7.2	Suivi des points triples	45
3.7.3	Procédure de calcul des champs moyens	45
3.8	Validation numérique du code	47
3.8.1	Tube de Sod	47
3.8.2	Interaction d'un choc avec un profil sinusoïdal de masse volumique	48
3.9	Etude du taux de convergence des schémas	48
3.10	Récapitulatif	52
4	Résultats	53
4.1	Détonation ZND	53
4.1.1	Influence du maillage	54
4.1.2	Influence du censeur de choc	56
4.2	Détonation galopante	58
4.3	Détonation bidimensionnelle	61
4.4	Détonation visqueuse	73
4.4.1	Détonation ZND	73
4.4.2	Influence des effets visqueux sur une détonation unidimensionnelle	76
4.4.2.1	Effets de la réduction de la pression initiale	76
4.4.3	Influence des effets visqueux et thermiques sur une détonation unidimensionnelle	78
4.4.3.1	Effet de réduction d'échelle	81
4.4.4	Ondes de détonation dans des canaux de faible hauteur	82
4.4.4.1	Dimensionnement du canal	82
4.4.4.2	Parois adiabatiques	84
4.5	Récapitulatif	106
5	Conclusion générale	109
A	Coefficients $a_{n,k}$ de la table thermodynamique, capacités calorifiques et coefficients polytropiques	121
B	Base de données pour les propriétés de transport	127
C	Matrices de passage	129
C.1	Forme conservative des équations d'Euler	129
C.2	Forme primitive des équations d'Euler	131
D	Equation d'Hugoniot des gaz brûlés	135
D.1	Détermination de l'état Chapman-Jouguet	137

D.2	Détermination de l'état Neumann	138
E	Détermination numérique de la vitesse d'une onde de détonation	141
F	Censeur de choc	143
G	Critère de sonicité	145
H	Courbure des lignes de courant	151
I	Article publié dans " <i>Computer & Fluids</i> "	157
J	Article extrait de la conférence ISIS18 (18 th International Shock Interaction Symposium)	169
K	Article extrait de la conférence ECCOMAS 2010 (5 th European Conference on Computational Fluid Dynamics)	175

Nomenclature

Abbreviations et sigles

CO ₂	: Symbole chimique du dioxyde de carbone
C ₂ H ₂	: Symbole chimique de l'acétylène
C ₂ H ₄	: Symbole chimique de l'éthène
C ₂ H ₆	: Symbole chimique de l'éthane
C ₃ H ₈	: Symbole chimique du propane
H ₂	: Symbole chimique du dihydrogène
N ₂	: Symbole chimique du diazote
O ₂	: Symbole chimique du dioxygène
Ar	: Symbole chimique de l'Argon
CFL	: Courant Friedrichs Lewy
CJ	: Etat chapman Jouguet
CO	: Symbole chimique du monoxyde de carbone
GLF	: <i>Global Lax-Friedrichs</i>
He	: Symbole chimique de l'Hélium
HLL	: <i>Harten-Lax-van Leer</i>
HLLC	: <i>Harten-Lax-van Leer</i> avec rétablissement de la discontinuité de contact
LLF	: <i>Local Lax-Friedrichs</i>
O	: Symbole chimique de l'oxygène atomique
OH	: Symbole chimique de l'ion hydroxyde
QSSA	: <i>Quasi Steady State Approximation</i>
TVD	: <i>Total Variation Diminishing</i>
WENO	: <i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
ZND	: Zel'dovich von Neumann Döring

Symboles grecs

α_k	: Poids optimaux pour la pondération des flux aux interfaces lors de l'interpolation WENO5
α_M	: Angle de Mach entre les lignes de courant et les lignes caractéristiques
β_k	: Paramètres de lissage utilisés pour le calcul des poids normalisés
Δg_l	: Variation d'enthalpie libre massique durant la réaction l
Δt	: Pas de temps
Δ	: Epaisseur de la zone où la fraction massique de F vaut 1% de sa valeur initiale
$\delta(x)$: Epaisseur de la couche limite
δ^*	: Epaisseur de déplacement de la couche limite
$\Delta_{1/2}$: Demi-épaisseur de la zone de réaction
δ_{lam}	: Echelle spatiale associée aux frottements visqueux pour un écoulement laminaire 1D
δ_{sub}	: Epaisseur de la zone subsonique
δ_{th}	: Echelle spatiale associée aux pertes thermiques
δ_{turb}	: Echelle spatiale associée aux frottements visqueux
Δ_{ZND}	: épaisseur de la zone de réaction ZND
$\dot{\omega}_k$: Terme source de production ou de consommation de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
ξ	: Variable d'avancement de la réaction chimique
ϵ	: Paramètre permettant d'éviter la division par zéro lors du calcul des poids normalisés, durant l'interpolation WENO5
γ	: Rapport des capacités calorifiques ou coefficient polytropique d'un mélange
γ_k	: Coefficient polytropique de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
Λ	: Matrice des valeurs propres
λ	: Conductivité thermique du mélange
λ_k	: Conductivité thermique de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
μ	: Viscosité du mélange
μ_k	: Viscosité de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
μ_∞	: Coefficient de viscosité du fluide pris à 273.15 K, selon la loi de Sutherland

ν''_{kl}	: Coefficient stœchiométrique produit de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique durant la $l^{\text{ème}}$ réaction chimique
ν'_{kl}	: Coefficient stœchiométrique réactif de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique durant la $l^{\text{ème}}$ réaction chimique
ω_k	: Poids normalisés utilisés pour la pondération des flux numériques WENO5
Ω_z	: Rotationnel de la vitesse
ψ	: Coefficient de frottement dans le cas 1D
ρ	: Masse volumique du fluide
ρ_k	: Masse volumique de la $k^{\text{ème}}$ espèce
σ	: Valeur moyenne numérique de la vitesse de détonation
σ_l	: Vitesse limite de l'onde selon le modèle de Manson et Guénoche
σ_{cj}	: Vitesse théorique d'une onde de détonation
σ_k	: Diamètre de collision
τ_{ij}	: Contrainte visqueuse
τ_p	: Contrainte pariétale
τ_{chem}	: Echelle de temps chimique pour le modèle 1D
τ_{conv}	: Temps convectif
τ_{th}	: Echelle de temps associée aux transferts thermiques (modèle 1D)
τ_{visq}	: Echelle de temps associée aux phénomènes visqueux (modèle 1D)
θ	: Epaisseur de quantité de mouvement
ε	: Epaisseur de la veine fluide proche de la parois, dans laquelle les réactions chimiques sont inhibées (selon le modèle de Manson et Guénoche)
ε_k	: Potentiel de Lennard-Jones de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique

Autres notations

$[X_k]$: Concentration molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
$\hat{f}_{i+1/2}$: Approximation numérique du flux eulérien à l'interface $i + 1/2$
$\hat{f}_{s,i+1/2}$: Approximation numérique du flux caractéristique à l'interface $i + 1/2$
$\mathcal{J}_{x,k}$: Loi de Fick suivant x pour la $k^{\text{ème}}$ espèce
$\mathcal{J}_{y,k}$: Loi de Fick suivant y pour la $k^{\text{ème}}$ espèce
\mathcal{W}_k	: Masse molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
\mathcal{E}_n^N	: Erreur en norme L_n
\mathcal{G}_k	: Poids de pondération de la version WENO Mapped

\mathcal{L}_h	: Opérateur de discrétisation spatiale des flux convectifs et visqueux
\mathcal{L}_s	: Opérateur discret d'intégration des termes sources
\mathcal{N}_{sp}	: Nombre d'espèces chimique dans le mélange
\mathcal{Q}_p	: Terme source thermique dans le modèle 1D
\mathcal{R}_u	: Constante universelle des gaz parfaits
\mathcal{W}	: Masse molaire du mélange
\mathbf{L}^{-1}	: Matrice des vecteurs propres à gauche
\mathbf{M}^{-1}	: Inverse de la matrice \mathbf{M}
H_{ref}	: Hauteur de référence
$\tilde{\mathcal{L}}_h$: Opérateur d'intégration spatio-temporel de la partie homogène des équations réactives multi-espèces de Navier-Stokes
$\tilde{\mathbf{A}}$: Matrice jacobienne de la forme primitive des équations d'Euler
A_l	: Facteur préexponentiel de la loi d'Arrhénius pour la $l^{\text{ème}}$ réaction
$a_{n,k}$: Coefficients polynômiaux des tables de JANAF
c	: Célérité du son
c_p	: Capacité calorifique massique à pression constante d'un mélange
c_v	: Capacité calorifique massique à volume constant d'un mélange
$C_{p,k}$: Capacité calorifique molaire à pression constante de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
$c_{p,k}$: Capacité calorifique massique à pression constante de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
$C_{v,k}$: Capacité calorifique molaire à volume constant de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
$c_{v,k}$: Capacité calorifique massique à volume constant de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
D	: Diamètre de tube
D_{jk}	: Coefficient de diffusion binaire de la $j^{\text{ème}}$ espèce chimique par rapport à la $k^{\text{ème}}$
$D_{k,m}$: Coefficient de diffusion de la $k^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange
dS_{lat}	: Surface latérale d'un volume de contrôle élémentaire
dV	: Volume de contrôle élémentaire
E	: Energie totale du fluide
e	: Energie interne massique d'un mélange

E_a	: Energie d'activation du mélange
e_k	: Energie interne massique de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
F_L, F_R	: Flux à gauche et à droite dans le solveur HLLC
f_{visq}	: Force de frottement par unité de volume dans le modèle 1D
h	: Enthalpie massique d'un mélange
$h_{0,k}^f$: Enthalpie massique de formation de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
H_k	: Enthalpie molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique
h_k	: Enthalpie massique de la $k^{\text{ème}}$ espèce
h_t	: Enthalpie totale d'un fluide
k_l^f, k_l^b	: Vitesse de réaction dans le sens "réactifs \longrightarrow produits" et inversement
k_B	: Constante de Boltzmann
K_{cl}	: Constante d'équilibre de la $l^{\text{ème}}$ réaction
Kn	: Nombre de Knudsen de l'écoulement
l_p	: Libre parcours moyen
M	: Nombre de Mach de l'écoulement
m_H	: Masse atomique
M_r	: Nombre de Mach local basé sur la vitesse du fluide, relative au choc
N_x	: Nombre de points suivant x
N_y	: Nombre de points suivant y
P	: Pression du fluide
Q	: Energie chimique adimensionnée
q_l	: Taux net d'évolution de la $l^{\text{ème}}$ réaction
q_x, q_y	: Flux thermique suivant x et y
R_c	: Rayon de courbure
R_l	: Rayon limite selon le modèle de Manson et Guénoche
Re	: Nombre de Reynolds de l'écoulement
S_L, S_R	: Vitesse d'onde à gauche et à droite dans le solveur HLLC
T	: Température d'un mélange
T_a	: Température d'activation
T_p	: Température de parois
u	: Composante longitudinale de la vitesse

u_∞	: Vitesse, relative au choc, du fluide dans l'état infini
u_{cj}	: Vitesse du fluide dans l'état CJ
v	: Composante transversale de la vitesse
v_f	: Vitesse de la flamme selon de modèle de Manzhalei
W	: Variable caractéristique
w	: Composante suivant z de la vitesse du fluide
x, y, z	: Coordonnées cartésiennes
x_{cj}	: Distance séparant le choc de la surface CJ selon le modèle de Wood et Kirkwood
$x_{s,f}$: Lieu où la vitesse du gaz est égale à celle de la flamme selon le modèle Manzhalei
Y_k	: Fraction massique de la $k^{\text{ème}}$ espèce
\mathbf{A}	: Matrice jacobienne de la forme conservative des équations d'Euler
\mathbf{L}	: Inverse de la matrice des vecteurs propres à gauche
\mathbf{M}	: Matrice de passage des variables primitives aux variables conservatives
\mathbf{P}	: Matrice de passage des variables caractéristiques aux variables conservatives
H	: Hauteur du canal

Table des figures

1.1	Microturbine à gaz (à gauche) et rotor d'une micro turbine (à droite). . .	1
1.2	Front de détonation, selon Chapman et Jouguet, se déplaçant à la vitesse σ	3
1.3	Diagramme de Clapeyron.	4
1.4	Diagramme (x, t) des ondes de compression dans le repère du choc. . .	5
1.5	Modèle d'onde de détonation se propageant dans un tube selon Manson et Guénoche [54]	6
1.6	Modèle d'onde de détonation se propageant dans un tube selon Fay [28].	7
1.7	Structure d'une onde de détonation se propageant dans un tube selon Manzhalei [56]	8
1.8	Schéma de principe d'une détonation courbe selon Bdzil [5]	9
1.9	Schéma d'une cellule de détonation.	10
1.10	Structure d'une onde de détonation. E : choc réfléchi, F : ligne de glissement, G : ligne de glissement perturbée par l'écoulement.	11
1.11	Configuration d'une double réflexion de Mach d'une onde de détonation [76]. PT1 : point triple 1, PT2 : point triple 2, F : faisceau de détente, k : point où le disque Mach est noué.	11
1.12	Images strioscopiques d'un front de détonation se propageant de gauche à droite dans un micro-tube rempli d'un mélange stable a) $C_2H_4/3O_2/12Ar$, $P_1 = 20$ kPa - instable b) $C_2H_4/3O_2/10.5N_2$, $P_1 = 20$ kPa [2].	12
1.13	Vitesse moyenne du front de combustion σ en fonction de la pression initiale P_1 d'un mélange stoechiométrique de propane/oxygène, comparée à la vitesse théorique CJ selon Haloua <i>et al.</i> [41].	14
3.1	Stencils candidats à une interpolation WENO d'ordre 5 du flux numérique $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$	31
3.2	Schéma de l'approximation choc-choc du solveur HLLC au point $i+1/2$, dans un diagramme (x, t)	34
3.3	Volume de contrôle de fluide à partir duquel les termes sources sont calibrés.	39
3.4	Conditions aux limites de paroi.	43
3.5	Profils de masse volumique et de température du tube de Sod.	47
3.6	Profil de masse volumique du problème de Shu-Osher.	49
3.7	Effet du maillage. Profils de masse volumique à $t = 1$ pour $\epsilon = 10^{-6}$. . .	50

3.8	Erreurs relatives locales en norme L_1 basées sur le profil de masse volumique pour deux différentes valeurs de ϵ	51
4.1	Profils à l'instant $t = 0.14$ de pression a) masse volumique b) température c) vitesse d) pour différents maillages. \circ : $N_x = 100$ - \square : $N_x = 500$ - \diamond : $N_x = 1000$ - \times : $N_x = 2000$ - \dots : Etat CJ théorique; $--$: Etat Neumann théorique.	56
4.2	Comparaison à l'instant $t = 0.14$ des profils de pression a), de masse volumique b), de température c) et vitesse d). \circ : sans censeur; \square : avec censeur; \dots : Etat CJ théorique; $--$: Etat Neumann théorique ($N_x = 2000$).	57
4.3	a) Distributions spatiales du gradient de la variable d'avancement de la réaction et b) de pression à différents instants.	59
4.4	a) Distributions spatiales de masse volumique et b) de température à différents instants.	59
4.5	Profils de pression à deux instants différents - a) $t = 80$, b) $t = 84$	60
4.6	a) Evolution temporelle de la vitesse de l'onde - b) Evolution temporelle de la pression du choc.	60
4.7	Répartition spatiale de la pression à $t = 32$. \dots : Etat CJ théorique; $--$: Etat Neumann théorique.	62
4.8	Méthode d'initialisation pour la détonation 2D.	63
4.9	Schlierens numériques du gradient de densité aux instants : a) $t = 0.5$ - b) $t = 1$ - c) $t = 1.5$ - d) $t = 2$	63
4.10	Normes des gradients : a) du champ de pression - b) du champ de masse volumique. Champs - c) de la variable d'avancement - d) du taux de décomposition chimique à l'instant $t = 17$	66
4.11	Norme du gradient du champ de pression à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$. I : onde incidente, T : onde transverse, M : disque de Mach, F : faisceau de détente, $pt1$: point triple de type 1, $pt2$: point triple de type 2, k : point d'impact du jet sur le disque de Mach.	67
4.12	Norme du gradient du champ de masse volumique à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$. lg : ligne de glissement, $J1$: jet orienté vers l'avant, $J2$: jet orienté vers l'arrière, k : point d'impact du jet avec le disque de Mach.	68
4.13	Champs de la norme du gradient de Z à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$	69
4.14	Champ de la variable d'avancement à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$	70
4.15	Champs du taux de réaction chimique à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$	71
4.16	Evolution temporelle de la vitesse de l'onde au niveau de l'axe. $-$: vitesse moyenne.	72
4.17	Trajectoires des points triples à $t = 57$. l : longueur moyenne d'une cellule, λ : largeur moyenne d'une cellule.	72

4.18	Trajectoires des points triples à $t = 29.5$	72
4.19	Profils de pression a) et des fractions massiques des espèces chimiques majoritaires b) dans le repère du choc.	74
4.20	a) Distribution spatiale de la fraction massique de C_3H_8 normalisée par sa valeur initiale dans le repère du choc - b) Pression du mélange en fonction de $Y_{C_3H_8}/Y_{C_3H_8}^0$	74
4.21	a) Epaisseur Δ en fonction de la pression initiale - b) Vitesse moyenne de détonation σ en fonction de la pression initiale.	75
4.22	Vitesse moyenne de détonation σ en fonction de la pression initiale pour un diamètre de 38 mm.	76
4.23	a) Rapport entre les différents temps caractéristiques avec un temps d'induction égal à τ_1 - b) Evolution de l'épaisseur de la zone subsonique en fonction de la pression initiale - c) et d), respectivement, profils de pression et de température à $t \approx 1.88$ ms, pour un mélange sous une pression initiale d'1 kPa. b), c) et d) sont obtenus avec un temps d'induction égal à τ_2	77
4.24	a) et b), respectivement, profils de pression et de température dans les cas visqueux avec parois adiabatiques et isothermes à $t \approx 1.88$ ms. La pression initiale du mélange est 1 kPa avec un temps d'induction τ_2	79
4.25	Vitesse moyenne de détonation σ en fonction de l'inverse de la hauteur, pour une pression initiale de 3 kPa.	81
4.26	Rapports des différents temps caractéristiques pour un temps d'induction égal à τ_1 et pour différentes hauteurs, sous une pression initiale de 3 kPa.	82
4.27	Couche limite se développant sur une plaque plane.	83
4.28	Etat infini vu par une couche limite se développant en aval d'un front de détonation. δ représente l'épaisseur de la couche limite et σ la vitesse moyenne de l'onde.	84
4.29	Test de convergence par rapport au maillage. Contrainte pariétale τ_p dans le repère du choc.	85
4.30	Test de convergence par rapport au maillage. Rapport δ/x en fonction du nombre de Reynolds Re_x	86
4.31	Evolution temporelle de la vitesse du front de détonation.	87
4.32	Contour de la ligne sonique à cinq instants différents.	87
4.33	Champ moyen de la vitesse longitudinale relative au choc [$m.s^{-1}$]. Avec la ligne sonique représentée en blanc.	88
4.34	Champ de pression [kPa].	88
4.35	Champ de masse volumique [$kg^{-3}m$].	89
4.36	Champ de température [K].	89
4.37	Champ de fraction massique adimensionnée [%].	90
4.38	Champ du gradient de $Y_{C_3H_8}/Y_{C_3H_8}^0$ [m^{-1}].	90
4.39	Profil axial de $Y_{C_3H_8}/Y_{C_3H_8}^0$ pour différentes ordonnées, pour une abscisse comprise entre le choc et la ligne sonique.	91
4.40	Champ du rotationnel [$m s^{-2}$].	91
4.41	(η, ξ) repère curviligne associé à une onde de détonation courbe [5].	92

4.42	a) $v/u = 0$ est représenté par des traits blancs, les traits noirs représentent les lignes de courant - b) $\partial(v/u)/\partial x = 0$ (traits verts).	92
4.43	Réseau des lignes caractéristiques. a) C^- - b) C^+ . Les traits blancs représentent des Iso-Mach.	93
4.44	Représentation d'une ligne caractéristique et d'une ligne de courant. . .	93
4.45	Développement d'une couche limite laminaire sur une plaque plane dans un champ de pression uniforme. $\Delta\dot{m}$ est la partie du débit masse déviée par la couche limite et h est la hauteur du volume de fluide.	94
4.46	Contour de la poche subsonique (points noirs), épaisseur de la couche limite (carrés rouges), épaisseur de déplacement (diamants verts) et épaisseur de quantité de mouvement (étoiles bleues). Canal de hauteur H_{ref}	95
4.47	a) et b) respectivement C_{fx} et δ/x en fonction de Re_x dans la zone A - c) gradient de la pression normalisée en fonction de Re_x - d) C_{fH} en fonction de Re_H dans la zone A.	96
4.48	a) C_{fH} en fonction de Re_H dans la zone B - b) Coefficient de frottement moyen, au sens de Favre, \bar{C}_{fH} , en fonction nombre de Reynolds \bar{Re}_H , moyenné au sens de Favre.	96
4.49	$(\rho u/\mu)_{axe}$ en fonction de x	97
4.50	u/u_∞ en fonction de $\eta = 4.92y/\delta$, à 0.3 mm en aval du choc (zone A). . .	97
4.51	a) et b) respectivement u/u_∞ en fonction de η , à 0.5 mm en aval du choc (zone B) et à 0.8 mm en aval du choc (zone C).	98
4.52	Critère de thermicité avec prise en compte des contraintes visqueuses et des flux thermiques.	99
4.53	Evaluation des différents termes du bilan d'énergie sur la ligne sonique.	100
4.54	Critère de thermicité avec prise en compte uniquement des contraintes visqueuses.	101
4.55	Vitesse moyenne de l'onde normalisée, prise sur l'axe, en fonction de l'inverse de la hauteur du canal.	102
4.56	Vitesse moyenne de détonation 1D et 2D, en fonction de la hauteur.	103
4.57	Contour de la poche subsonique pour différentes hauteurs du canal.	103
4.58	Vitesse instantanée normalisée de l'onde, prise sur l'axe, pour le canal de hauteur $4H_{ref}$. La droite en tirets représente la vitesse moyenne.	104
4.59	Contour de la poche subsonique (point noirs), épaisseur de la couche limite (carrés rouges), épaisseur de déplacement (diamants verts), épaisseur de quantité de mouvement (étoiles bleues). Canal de hauteur $4H_{ref}$	104
4.60	Aire normalisée des poches subsoniques pour différentes hauteurs.	105
4.61	Trajectoires des points triples pour différentes hauteurs de canal. a) $H = 4H_{ref}$; b) $H = 3H_{ref}$; c) $H = 2H_{ref}$; d) $H = H_{ref}$	105
A.1	a) Capacités calorifiques à pression constante - b) Coefficients polytropiques des différentes espèces chimiques -c) Coefficients polytropiques des mélanges initiaux et finaux, en fonction de la température.	125
B.1	a) Viscosité dynamique - b) Conductivité thermique - c) Nombre de Prandtl des espèces chimiques en fonction de la température.	128

B.2	Nombre de Prandtl des mélanges initial et final en fonction de la température.	128
C.1	Récapitulatif des relations entre les variables conservatives U , les variables primitives V et les variables caractéristiques W	134
D.1	Front de détonation selon Chapman et Jouguet.	135
F.1	Diagramme (x, t) schématisant la variation du volume des particules fluides après passage d'un choc.	143
G.1	Changement de repère.	146
H.1	(η, ξ) repère curviligne associé à un front de détonation courbe.	151
H.2	La ligne blanche représente l'ensemble de points où $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right)$ s'annule avec prise en compte de la vorticit�.	155
H.3	La ligne blanche représente l'ensemble de points où $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right)$ s'annule sans prise en compte de la vorticit�.	155

Liste des tableaux

1.1	Configurations expérimentales employées par différents auteurs. D diamètre du tube, L longueur du tube, P pression.	12
1.2	Différents modes de propagation des ondes de détonation.	13
3.1	Ordre de convergence du <i>WENO5-GLF</i> pour deux différentes valeurs de ϵ	51
3.2	Ordre de convergence du <i>WENO5-HLLC</i> pour deux différentes valeurs de ϵ	51
3.3	Ordre de convergence du <i>WENO5M</i> pour deux différentes valeurs de ϵ	52
4.1	Conditions initiales d'une détonation stationnaire 1D. HP et BP désignent, respectivement, haute et basse pression.	54
4.2	Vitesse moyenne σ de l'onde pour différentes valeurs de N_x	54
4.3	Etats Neumann et CJ de l'onde respectivement indicés par $(\cdot)_{vn}$ et $(\cdot)_{cj}$ pour différentes valeurs de N_x	55
4.4	Etats Neumann et CJ de l'onde selon que le censeur de choc est activé ou pas.	57
4.5	Vitesse moyenne σ de l'onde selon que le censeur de choc est activé ou pas.	58
4.6	Etats Neumann et CJ théoriques.	59
4.7	Etats Neumann et CJ numériques pour une détonation stable 1D, avec $\gamma = 1.2$	62
4.8	Rapport Δ/δ_{sub} en fonction de la pression initiale du mélange.	75
4.9	Longueur de la zone subsonique δ_{sub} et fraction massique normalisée du réactif à quatre instants différents, pour un mélange de pression initiale 1 kPa.	78
4.10	Longueur δ_{sub} de la poche subsonique, fraction massique du propane $Y_{C_3H_8}^{CJ}$ à la fin de la zone subsonique et vitesse moyenne σ de l'onde, en fonction de la pression initiale du mélange pour les cas parois adiabatiques et isothermes.	79
4.11	Estimation de l'épaisseur δ_c de la couche limite et de x_c à la fin du régime laminaire.	83
4.12	Différents maillages testés.	85
A.1	Coefficients $a_{n,k}$ pour C_3H_8 , CO et CO_2	122
A.2	Coefficients $a_{n,k}$ pour H_2 , H et H_2O	123
A.3	Coefficients $a_{n,k}$ pour O_2 et O et OH.	124

B.1 Paramètres issus de la théorie cinétique des gaz pour quelques espèces chimiques, disponible dans [39]. L'unité de $\bar{\mu}$ est le Debye.	127
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Généralités

Au cours de cette dernière décennie, un nouveau domaine de recherche, appelé nanoscience, s'est développé de façon fulgurante. C'est un champ qui recouvre pratiquement tous les domaines scientifiques. On peut citer, notamment, la microfluidique qui s'intéresse aux écoulements de fluide à petite échelle, la combustion et plus généralement le domaine de l'énergétique [29] et de la micro-propulsion. Un autre champ d'application concerne également les matériaux micro-énergétiques et l'interaction d'une onde de détonation avec la microstructure [81, 93].

Dans le cas des machines thermiques, fonctionnant selon le principe de Carnot (transformation de l'énergie chimique en un travail mécanique), l'échelle de temps caractéristique de la combustion est indépendante de la taille du système. Cependant, les temps diffusifs, notamment ceux associés aux pertes thermiques, diminuent lorsque la taille du système est réduite. Ainsi, l'efficacité des machines se trouve très sérieusement dégradée car la grande partie de l'énergie, fournie par la combustion, est dissipée à travers les parois. Cette énergie n'est évidemment plus disponible pour effectuer un travail mécanique. L'utilisation de la déflagration comme mode de combustion semble peu efficace dans les micro-systèmes, d'où l'idée d'assister la combustion par onde de choc afin d'obtenir un rendement plus acceptable [7].



figure 1.1 – Microturbine à gaz (à gauche) et rotor d'une micro turbine (à droite).

Afin de mieux comprendre l'influence des effets diffusifs sur le comportement des ondes de choc, une présentation générale de l'état de l'art dans ce domaine est faite par la suite.

1.2 Ondes de choc en milieu confiné

Généralement, lorsqu'une onde de choc se propage dans un tube de taille conventionnelle, l'échelle de temps convective, τ_s , est négligeable comparée à l'échelle diffusive τ_d [7]. Cependant, lorsque ces deux échelles sont du même ordre de grandeur, les effets diffusifs doivent être pris en compte. En effet, lorsque le rapport volume sur surface diminue, les effets de parois, liés aux phénomènes de transport (viscosité, conductivité thermique et diffusion d'espèces chimiques), ne peuvent plus être négligés. Les écoulements, dans ce genre de configuration, sont considérés à faible nombre de Reynolds. Ils sont obtenus soit par réduction d'échelle, soit par diminution de pression. Le lien entre la pression et la longueur caractéristique est fait à travers le nombre de Reynolds, basé sur la vitesse du son.

Dans une configuration de tube à choc, l'intégration des lois de conservation avec prise en compte des forces de frottement et des pertes thermiques pariétales permet de prédire la décroissance de la vitesse et de l'intensité du choc [7]. A titre d'exemple, citons le modèle 0D développé par Brouillette *et al.*, qui permet de retrouver des résultats similaires à ceux obtenus expérimentalement par Duff [24]. Ce dernier a mené plusieurs tests dans des tubes à choc d'Argon à faibles pressions initiales (de l'ordre de quelques centaines de Pa). Il a ainsi montré que pour un rapport de pression amont/aval donné, une diminution notable de la vitesse du choc, au cours du temps, est observée. Ce phénomène est attribué à la présence d'une couche limite laminaire le long des parois.

Un modèle 1D compressible a été développé par Mirshekari et Brouillette [59]. Il repose sur l'ajout des termes sources de masse volumique, de quantité de mouvement et d'énergie aux équations du mouvement. Pour simplifier l'étude, l'écoulement est rendu quasi-stationnaire en prenant un repère attaché au choc. Pour de faibles rapports de pression, le choc connaît une forte atténuation. Ce résultat, assez intuitif, a également été retrouvé par Zeitoun et Burtschell [97]. Ces derniers ont modélisé des écoulements compressibles visqueux, dans des micro-tubes, à l'aide des équations de Navier-Stokes 2D. Ils ont conclu qu'une couche limite, dont l'épaisseur est inversement proportionnelle à la pression initiale, serait responsable de ce phénomène. Un résultat similaire a été obtenu par Ngomo *et al.* [62] pour des écoulements compressibles 1D à forts nombres de Reynolds dans des micro-tubes. Le modèle utilisé est celui de Fanno [63]. Ce dernier est obtenu à partir des équations d'Euler 1D, auxquelles est ajouté un terme de friction. Le modèle de Fanno-Rayleigh est ensuite obtenu en ajoutant un terme source, modélisant les pertes thermiques pariétales, à l'équation d'énergie du modèle de Fanno. Les auteurs ont montré que les pertes thermiques jouent un rôle moins important dans l'atténuation des chocs que la viscosité.

Pour relier ces problèmes au domaine de l'énergétique et de la combustion, une présentation générale des différents travaux sur les ondes de détonation sera effectuée par la suite.

1.3 Ondes de détonation : théorie et modèle

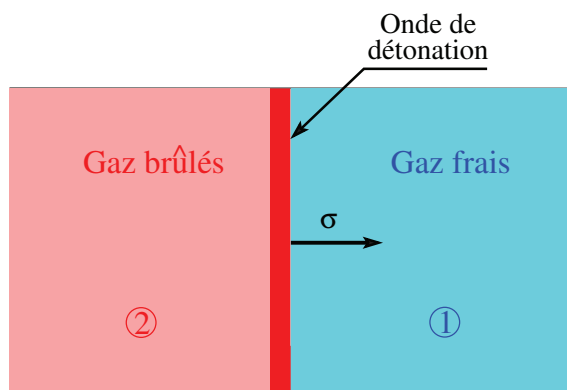


figure 1.2 – Front de détonation, selon Chapman et Jouguet, se déplaçant à la vitesse σ .

Une onde de détonation est une zone de combustion couplée à un système d'ondes de choc assez complexes [37]. Historiquement, la détonation a été caractérisée d'abord par Berthelot et Vieille, ensuite par Mallard et Le Chatelier à la fin du 19^{ème} siècle [31]. Les jalons d'une théorie unidimensionnelle sur la détonation ont été posés de façon indépendante par David L. Chapman en Angleterre (1899) et Emile Jouguet en France (1905) [16]. Le front de détonation est assimilé à une discontinuité au travers de laquelle le mélange réactif est instantanément transformé en produits de détonation (voir figure 1.2). Cela signifie une chimie infiniment rapide et une zone de réaction extrêmement fine. Le front de détonation se propage à une vitesse supérieure à la célérité du son du milieu réactif prémélangé.

Le processus de transfert d'énergie d'une flamme laminaire se fait essentiellement par l'intermédiaire des transferts thermiques des gaz brûlés vers les gaz frais, dont l'élévation de température va, elle-même, libérer de l'énergie chimique. Dans le cas d'une détonation, le processus de transfert d'énergie est différent. En effet, l'onde de choc de forte amplitude se propage dans le milieu réactif qui sera fortement comprimé et chauffé. La décomposition chimique du prémélange gazeux libère l'énergie chimique, créant des ondes de compression qui alimentent et soutiennent la propagation du front de choc. Quand la propagation de l'onde devient indépendante du processus d'amorçage, l'onde est considérée comme autonome. Dans un tube de taille conventionnelle, après une phase transitoire, un front d'onde quasi-plan se développe en se propageant à une vitesse quasi-constante, notée σ . Celle-ci est la grandeur caractéristique la plus accessible.

Dans le cas non-réactif, des chocs de différentes intensités sont possibles. Dans la limite d'une onde de choc faible, la vitesse du choc sera proche de la célérité du son du milieu en amont du choc. Par contre, avec la présence d'une réaction exothermique, les équations de conservation n'ont pas de solution en deçà d'une vitesse limite. Celle-ci se situe bien au-delà de la vitesse du son [31]. L'état thermodynamique final du fluide, appelé état Chapman-Jouguet (CJ), est construit à partir de cette vitesse limite. Dans le

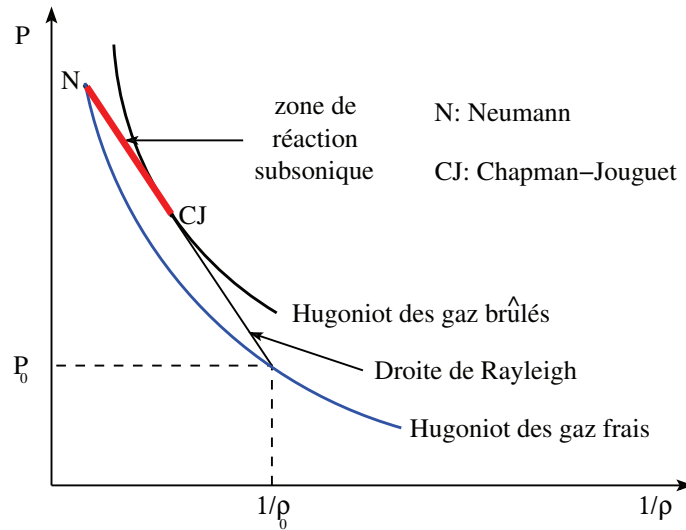


figure 1.3 – Diagramme de Clapeyron.

diagramme de Clapeyron (voir figure 1.3), l'état CJ est obtenu quand la droite de Rayleigh est tangente à la courbe d'Hugoniot des gaz brûlés (voir annexe D). L'écoulement immédiatement en aval du front est subsonique dans un repère associé au front.

Ce modèle a été affiné par Yakov B. Zel'dovich (1940), John von Neumann (1942) et Werner Döring (1943), pour donner lieu au modèle ZND [31]. Celui-ci est basé sur les équations hydrodynamiques d'Euler réactives. Les réactions chimiques procèdent à taux fini. L'écoulement est unidimensionnel et l'onde de choc est considérée comme une discontinuité au travers de laquelle aucune réaction n'est possible. L'état aval du choc est celui de Neumann où la pression et la masse volumique atteignent leurs valeurs maximales. La température étant suffisamment élevée, les réactions de dissociation des espèces du mélange initial peuvent avoir lieu et donner des radicaux libres. Ces derniers se combinent entre eux, dans la zone de réaction, pour former les gaz brûlés. C'est dans cette zone qu'a lieu le dégagement d'énergie, entraînant une hausse de température du gaz. La fin de la zone de réaction représente l'état CJ. Dans ce modèle, l'onde de détonation, est une onde de choc composite. En effet, l'onde de choc est immédiatement suivie d'une déflagration où la libération d'énergie s'accompagne d'une accélération de l'écoulement. Cette accélération est due à l'expansion des gaz brûlés et à la baisse de pression. Dans le repère du choc, l'écoulement subsonique, immédiatement en aval du choc, devient supersonique à la fin de la zone de réaction. Les ondes de compression, générées par le dégagement d'énergie, alimentent le front de détonation. Ce dernier se propage de manière auto-similaire (voir figure 1.4).

1.4 Modélisation du déficit de vitesse

L'inconvénient du modèle ZND est qu'il est inapte à expliquer le déficit de vitesse du front de détonation observé expérimentalement, avec une décroissance inversement proportionnelle au diamètre du tube. Zel'dovich fut le premier à penser que le confine-

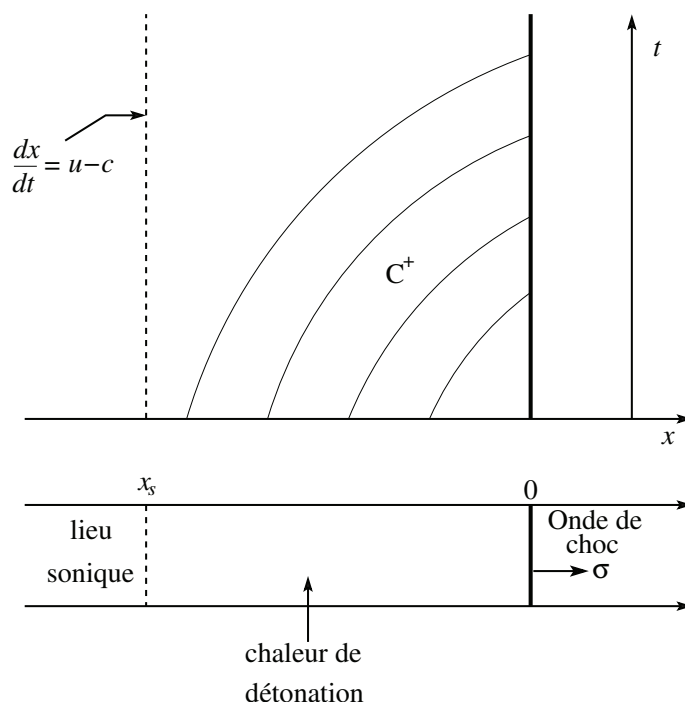


figure 1.4 – Diagramme (x, t) des ondes de compression dans le repère du choc.

ment du front de détonation rendait non-négligeables les échanges pariétaux [33, 95]. Les transferts de quantité de mouvement et les échanges thermiques deviennent comparables au taux de dégagement d'énergie chimique. Ils peuvent devenir importants au point que la détonation ne soit plus auto-entretenu. Le modèle, proposé par Zel'dovich [95], est basé sur les équations d'Euler réactives, auxquelles sont ajoutés des termes sources (frottements et pertes thermiques). La dissipation de l'énergie par frottement est la principale cause du déficit de vitesse d'une onde de détonation [96], cela est confirmé par Zhang et Lee [98]. Les effets thermiques semblent jouer un rôle moins important [98]. Dans le cas d'une détonation 1D visqueuse, durant le processus transitoire de formation de l'onde stationnaire, les phénomènes dissipatifs génèrent des détente le long des lignes caractéristiques. Elles ont pour conséquence de ralentir le choc. Le taux de décomposition chimique s'affaiblit avec la diminution de l'amplitude du choc et la mise en vitesse diminue. Les forces de frottement vont alors diminuer en intensité, et le cycle se répète jusqu'à ce qu'un équilibre soit atteint. Le point sonique séparant les états subsonique et supersonique représente le point CJ généralisé. Celui-ci a été identifié la première fois par Zel'dovich [95]. En ce lieu, les taux de production d'énergie entre les différentes contributions dues à la friction et à la réaction chimique s'équilibrent. La combustion du mélange réactif devient incomplète et l'état CJ n'est plus le lieu de fin de zone de réaction. Ainsi, le déficit de vitesse de détonation peut être attribué à une diminution d'énergie soutenant le front. Deux facteurs en sont à l'origine : l'énergie chimique libérée dans la partie supersonique de l'écoulement et l'énergie absorbée par les phénomènes dissipatifs. La deuxième cause l'emporte souvent sur la première [98].

Dans les tubes à parois lisses, une couche limite se développe rapidement le long de

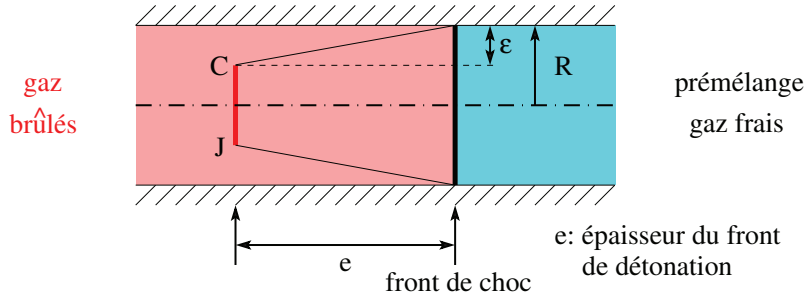


figure 1.5 – Modèle d'onde de détonation se propageant dans un tube selon Manson et Guénoche [54]

l'écoulement en aval de l'onde de choc. Ainsi, le coefficient de trainée, résultant des pertes de charge, sera équivalent au coefficient de Poiseuille pour un écoulement laminaire et au coefficient de Blasius pour un écoulement turbulent. D'après Murray [61], ce modèle permet certes de retrouver la variation linéaire de la vitesse en fonction de l'inverse du diamètre, mais sous-estime fortement les niveaux observés expérimentalement. Il nécessite le plus souvent une calibration. Ceci a conduit Manson et Guénoche [54] à proposer le modèle phénoménologique schématisé sur la figure 1.5.

D'après ce modèle, dans l'écoulement en aval de l'onde de choc, les réactions chimiques sont inhibées ou profondément modifiées dans une veine fluide d'épaisseur ε , proche des parois (voir figure 1.5). Par contre, les réactions chimiques étant complètes dans une zone centrale de rayon $R - \varepsilon$, l'écoulement pourrait être ainsi séparé en deux zones. La fraction λ des gaz brûlés est définie comme étant le rapport entre la section du cœur potentiel de l'écoulement et la section du tube. Ainsi, on a

$$\lambda = \frac{\pi(R - \varepsilon)^2}{\pi R^2} = \left(1 - \frac{\varepsilon}{R}\right)^2 \quad (1.1)$$

En considérant les valeurs moyennes dans chaque section de l'écoulement, les lois de conservation entre l'onde de choc et le plan sonique CJ (approximation moyenne de la surface sonique) peuvent être réécrites. Le terme de chaleur de réaction étant pondéré par λ , cela signifie que l'énergie chimique alimentant le front de détonation est uniquement libérée dans la zone centrale de l'écoulement. A partir de ce constat, une expression de la vitesse de détonation est obtenue en fonction du rayon du tube

$$\sigma = \sigma_{cj} \sqrt{\left(1 - \frac{\varepsilon}{R}\right)^2 + \left[1 + \left(1 - \frac{\varepsilon}{R}\right)^2\right] \left(\frac{\sigma_l}{\sigma_{cj}}\right)^2} \quad (1.2)$$

où σ_l est la vitesse limite de l'onde atteinte lorsque ε tend vers R , situation limite où le front ne peut plus se propager. A partir de là, on peut définir un rayon limite R_l proche de ε . Ainsi, pour $R \gg R_l$, l'expression 1.2 devient

$$\sigma \approx \sigma_{cj} \left(1 - \frac{R_l}{R}\right) \quad (1.3)$$

Le modèle de Manson et Guénoche n'arrive cependant pas à expliquer l'origine de l'inhibition ou de la modification des réactions chimiques proche des parois. Ainsi, Tsugé

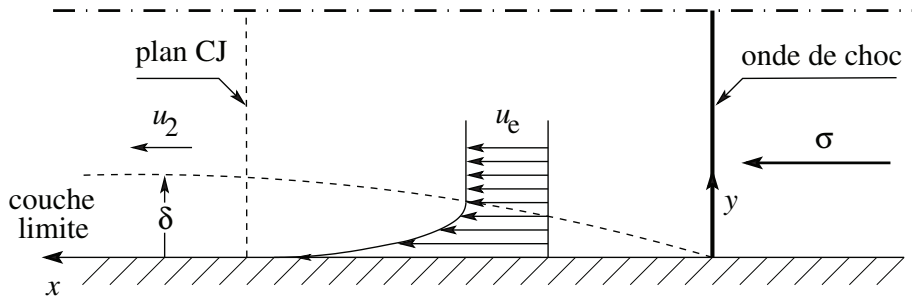


figure 1.6 – Modèle d’onde de détonation se propageant dans un tube selon Fay [28].

[85] propose d’expliquer le déficit de vitesse d’une onde de détonation par les transferts dissipatifs. En intégrant les équations de Navier-Stokes réactives dans les directions transverses de l’écoulement, dans un repère attaché au choc, un système d’équations quasi-unidimensionnel a été obtenu. Dans ces équations, des corrections basées sur l’approximation d’Oseen-Kàrmàn-Millàn ont été apportées afin de mieux résoudre la couche limite laminaire. Le modèle de Tsugé diffère de celui de Zel’dovich [95] grâce à une meilleure modélisation des frottements pariétaux et aussi par la présence d’un terme de diffusion d’espèces chimiques.

D’autre part, Fay [28] propose d’expliquer le déficit de vitesse par le développement d’une couche limite en aval de l’onde de choc (voir figure 1.6). A pression initiale fixée, la vitesse de détonation diminue en fonction de l’inverse du diamètre du tube. De même, à diamètre fixé, cette même vitesse diminue en fonction de l’inverse de la pression initiale du mélange réactif. En réduisant la pression du mélange, l’épaisseur de la zone de réaction augmente, la rendant ainsi plus sensible à la présence de la couche limite naissante en aval du choc. Selon Fay, les effets de parois étant confinés dans une couche limite, l’écoulement est influencé au travers d’ondes de pression se propageant dans la zone de réaction subsonique. Les effets de la couche limite entraînent une divergence des lignes de courant dans la zone de réaction et par conséquent une réduction de la vitesse de l’onde. Dans le repère lié au choc (voir figure 1.6), la condition aux limites d’adhérence impose une vitesse égale à la vitesse du front d’onde. Elle est supérieure à la vitesse au sein de la zone subsonique, le gaz ayant été préalablement choqué. Cette augmentation de vitesse se transmet dans l’écoulement par l’intermédiaire de la couche limite croissante. Le nombre de Prandtl d’un mélange gazeux étant proche de l’unité, les couches limites thermiques et dynamiques sont équivalentes. Pour toute surface parallèle à l’onde, la pression est quasi-uniforme. La température de la paroi étant moins élevée que la température au cœur de l’écoulement, la masse volumique du gaz sera plus importante. Le débit massique gazeux est donc plus important à la paroi qu’au centre. Ainsi, la présence de la couche limite fait apparaître un excès de débit massique et de quantité de mouvement. L’épaisseur de déplacement δ^* est donnée par

$$\rho_e u_e \delta^* = \int_0^\delta (\rho u - \rho_e u_e) dy \quad (1.4)$$

l’état e représente celui du bord externe de la couche limite. On peut donc considérer que la paroi est déplacée de δ^* , qui croît comme l’épaisseur de la couche limite.

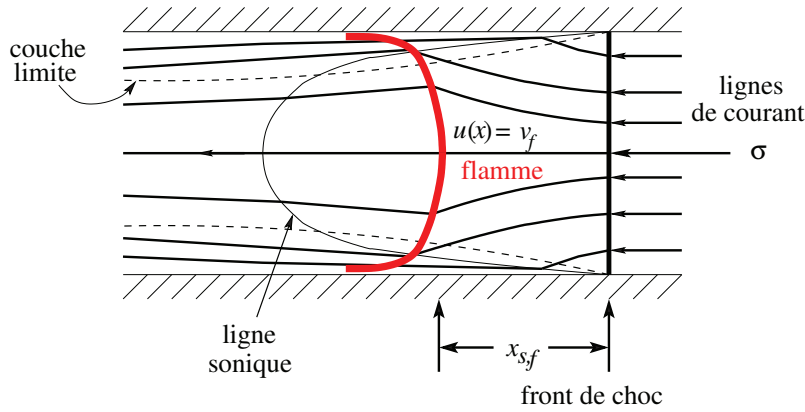


figure 1.7 – Structure d’une onde de détonation se propageant dans un tube selon Manzhalei [56]

L’écoulement subsonique s’adapte de sorte à ce que chaque tube de courant subisse la même variation de section afin que le plan CJ généralisé reste parallèle au choc. Ceci entraîne une divergence des lignes de courant. Ainsi, l’écoulement peut être modélisé par les équations d’Euler réactives avec une variation de section qui sera déterminée en fonction de l’épaisseur de déplacement turbulente [38].

$$\delta^* = 0.22x^{0.8} \left(\frac{\mu_e}{\rho_1 \sigma} \right)^{0.2}, \quad A = \pi(R + \delta^*)^2 \quad (1.5)$$

x étant la distance par rapport au choc. La prise en compte de la divergence de l’écoulement revient à rajouter un terme source de masse à l’équation de continuité. Cela signifie qu’une partie du débit massique et de l’énergie libérée, transitant au travers du choc, est affectée à la couche limite. La chute de vitesse est due à l’augmentation de la section de passage du fluide. Dans un écoulement réactif divergent, l’augmentation de la section et le dégagement d’énergie chimique ont des effets opposés. En effet, l’augmentation de la section tend à écarter le nombre de Mach local de l’unité tandis que la libération d’énergie chimique tend à le ramener à l’unité. L’équilibre sera atteint au plan CJ généralisé [98]. L’écoulement en aval de ce plan étant supersonique, le choc n’est plus influencé car toute perturbation générée dans cette zone ne peut remonter l’écoulement. Seule la zone de la couche limite comprise entre le plan CJ et le choc influence la propagation du front de détonation. En supposant que $\delta^* \ll D$ (D étant le diamètre du tube), Fay propose une relation entre le déficit de vitesse $\Delta\sigma/\sigma_{cj}$, l’épaisseur de déplacement et le diamètre du tube.

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_{cj}} \approx \frac{2.1\delta^*}{D} \quad (1.6)$$

L’inconvénient du modèle de Fay se situe dans les hypothèses de la couche limite. En effet, dans un repère lié au choc, la condition aux limites d’adhérence impose un écoulement supersonique à la paroi. L’écoulement étant subsonique suite au passage du choc, il est nécessaire d’avoir un plan (ou a fortiori un point) sonique permettant

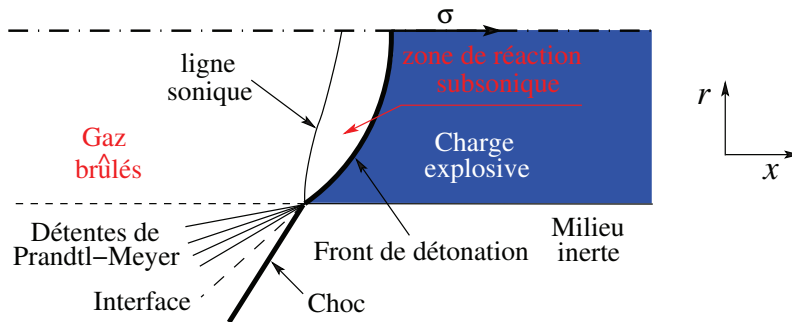


figure 1.8 – Schéma de principe d'une détonation courbe selon Bdzil [5]

la transition entre les états subsonique et supersonique. Ce modèle correspond à celui proposé par Manzhalei [56]. En aval du choc, les conditions d'adhérence à la paroi entraînent une accélération du fluide (voir figure 1.7). Cette accélération se propage au cœur de l'écoulement par des échanges de quantité de mouvement qui ont lieu dans la couche limite laminaire, en aval du choc. Il s'ensuit une déviation des lignes de courant vers la paroi, engendrant ainsi une accumulation de gaz dans la couche limite laminaire. Cette accumulation entraîne un défaut de masse au cœur de l'écoulement, dans lequel la flamme est stabilisée à $x_{s,f}$, lieu où la vitesse du gaz est égale à celle de la flamme.

$$x_{s,f} = x^* \left(1 - \frac{v_f}{u}\right)^2 \quad (1.7)$$

avec x^* le point à partir duquel tout le gaz, ayant traversé le choc, se retrouve dans la couche limite. v_f est la vitesse de la flamme et u la vitesse de l'écoulement juste derrière le choc. Au cœur de l'écoulement supersonique, la flamme est parallèle à la section du tube tandis qu'elle est courbe dans la couche limite.

Par ailleurs, dans le cas d'une détonation en cartouche, détonation se propageant dans un matériau énergétique cylindrique, Wood et Kirkwood [92] ont montré que le déficit de vitesse pouvait être lié à la divergence de l'écoulement due à la courbure du choc. Les équations d'Euler réactives écrites en coordonnées cylindriques sont spécifiées sur l'axe de symétrie. La divergence de l'écoulement se matérialise par un terme source dans l'équation de masse dont la résolution aboutit à l'expression approchée du déficit de vitesse.

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_{cj}} = \frac{3.5x_{cj}^*}{R_c} \quad (1.8)$$

où x_{cj}^* est la distance séparant le choc de la surface CJ et R_c le rayon de courbure du choc. Il en ressort que, plus une onde est courbe, plus sa vitesse de propagation est faible. Par contre, lorsque cette onde est plane, il n'y a pas de déficit de vitesse. Elle se propage à la vitesse CJ. Dans le même esprit que [92], Bdzil [5] a montré à partir d'une analyse bidimensionnelle de l'écoulement, qu'une partie de l'énergie était dissipée dans les directions transverses au sens de propagation du choc. En effet, le choc courbe (voir figure 1.8) induit des vitesses radiales. Ainsi, l'énergie réelle pour soutenir le choc dans la direction longitudinale est moindre que dans le cas strictement plan.

Dans des tubes de dimensions conventionnelles, des instabilités peuvent apparaître dans la structure de l'onde. Les origines de ces dernières sont présentées par la suite.

1.5 Instabilités des ondes de détonation

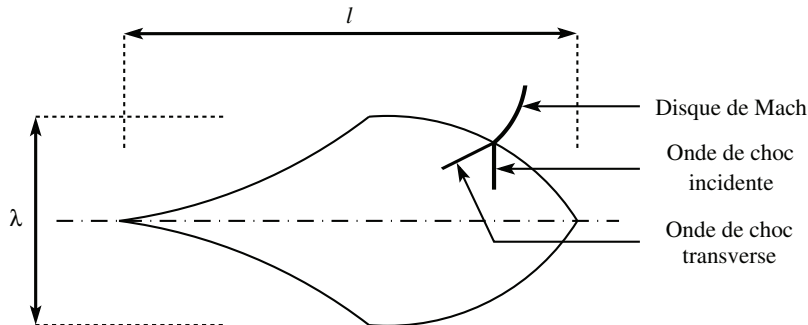


figure 1.9 – Schéma d'une cellule de détonation.

De fait, la structure d'une onde de détonation peut être beaucoup plus complexe que celle proposée par les modèles précédents. Erpenbeck a montré analytiquement que l'onde devenait instable à la moindre perturbation [26]. Les paramètres utilisés sont le facteur de surdétonation, qui est le carré du rapport entre la vitesse moyenne d'une onde et la valeur CJ $(\sigma/\sigma_{cj})^2$, l'énergie d'activation réduite $E_a/\mathcal{R}_u T_1$, l'énergie chimique réduite $Q/\mathcal{R}_u T_1$ et le coefficient polytropique γ . L'indice 1 fait référence à l'état non choqué. Pour un paramètre de surdétonation, il y a une énergie d'activation réduite critique au-delà de laquelle le front de détonation est instable [6, 26, 46, 65]. Ces instabilités peuvent être suffisamment importantes pour que les fronts de détonation observés expérimentalement présentent des fronts multiples multidimensionnels, associés à des ondes transverses. À l'aide d'un film de suie tapissant les parois d'un tube de détonation, l'empreinte laissée par les points triples met en évidence la structure cellulaire du front de détonation (voir figure 1.9). λ et l sont respectivement la largeur et la longueur de la cellule, ils dépendent de la nature du mélange et des conditions initiales. De plus, λ est proportionnelle à la distance d'induction ZND [15].

Lorsqu'un front de choc se réfléchit sur une surface avec un angle supérieur à l'angle de détachement, une réflexion de Mach se produit. Une structure de disque de Mach avec un point triple se forme, le point triple étant le lieu de rencontre du choc incident, de l'onde transverse et du disque de Mach. La trajectoire du point triple est telle qu'elle s'éloigne de la surface de réflexion. Une ligne de glissement, ancrée sur le point triple, sépare les gaz ayant subi le passage des chocs incident et transverse de ceux comprimés par le disque de Mach (voir figure 1.10). La zone de réaction, en aval du disque de Mach, est moins épaisse qu'en aval du choc incident, car son amplitude est plus importante. Étant donné que la pression est uniforme au travers de la ligne de glissement, cette dernière représente une discontinuité de la zone de réaction.

Une configuration en double réflexion de Mach est également possible quand un deuxième point triple se forme un peu plus loin dans l'écoulement [15, 23] (voir figure 1.11).

La régularité de la structure cellulaire peut être mise à défaut, notamment, pour des mélanges pouvant présenter des instabilités longitudinales unidimensionnelles. En effet, pour des énergies d'activation importantes, les temps d'induction augmentent. L'inten-

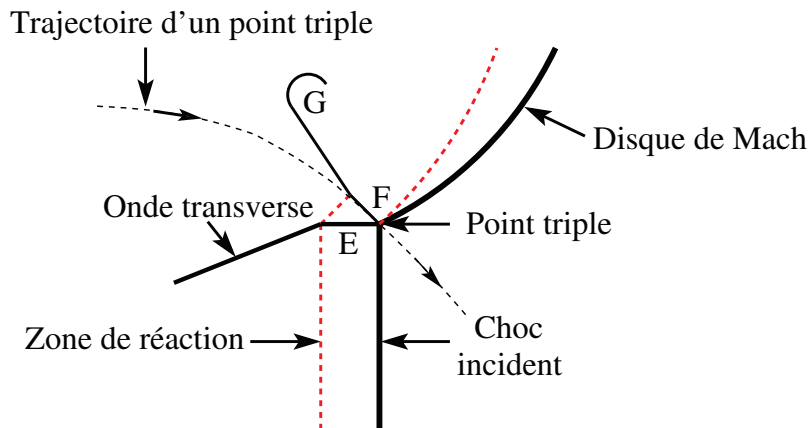


figure 1.10 – Structure d’une onde de détonation. E : choc réfléchi, F : ligne de glissement, G : ligne de glissement perturbée par l’écoulement.

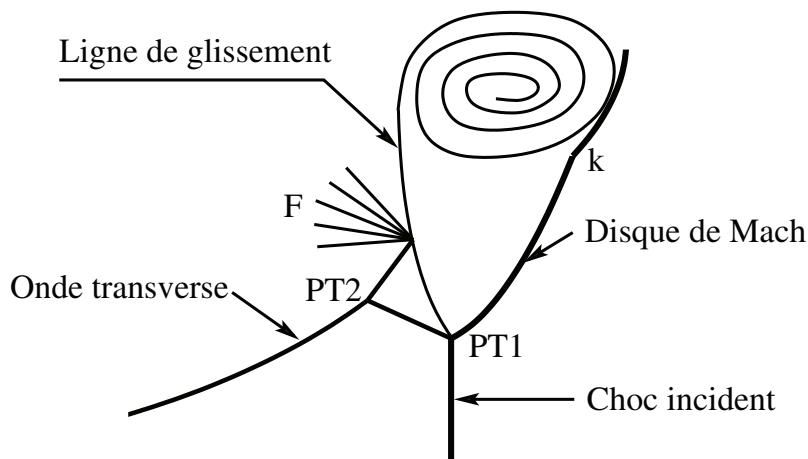


figure 1.11 – Configuration d’une double réflexion de Mach d’une onde de détonation [76]. PT1 : point triple 1, PT2 : point triple 2, F : faisceau de détente, k : point où le disque Mach est noué.

sité du choc incident peut ne pas être suffisamment forte pour initier la combustion. La zone de réaction peut se découpler du choc pour des vitesses légèrement inférieures à la vitesse CJ. La structure de la détonation, telle que présentée précédemment, est plus difficile à discerner expérimentalement [2]. L’impression sur un film de suie fait donc apparaître une plus grande gamme de longueurs caractéristiques. Selon Austin *et al.* [2], plus l’énergie d’activation réduite est éloignée des frontières de stabilité de détonation, plus la structure devient irrégulière. Ainsi, le front de détonation apparaît rugueux, voire plissé (voir figure 1.12).

De plus, la ligne de glissement réactive est le siège d’instabilités de type Kelvin-Helmholtz. Ainsi, il est proposé dans Ciccarelli et Dorofeev [15], Shepherd [77], Gamezo *et al.* [35] et Radulescu *et al.* [71] que les poches de gaz partiellement brûlés seront consommées à la suite d’échanges diffusifs et thermiques avec les gaz chauds. Ces mécanismes de mélange sont favorisés par les chocs transverses. C’est l’ensemble de

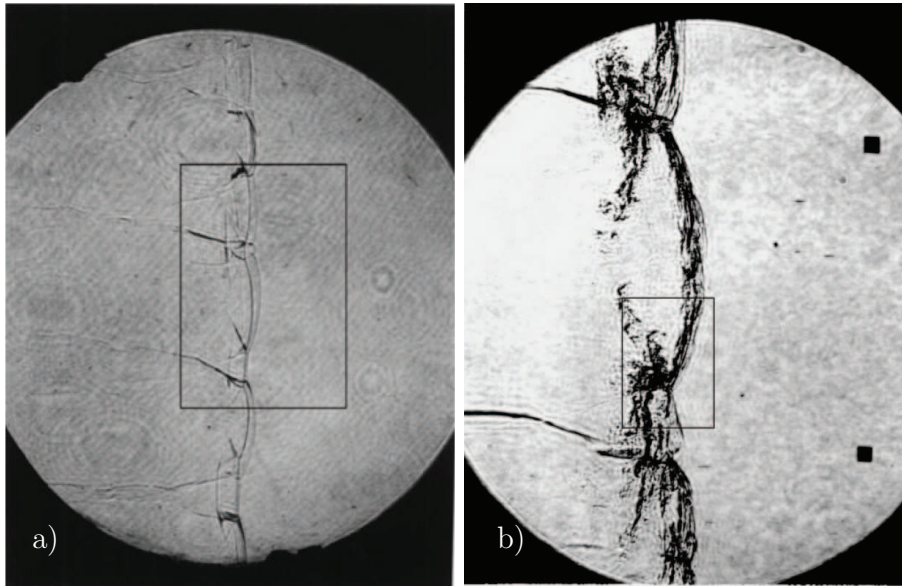


figure 1.12 – Images strioscopiques d’un front de détonation se propageant de gauche à droite dans un micro-tube rempli d’un mélange stable a) $\text{C}_2\text{H}_4/3\text{O}_2/12\text{Ar}$, $P_1 = 20$ kPa - instable b) $\text{C}_2\text{H}_4/3\text{O}_2/10.5\text{N}_2$, $P_1 = 20$ kPa [2].

ces instabilités et des mélanges réactifs induits qui permet de soutenir le front de détonation.

1.6 Détonations dans les canaux à section réduite

Des études expérimentales [41, 52, 55, 56] ont montré plusieurs modes de propagation de la détonation dans des tubes de différentes dimensions. Le tableau 1.1 représente les configurations expérimentales employées par quelques auteurs. Le front de détona-

	$D(\text{mm})$	L/D	$P(\text{kPa})$	Mélange
Lee <i>et al.</i> [52]	38	260	6.66-40	C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$ ou air
Haloua <i>et al.</i> [41]	38	640	6.66-13.33	$\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$ dilué à l’He ou l’Ar
Manzhalei [55, 56]	1	1300	3.65-60.8	$\text{C}_2\text{H}_2/\text{O}_2$
Ishii <i>et al.</i> [48]	0.8 – 3	167 – 625	39	H_2/O_2 dilué à l’Ar

tableau 1.1 – Configurations expérimentales employées par différents auteurs. D diamètre du tube, L longueur du tube, P pression.

tion semble exister pour des pressions initiales en deçà de celles pour lesquelles une

détonation à spin (dans des tubes à section circulaire) ou marginale (dans des tubes à section carrée) est possible. Ces conditions se matérialisent par l'existence d'un seul point triple dans l'écoulement, généralement considérées comme la limite de détonabilité [52]. En fonction du type de mélange, de la pression initiale et de la nature de la dilution, plusieurs modes de propagation ont été identifiés. Pour un mélange de propane/oxygène à la stœchiométrie, le premier mode se caractérise d'abord par une détonation ayant une vitesse proche de CJ [41]. Puis en réduisant la pression initiale en dessous de 2.67 kPa jusqu'à 1.33 kPa, une détonation haletante baptisée "stuttering" est mise en évidence. C'est un régime moins stable que le précédent, la vitesse moyenne baisse à $0.9\sigma_{cj}$ et une fréquence d'oscillation de l'ordre du kHz apparaît. Si la pression initiale est davantage réduite, de larges fluctuations de vitesses sont observées. Elles peuvent aller de 0.3 à $1.4\sigma_{cj}$ pour une vitesse moyenne de $0.6\sigma_{cj}$, à une fréquence d'un ordre de grandeur inférieur à celui du cas précédent (\sim quelques centaines de Hz). Ce régime est connu sous le nom de galopant. Finalement, quand la pression initiale est relativement faible, une flamme rapide est observée, ayant une vitesse moyenne de $0.5\sigma_{cj}$. La figure 1.13 montre la vitesse moyenne en fonction de la pression initiale pour un mélange de propane/oxygène à la stœchiométrie. On peut y distinguer trois régions. La première, dont la vitesse de l'onde baisse régulièrement avec la pression initiale, est située dans l'intervalle de pression initiale pour laquelle P_1 est supérieure à P_A . La deuxième est caractérisée par la chute brutale de la vitesse de l'onde, lorsque la pression initiale P_1 est comprise entre P_B et P_A . La dernière région est située dans la gamme des pressions inférieures à P_B . Très au-dessus de A, la vitesse est proche de σ_{cj} . Le mode stuttering apparaît pour des pressions proches de P_A . La baisse brutale est corrélée à l'apparition du mode galopant, pour lequel le déficit de vitesse avoisine les 40%. Finalement, en dessous de P_B , le régime de "flamme rapide" ou de "détonation basse vitesse" est atteint. La classification peut différer d'un auteur à un autre (voir tableau 1.2), surtout pour le mode stuttering. De plus, Lee *et al.* [52] y inclut un mode de fluctuations rapides, où la vitesse présente un caractère oscillant, d'amplitude et de fréquence irrégulières. Ceci est également en accord avec les travaux de Pinaev [68].

Modes	Vitesse/ σ_{cj}	
	Haloua <i>et al.</i> [41]	Lee <i>et al.</i> [52]
Stable	1	1
Fluctuations rapides	–	0.7 – 0.9
Stuttering	0.9	0.6 – 1
Galopant	0.5 – 1.4	0.4 – 1.5
Flamme rapide ou détonation basse vitesse	0.5	0.5
Extinction	0.5	0.5

tableau 1.2 – Différents modes de propagation des ondes de détonation.

Chue *et al.* [14] attribuent le régime de flamme rapide au mode de déflagration CJ, également présent dans des tubes rugueux ou contenant des obstacles. La nature des parois et des obstacles n'a pas d'influence sur la vitesse [14, 15]. Il faut cependant un niveau de turbulence suffisamment élevé pour que ce régime soit possible [99]. Ce dernier

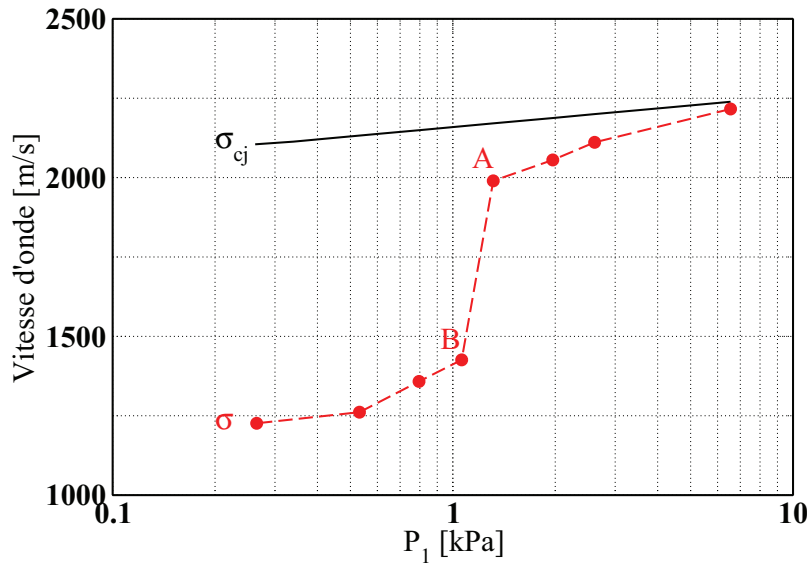


figure 1.13 – Vitesse moyenne du front de combustion σ en fonction de la pression initiale P_1 d'un mélange stœchiométrique de propane/oxygène, comparée à la vitesse théorique CJ selon Haloua *et al.* [41].

peut perdurer plus ou moins longtemps selon la sensibilité du mélange avant transition à la détonation. Ce régime a également été mis en évidence dans des simulations par Valiev *et al.* [86, 87] dans le cadre de la transition flamme laminaire/détonation (DDT) dans des tubes très longs.

Le régime galopant est, quant à lui, caractérisé par un phénomène de couplage/découplage périodique du front de choc avec la zone de réaction [41]. Après une phase de surdétonation, l'amplitude de l'onde décroît jusqu'à un régime CJ, puis tend vers une vitesse proche de $0.5\sigma_{CJ}$. Enfin, suite à une micro-explosion dans la zone d'induction, un régime de surdétonation se réinstalle. Le cycle se poursuit ainsi et peut se maintenir longtemps. Haloua *et al.* [41] supposent qu'une condition nécessaire pour que ce régime puisse apparaître est le changement de la constante d'énergie d'activation globale en fonction de la température.

Le régime stuttering peut être associé à une détonation à spin selon Ishii et Gröning [47]. Ce type de détonation a été découvert par Campbell et Woodhead [10, 11] lors d'expériences avec des mélanges de CO/H₂/O₂ proches des limites de détonabilité.

Avec la baisse de la pression initiale, la détonation va donc progressivement d'un mode stable à un mode instable. De plus, chaque mélange présente des caractéristiques différentes. Ainsi, une forte dilution à l'Argon va inhiber les modes les plus instables. Cependant, selon Lee *et al.* [52], la corrélation des modes instables avec les paramètres usuels (énergie d'activation, régularité de la structure cellulaire) n'est pas triviale du fait de l'interdépendance de ces paramètres d'une part et aussi des conditions aux limites d'autre part. Des tendances ont, cependant, pu être dégagées par Lee *et al.* [52]. Ainsi, des mélanges d'acétylène/oxygène avec une faible énergie d'activation ne présentent pas les modes stuttering et galopant. La régularité des cellules ne semble pas avoir subi d'influence suite à une dilution à l'Argon ou à l'Azote. Les mélanges avec

une forte énergie d'activation (propane/oxygène, éthylène/oxygène, éthane/oxygène) présentent des fronts de combustion instables. La dilution à l'Argon de ces précédents mélanges permet de supprimer le mode galopant.

Plus récemment, Chao *et al.* [12] ont étudié la baisse de la vitesse de détonation pour des mélanges très stables (hydrogène/oxygène dilué à l'Argon à hauteur de 50% et acétylène/oxygène dilué à 80% à l'Argon sous des pressions comprises entre 6.99 kPa et 10.19 kPa). Cela correspond au cas où les instabilités de détonation jouent un rôle mineur dans le maintien de l'auto-similarité de la détonation, dans des canaux annulaires de diamètre 2.2 et 6.9 mm. Dans ce cas, aucune instabilité n'est observée [12]. Les auteurs ont montré que le modèle de Fay permettait de reproduire la baisse de la vitesse et également les limites de détonabilité. Cependant, ces prévisions se dégradent pour des mélanges instables dans des tubes [9]. Ainsi, la suppression des instabilités liées à la présence de parois semble un mécanisme plus approprié pour l'extinction de la détonation [9]. Kitano [50] *et al.* ont étudié le déficit de vitesse pour des mélanges d'hydrogène/oxygène sur des distances allant de 100 à 300 diamètres de tube. Ils se sont focalisés sur la transition d'un front multiple à une détonation à spin. Ils ont ensuite comparé les résultats expérimentaux des vitesses de détonation aux résultats fournis par le modèle de Zel'dovich. Pour ce faire, il était nécessaire d'ajuster un coefficient correctif à la force de frottement pour corroborer leurs résultats expérimentaux. Ishii *et al.* [48] ont fait de même pour des détonations de mélanges, initialement à 39 kPa et à température ambiante, se propageant dans un canal long de 5.05 m dont la hauteur varie de 0.8 mm à 3 mm. Dans ce genre de configurations, la vitesse de propagation de l'onde est quasiment proportionnelle à l'inverse de la hauteur du tube.

Dans un contexte différent, Wu *et al.* [93], Valiev *et al.* [86, 87] ont étudié la transition d'une déflagration vers une détonation dans des tubes de faibles diamètres. D'après [86, 87], les frottements sont à l'origine de cette transition. En effet, la chaleur dégagée par la flamme met en mouvement les gaz frais en amont de cette dernière. Ces gaz voient leur température augmenter du fait des frottements. Ils entraînent alors une courbure de la flamme qui voit sa surface augmenter. Cela accroît le taux de dégagement d'énergie et par conséquent, la vitesse de la flamme. Son accélération se fait d'abord de façon exponentielle, puis suit une loi linéaire jusqu'à ce que sa vitesse soit proche de la vitesse du son (mode de déflagration CJ). Finalement, la transition à la détonation a lieu après une micro-explosion qui entraîne une brusque hausse de la température. L'onde de détonation résultante se propage à une vitesse proche de la vitesse théorique CJ.

1.7 Récapitulatif

En partant du constat que la combustion dans les micro-systèmes est inefficace, en raison des effets diffusifs qui deviennent prépondérants, l'idée proposée était de l'assister par des ondes de choc ou d'utiliser des ondes de détonation.

Une onde de détonation est une onde de choc couplée à une zone de réaction, l'ensemble se propageant à une vitesse supersonique. Le front de choc présente des instabilités longitudinales [6, 26, 46, 65] et transverses en fonction du couple énergie

d'activation/énergie chimique [15]. Cela se manifeste par une structure cellulaire de détonation, conséquence des trajectoires des points triples. Plus l'énergie d'activation réduite est importante, plus la régularité du front de choc va se dégrader, due aux instabilités croissantes. Cependant, elles sont nécessaires pour entretenir la propagation de la détonation.

Lorsque la détonation devient non-idéale lors de la réduction d'échelle ou lors de la diminution de la pression initiale du mélange, différents modes de propagation de la détonation ont été observés. Cela va de la détonation stable aux flammes rapides, en passant par la détonation galopante [41, 52]. La vitesse moyenne diminue au fur et à mesure, avec une chute brutale au voisinage de la détonation galopante. Ce déficit de vitesse, par rapport au cas ZND, a pour origine la diminution d'énergie dans la poche subsonique due aux phénomènes dissipatifs. Plusieurs auteurs ont proposé des modèles analytiques unidimensionnels. Manson et Guénoche pense qu'une partie de l'énergie chimique libérée proche des parois ne participe pas à la propagation de la détonation. Dans le modèle de Zel'dovich, la dissipation de l'énergie se fait principalement par les forces de frottement. Dans Fay, le développement de la couche limite entraîne la divergence des lignes de courant, modélisée par la vitesse de développement de l'épaisseur de déplacement. Dans le cadre de détonations en cartouche qui est un contexte très différent, Wood et Kirkwood [92] et Bdzil [5] ont montré que la courbure du front de choc était responsable du déficit de la vitesse détonation. Il est à noter, qu'à moins de facteurs correctifs plus ou moins importants, ces modèles semblent principalement adaptés aux mélanges stables.

1.8 Présentation de l'étude

Ce travail se situe dans le cadre de la micro-détonation. La plupart des travaux en détonation ont été effectués dans des tubes de taille conventionnelle avec des mélanges de différentes énergies d'activation. Le principal objectif de cette thèse est de comprendre et de décrire la structure d'une onde de détonation stable se propageant dans des canaux de tailles réduites. On s'est ainsi placé dans une double limite : canal de très faible hauteur et mélange à faible énergie d'activation réduite. Dans ce cas, l'amplitude des instabilités est minimisée, cela permet d'étudier la structure de l'interaction du front de détonation avec le développement de la couche limite.

Ainsi, faisant suite au présent chapitre introductif, le chapitre 2 est consacré à la présentation du modèle mathématique pour les écoulements réactifs avec prise en compte des effets visqueux. Il s'agit, dans le cas 1D, du modèle d'Euler réactif auquel des termes sources, pour la prise en compte des transferts pariétaux, ont été ajoutés. Les écoulements 2D sont ensuite modélisés à l'aide des équations de Navier-Stokes réactives. La composition du mélange ainsi que le mécanisme réactionnel choisis sont aussi présentés dans le même chapitre.

Dans le chapitre 3, il est question de présenter les outils numériques permettant la résolution des équations du mouvement. Résoudre des écoulements complexes, comportant de nombreuses discontinuités, nécessite des méthodes numériques performantes. D'où l'utilisation d'un solveur haute précision à capture de chocs appelé CHOC-

WAVES¹. Des aménagements nécessaires permettant à ce solveur de traiter des écoulements réactifs lui ont été apportés. Ce solveur est basé sur un schéma WENO précis à l'ordre 5 en espace [80]. C'est un schéma à faible dissipation numérique permettant une meilleure résolution des écoulements stationnaires ou instationnaires, sur des maillages structurés. En ce qui concerne les flux visqueux, leur calcul est effectué par un schéma centré d'ordre 4 en espace. Pour l'avancement en temps, un schéma Runge-Kutta d'ordre 3 a été choisi, tandis que l'intégration temporelle des termes sources chimiques est faite au moyen d'un schéma d'Euler d'ordre 2. Le calcul de la température, quant à lui, est effectué en utilisant la méthode d'itération de Newton-Raphson. Pour clore ce troisième chapitre, des tests standards de validation du noyau aérodynamique du solveur CHOC-WAVES ont été effectués. Un test sur un choc isotherme [58, 62] (en annexe I) permet de valider la procédure d'intégration des termes sources dans le cas inerte.

Les résultats des calculs sont présentés et discutés dans le chapitre 4. Il s'agit tout d'abord de la validation de la partie réactive du solveur. Elle est réalisée par la reproduction d'une détonation ZND, proposée par Fiorina et Lele [32]. Cette validation est ensuite poursuivie par un calcul de détonation 1D instable qui a déjà été effectué dans [6, 46, 65, 75]. Elle s'achève par un calcul de détonation bidimensionnelle d'un mélange à faible énergie d'activation réduite, où les instabilités sont présentes [78]. Les autres calculs ont pour but d'étudier le comportement et la structure d'une détonation se propageant dans un milieu confiné. Ainsi, des calculs 1D sont d'abord présentés. Ensuite, l'étude du confinement d'une onde de détonation, se propageant dans un canal plan, est effectuée. La conclusion et les perspectives sont données dans le chapitre 5.

Le présent document comprend également 11 annexes. La première présente les tables thermodynamiques, permettant le calcul des propriétés thermodynamiques des espèces majoritaires, présentes dans la détonation d'un mélange stœchiométrique de propane/oxygène. L'annexe B, quant à elle, présente une base de données pour le calcul des propriétés de transport des espèces majoritaires du mélange. Les matrices de passage entre les différents types de variables des équations d'Euler sont fournies dans l'annexe C. La méthode de détermination des états Chapman-Jouguet et Neumann théoriques est détaillée dans l'annexe D. L'annexe E présente une méthode de détermination directe de la vitesse d'une onde de détonation. Le censeur de choc, basé sur la compression du volume de fluide dans une maille de calcul, est décrit dans l'annexe F. L'annexe G présente le critère de sonicité dans le cas d'une détonation 2D visqueuse. Sur l'annexe H, la méthode de calcul de la courbure des lignes de courant est présentée. Pour finir, les annexes I, J et K présentent les différents articles produits au cours de cette étude.

1. **Compressible High-Order Code using Weno Adaptive Stencils**, développé au CORIA par Abdellah Hadjadj et son équipe.

Chapitre 2

Equations et modèles mathématiques

Ce chapitre traite des différentes équations utilisées pour la modélisation des écoulements compressibles réactifs, incluant l'équation d'état d'un fluide parfait et le modèle cinétique chimique. C'est aussi dans cette partie que seront présentées les expressions utilisées pour le calcul de la viscosité dynamique du mélange, de sa conductivité thermique ainsi que des coefficients de diffusion massique de chaque espèce chimique et du mélange.

2.1 Différents régimes d'écoulement

Un fluide compressible est caractérisé par une variation notable de sa masse volumique lorsqu'il subit une transformation donnée. Ce fluide peut être soumis à différents régimes d'écoulement suivant le nombre de Knudsen $Kn = \sqrt{(\gamma\pi/2)}M/Re$. Ce dernier est défini comme le rapport entre le libre parcours moyen l_p des molécules sur la dimension caractéristique de l'écoulement (diamètre ou hauteur, respectivement, dans le cas d'un tube à section circulaire ou d'un canal). Ce nombre permet de caractériser le degré de raréfaction d'un milieu fluide [1, 18]. Bien que le nombre de Knudsen ne soit pas le seul paramètre à considérer, il est très souvent utilisé pour classer les différents régimes d'écoulement [18]. Ainsi

1. Lorsque $Kn \rightarrow 0$, le mouvement du fluide peut être décrit par les équations d'Euler.
2. Lorsque Kn est compris entre 0 et 10^{-3} , le régime est dit **continu**. L'écoulement est décrit par les équations de Navier-Stokes (NS), auxquelles on associe les conditions aux limites classiques de continuité de la température et de la vitesse à la paroi. Comme exemples d'écoulements, nous citons celui d'un gaz dans une gaine de ventilation ou d'une détente des gaz brûlés dans une tuyère.
3. Lorsque Kn est compris entre 10^{-3} et 10^{-1} , le régime est dit **glissant**. Les équations de Navier-Stokes peuvent toujours être utilisées. Cependant, il faut tenir compte des conditions de saut à la paroi pour la température et la vitesse (Maxwell pour la vitesse et Smoluchowski pour la température par exemple [18]) ré-

sultant du déséquilibre thermodynamique proche de la paroi. Comme exemple d'écoulement, nous pouvons citer celui d'un gaz dans un microcanal.

4. Lorsque Kn est compris entre 10^{-1} et 10, le régime est dit **transitionnel**. L'approche Navier-Stokes, pour la description du mouvement du fluide, n'est plus valable. Il faut avoir recours à d'autres modèles d'équations, comme par exemple, celui de Burnett ou BGK¹-Burnett [1]. Ce type d'écoulement est souvent rencontré autour des navettes spatiales en rentrée atmosphérique où le nombre de Mach de l'écoulement est très grand ($M \geq 25$), ou dans les micro-conduites dans lesquels le nombre de Reynolds est très petit.

Dans cette étude, nous nous limitons au cas où le modèle Navier-Stokes est valable avec $Kn < 10^{-3}$.

2.2 Equations de Navier-Stokes pour un fluide réactif

L'expression (2.1) représente la forme condensée des équations de Navier-Stokes pour un fluide réactif composé de \mathcal{N}_{sp} espèces chimiques

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [F(U) - F_v(U)] + \frac{\partial}{\partial y} [G(U) - G_v(U)] = S(U) \quad (2.1)$$

avec U le vecteur des variables conservatives, $F(U)$ et $G(U)$ les vecteurs des flux conservatifs, respectivement, dans les directions x et y

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} \end{bmatrix}, F(U) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ (\rho E + P)u \\ \rho_1 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} u \end{bmatrix}, G(U) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ (\rho E + P)v \\ \rho_1 v \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} v \end{bmatrix}, S(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathcal{W}_1 \dot{\omega}_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathcal{W}_{\mathcal{N}_{sp}} \dot{\omega}_{\mathcal{N}_{sp}} \end{bmatrix}$$

ρ_k est la masse volumique de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique. $E = e + (u^2 + v^2)/2$ et e sont, respectivement, l'énergie totale et l'énergie interne du fluide par unité de masse. \mathcal{W}_k et $\dot{\omega}_k$ sont, respectivement, la masse molaire et le terme source chimique de la $k^{\text{ème}}$ espèce.

1. Bhatnagar-Gross-Krook

Les flux visqueux $F_v(U)$ et $G_v(U)$ s'écrivent, quant à eux, de la façon suivante

$$F_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{yx} \\ q_x \\ \mathcal{J}_{x,1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathcal{J}_{x,N_{sp}} \end{bmatrix}, \quad G_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ q_y \\ \mathcal{J}_{y,1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathcal{J}_{y,N_{sp}} \end{bmatrix}$$

Les termes visqueux, contenus dans ces équations, sont donnés par

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \tau_{yy} = \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ q_x &= u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{k=1}^N h_k D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) \\ q_y &= u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{k=1}^N h_k D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \\ \mathcal{J}_{x,k} &= \rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial x}, \quad \mathcal{J}_{y,k} = \rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \end{aligned}$$

où λ , h_k , $D_{k,m}$ et μ sont, respectivement, la conductivité thermique du mélange, l'enthalpie massique de la $k^{\text{ème}}$ espèce, le coefficient de diffusion de la $k^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange et la viscosité dynamique du mélange. $\mathcal{J}_{x,k}$ et $\mathcal{J}_{y,k}$ sont obtenus par la loi de Fick, avec $Y_k = \rho_k/\rho$ la fraction massique de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique. Dans q_x et q_y , on retrouve la loi de Fourier pour le calcul des flux thermiques conductifs.

La première équation du modèle de Navier-Stokes traduit la conservation de la masse du mélange, tandis que la deuxième et la troisième équations traduisent le principe fondamental de la dynamique. Celui-ci stipule que la variation de la quantité de mouvement d'un système physique est due aux forces auxquelles est soumis ce système. La quatrième équation représente la conservation de l'énergie totale du système. Elle traduit le premier principe de la thermodynamique, à savoir que la variation de l'énergie totale d'un système physique (ici un volume élémentaire de fluide) est due à la somme des travaux de toutes les forces appliquées à ce système. Les autres équations traduisent la conservation des espèces chimiques.

2.3 Modèle cinétique

La façon la plus simple de décrire une réaction chimique, traduisant le bilan global d'un processus de combustion, est résumée par l'équation suivante



où ν'_F , ν'_O et ν''_P désignent, respectivement, les coefficients stœchiométriques du combustible F , de l'oxydant O et des produits de combustion P . Le mécanisme réactionnel peut être décrit de la manière suivante

$$\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \nu'_{kl} X_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \nu''_{kl} X_k \quad l = 1, \dots, L \quad (2.3)$$

L est le nombre total de réactions chimiques, ν'_{kl} et ν''_{kl} représentent, respectivement, les coefficients stœchiométriques des réactifs et des produits de la $l^{\text{ème}}$ réaction. Le terme source chimique, qui est la vitesse de production ou de consommation de la $k^{\text{ème}}$ espèce s'exprime, comme suit

$$\dot{\omega}_k = \sum_{l=1}^L (\nu''_{kl} - \nu'_{kl}) q_l \quad (2.4)$$

où q_l est le taux net d'évolution de la $l^{\text{ème}}$ réaction chimique et est donné par

$$q_l = k_l^f \prod_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} [X_k]^{\nu'_{kl}} - k_l^b \prod_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} [X_k]^{\nu''_{kl}} \quad (2.5)$$

avec $[X_k] = \rho_k / \mathcal{W}_k$ représentant la concentration molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce. k_l^f et k_l^b sont respectivement les vitesses de réaction dans le sens "réactifs \rightarrow produits" et dans le sens "produits \rightarrow réactifs". En pratique, il suffit de connaître k_l^f qui s'écrit

$$k_l^f = A_l T^{\beta_l} \exp\left(-\frac{E_{al}}{\mathcal{R}_u T}\right) \quad (2.6)$$

où A_l est le facteur préexponentiel, β_l l'exposant de la température et E_{al} l'énergie d'activation de la réaction dans le sens "réactifs \rightarrow produits". On peut déduire k_l^b en utilisant la relation

$$k_l^b = \frac{k_l^f}{K_{cl}} \quad (2.7)$$

K_{cl} est la constante d'équilibre de la réaction l . Elle est donnée par l'expression

$$K_{cl} = \exp\left(-\frac{\Delta g_l}{\mathcal{R}_u T}\right) \left(\frac{P_{atm}}{\mathcal{R}_u T}\right)^{\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \nu_{kl}} \quad (2.8)$$

Avec Δg_l la variation d'enthalpie libre massique du mélange durant la réaction l et $\nu_{kl} = \nu''_{kl} - \nu'_{kl}$. \mathcal{R}_u est la constante universelle des gaz parfaits valant 8.3145 J/mol/K. Un mécanisme réactionnel simple, pourvu qu'il soit correctement calibré, est largement suffisant pour connaître des données telles que la vitesse d'une onde de détonation, la taille moyenne d'une cellule de détonation et donc la structure même d'une détonation [89].

2.4 Relations thermodynamiques

Pour fermer le système des équations décrites précédemment, il convient de prendre en compte une équation d'état.

2.4.1 Equation d'état d'un mélange de \mathcal{N}_{sp} espèces chimiques

A chaque espèce du mélange, est associée une pression partielle P_k et une masse molaire \mathcal{W}_k . Le mélange occupe un volume V sous la pression P , à la température T . Tous les constituants du mélange sont à la même température. La pression partielle P_k de la $k^{\text{ème}}$ espèce est la pression qu'aurait le mélange s'il n'était constitué que de cette espèce. Nous supposons que chaque espèce chimique est régie par la loi des gaz parfaits

$$P_k = \rho_k \mathcal{R}_k T \quad (2.9)$$

$\mathcal{R}_k = \mathcal{R}_u / \mathcal{W}_k$. D'après la loi de Dalton, valable uniquement pour les gaz parfaits, nous pouvons déduire la pression P du mélange

$$\begin{aligned} P &= \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} P_k = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \rho_k \mathcal{R}_k T = T \mathcal{R}_u \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \frac{\rho_k}{\mathcal{W}_k} \\ &= T \mathcal{R}_u \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \frac{\rho_k}{\rho} \frac{\rho}{\mathcal{W}_k} = T \rho \mathcal{R}_u \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \frac{Y_k}{\mathcal{W}_k} = T \rho \frac{\mathcal{R}_u}{\mathcal{W}} \end{aligned}$$

On obtient alors $P = \rho \mathcal{R} T$, où $\mathcal{R} = \mathcal{R}_u / \mathcal{W}$ et $\mathcal{W} = \left(\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k / \mathcal{W}_k \right)^{-1}$ sont respectivement la constante et la masse molaire du mélange. Il est donc facile de remarquer qu'un mélange de plusieurs gaz parfaits est un gaz parfait.

2.4.2 Energie interne, enthalpie et capacités calorifiques d'un mélange de gaz parfaits

L'énergie interne massique e d'un mélange composé de plusieurs espèces chimiques est la somme des énergies internes massiques e_k de chaque constituant du mélange, pondérées par les fractions massiques correspondantes. Soit

$$e(T, Y_k) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k e_k(T) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k \left[e_{0,k} + \int_{T^0}^T c_{v,k}(\tau) d\tau \right] \quad (2.10)$$

ou encore

$$e(T, Y_k) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k e_{0,k} + \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \left[\int_{T^0}^T Y_k c_{v,k}(\tau) d\tau \right] \quad (2.11)$$

avec $c_{v,k}(T)$ la capacité calorifique massique à volume constant de la $k^{\text{ème}}$ espèce. T^0 est la température de référence, valant 298.15 K. L'équation (2.11) nous permet de déduire la capacité calorifique à volume constant c_v du mélange

$$c_v(T, Y_k) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k c_{v,k}(T) \quad (2.12)$$

L'énergie interne massique du mélange s'écrit donc par la suite

$$e(T, Y_k) = e_0 + \int_{T^0}^T c_v(\tau, Y_k) d\tau \quad (2.13)$$

avec $e_0 = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k e_{0,k}$. De la même façon, on peut définir l'enthalpie massique h du mélange. Celle-ci s'exprime comme

$$h(T, Y_k) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k h_k(T) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k \left[h_{0,k}^f + \int_{T^0}^T c_{p,k}(\tau) d\tau \right] \quad (2.14)$$

avec $h_{0,k}^f$ l'enthalpie massique de formation de la $k^{\text{ème}}$ espèce à la température T^0 . L'enthalpie de formation d'une espèce chimique est l'énergie nécessaire à la formation d'une mole de cette espèce, à partir des éléments qui la constituent, dans leur état standard respectif. En général, cette enthalpie vaut 0 pour les espèces dans leur état naturel. $c_{p,k}(T)$ est la capacité calorifique massique à pression constante de la $k^{\text{ème}}$ espèce, d'où l'expression de la capacité massique $c_p(T, Y_k)$ du mélange

$$c_p(T, Y_k) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k c_{p,k}(T) \quad (2.15)$$

avec l'enthalpie massique du mélange

$$h(T, Y_k) = h_0 + \int_{T^0}^T c_p(\tau, Y_k) d\tau \quad (2.16)$$

$h_0 = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k h_{0,k}^f$ et $\gamma(T, Y_k)$ étant le rapport des capacités calorifiques (molaires ou massiques) du mélange, est défini par l'expression ci-dessous

$$\gamma(T, Y_k) = \frac{c_p(T, Y_k)}{c_v(T, Y_k)} = \frac{c_p(T, Y_k)}{c_p(T, Y_k) - \mathcal{R}} \quad (2.17)$$

Quant au rapport des capacités calorifiques $\gamma_k(T)$ de chaque espèce, il est donné par une expression similaire à (2.17)

$$\gamma_k(T) = \frac{c_{p,k}(T)}{c_{v,k}(T)} = \frac{c_{p,k}(T)}{c_{p,k}(T) - \mathcal{R}_k} \quad (2.18)$$

2.4.3 Vitesse du son

Pour une masse volumique d'un état donné, il est possible de connaître la vitesse locale du son. Dans le cas d'un écoulement isentropique, la célérité du son c est donnée par

$$c^2 = \left[\left(\frac{P}{\rho^2} \right) - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{P, Y_k} \right] \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_{\rho, Y_k}^{-1} \quad (2.19)$$

qui peut s'écrire aussi comme [13]

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k} \cdot \left[\left(\frac{P}{\rho^2} \right) - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} \right] \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_{\rho, Y_k}^{-1} \quad (2.20)$$

Dans le cas d'une équation d'état de type gaz parfait

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_{T, Y_k} = 0 \quad , \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T, Y_k} = \mathcal{R}T \quad , \quad \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho, Y_k} = \rho \mathcal{R} \quad , \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_{\rho, Y_k} = c_v$$

On obtient alors

$$c = \sqrt{\gamma \mathcal{R}T} \quad (2.21)$$

2.4.4 Table thermodynamique

En pratique, les coefficients $c_{p,k}(T)$ sont calculés à partir des capacités calorifiques molaires à pression constante données par les tables de JANAF [51]. Ils se présentent sous forme d'une expression polynomiale de degré $N - 1$, fonction de la température

$$\frac{C_{p,k}(T)}{\mathcal{R}_u} = \sum_{n=1}^N a_{n,k} T^{n-1} \quad (2.22)$$

Les coefficients $a_{n,k}$ (donnés dans l'annexe A), utilisés durant cette étude, sont valables uniquement pour des températures comprises entre 300 K et 5000 K. Ils sont tirés des tables thermodynamiques développées à l'Université de Berkeley [39]. De l'équation (2.22), nous pouvons déduire la capacité calorifique molaire à volume constant, $C_{v,k}(T)$, et l'enthalpie molaire $H_k(T)$ de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique.

$$C_{v,k}(T) = C_{p,k}(T) - \mathcal{R}_u \quad (2.23)$$

$$H_k(T) = H_k^0 + \int_{T^0}^T C_{p,k}(\tau) d\tau \quad (2.24)$$

Après intégration, l'équation (2.24) devient

$$\frac{H_k(T)}{\mathcal{R}_u} = \sum_{n=1}^N \frac{a_{n,k}}{n} T^n + a_{N+1,k} \quad (2.25)$$

avec $H_k^0 = a_{N+1,k} \mathcal{R}_u$. On peut alors calculer les coefficients $c_{p,k}(T)$ et les enthalpies $h_k(T)$ en utilisant les expressions suivantes

$$c_{p,k}(T) = \frac{C_{p,k}(T)}{\mathcal{W}_k} \quad \text{et} \quad h_k(T) = \frac{H_k(T)}{\mathcal{W}_k}$$

et déduire $e_k(T)$ via la relation

$$e_k(T) = h_k(T) - \frac{P_k}{\rho_k} \quad (2.26)$$

2.5 Propriétés de transport

Dans des écoulements réactifs visqueux, il est primordial d'évaluer correctement les propriétés de transport du mélange. Il s'agit de la viscosité, de la conductivité thermique

du mélange et des coefficients de diffusion des espèces chimiques dans le mélange. Les propriétés de transport de chaque espèce sont évaluées à l'aide de la théorie cinétique des gaz, tandis que celles du mélange sont obtenues grâce à des lois de mélanges déjà établies.

Dans cette étude, la base de données, utilisée pour le calcul des propriétés de transport des espèces, est celle du GRI-Mech 3.0 [39]. Le tableau B.1, présenté en annexe B, contient les données nécessaires pour le calcul des propriétés de transport de certaines espèces chimiques. Par la suite, nous présentons les équations permettant le calcul de ces propriétés de transport.

- Viscosité

Pour de l'air (ou pour un gaz composé d'une seule espèce chimique), le calcul de la viscosité peut se faire à l'aide de la loi de Sutherland

$$\mu = \mu_\infty \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^{3/2} \frac{T_\infty + S}{T + S} \quad (2.27)$$

avec $S = 110.4 \text{ K}$ et $T_\infty = 273.15 \text{ K}$. $\mu_\infty = 1.711 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ est la viscosité du fluide pris à la température 273.15 K . Cependant, lorsque le gaz est composé de plusieurs espèces chimiques, la loi de Wilke [90] est plus adaptée pour déterminer la viscosité du mélange. Elle s'exprime de la façon suivante

$$\mu = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k \mu_k}{\mathcal{W}_k \left(\sum_{j=1}^{N_{sp}} \frac{Y_j \phi_{kj}}{\mathcal{W}_j} \right)} \quad (2.28)$$

où

$$\phi_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{\mathcal{W}_k}{\mathcal{W}_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_k}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{\mathcal{W}_k}{\mathcal{W}_j} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (2.29)$$

μ_k est la viscosité de la $k^{\text{ème}}$ espèce. En utilisant le potentiel de Lennard-Jones, elle est donnée par l'expression ci-dessous [17]

$$\begin{aligned} \mu_k &= \frac{5}{16} \left(\frac{m_H k_B}{\pi} \right)^{1/2} \frac{(\mathcal{W}_k T)^{1/2}}{\sigma_k^2 f(T_k^*)} \\ &= 2.6693 \times 10^{-5} \frac{(\mathcal{W}_k T)^{1/2}}{\sigma_k^2 f(T_k^*)} \end{aligned} \quad (2.30)$$

où

$$f(T_k^*) = 1.147(T_k^*)^{-0.145} + (T_k^* + 0.5)^{-2} : \text{Intégrale de collision} \quad (2.31)$$

$$T_k^* = \frac{T}{T_{ek}} \quad \text{avec} \quad T_{ek} = \frac{k_B}{\varepsilon_k}$$

ε_k , σ_k , k_B et m_H représentent respectivement le potentiel de Lennard-Jones de chaque espèce chimique, le diamètre de collision exprimée en angström, la constante de Boltzmann et la masse atomique exprimée en grammes. L'unité de la viscosité dans l'expression (2.30) est exprimée dans le système CGS. Pour la conversion dans le système international, il convient de multiplier cette expression par 1/10.

- Conductivité thermique

De même que précédemment, le calcul de la conductivité thermique du mélange se fait grâce à une loi de mélange. Il s'agit de celle proposée par Mathur *et al* [57]

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[\mathcal{W} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k \lambda_k}{\mathcal{W}_k} + \left(\mathcal{W} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{\lambda_k \mathcal{W}_k} \right)^{-1} \right] \quad (2.32)$$

avec λ_k , la conductivité thermique de la $k^{\text{ème}}$ espèce, donnée par l'expression de Ferziger *et al* [30]

$$\lambda_k = 0.25(9\gamma_k - 5)\mu_k c_{v,k} \quad (2.33)$$

γ_k , μ_k et $c_{v,k}$ sont, respectivement, le rapport des capacités calorifiques, la viscosité dynamique et la capacité calorifique massique à volume constant de la $k^{\text{ème}}$ espèce. Ces grandeurs sont déterminées, respectivement, par les équations (2.18), (2.30) et (2.12).

- Diffusion moléculaire

Au sein d'un même mélange, chaque espèce diffuse à une vitesse donnée suivant sa taille, sa masse et la température du milieu. Cette diffusion d'espèce se fait par le biais d'un coefficient de diffusion moléculaire dans le mélange, donné par la loi de mélange suivante

$$D_{k,m} = \frac{1 - Y_k}{\mathcal{W} \left(\sum_{j \neq k}^{N_{sp}} \frac{Y_j}{\mathcal{W}_j D_{jk}} \right)} \quad (2.34)$$

où D_{jk} est le coefficient de diffusion binaire de la $j^{\text{ème}}$ espèce par rapport à la $k^{\text{ème}}$ espèce. Il est donné par l'expression d'Hayashi et Hishida [43] ci-dessous

$$D_{jk} = 1.8829 \times 10^3 \frac{\left[T^3 \left(\frac{\mathcal{W}_j + \mathcal{W}_k}{\mathcal{W}_j \mathcal{W}_k} \right) \right]^{1/2}}{P \sigma_{jk}^2 g(T_{jk}^*)} \quad (2.35)$$

avec

$$\sigma_{jk} = 0.5(\sigma_j + \sigma_k) \quad (2.36)$$

$$g(T_{jk}^*) = (T/T_{ejk})^{-0.145} + (T/T_{ejk} + 0.5)^{-2} \quad (2.37)$$

$$T_{ejk} = (T_{ej} T_{ek})^{1/2} = \left(\frac{\epsilon_j \epsilon_k}{k_B^2} \right)^{1/2} \quad (2.38)$$

Comme on peut le constater, le coefficient de diffusion moléculaire d'une espèce chimique dépend non seulement de la température mais aussi de l'inverse de la pression du mélange.

2.6 Récapitulatif

En résumé, les équations de Navier-Stokes multi-espèces réactives 2D sont brièvement présentées. La fermeture de ce système est effectuée par l'équation d'état d'un mélange de gaz supposés parfaits. Les capacités calorifiques des différentes espèces chimiques du mélange sont calculées à l'aide des coefficients des tables de JANAF [51]. Les moyennes de ces capacités calorifiques servent à déterminer celles du mélange. Les propriétés de transport de chaque espèce chimique sont déterminées à l'aide des expressions issues de la théorie cinétique des gaz [17]. Quant à celles du mélange, elles sont déterminées à l'aide des lois de mélange. En ce qui concerne la partie chimique du modèle, le mécanisme réactionnel utilisé dépendra de la nature du mélange et de l'étude à mener.

Chapitre 3

Méthodes numériques

Dans un écoulement réactif, il existe plusieurs échelles temporelles dues aux différents phénomènes physiques et chimiques impliqués. Cela donne lieu à des équations particulièrement raides dont la résolution n'est pas aisée dans la plupart des cas. De la même manière, il existe différentes échelles spatiales qui entraînent, elles aussi, des difficultés lors de la résolution des équations du mouvement. Cela est particulièrement vrai en détonation, car pour modéliser correctement la structure d'une onde de détonation, il est nécessaire d'avoir des maillages assez fins. La simulation numérique directe de ces phénomènes physiques est relativement coûteux en temps calcul. Une autre difficulté à prendre en compte est celle liée à la résolution simultanée des équations du mouvement et des espèces chimiques, y compris celles d'intégration des termes sources du fait que les différentes espèces chimiques du mélange sont couplées entre elles. Dans ce chapitre, les outils numériques, utilisés dans cette étude, seront présentés. Plus précisément, les schémas numériques pour la résolution spatio-temporelle de la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes seront discutés. De même, les schémas numériques pour l'intégration temporelle des termes sources, le schéma spatial utilisé pour le calcul des flux visqueux seront abordés. Un paragraphe sera dédié à la méthode utilisée pour la détermination de la température et des conditions aux limites. Le chapitre s'achèvera par la présentation des outils utilisés pour la visualisation de l'écoulement, ainsi que quelques cas de validation numérique. Dans un premier temps, des tests classiques de tubes à chocs ont été effectués. Ensuite, une étude du taux de convergence des différentes versions WENO5 a été réalisée.

3.1 Solveur aérodynamique

La partie hyperbolique des équations du mouvement est représentée par les équations d'Euler. Elles décrivent le mouvement d'un fluide compressible, non-visqueux. Elles sont présentées sous une forme différentielle dans le chapitre 2. C'est ainsi que naturellement, la méthode des différences finies a été choisie pour la discrétisation de ces équations. Cette méthode est simple à mettre en place, par contre elle ne permet pas de modéliser des écoulements dans des géométries complexes. Pour des raisons de simplicité, la description du schéma numérique se fera à l'aide des équations d'Euler

mono-dimensionnelles suivantes

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

où $U = [\rho, \rho u, \rho E, \rho_k]^T$ et $F(U) = [\rho u, \rho u^2 + P, (\rho E + P)u, \rho_k u]^T$. En utilisant un maillage régulier, l'équation (3.1) peut être écrite sous la forme semi-discrète ci-après

$$\frac{\partial U}{\partial t} \simeq - \underbrace{\frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2})}_{\mathcal{L}_h} \quad (3.2)$$

où $\hat{f}_{i+1/2}$ et $\hat{f}_{i-1/2}$ sont des approximations numériques respectivement aux interfaces $i+1/2$ et $i-1/2$ des flux eulériens $F(U(x_{i+1/2}))$ et $F(U(x_{i-1/2}))$. \mathcal{L}_h représente l'opérateur de discrétisation spatiale. Cet opérateur peut être facilement étendu aux équations multi-espèces réactives. Le calcul de ces flux convectifs se fait à l'aide d'un schéma WENO précis à l'ordre 5.

3.1.1 Schéma WENO

Les schémas WENO d'ordre élevé ont été développés dans le but de résoudre des écoulements complexes comportants de forts gradients (ondes de choc, discontinuités de contact...)[80]. Comme tout schéma à capture de choc, ils introduisent de la viscosité numérique proche des discontinuités de l'écoulement afin d'éviter l'apparition d'oscillations non physiques. Cependant, ils conservent un ordre élevé dans les autres régions de l'écoulement. La viscosité numérique est introduite par la superposition de tous les stencils candidats pour effectuer l'interpolation des flux. Selon que le stencil est proche ou loin de la discontinuité, un poids très faible ou plus fort lui sera associé. Ce qui veut dire que dans les régions de l'écoulement où il n'y a pas de discontinuités, tous les stencils seront utilisés pour l'interpolation. Un poids optimal sera associé à chaque stencil afin de garantir l'ordre théorique du schéma. La version WENO d'ordre 5 développée par Jiang et Shu [49] sera présentée dans la suite du paragraphe.

En pratique, il est possible d'interpoler directement les flux des variables conservatives ou flux eulériens. Cependant, pour éviter des oscillations en raison des discontinuités présentes dans l'écoulement, il est recommandé d'interpoler les flux caractéristiques. Ce n'est qu'après cette interpolation dans le champ caractéristique que les flux conservatifs seront déduits.

La procédure de calcul des flux se fait de la manière suivante :

- Premièrement, une opération de passage de la forme conservative à la forme caractéristique est effectuée en multipliant l'équation (3.1) par une matrice de vecteurs propres à droite (\mathbf{P}^{-1}).

$$\mathbf{P}^{-1} \frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{P}^{-1} \frac{\partial F(U)}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F_s(W)}{\partial x} = 0 \quad (3.3)$$

Les dérivées spatiales sont discrétisées selon le schéma suivant

$$\frac{\partial F_s}{\partial x} \simeq \frac{\hat{f}_{s,i+1/2} - \hat{f}_{s,i-1/2}}{\Delta x} \quad (3.4)$$

où $\hat{f}_{s,i+1/2}$ est l'approximation numérique à l'interface $i + 1/2$ du flux caractéristique F_s .

- Deuxièmement, les flux caractéristiques sont décomposés en deux parts, F_s^+ et F_s^- . Nous avons

$$F_s(W) = F_s^+(W) + F_s^-(W) \quad \text{tel que} \quad \frac{dF_s^+(W)}{dW} \geq 0 \quad \text{et} \quad \frac{dF_s^-(W)}{dW} \leq 0$$

Dans cette étude, la décomposition est faite selon la méthode de Lax-Friedrichs. Celle-ci est donnée par

$$F_s^\pm(W) = \frac{1}{2}(F_s(W) \pm \alpha W) \quad \text{avec} \quad \alpha = \max_W \left| \frac{dF_s(W)}{dW} \right|$$

Lorsque l'intervalle de W choisi pour le calcul de α est local, on parle de décomposition locale de Lax-Friedrichs (LLF). Lorsque cet intervalle est global, c'est-à-dire tout le domaine de calcul, on parle de décomposition globale de Lax-Friedrichs (GLF).

- Troisièmement, les flux caractéristiques numériques $\hat{f}_{s,i+1/2}^\pm$ et $\hat{f}_{s,i-1/2}^\pm$ sont reconstruits par interpolation essentiellement non-oscillante des flux $F_{s,i}^{\pm(k)}$ sur trois "stencils"

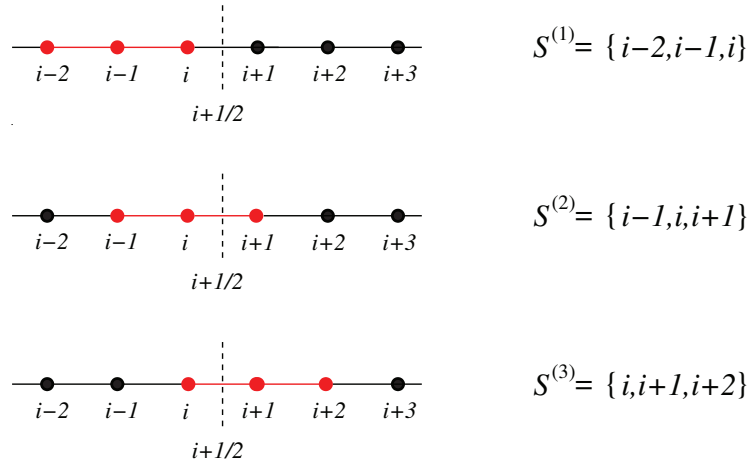


figure 3.1 – Stencils candidats à une interpolation WENO d'ordre 5 du flux numérique $\hat{f}_{s,i+1/2}^+$.

avec

$$\hat{f}_{s,i+1/2}^+ = \omega_1 \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(1)} + \omega_2 \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(2)} + \omega_3 \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(3)} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(1)} &= \frac{1}{3} F_{s,i-2}^+ - \frac{7}{6} F_{s,i-1}^+ + \frac{11}{6} F_{s,i}^+ \\ \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(2)} &= -\frac{1}{6} F_{s,i-1}^+ + \frac{5}{6} F_{s,i}^+ + \frac{1}{3} F_{s,i+1}^+ \\ \hat{f}_{s,i+1/2}^{+(3)} &= \frac{1}{3} F_{s,i}^+ + \frac{5}{6} F_{s,i+1}^+ - \frac{5}{6} F_{s,i+2}^+ \end{aligned}$$

Le calcul du flux $\hat{f}_{s,i+1/2}^-$ se fait symétriquement par rapport à l'interface $i + 1/2$. Dans les régions où l'écoulement ne contient pas de discontinuités, les poids, pondérant la contribution du flux provenant de chaque stencil, tendent vers les valeurs optimales α_k . Avec $\alpha_1 = 1/10$, $\alpha_2 = 6/10$ et $\alpha_3 = 5/10$. Par contre, dans les régions où des discontinuités sont présentes, l'utilisation de ces poids optimaux génère des oscillations au voisinage des discontinuités. Pour éviter cela, des poids normalisés ont été proposés par les auteurs. Ils s'écrivent de la façon ci-dessous

$$\omega_k = \frac{\tilde{\omega}_k}{\sum_i \tilde{\omega}_i} \quad \text{avec} \quad \tilde{\omega}_k = \frac{\alpha_k}{(\epsilon + \beta_k)^2} \quad (3.6)$$

où ϵ est un paramètre permettant d'éviter la division par zéro [49], pris égal à 10^{-6} . Les coefficients β_k sont des paramètres de lissage, écrit sous la forme d'une somme en norme L^2 de toutes les dérivées des interpolations polynomiales $F_s^{(k)}$ dans l'intervalle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. L'expression analytique des β_k est donnée par

$$\beta_k = \Delta x \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{dF_s^{(k)}}{dx} \right)^2 dx + \Delta x^3 \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{d^2 F_s^{(k)}}{dx^2} \right)^2 dx \quad (3.7)$$

après calcul, on obtient

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{13}{12} (F_{s,i-2}^+ - 2F_{s,i-1}^+ + F_{s,i}^+)^2 + \frac{1}{4} (F_{s,i-2}^+ - 4F_{s,i-1}^+ + 3F_{s,i}^+)^2 \\ \beta_2 &= \frac{13}{12} (F_{s,i-1}^+ - 2F_{s,i}^+ + F_{s,i+1}^+)^2 + \frac{1}{4} (F_{s,i-1}^+ - F_{s,i+1}^+)^2 \\ \beta_3 &= \frac{13}{12} (F_{s,i}^+ - 2F_{s,i+1}^+ + F_{s,i+2}^+)^2 + \frac{1}{4} (F_{s,i}^+ - 4F_{s,i+1}^+ + 3F_{s,i+2}^+)^2 \end{aligned}$$

Les flux caractéristiques numériques s'écrivent alors

$$\hat{f}_{s,i+1/2} = \hat{f}_{s,i+1/2}^+ + \hat{f}_{s,i+1/2}^-$$

- Enfin, la reconstruction des flux conservatifs se fait par une opération inverse, à savoir, une multiplication des flux caractéristiques par la matrice des vecteurs propres à gauche \mathbf{P} .

$$\mathbf{P} \frac{\partial W}{\partial t} + \mathbf{P} \frac{\partial F_s(W)}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \quad (3.8)$$

Les matrices \mathbf{P} et \mathbf{P}^{-1} sont données en annexe C. La procédure de calcul du flux $\hat{f}_{s,i-1/2}$ est exactement la même que celle décrite pour le flux $\hat{f}_{s,i+1/2}$.

Version Mapped. Henrick *et al.* [44] ont montré que le paramètre ϵ nécessaire pour éviter la division par zéro, lors de l'interpolation WENO d'ordre 5, entraîne une diminution de l'ordre global du schéma proche des points critiques (un point critique est défini comme l'endroit où la dérivée d'ordre k de la fonction à interpoler s'annule, alors qu'une des dérivées d'ordre supérieur et/ou inférieur de cette fonction est non-nulle).

k étant un entier positif). Pour remédier à ce problème, les auteurs ont proposé une solution qui peut être directement appliquée à la version standard du WENO. Cette solution repose sur la modification de l'expression des poids normalisés. On obtient donc

$$\bar{\omega}_k = \mathcal{G}_k(\tilde{\omega}_k) \quad \text{tel que} \quad \mathcal{G}_k(\tilde{\omega}) = \frac{\tilde{\omega}(\alpha_k + \alpha_k^2 - 3\alpha_k\tilde{\omega} + \tilde{\omega}^2)}{\alpha_k^2 + \tilde{\omega}(1 - 2\alpha_k)}$$

Les poids normalisés deviennent donc

$$\omega_i = \frac{\bar{\omega}_i}{\sum_k \bar{\omega}_k}$$

La version WENO mapped sera utilisée avec la décomposition GLF.

3.1.2 Schéma HLLC

Les schémas WENO peuvent être aussi utilisés pour l'interpolation des variables caractéristiques. La procédure de calcul ne diffère pas de celle présentée dans le paragraphe 3.1.1. Dans ce cas, le calcul des flux est effectué par un solveur de Riemann approché. La majorité des calculs 1D de la présente étude ont été réalisés en combinant le schéma WENO pour l'interpolation des variables et le solveur de Riemann approché pour le calcul des flux. Le schéma HLLC a été choisi en raison de sa robustesse et de sa mise en œuvre simple. C'est une extension du solveur HLL (Solveur numérique de Riemann développé par Harten, Lax et van Leer [42]) dans laquelle la discontinuité de contact a été rétablie [4, 83]. Le calcul des flux HLLC se fait de la façon suivante :

Considérons le volume de contrôle défini par $S = [0, T] \times [x_L, x_R]$ (voir figure 3.2). En intégrant l'équation (3.1) dans ce volume, on obtient

$$\oint_C (-U\vec{x} + F\vec{t}) \cdot d\vec{C} = 0 \quad (3.9)$$

en posant $d\vec{C} = dx\vec{x} + dt\vec{t}$ on obtient

$$\oint_C (-Udx + Fdt) = 0 \quad \text{soit} \quad \oint_C (Udx - Fdt) = 0$$

En évaluant l'intégrale précédente dans le rectangle ABCD de la figure 3.2, nous obtenons

$$\int_{x_L}^0 U_L dx - \int_0^T F_L^* dt + \int_0^{x_L} U_L^* dx - \int_T^0 F_L dt = 0 \quad (3.10)$$

soit encore

$$-x_L U_L - F_L^* T + x_L U_L^* + F_L T = 0 \quad \text{d'où} \quad F_L^* = F_L + S_L(U_L^* - U_L)$$

En calculant la même intégrale dans le rectangle EFGH, nous obtenons

$$\int_{x_M}^{x_R} U_R dx - \int_0^T F_R dt + \int_{x_R}^{x_M} U_R^* dx - \int_T^0 F_R^* dt = 0 \quad (3.11)$$

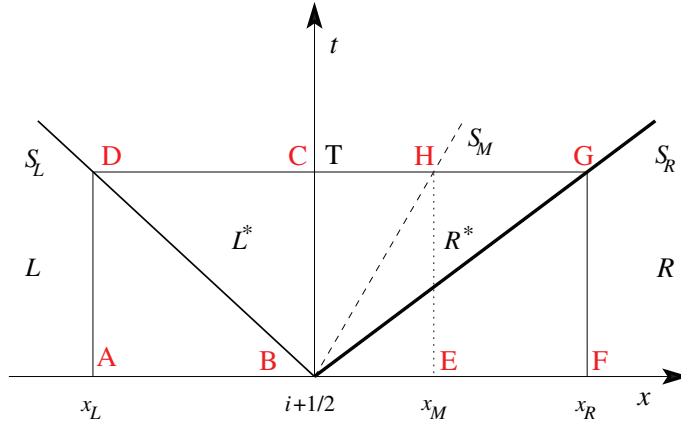


figure 3.2 – Schéma de l'approximation choc-choc du solveur HLLC au point $i + 1/2$, dans un diagramme (x, t) .

Finalement, nous avons

$$F_R^* = F_R + S_R(U_R^* - U_R) \quad \text{soit} \quad S_R U_R^* - F_R^* = S_R U_R - F_R$$

De la même manière, nous avons

$$F_L^* = F_L + S_L(U_L^* - U_L) \quad \text{soit} \quad S_L U_L^* - F_L^* = S_L U_L - F_L$$

que l'on peut écrire entièrement

$$S_L \begin{bmatrix} \rho_L^* \\ \rho_L^* u_L^* \\ \rho_L^* E_L^* \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \rho_L^* u_L^* \\ \rho_L^* u_L^{*2} + P^* \\ (\rho_L^* E_L^* + P^*) u_L^* \end{bmatrix} = S_L \begin{bmatrix} \rho_L \\ \rho_L u_L \\ \rho_L E_L \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \rho_L u_L \\ \rho_L u_L^2 + P_L \\ (\rho_L E_L + P_L) u_L \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

On obtient un système d'équations dont la résolution donne l'expression ci-dessous

$$\rho_L^* E_L^* = \frac{\rho_L E_L (S_L - u_L) - u_L P_L + S_M P^*}{S_L - S_M} \quad (3.13)$$

avec $u_L^* = S_M$. En résumé, on peut écrire

$$U_L^* = \begin{bmatrix} \rho_L^* = \frac{\rho_L (S_L - u_L)}{S_L - S_M} \\ \rho_L^* u_L^* = \frac{\rho_L u_L (S_L - u_L) + P^* - P_L}{S_L - S_M} = \rho_L^* S_M \\ \rho_L^* E_L^* = \frac{\rho_L E_L (S_L - u_L) - u_L P_L + S_M P^*}{S_L - S_M} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

De façon similaire, on obtient

$$U_R^* = \begin{bmatrix} \rho_R^* = \frac{\rho_R(S_R - u_R)}{S_R - S_M} \\ \rho_R^* u_R^* = \frac{\rho_R u_R (S_R - u_R) + P^* - P_R}{S_R - S_M} = \rho_R^* S_M \\ \rho_R^* E_R^* = \frac{\rho_R E_R (S_R - u_R) - u_R P_R + S_M P^*}{S_R - S_M} \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

L'élimination de P^* dans l'équation de quantité de mouvement permet d'obtenir l'expression de la vitesse de la discontinuité de contact S_M

$$S_M = \frac{\rho_R u_R (S_R - u_R) - P_R - \rho_L u_L (S_L - u_L) + P_L}{\rho_R (S_R - u_R) - \rho_L (S_L - u_L)} \quad (3.16)$$

Cette expression a été trouvée par Batten *et al.* [4]. Ensuite, P^* est obtenue

$$P^* = \rho_R (S_M - u_R) (S_R - u_R) + P_R \quad \text{ou encore} \quad P^* = \rho_L (S_M - u_L) (S_L - u_L) + P_L$$

On peut donc déduire les expressions de F_L^* et F_R^*

$$F_L^* = \begin{bmatrix} \rho_L^* S_M \\ \rho_L^* S_M^2 + P^* \\ (\rho_L^* E_L^* + P_L) S_M \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad F_R^* = \begin{bmatrix} \rho_R^* S_M \\ \rho_R^* S_M^2 + P^* \\ (\rho_R^* E_R^* + P_R) S_M \end{bmatrix}$$

L'évaluation des vitesses S_L et S_R se fait à l'aide de l'estimation des vitesses de Davis [20]

$$S_L = \min(u_L - c_L, u_R - c_R) \quad \text{et} \quad S_R = \max(u_L + c_L, u_R + c_R)$$

Le calcul du flux $F_{i+1/2}$ est résumé de la façon ci-dessous

$$F_{i+1/2} = \begin{cases} F_L, & \text{si } S_L > 0 \\ F_L^*, & \text{si } S_M > 0 \quad \text{et} \quad S_L < 0 \\ F_R^*, & \text{si } S_M < 0 \quad \text{et} \quad S_R > 0 \\ F_R, & \text{si } S_R < 0 \end{cases}$$

3.1.3 Avancement en temps

L'équation (3.1) peut être réduite à la forme ci-dessous

$$\frac{\partial U}{\partial t} = - \underbrace{\frac{\partial F}{\partial x}}_{\mathcal{L}_h} \quad (3.17)$$

L'utilisation des méthodes TVD Runge-Kutta permet de mieux capturer les phases instationnaires lors d'un processus d'évolution. Ce qui est une particularité très importante lors d'une propagation d'onde de choc. La méthode d'avancement d'ordre 3 a été choisie ici. La procédure d'intégration se fait de la manière suivante

$$\begin{cases} U^{(1)} = U^n + \Delta t \mathcal{L}_h(U^n) \\ U^{(2)} = \frac{1}{4} [3U^n + U^{(1)} + \Delta t \mathcal{L}_h(U^{(1)})] \\ U^{(n+1)} = \frac{1}{3} [U^n + 2U^{(2)} + 2\Delta t \mathcal{L}_h(U^{(2)})] \end{cases} \quad (3.18)$$

où Δt est le pas de temps. U^n est la valeur de la variable U à l'instant n , et $U^{(k)}$ ($k = 1, 2$) sont des solutions intermédiaires. Formellement, la solution à l'instant $n + 1$, obtenue après toutes les étapes, peut s'écrire comme $U^{(n+1)} = \tilde{\mathcal{L}}_h(\Delta t)U^n$. Avec $\tilde{\mathcal{L}}_h$ représentant l'opérateur d'intégration spatio-temporel de la partie hyperbolique du système Navier-Stokes. Plus globalement, $\tilde{\mathcal{L}}_h$ représente l'opérateur d'intégration spatio-temporel de la partie homogène des équations de Navier-Stokes multi-espèces réactives.

3.2 Approximation des flux visqueux

Les flux visqueux, contenus dans l'équation (2.1), seront approchés par un schéma centré d'ordre 4, selon lequel, la dérivée $\partial F_v / \partial x$ dans la maille (i, j) s'exprime de la façon ci-dessous

$$\left(\frac{\partial F_v}{\partial x} \right)_{i,j} = \frac{F_{v,i-2,j} - 8F_{v,i-1,j} + 8F_{v,i+1,j} - F_{v,i+2,j}}{12\Delta x} \quad (3.19)$$

Les composantes de F_v contiennent des dérivées suivant x et y . Le calcul des dérivées suivant x se fait en utilisant différentes formulations d'ordre 5 sur un stencil de 5 points $S = \{i - 2, i - 1, i, i + 1, i + 2\}$

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial f_v}{\partial x} \right)_{i-2,j} = \frac{-25f_{v,i-2,j} + 48f_{v,i-1,j} - 36f_{v,i,j} + 16f_{v,i+1,j} - 3f_{v,i+2,j}}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ \left(\frac{\partial f_v}{\partial x} \right)_{i-1,j} = \frac{-3f_{v,i-2,j} - 10f_{v,i-1,j} + 18f_{v,i,j} - 6f_{v,i+1,j} + f_{v,i+2,j}}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ \left(\frac{\partial f_v}{\partial x} \right)_{i+1,j} = \frac{-f_{v,i-2,j} + 6f_{v,i-1,j} - 18f_{v,i,j} + 10f_{v,i+1,j} + 3f_{v,i+2,j}}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ \left(\frac{\partial f_v}{\partial x} \right)_{i+2,j} = \frac{3f_{v,i-2,j} - 16f_{v,i-1,j} + 36f_{v,i,j} - 48f_{v,i+1,j} + 25f_{v,i+2,j}}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \end{cases} \quad (3.20)$$

La même procédure est employée pour évaluer la dérivée $\partial F_v/\partial y$. L'avantage de ce schéma dit "compact" est de travailler sur un intervalle de points plus réduit que son schéma homologue ayant le même ordre de précision.

3.3 Intégration des termes sources

Dans la majorité des cas, l'intégration des termes sources est effectuée suivant des schémas implicites ou semi-implicites. En effet, ces derniers s'avèrent très robustes pour l'intégration des termes sources raides (comme c'est le cas des termes sources chimiques). Cependant, ils sont coûteux en temps calcul et parfois difficiles à mettre en place. Un des moyens de s'affranchir de ces difficultés est d'utiliser des schémas explicites. Pour l'intégration des termes sources chimiques, le solveur VODE ou CHEMEQ2 [60] serait un bon candidat. Cependant, dans le cas de schémas explicites, après intégration de la partie homogène des équations du mouvement, il convient de résoudre un ensemble d'équations différentielles ordinaires (ODE). L'intégration de ces équations nécessite la connaissance des conditions initiales qui sont les solutions obtenues après résolution de la partie homogène des équations du mouvement. C'est une opération de couplage entre $\tilde{\mathcal{L}}_h$ et \mathcal{L}_s . Ce couplage est effectué par la méthode de splitting d'ordre 2 de Strang [82]. La solution finale obtenue s'écrit donc

$$U^{n+1} = [\mathcal{L}_s(\Delta t/2)\tilde{\mathcal{L}}_h(\Delta t)\mathcal{L}_s(\Delta t/2)] U^n \quad (3.21)$$

\mathcal{L}_s est l'opérateur discret d'intégration des termes sources.

Dans la suite de ce chapitre, les méthodes d'intégration des termes sources seront présentées selon la nature de ces derniers.

3.3.1 Termes sources chimiques

La méthode d'intégration des termes sources chimiques est basée sur l'approximation des états quasi stables ou QSSA, à partir duquel la seconde version du solveur CHEMEQ a été développée [60]. Le schéma utilisé est explicite, pour des raisons de simplicité d'implémentation, mais assez robuste pour intégrer des termes sources chimiques. Ces derniers sont généralement assez raides en raison de la faiblesse des temps chimiques liés à ces termes sources, comparés aux temps convectif et diffusif. Le mécanisme réactionnel utilisé pour modéliser le processus chimique est rappelé ici

$$\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \nu'_{kl} X_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \nu''_{kl} X_k \quad l = 1, \dots, L \quad (3.22)$$

L étant le nombre total de réactions chimiques. Les équations à résoudre s'écrivent sous la forme compacte suivante

$$\frac{\partial [X_k]}{\partial t} = \sum_{l=1}^L (\nu''_{kl} - \nu'_{kl}) \frac{[X_k]}{\tau_{ind}} \quad (3.23)$$

Pour des raisons de coût de calcul et aussi par simplicité, le mécanisme réactionnel utilisé ici ne contient qu'une seule réaction chimique irréversible. L'équation (3.23) devient alors

$$\frac{\partial [X_k]}{\partial t} (\nu_k'' - \nu_k') \frac{[X_k]}{\tau_{ind}} \quad (3.24)$$

L'expression du temps d'induction chimique τ_{ind} dépend du mélange étudié. L'équation (3.24) peut être réécrite de la façon ci-après

$$\frac{d[X_k]}{[X_k]} = (\nu_k'' - \nu_k') \frac{dt}{\tau_{ind}} \quad (3.25)$$

Après intégration, on obtient la solution suivante

$$[X_k](t) = [X_k](t - dt) \exp \left[(\nu_k'' - \nu_k') \frac{t}{\tau_{ind}} \right] \quad (3.26)$$

où $[X_k](t - dt)$ est la concentration molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce à l'instant précédent. Numériquement, cela se traduit par l'expression ci-dessous

$$[X_k]^{n+1} = [X_k]^n \exp \left[(\nu_k'' - \nu_k') \frac{\Delta t}{\tau_{ind}} \right] \quad (3.27)$$

Soit $X_{k,lim}$ le réactif par défaut dans le mélange initial. On définit $\dot{\xi}$, la variable d'avancement de la réaction chimique comme

$$\dot{\xi} = \frac{[X_{k,lim}]^{n+1} - [X_{k,lim}]^n}{\nu_{k,lim}' - \nu_{k,lim}''} \quad (3.28)$$

que l'on peut encore écrire

$$\dot{\xi} = \frac{[X_{k,lim}]^n}{\nu_{k,lim}' - \nu_{k,lim}''} \left(\exp \left[(\nu_{k,lim}'' - \nu_{k,lim}') \frac{\Delta t}{\tau_{ind}} \right] - 1 \right) \quad (3.29)$$

Ainsi, la concentration molaire à l'instant $n + 1$ de la $k^{\text{ème}}$ espèce est déduite par l'expression ci-après

$$[X_k]^{n+1} = [X_k]^n + (\nu_k'' - \nu_k') \dot{\xi} \quad (3.30)$$

La fraction massique Y_k de la $k^{\text{ème}}$ espèce est obtenue par $Y_k = \rho_k / \rho$.

3.3.2 Terme source visqueux pour le modèle 1D

Lorsque l'on veut étudier l'influence de la viscosité sur la propagation d'une onde de détonation ou tout simplement d'une onde de choc 1D, pour des nombres de Reynolds suffisamment élevés, il faut ajouter à l'équation de conservation de la quantité de mouvement, un terme source modélisant les frottements pariétaux. On obtient ainsi le modèle de Zel'dovich [96] dans le cas réactif ou le modèle de Fanno [63] dans le cas inerte. Le terme source visqueux, construit à partir de la définition des pertes de charge d'un écoulement de fluide dans un volume de contrôle élémentaire de diamètre

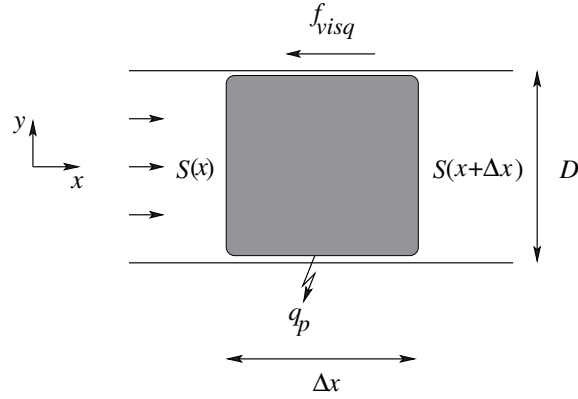


figure 3.3 – Volume de contrôle de fluide à partir duquel les termes sources sont calibrés.

D (voir figure 3.3), sera noté f_{visq} d'unité $\text{N.m}^3.\text{s}^{-1}$. Les propriétés du fluide sont supposées constantes sur toute la section du tube. Ce terme source représente une force de friction par unité de volume et s'écrit de la façon suivante

$$f_{visq} = -\psi \frac{\rho|u|u}{2D}, \quad \text{avec} \quad \psi = \begin{cases} \frac{64}{Re_D}, & \text{si } Re_D \leq 2500 \\ \frac{0.316}{Re_D^{1/4}}, & \text{si } 2500 \leq Re_D \leq 10^5 \end{cases}$$

avec Re_D , le nombre de Reynolds basé sur le diamètre du tube et ψ , le coefficient de frottement. Il faut donc résoudre l'équation différentielle suivante

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = -\psi \frac{\rho|u|u}{2D} \quad (3.31)$$

que l'on peut encore écrire

$$\frac{d(\rho u)}{\rho u} = -\frac{\psi|u|}{2D} dt = -\frac{dt}{\tau_{visq}} \quad (3.32)$$

avec $\tau_{visq} = 2D/\psi|u|$, l'échelle de temps associée aux phénomènes visqueux. En supposant la masse volumique constante durant l'intégration, la solution obtenue s'écrit

$$(\rho u)(t) = \rho u(t - dt) \exp\left(-\frac{t}{\tau_{visq}}\right) \quad (3.33)$$

avec $\rho u(t - dt)$, la quantité de mouvement du fluide à l'instant $t - dt$. Sur le plan numérique, on obtient

$$(\rho u)^{n+1} = (\rho u)^n \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_{visq}}\right) \quad (3.34)$$

3.3.3 Terme source thermique pour le modèle 1D

Pour étudier l'influence des pertes thermiques dans le modèle 1D, il convient d'ajouter un terme source dans l'équation de conservation de l'énergie totale des modèles de Zel'dovich [96] et Fanno [63]. Le bilan énergétique du volume de contrôle dV , schématisé sur la figure 3.3, nous donne l'équation suivante

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} dV = q_p dS_{lat} \quad (3.35)$$

où dS_{lat} est la surface latérale du volume de contrôle. Cette équation peut être réécrite sous la forme

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = q_p \frac{dS_{lat}}{dV} \quad (3.36)$$

avec $dS_{lat} = \pi D \Delta x$ et $dV = \pi D^2 \Delta x / 4$, on obtient

$$\frac{dS_{lat}}{dV} = \frac{4}{D}$$

Or,

$$q_p = \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \approx \lambda \frac{T_p - T}{D} \quad (3.37)$$

Ainsi, l'équation à résoudre devient

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = \underbrace{\frac{4\lambda}{D^2} (T_p - T)}_{\mathcal{Q}_p} \quad (3.38)$$

où \mathcal{Q}_p est une puissance par unité de volume. λ , T_p et T sont, respectivement, la conductivité thermique du fluide, la température de la paroi et la température du fluide. L'équation (3.38) peut être réécrite de la façon ci-après

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{th}} (\rho e_p - \rho e) \quad (3.39)$$

où $e_p = c_{v,p} T_p$ et $\tau_{th} = \rho c_v D^2 / 4\lambda$ l'échelle de temps associée aux transferts thermiques. On obtient ainsi une équation différentielle sur l'énergie interne du fluide

$$\frac{\partial(\rho e^*)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{th}} \rho e^* = -\rho \left(\frac{u^2}{2} \right) \quad (3.40)$$

avec $e^* = e - e_p$. Comme pour le terme source visqueux, on obtient

$$\rho e^*(t + \Delta t) = \rho e^*(t) e^{-\Delta t / \tau_{th}} - \rho \tau_{th} \left(\frac{u^2(t + \Delta t) - u^2(t)}{2\Delta t} \right) (1 - e^{-\Delta t / \tau_{th}}) \quad (3.41)$$

3.4 Condition de stabilité

Tous les schémas utilisés pour l'intégration des termes sources sont stables. La seule restriction sur le pas de temps est celle liée à la stabilité de l'opérateur $\tilde{\mathcal{L}}_h$. Le solveur développé étant explicite, la stabilité de l'intégration globale est assurée par la restriction du CFL (Courant Friedrichs Lewy). Cela veut dire que $\Delta t = \text{CFL} \cdot \tau_{conv}$, où τ_{conv} est le temps convectif déterminé par $1/\tau_{conv} = \max_i (|u_i| + c_i) / \Delta x$. Plus généralement, $\Delta t = \text{CFL} \cdot \tau_{moy}$, avec τ_{moy} tel que

$$\frac{1}{\tau_{moy}} = \sum_l \left(\frac{1}{\tau_{conv,l}} + \frac{1}{\tau_{diff,l}} \right) \quad , \quad l = x, y \quad (3.42)$$

où

$$\frac{1}{\tau_{conv,x}} = \max_i \left(\frac{|u_i| + c_i}{\Delta x} \right) \quad , \quad \frac{1}{\tau_{diff,x}} = \max_i \left(\frac{2\lambda_i}{\rho_i c_{v,i} \Delta x^2} \right)$$

et

$$\frac{1}{\tau_{conv,y}} = \max_j \left(\frac{|v_j| + c_j}{\Delta y} \right) \quad , \quad \frac{1}{\tau_{diff,y}} = \max_j \left(\frac{2\lambda_j}{\rho_j c_{v,j} \Delta y^2} \right)$$

3.5 Détermination de la température du fluide

Rappelons ici l'expression de l'énergie interne d'un mélange de gaz parfaits, dont il a été démontré plus haut qu'elle dépend uniquement de la température du fluide T et des fractions massiques Y_k

$$e(T, Y_k) = c_v(T, Y_k)T = h(T, Y_k) - \frac{P}{\rho} \quad (3.43)$$

L'équation à résoudre s'écrit

$$f(T) = e(T, Y_k) - e_0 = 0 \quad (3.44)$$

avec e_0 l'énergie interne initiale du fluide. Durant le processus itératif, les fractions massiques ne variant pas, l'équation ci-dessus devient

$$f(T) = e(T) - e_0 = 0 \quad (3.45)$$

La méthode de résolution utilisée est celle de Newton-Raphson dont le principe est brièvement rappelé ci-après.

Soit une fonction $f(x)$ dont la courbe d'évolution est connue. On souhaite connaître le zéro de cette fonction en utilisant la méthode des tangentes. Pour cela, une estimation de ce zéro est effectuée. Ensuite, la tangente à la courbe passant par le point de coordonnées $(x^n, f(x^n))$ est tracée. Cette tangente coupe l'axe des x en un point x^{n+1} . On calcule $f(x^{n+1})$. Si $f(x^{n+1}) \neq 0$, on pose $x^n = x^{n+1}$ et la procédure est répétée jusqu'à convergence. Mathématiquement, cela se traduit par

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)} \quad (3.46)$$

Dans notre cas

$$f(T) = \mathcal{R}_u \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{\mathcal{W}_k} \left(\sum_{n=1}^N \frac{a_{n,k}}{n} T^n + a_{N+1,k} \right) - \mathcal{R}_u T \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{\mathcal{W}_k} - e_0 \quad (3.47)$$

et

$$f'(T) = \mathcal{R}_u \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{\mathcal{W}_k} \left(\sum_{n=1}^N a_{n,k} T^{n-1} \right) - \mathcal{R}_u \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{\mathcal{W}_k} \quad (3.48)$$

3.6 Conditions aux limites

Ce paragraphe est dédié à l'évaluation des conditions aux limites de parois, des conditions d'entrée et de sortie pour un écoulement réactif visqueux. Tout d'abord, des conditions d'adhérence à la paroi seront utilisées pour la vitesse. En ce qui concerne la température, cela dépendra selon que les parois sont considérées adiabatiques ou isothermes. Pour ce qui est des fractions massiques, des conditions de non-adsorption à la paroi seront employées. Ensuite, les conditions aux limites d'entrée et de sortie seront évaluées à l'aide des informations fournies par le réseau d'ondes caractéristiques.

3.6.1 Conditions de parois

Lors de la modélisation d'écoulements visqueux en régime continu, les conditions d'adhérence du fluide à la paroi sont appliquées. Ces conditions se traduisent par une vitesse nulle à la paroi. Pour un écoulement 2D dans un maillage cartésien, on peut donc écrire

$$u_p = v_p = 0 \quad (3.49)$$

où u_p et v_p sont les composantes de la vitesse du fluide à la paroi. Les espèces chimiques n'étant pas adsorbées par la paroi, on peut écrire la condition suivante

$$\left(\frac{\partial Y_k}{\partial y} \right)_p = 0 \quad (3.50)$$

Lorsque les parois sont considérées adiabatiques, le flux thermique normal à la paroi est nul. Ainsi

$$\begin{aligned} q_y &= u_p \tau_{xy} + v_p \tau_{yy} + \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{k=1}^N h_k D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right)_p \\ &= \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{k=1}^N h_k D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right)_p \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Combinée à la condition de non-adsorption à la paroi des espèces chimiques, l'équation plus haut devient

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_p = 0 \quad (3.52)$$

Le gradient normal de température à la paroi est donc nul. Dans le cas où les parois sont isothermes, la condition suivante est appliquée

$$T = T_p \quad (3.53)$$

Reste à déterminer la pression, dont le gradient normal à la paroi est nul (hypothèse de couche limite). Ainsi

$$\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_p = 0 \quad (3.54)$$

La masse volumique du fluide à la paroi est déduite à partir de l'équation d'état des gaz parfaits et des conditions fixées plus haut pour la pression et la température. Si les parois sont adiabatiques, le gradient de masse volumique normal à la paroi est nul. En effet

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_p &= \left[\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{P}{\mathcal{R}_u T}\right)\right]_p = \frac{1}{\mathcal{R}_u} \left[\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{P}{T}\right)\right]_p \\ &= \frac{1}{\mathcal{R}_u T} \left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_p - \frac{P}{\mathcal{R}_u T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_p = 0 \end{aligned} \quad (3.55)$$

Par contre, lorsque les parois sont isothermes, la masse volumique pariétale s'écrit comme suit

$$\rho = \frac{P}{\mathcal{R}_u T_p} \quad (3.56)$$

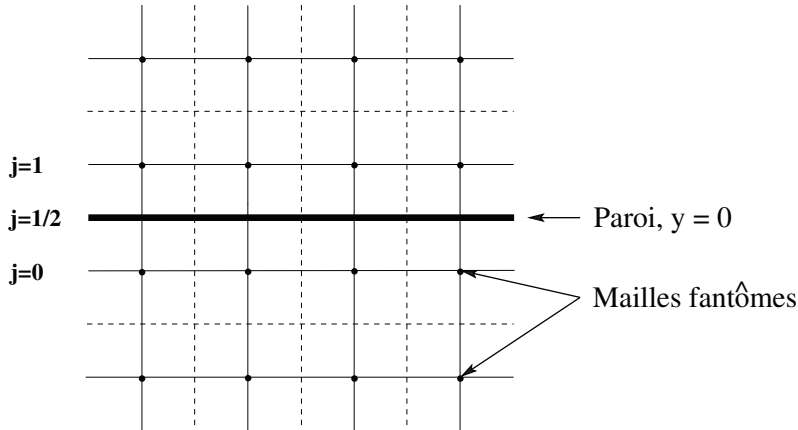


figure 3.4 – Conditions aux limites de paroi.

Avec un schéma aux noeuds (cell-vertex) (voir figure 3.4), la paroi se trouvant au milieu des cellules à $j = 1/2$, les conditions aux limites discrétisées pour une paroi adiabatique s'écrivent de la façon ci-dessous

$$u_0 = -u_1 \quad , \quad v_0 = -v_1 \quad , \quad T_0 = T_1 \quad , \quad p_0 = p_1 \quad , \quad Y_{k,0} = Y_{k,1} \quad (3.57)$$

$j = 0$ est la première maille fantôme. Lorsque les parois sont isothermes, les conditions aux limites discrétisées donnent

$$u_0 = -u_1 \quad , \quad v_0 = -v_1 \quad , \quad T_0 = 2T_p - T_1 \quad , \quad p_0 = p_1 \quad , \quad Y_{k,0} = Y_{k,1} \quad (3.58)$$

Il convient de noter que dans le cas du schéma WENO5, trois mailles fantômes sont utilisées pour la détermination des conditions aux limites.

3.6.2 Conditions aux limites d'entrée/sortie

Différentes conditions d'entrée/sortie sont fixées selon que l'écoulement soit subsonique ou supersonique. La méthode généralement utilisée est celle basée sur le signe des vitesses des ondes caractéristiques, qui sont les valeurs propres de la matrice jacobienne des flux convectifs. Dans un écoulement 1D, ces valeurs propres sont $u - c$, u et $u + c$, où c est la vitesse locale du son. Dans cette étude, nous avons utilisé des conditions classiques d'entrée/sortie supersoniques.

Ainsi, à l'entrée d'un écoulement supersonique, toutes les valeurs propres sont positives. Ce qui signifie que toutes les ondes caractéristiques associées à ces valeurs propres se propagent dans le sens de l'écoulement. Ainsi, seules les variables physiques de l'écoulement sont spécifiées dans les mailles fantômes à l'entrée du domaine. Les conditions aux limites discrètes, en $i = 0$, sont alors déterminées par les valeurs des variables physiques en $i = 1$

$$\phi_0 = \phi_1 \quad (3.59)$$

De même, les conditions de sortie supersonique sont déterminées à la base des valeurs propres positives. Le fluide sortant du domaine de calcul, seules les variables physiques de l'écoulement sont extrapolées dans les mailles fantômes. Les conditions aux limites discrètes s'écrivent donc

$$\phi_{N_x+1} = \phi_{N_x} \quad (3.60)$$

3.7 Outils de visualisation numérique

Dans les écoulements supersoniques de fluides compressibles, plusieurs discontinuités (ondes de choc, discontinuités de contact ou lignes de glissement dans le cas multidimensionnel, faisceau de détente) peuvent apparaître. Ces discontinuités entraînent des changements d'états thermodynamiques du fluide. Ce qui se traduit par une augmentation brutale de la température, de la pression, de la masse volumique dans le cas d'une compression, ou par une diminution de ces grandeurs dans le cas d'une détente. Pour une meilleure analyse des résultats de simulations, il est important d'utiliser des outils de visualisation qui permettent de mettre en relief les détails de la structure des écoulements étudiés. Dans la suite, la strioscopie numérique ainsi que la méthode de suivi des points triples seront présentées.

3.7.1 Strioscopie ou "schlieren" numérique

Les images strioscopiques numériques sont générées, en suivant le modèle des images expérimentales, par le champ du gradient de densité [40]. Pour des écoulements 2D, la

norme du gradient de masse volumique s'écrit

$$\|\nabla\rho\| = \sqrt{\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2} \quad (3.61)$$

Afin de faire apparaître toutes les discontinuités du champ de masse volumique, même les plus faibles, il est intéressant d'utiliser une échelle non-linéaire. Ainsi, on peut visualiser la quantité suivante

$$S(x, y) = \beta \exp\left(-\frac{\varsigma\|\nabla\rho\|}{\|\nabla\rho\|_{max}}\right) \quad (3.62)$$

avec $\|\nabla\rho\|_{max}$, la valeur maximale du gradient de masse volumique dans tout le champ de l'écoulement. β et ς sont des paramètres réglables. Ils permettent, respectivement, de faire varier les niveaux de gris et de mieux faire ressortir les faibles gradients.

3.7.2 Suivi des points triples

Comme mentionnée dans l'introduction et schématisée sur la figure 1.10, une onde de détonation possède une structure multidimensionnelle. Le front de cette onde est très perturbé car il est le lieu d'intersections de plusieurs discontinuités (onde incidente, disque de Mach et ondes transverses). Les lieux d'intersections sont appelés points triples, sièges de fortes pressions et masses volumiques. Pour connaître la trajectoire de ces points triples, il suffit donc de suivre leur trace au cours du temps. La méthode de suivi, utilisée ici, est basée sur l'enregistrement au cours du temps des maxima temporels de la norme du gradient local de pression, qui s'écrit à chaque instant comme suit

$$\|\nabla P\|_{i,j}^n = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_{i,j}^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_{i,j}^2} \quad (3.63)$$

Ce gradient local est ensuite comparé à sa valeur calculée à l'instant précédent. La valeur maximale ainsi obtenue sera enregistrée pour une comparaison ultérieure.

$$\|\nabla P\|_{i,j}^n = \max(\|\nabla P\|_{i,j}^n, \|\nabla P\|_{i,j}^{n-1}) \quad (3.64)$$

avec $\|\nabla P\|_{i,j}^{n-1}$, la norme du gradient local de pression à l'instant $n - 1$. Dans certains cas, l'intervalle de valeurs de cette quantité peut être très grand, ce qui ne permet pas de distinguer correctement la trace des points triples. Pour obtenir un meilleur contraste, il est judicieux de visualiser cette norme sur une échelle non linéaire, en prenant par exemple $\ln(\|\nabla P\|_{i,j}^n)$, avec i et j parcourant tout le domaine de calcul.

3.7.3 Procédure de calcul des champs moyens

Il peut s'avérer nécessaire d'analyser la structure d'un écoulement via ses champs moyens, surtout lorsque certains phénomènes sont auto-similaires. Une procédure permettant de suivre l'évolution, au cours du temps, de ces champs a été mise en place.

On part de l'expression analytique donnant la moyenne temporelle $\bar{\varphi}$ d'une quantité arbitraire φ .

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{T} \int_{t_i}^t \varphi(\tau) d\tau \quad (3.65)$$

Où $T = t - t_i$ est la période d'échantillonnage, avec t_i l'instant initial. Cette expression peut être réécrite de la façon suivante

$$\bar{\varphi} \cdot T = \int_{t_i}^t \varphi(\tau) d\tau \quad (3.66)$$

Numériquement, cela se traduit par

$$\bar{\varphi}^{(n)} \cdot \sum_{m=n_i}^n \Delta t^{(m)} = \sum_{m=n_i}^n \varphi^{(m)} \Delta t^{(m)} \quad (3.67)$$

où $\bar{\varphi}^{(n)}$, $\Delta t^{(m)}$ et $\varphi^{(m)}$ sont respectivement la moyenne de φ à l'instant n , le pas de temps et φ à l'instant m . A l'instant $n + 1$, l'égalité ci-dessus reste valable. On peut donc écrire

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} \cdot \sum_{m=n_i}^{n+1} \Delta t^{(m)} = \sum_{m=n_i}^{n+1} \varphi^{(m)} \Delta t^{(m)} \quad (3.68)$$

En retranchant termes à termes l'équation (3.67) et l'équation (3.68), nous obtenons l'équation ci-dessous

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} [t^n + \Delta t^{(n+1)}] - \bar{\varphi}^{(n)} t^n = \varphi^{(n+1)} t^{n+1} \quad (3.69)$$

ou encore

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} [t^n + \Delta t^{(n+1)}] = \bar{\varphi}^{(n)} t^n + \varphi^{(n+1)} t^{n+1} \quad (3.70)$$

On peut donc déduire l'expression donnant la valeur moyenne $\bar{\varphi}$ à l'instant $n + 1$

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} = \frac{\bar{\varphi}^{(n)} t^n + \varphi^{(n+1)} \Delta t^{(n+1)}}{t^{n+1}} \quad (3.71)$$

avec $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{(n+1)}$. L'expression (3.71) peut être réarrangée. Ainsi

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} = \bar{\varphi}^{(n)} \frac{t^n}{t^{n+1}} + \varphi^{(n+1)} \frac{\Delta t^{(n+1)}}{t^{n+1}} \quad (3.72)$$

qui peut être réécrite de la façon suivante

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}^{(n+1)} - \bar{\varphi}^{(n)} &= \bar{\varphi}^{(n)} \left(\frac{t^n}{t^{n+1}} - 1 \right) + \varphi^{(n+1)} \frac{\Delta t^{(n+1)}}{t^{n+1}} \\ &= \bar{\varphi}^{(n)} \underbrace{\left(\frac{t^n - t^{n+1}}{t^{n+1}} \right)}_{-\Delta t^{(n+1)} / t^{n+1}} + \varphi^{(n+1)} \frac{\Delta t^{(n+1)}}{t^{n+1}} \end{aligned} \quad (3.73)$$

d'où

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} - \bar{\varphi}^{(n)} = [\varphi^{(n+1)} - \bar{\varphi}^{(n)}] \frac{\Delta t^{(n+1)}}{t^{n+1}} \quad (3.74)$$

ou encore

$$\bar{\varphi}^{(n+1)} = \bar{\varphi}^{(n)} + [\varphi^{(n+1)} - \bar{\varphi}^{(n)}] \frac{\Delta t^{(n+1)}}{t^{n+1}} \quad (3.75)$$

L'expression (3.75) peut être appliquée à n'importe quelle quantité variant au cours du temps, dont on souhaite connaître la valeur moyenne.

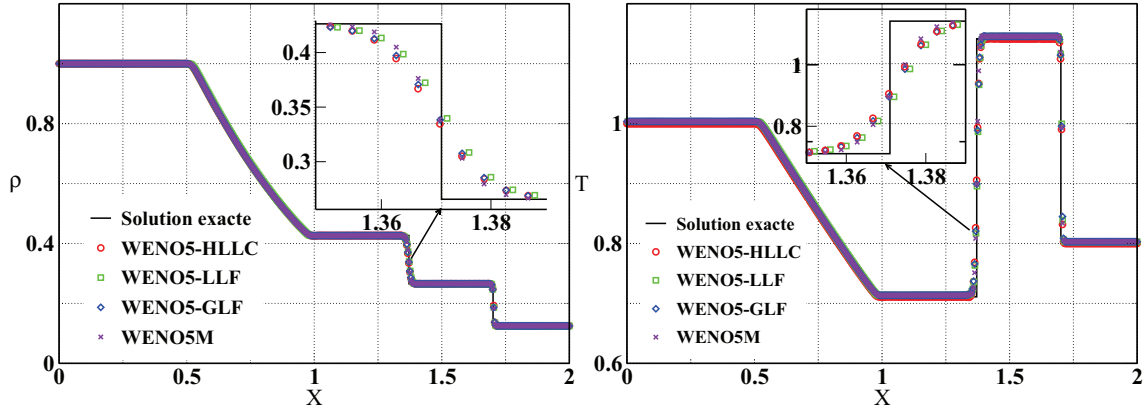


figure 3.5 – Profils de masse volumique et de température du tube de Sod.

3.8 Validation numérique du code

Différents tests ont été sélectionnés dans le but de valider le solveur développé. Dans le cas inerte, des calculs classiques tel que le tube de Sod et le test de Shu-Osher ont été réalisés. Le fluide utilisé est l'air avec $\gamma = 1.4$. Quatre versions du schéma WENO5 (*WENO5-HLLC*, *WENO5-LLF*, *WENO5-GLF* et *WENO5M*) ont été utilisées pour ces tests. L'objectif est d'appréhender le comportement des schémas et d'en déduire un pour la modélisation des détonations visqueuses dont les résultats seront discutés dans le chapitre 4.

3.8.1 Tube de Sod

Le processus de validation du solveur commence par le tube de Sod pour l'évaluation des méthodes numériques employées. Ce test consiste à résoudre des équations d'Euler 1D décrivant le mouvement d'un fluide compressible parfait dans lequel se propagent un choc, une discontinuité de contact et un faisceau de détente.

La longueur adimensionnée du tube vaut 2 et les conditions initiales sont les suivantes

$$\begin{aligned} \rho_L = 1.0 \quad , \quad u_L = 0 \quad , \quad P_L = 1.0 \quad \text{pour } x < 1 \\ \rho_R = 0.125 \quad , \quad u_R = 0 \quad , \quad P_R = 0.1 \quad \text{pour } x \geq 1 \end{aligned}$$

Les états gauche (haute pression) et droit (basse pression) indicés respectivement par L et R sont séparés par un diaphragme placé au milieu du tube. Le domaine de calcul a été découpé en 500 mailles et le CFL vaut 0.7. Après rupture du diaphragme, la discontinuité initiale, séparant les états gauche et droit, se transforme en un choc se propageant vers la droite, un faisceau de détente se propageant vers la gauche et une discontinuité de contact se propage vers la droite à une vitesse inférieure à celle du choc. Au bout d'un certain temps adimensionné (0.4), les profils de masse volumique et de température adimensionnés par rapport à l'état droit initial sont obtenus et présentés sur la figure 3.5. Les quatre versions de WENO5 donnent des résultats proches de la solution exacte du problème. Cela démontre la robustesse des

schémas WENO en terme de capture de discontinuités. Après une analyse fine de la zone proche de la discontinuité de contact, la version la mieux résolue semble être celle avec obtenue le schéma *WENO5M*. Ceci nous a permis d'effectuer un classement de ces schémas, selon leur degré de précision décroissant : *WENO5M* > *WENO5-LLF* ~ *WENO5-GLF* > *WENO5-HLLC*.

3.8.2 Interaction d'un choc avec un profil sinusoïdal de masse volumique

Le deuxième cas de validation concerne le test de Shu-Osher [79]. L'écoulement est constitué d'un choc fort se propageant dans un milieu où la masse volumique varie de façon sinusoïdale. Les conditions initiales adimensionalisées de l'écoulement sont

$$(\rho, u, P) = \begin{cases} (3.857, 2.629, 10.333) & \text{pour } x < 1 \\ (1 + 0.2 \sin(5x), 0, 1) & \text{pour } x \geq 1 \end{cases}$$

Le domaine de calcul adimensionné vaut 8, le CFL vaut 0.4. Un choc initial de nombre Mach 3 est positionné à $x = 1$. Celui-ci se propageant de gauche vers à droite, en interagissant avec le milieu à masse volumique oscillante, voit sa vitesse varier en conséquence. Immédiatement en aval du choc incident, les amplitudes et fréquences de ces ondes sont plus importantes que celles de l'état initial. Au bout d'une certaine distance, proportionnelle à la longueur d'onde initiale, ces quantités diminuent. Après que les ondes se soient coalescées, des fronts d'onde raides se forment. Ils sont suivis de détente. Une solution obtenue avec la version *WENO5-GLF* sur un maillage raffiné (2050 cellules) est utilisée comme cas de référence. Les résultats numériques obtenus avec 200 points à $t = 1.4$ sur toutes les versions du schéma WENO sont comparés à la solution de référence sur la figure 3.6. Cette figure représente la distribution spatiale de la masse volumique. Toutes les versions WENO5 donnent des résultats similaires avec plus ou moins de précision aux alentours de la région présentant des fluctuations. En agrandissant cette région, on peut remarquer qu'elle est mieux résolue par le *WENO5M*, certainement grâce à une meilleure précision aux points critiques.

3.9 Etude du taux de convergence des schémas

Cette partie a pour objectif de déterminer le taux de convergence des schémas utilisés sur des solutions lisses. Pour cela, un tourbillon isentropique est étudié [21, 94]. Ce test consiste en un écoulement bidimensionnel uniforme à l'intérieur duquel un tourbillon isentropique est créé à l'aide de la perturbation suivante

$$(\delta u, \delta v) = \frac{\Gamma}{2\pi} e^{\frac{1-r^2}{2}} (-\bar{y}, \bar{x}) \quad , \quad \delta T = -\frac{(\gamma-1)\Gamma^2}{8\gamma\pi^2} e^{1-r^2}$$

$\Gamma = 5$ est l'intensité du tourbillon, $(\bar{y}, \bar{x}) = (x - x_0, y - y_0)$, avec x_0 et y_0 les coordonnées initiales du centre du tourbillon et $r^2 = x^2 + y^2$ le carré du rayon du tourbillon. Comme l'écoulement est isentropique, P/ρ^γ est uniforme. Les conditions initiales sont

$$u = u_\infty + \delta u \quad , \quad v = v_\infty + \delta v \quad , \quad T = T_\infty + \delta T \quad , \quad \rho = T^{\frac{1}{\gamma-1}}$$

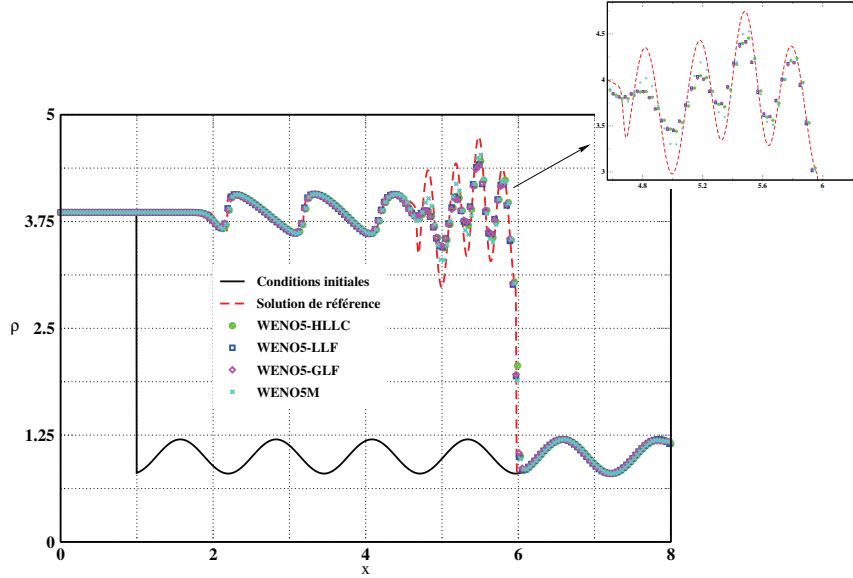


figure 3.6 – Profil de masse volumique du problème de Shu-Osher.

où $P_\infty = 1$, $\rho_\infty = 1$, $T_\infty = 1$, $u_\infty = v_\infty = 0$. La perturbation introduite par le tourbillon dans l'écoulement uniforme n'est pas suffisamment forte pour générer des effets non linéaires importants. Ainsi, l'évolution du tourbillon se fait de façon linéaire et le problème se réduit en une simple advection. Toute diffusion du tourbillon sera considérée comme ayant une origine numérique. La mesure du degré de précision du schéma sera effectuée en comparant la densité au centre du tourbillon, à un instant donné, à celle initiale.

De plus, l'effet du paramètre ϵ (équation (3.6)) sur l'ordre global du schéma numérique sera étudié.

Initialement, un tourbillon de rayon 5 est placé au centre d'un domaine de calcul carré de côté 10. Des conditions aux limites périodiques ont été utilisées. Le CFL vaut 0.8. A $t = 1$, le tourbillon simulé est comparé à la solution exacte et l'erreur locale relative en est déduite. L'erreur relative et l'erreur absolue ont été calculées afin d'estimer l'ordre de convergence des schémas. L'ordre de convergence r , sur un maillage régulier pour un schéma quelconque, est donné par l'expression suivante

$$r = \frac{\ln \left[\mathcal{E}_n^N / \mathcal{E}_n^{N'} \right]}{\ln (N' / N)} \quad (3.76)$$

avec \mathcal{E}_n^N et $\mathcal{E}_n^{N'}$, respectivement, les erreurs en norme L_n sur le maillage $N \times N$ et son double $N' \times N' = 2N \times 2N$. Au fur et à mesure que le maillage est raffiné, les valeurs de \mathcal{E}_1^N , \mathcal{E}_∞^N et de r ont été reportées dans les tableaux 3.1, 3.2 et 3.3. Les expressions (3.77a) et (3.77b), que l'on peut trouver dans [44], permettent de calculer respectivement \mathcal{E}_1^N

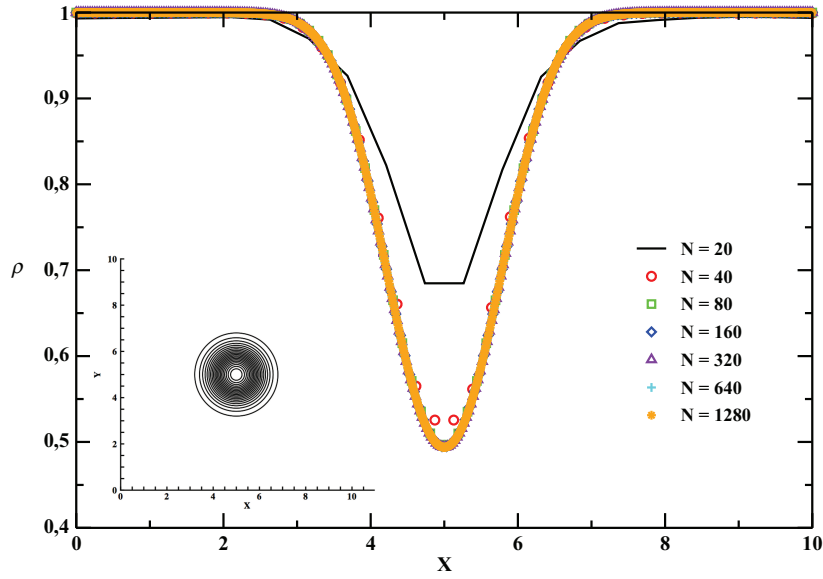


figure 3.7 – Effet du maillage. Profils de masse volumique à $t = 1$ pour $\epsilon = 10^{-6}$.

et \mathcal{E}_∞^N .

$$\mathcal{E}_1^N = \frac{2}{N} \sum_{i=0}^N |\rho_i - \rho_{exact,i}| \quad (3.77a)$$

$$\mathcal{E}_\infty^N = \max |\rho_i - \rho_{exact,i}| \quad \text{pour } i = 0, \dots, N \quad (3.77b)$$

La figure 3.7 montre le profil de masse volumique obtenu pour différents maillages avec $\epsilon = 10^{-6}$. Comme pr esenti, la solution num erique converge vers la solution exacte lorsque le maillage est raffin e. Les tableaux 3.1-3.3 montrent que pour $\epsilon = 10^{-6}$, r tend vers 5 pour toutes les versions WENO5, except e pour la version *WENO5-HLLC*, o u r tend vers 2.5. Ce fait peut-ˆetre attribu e au manque de pr ecision des estimations de Davis des vitesses d’ondes du sch ema HLLC.

Quand ϵ diminue et prend la valeur 10^{-16} , l’ordre global du sch ema d ecroit jusqu’ a une valeur proche de 3.6. On constate une diminution de la pr ecision des sch emas WENO5 mˆeme pour la version *WENO5M*, dont l’ordre est suppos e rester  a 5 pour des maillages fins [44]. La conclusion fournie par Henrick *et al.* dans [44] est probablement vraie dans le cas d’ equations scalaires, mais ne l’est pas lorsqu’il s’agit d’un syst eme d’ equations hyperboliques multi-dimensionnelles.

N	$\epsilon = 10^{-6}$			$\epsilon = 10^{-16}$		
	\mathcal{E}_1^N	\mathcal{E}_∞^N	r	\mathcal{E}_1^N	\mathcal{E}_∞^N	r
20	4.9×10^{-2}	1.4×10^{-1}	—	4.9×10^{-2}	1.4×10^{-1}	—
40	5.2×10^{-3}	1.9×10^{-2}	3.2	5.0×10^{-3}	1.6×10^{-2}	3.3
80	2.0×10^{-4}	9.3×10^{-4}	4.7	4.4×10^{-4}	2.1×10^{-3}	3.5
160	4.2×10^{-6}	1.6×10^{-5}	5.6	7.2×10^{-5}	5.6×10^{-4}	2.6
320	1.2×10^{-7}	5.0×10^{-7}	5.1	6.9×10^{-6}	6.2×10^{-5}	3.4
640	3.2×10^{-9}	1.3×10^{-8}	5.2	5.0×10^{-7}	8.0×10^{-6}	3.5
1280	8.6×10^{-11}	1.0×10^{-9}	5.2	3.4×10^{-8}	$8.2E-7$	3.6

tableau 3.1 – Ordre de convergence du *WENO5-GLF* pour deux différentes valeurs de ϵ .

N	$\epsilon = 10^{-6}$			$\epsilon = 10^{-16}$		
	\mathcal{E}_1^N	\mathcal{E}_∞^N	r	\mathcal{E}_1^N	\mathcal{E}_∞^N	r
20	1.9×10^{-2}	5.3×10^{-2}	—	2.0×10^{-2}	5.3×10^{-2}	—
40	1.4×10^{-3}	6.5×10^{-3}	3.8	1.4×10^{-3}	6.5×10^{-3}	3.8
80	6.2×10^{-5}	3.4×10^{-4}	4.5	6.2×10^{-5}	3.4×10^{-4}	3.5
160	2.6×10^{-6}	1.3×10^{-5}	4.5	2.6×10^{-6}	1.3×10^{-5}	3.6
320	8.4×10^{-8}	3.4×10^{-7}	4.5	8.4×10^{-8}	3.4×10^{-7}	3.9
640	1.4×10^{-8}	2.9×10^{-8}	2.6	1.4×10^{-8}	2.9×10^{-8}	2.6
1280	6.7×10^{-9}	1.4×10^{-8}	1.0	6.78×10^{-9}	1.3×10^{-8}	1.0

tableau 3.2 – Ordre de convergence du *WENO5-HLLC* pour deux différentes valeurs de ϵ .

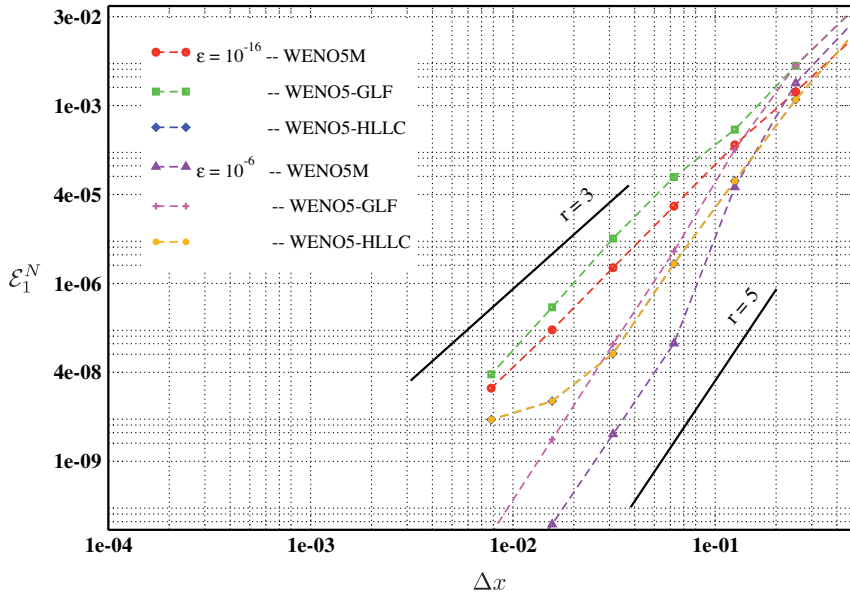


figure 3.8 – Erreurs relatives locales en norme L_1 basées sur le profil de masse volumique pour deux différentes valeurs de ϵ .

N	$\epsilon = 10^{-6}$			$\epsilon = 10^{-16}$		
	\mathcal{E}_1^N	\mathcal{E}_∞^N	r	\mathcal{E}_1^N	\mathcal{E}_∞^N	r
20	3.0×10^{-2}	7.8×10^{-2}	—	3.1×10^{-2}	7.8×10^{-2}	—
40	2.0×10^{-3}	9.4×10^{-3}	3.6	2.6×10^{-3}	9.4×10^{-3}	3.5
80	4.9×10^{-5}	1.7×10^{-4}	5.7	3.1×10^{-4}	2.3×10^{-3}	3.1
160	1.2×10^{-6}	7.5×10^{-6}	5.3	3.2×10^{-5}	3.2×10^{-4}	3.3
320	3.9×10^{-8}	2.6×10^{-7}	5.0	2.9×10^{-6}	3.5×10^{-5}	3.4
640	1.2×10^{-9}	8.4×10^{-9}	5.0	2.4×10^{-7}	5.4×10^{-6}	3.6
1280	5.9×10^{-11}	7.2×10^{-10}	4.9	1.77×10^{-8}	5.1×10^{-7}	3.7

tableau 3.3 – Ordre de convergence du *WENO5M* pour deux différentes valeurs de ϵ .

3.10 Récapitulatif

Dans ce chapitre, nous avons présenté les outils numériques employés pour la modélisation des écoulements traités dans cette étude. Dans un premier temps, nous avons examiné les caractéristiques du solveur aérodynamique, basé sur un schéma Weighted Essentially Non-Oscillatory d'ordre 5 (WENO5) [49, 79], qui est un schéma haute résolution à capture de chocs. La décomposition des flux, selon les signes positif et négatif, est effectuée à l'aide de la méthode de Lax-Friedrichs. D'après Henrick *et al.* [44], la version développée par Jiang et Shu [49, 80] est généralement d'ordre 3 au voisinage des points critiques. Afin de garantir l'ordre 5, même au voisinage de ces points critiques, les auteurs ont proposé de modifier les poids normalisés. C'est cette version qui est utilisée par la suite. Dans certains calculs 1D, la détermination des flux est effectuée à l'aide du solveur de Riemann HLLC, alors que l'intégration des variables est faite à l'aide du schéma WENO5.

Egalement, nous avons présenté le schéma centré d'ordre 4 servant pour le calcul des flux visqueux. En ce qui concerne les calculs 1D dissipatifs, des termes sources visqueux et thermiques sont intégrés par un schéma Euler d'ordre 1. Pour ce qui est de l'avancement temporel, un schéma Runge-Kutta d'ordre 3 est employé. L'intégration des termes sources chimiques est faite à l'aide d'une méthode basée sur l'approximation des états quasi-stables (QSSA), quelque soit le mécanisme réactionnel utilisé. Le mélange étant composé de plusieurs espèces chimiques, la méthode d'itération de Newton-Raphson, appliquée à l'énergie interne du mélange, permet de déduire sa température. Les conditions aux limites d'entrée/sortie et de parois pour les calculs 2D ont été ensuite présentées. Egalement, quelques outils de visualisation numérique ainsi que la méthode d'évolution de la moyenne d'une variable au cours du temps ont été présentés. Pour clore le chapitre, quelques tests de validation ont été présentés.

Chapitre 4

Résultats

Ce chapitre est consacré à la présentation des résultats numériques obtenus à l'aide du solveur CHOCS-WAVES. Des tests allant de la détonation unidimensionnelle ZND jusqu'aux détonations bidimensionnelles confinées seront présentés.

4.1 Détonation ZND

Ce cas test reprend celui de la référence [32]. Un mécanisme réactionnel simplifié, donné par l'équation (4.1), est utilisé pour cette étude.



Toutes les variables et paramètres de l'écoulement sont normalisés par rapport à l'état amont du front de détonation, comme proposé par Fiorina et Lele [32]

$$\rho = \frac{\rho^*}{\rho_r} \quad , \quad u = \frac{u^*}{u_r} \quad , \quad T = \frac{T^*}{T_r} \quad , \quad P = \frac{P^*}{\rho_r u_r^2} \quad , \quad E = \frac{E^*}{u_r^2}$$

Les quantités portant un astérisque et celles indicées par r représentent, respectivement, l'état réel et l'état amont de la discontinuité initiale. Les gaz frais et les gaz brûlés ont les mêmes propriétés thermodynamiques. Le coefficient polytropique est $\gamma = 1.4$. L'équation d'état est $P = \rho T / \gamma M_r^2$, avec $M_r = 0.845$. La chaleur de réaction \tilde{Q}_r vaut 25. Le terme source de déplétion chimique est donné par l'expression $\dot{\omega} = -5000Z \exp(-25/T)$ où T est la température du milieu et Z la variable d'avancement de la réaction. Connaissant l'équation d'état et la chaleur de réaction, il est possible de déterminer les états Neumann et Chapman-Jouguet théoriques correspondants (voir annexe D).

Initialement, le gaz contenu dans la partie gauche du tube se trouve dans l'état CJ. Les conditions initiales présentées dans le tableau 4.1 permettent d'avoir une onde de détonation stationnaire. Afin d'avoir une onde en mouvement, il convient d'utiliser les vitesses u_{abs} . Le tube fait 1 de long. Le schéma WENO d'ordre 5 combiné au solveur de Riemann HLLC a été utilisé pour ce calcul.

Après rupture du diaphragme, séparant les chambres haute et basse pression, une onde de choc se propage vers la droite dans le milieu contenant le réactif. Cette onde

	P	ρ	u	u_{abs}	T	Z
Chambre HP	21.5672	1.6812	-4.2380	2.887	12.8272	0
Chambre BP	1	1	-7.1247	0	1	1

tableau 4.1 – Conditions initiales d’une détonation stationnaire 1D. HP et BP désignent, respectivement, haute et basse pression.

de choc comprime et met en mouvement ce milieu, qui voit sa température augmenter en conséquence. Le taux de décomposition chimique croît et un front de combustion se forme alors derrière le choc. Ce front, dont la vitesse augmente au cours du temps, génère des ondes de compression qui vont alimenter le choc et l’accélérer. Cette accélération entraîne une hausse du saut de pression et de température à travers le choc, ce qui augmente davantage le taux de décomposition chimique. Une explosion a alors lieu et les ondes issues de cette explosion rattrapent le choc principal. L’ensemble formé par l’onde de choc et la zone de réaction va donc former un front de surdétonation qui va se stabiliser et se propager à une vitesse quasi-constante dans un régime de détonation de type ZND.

4.1.1 Influence du maillage

Afin d’étudier l’effet du maillage, le nombre de points N_x a été varié de 100 à 2000. Dans le tableau 4.2, on trouve la vitesse de l’onde pour différents maillages. Cette vitesse est déterminée par une méthode détaillée dans l’annexe E. L’erreur sur la vitesse de détonation est calculée par rapport à la valeur théorique. Dans le tableau 4.3, sont regroupés les états simulés CJ et Neumann du mélange après passage de l’onde de détonation, pour différents maillages. Les profils de pression, de masse volumique, de température et de vitesse pour les différentes résolutions spatiales sont présentés sur la figure 4.1. On peut voir qu’un maillage plus fin permet de mieux capturer l’état Neumann. En effet, en raffinant le maillage, la zone de réaction est mieux résolue. Ce qui entraîne, par conséquent, une meilleure détermination de l’état CJ, de la vitesse de l’onde et de l’état Neumann. Cependant, un raffinement plus contraignant et un temps CPU plus important semblent nécessaires pour pouvoir capturer l’état Neumann relatif à la masse volumique. Ainsi, pour éviter de raffiner davantage le maillage tout en gardant une bonne précision, une nouvelle méthode a été proposée. Elle repose sur un censeur de choc qui permet de désactiver les termes sources chimiques dans la zone du choc, afin d’éviter de brûler dans l’épaisseur numérique du choc. En effet, selon le modèle ZND, les réactions chimiques ont lieu uniquement dans la zone de réaction.

N_x	100	500	1000	2000	Théorique
σ	7.1024	7.1317	7.1269	7.1286	7.1247
Erreur [%]	0.31	0.10	0.03	0.05	—

tableau 4.2 – Vitesse moyenne σ de l’onde pour différentes valeurs de N_x .

	N_x												Théorique
	100			500			1000			2000			
	—	Erreur[%]		—	Erreur[%]		—	Erreur[%]		—	Erreur[%]		
P_{vm}	31.33	25.64		38.74	8.06		40.51	3.86		41.4	1.74		42.1344
ρ_{vm}	2.5	52.59		3.76	28.69		4.25	19.4		4.59	12.95		5.2728
T_{vm}	9.47	18.56		9.75	22.06		9.13	14.3		8.12	1.65		7.9878
u_{vm}	4.18	27.6		5.2	9.93		5.43	5.95		5.6	3		5.7735
P_{cj}	22.76	5.53		23.768	10.2		23.768	10.2		23.768	10.2		21.5672
ρ_{cj}	1.9	13.01		1.8743	11.49		1.8923	12.56		1.8125	7.81		1.6812
T_{cj}	13.78	7.45		13.42	4.65		13.39	4.41		13.38	4.34		12.824
u_{cj}	3.1795	10.17		3.19	10.53		3.2	10.88		3.2	10.88		2.886

tableau 4.3 – Etats Neumann et CJ de l'onde respectivement indicés par $(\cdot)_{vm}$ et $(\cdot)_{cj}$ pour différentes valeurs de N_x .

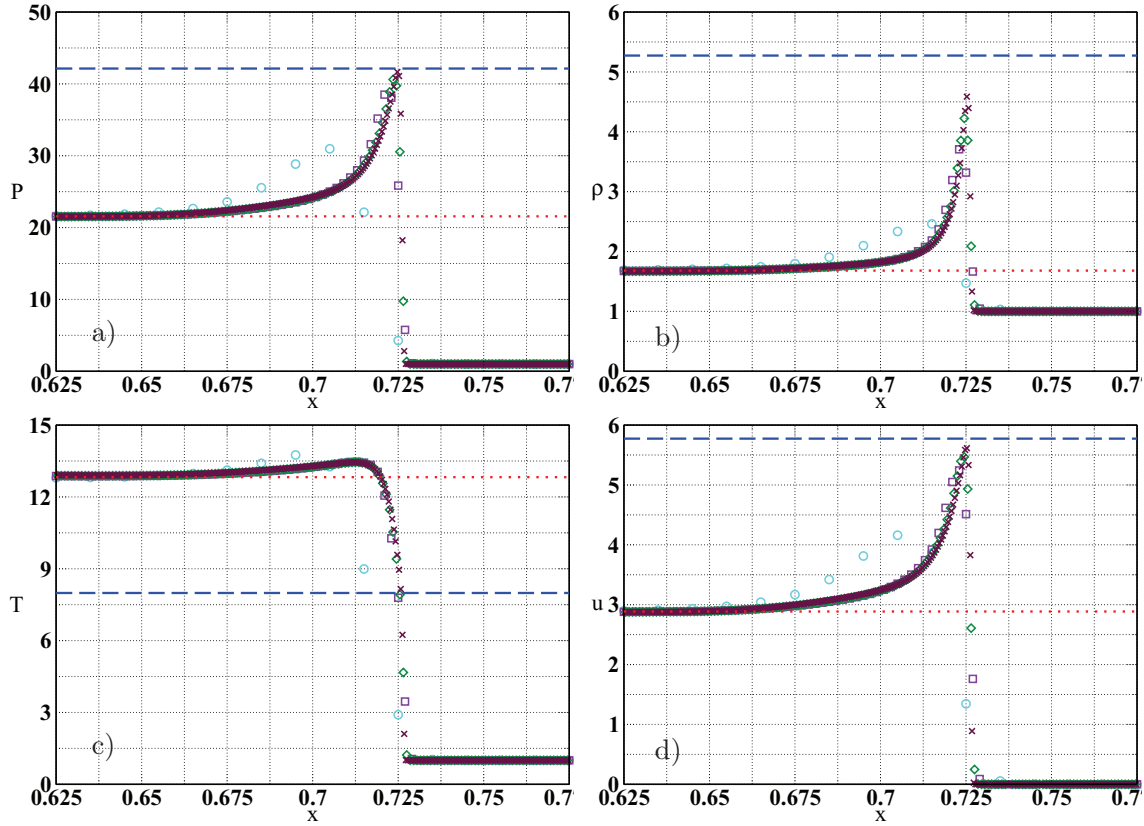


figure 4.1 – Profils à l’instant $t = 0.14$ de pression a) masse volumique b) température c) vitesse d) pour différents maillages. \circ : $N_x = 100$ - \square : $N_x = 500$ - \diamond : $N_x = 1000$ - \times : $N_x = 2000$ - \dots : Etat CJ théorique ; $--$: Etat Neumann théorique.

4.1.2 Influence du censeur de choc

Après le passage d’une onde compressive, la masse volumique augmente et le volume de fluide contenu dans la maille de calcul diminue. En estimant les vitesses des bords de maille par l’intermédiaire de la solution approchée du problème de Riemann, cela induit que $1 + (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*)\Delta t/\Delta x < \varepsilon$, avec $u_{i+1/2}^*$ la solution du problème de Riemann et $\varepsilon \approx 0.0001$. Si le précédent critère est vérifié (voir annexe F), le terme source n’est pas activé. Cette procédure de détection semble meilleure que le critère $(P_i^{n+1} - P_i^n)/P_i^n > \varepsilon'$ [67], qui ne fonctionnerait pas dans le cas d’une onde de détonation stationnaire. Pour illustrer l’efficacité de cette méthode, nous avons effectué un calcul qui reprend les mêmes paramètres et conditions initiales que précédemment. La comparaison entre les cas avec et sans censeur de choc est faite sur la figure 4.2. Pour des soucis de comparaison, les courbes du cas sans censeur ont été volontairement décalées vers la droite. Quand l’énergie chimique est disponible uniquement dans la zone de réaction, notamment dans le cas où le censeur de choc est activé, de meilleurs résultats sont obtenus. Ainsi, l’état Neumann est correctement déterminé comme on peut le voir sur la figure 4.2 et aussi sur les tableaux 4.4 et 4.5. Ces tableaux représentant respectivement les états Neumann et CJ ainsi que la vitesse moyenne de l’onde dans les cas avec et

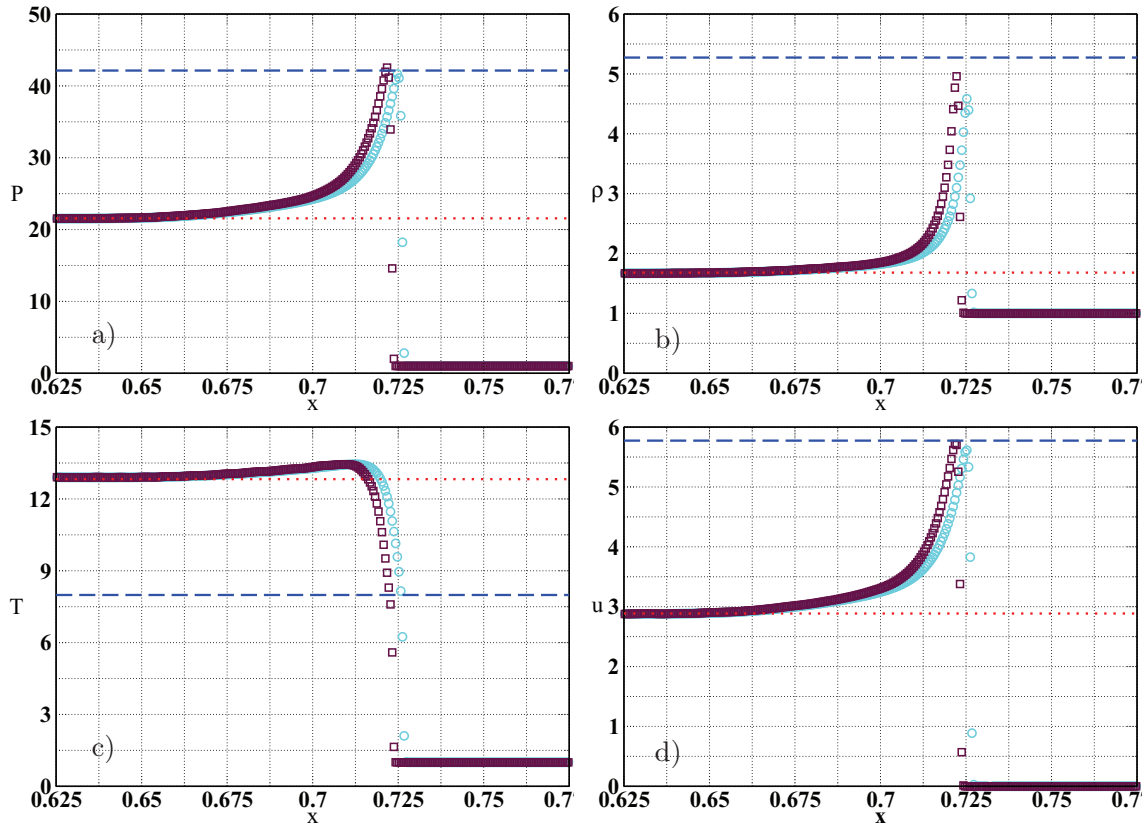


figure 4.2 – Comparaison à l’instant $t = 0.14$ des profils de pression a), de masse volumique b), de température c) et vitesse d). \circ : sans censeur ; \square : avec censeur ; \dots : Etat CJ théorique ; $---$: Etat Neumann théorique ($N_x = 2000$).

sans censeur.

		Avec censeur		Sans censeur		Théorique
		–	Erreur [%]	–	Erreur [%]	
Etat Neumann	P_{vn}	42.277	0.34	41.4	1.74	42.1344
	ρ_{vn}	4.948	6.16	4.59	12.95	5.2728
	T_{vn}	7.5617	5.34	8.12	1.66	7.9878
	u_{vn}	5.7	1.27	5.6	3.0	5.7735
Etat CJ	P_{cj}	22.9	6.18	23.768	10.2	21.5672
	ρ_{cj}	1.8114	7.74	1.8125	7.81	1.6812
	T_{cj}	13.3725	4.28	13.38	4.33	12.824
	u_{cj}	3.1752	10.02	3.2	10.88	2.886

tableau 4.4 – Etats Neumann et CJ de l’onde selon que le censeur de choc est activé ou pas.

	Avec censeur	Sans censeur	Théorique
σ	7.1321	7.1286	7.1247
Erreur [%]	0.1	0.05	

tableau 4.5 – Vitesse moyenne σ de l'onde selon que le censeur de choc est activé ou pas.

4.2 Détonation galopante

Lorsque le terme source chimique est de plus en plus raide, l'onde de détonation peut devenir instable. Cette raideur provient d'une augmentation de l'énergie d'activation de la loi d'Arrhénius, ou encore de la chaleur de réaction libérée durant la combustion. Des travaux analytiques et numériques [6, 26, 46, 65] ont été menés afin de déterminer avec précision ces paramètres. Simuler de tels écoulements est aussi un bon moyen de vérifier la robustesse et la précision du solveur développé. Ainsi, des calculs 1D de détonations instables ont été effectués avec le solveur *WENO5-HLLC*. Le coefficient polytropique vaut 1.2.

La méthode utilisée pour la normalisation des équations est semblable à celle proposée par Deiterding [22]. Considérons l'équation de conservation de la variable d'avancement Z suivante

$$\frac{\partial \bar{\rho} Z}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u} Z}{\partial \bar{x}} = \underbrace{-k \bar{\rho} Z \exp\left(-\frac{\bar{E}_a}{\bar{\mathcal{R}}_u \bar{T}}\right)}_S \quad (4.2)$$

avec $\bar{T} = \bar{P} \bar{\mathcal{W}} / \bar{\mathcal{R}}_u \bar{\rho}$, $\bar{\mathcal{W}}$ étant la masse molaire du mélange. Les quantités surmontées d'une barre correspondent aux grandeurs réelles. Le terme source de l'équation (4.2) devient

$$S = -k \bar{\rho} Z \exp\left(-\frac{\bar{E}_a \bar{\rho}}{\bar{\mathcal{W}} \bar{P}}\right) \quad (4.3)$$

Posons

$$\rho = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_0} \quad , \quad u = \bar{u} \sqrt{\frac{\bar{\rho}_0}{\bar{P}_0}} \quad , \quad P = \frac{\bar{P}}{\bar{P}_0} \quad , \quad T = \frac{P}{\rho}$$

et

$$T_a = \frac{\bar{E}_a \bar{\rho}_0}{\bar{\mathcal{W}} \bar{P}_0} \quad , \quad t = \bar{t} \Delta_{1/2} \sqrt{\frac{\bar{\rho}_0}{\bar{P}_0}} \quad , \quad x = \frac{\bar{x}}{\Delta_{1/2}}$$

L'équation d'état reste inchangée avec $Q = \bar{Q} \frac{\bar{\rho}_0}{\bar{P}_0}$, on a alors

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Z}{\partial x} = -k \rho \Delta_{1/2} Z \sqrt{\frac{\bar{\rho}_0}{\bar{P}_0}} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (4.4)$$

ou encore

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Z}{\partial x} = -K \rho Z \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (4.5)$$

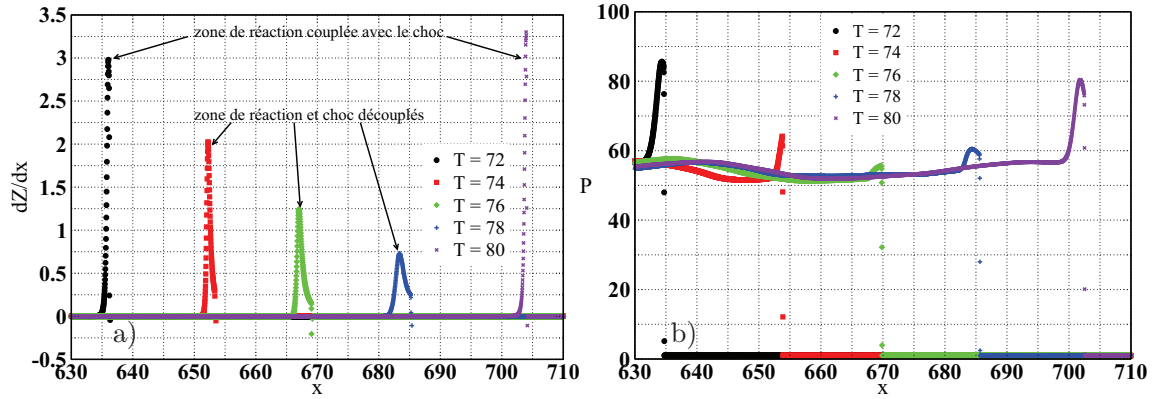


figure 4.3 – a) Distributions spatiales du gradient de la variable d’avancement de la réaction et b) de pression à différents instants.

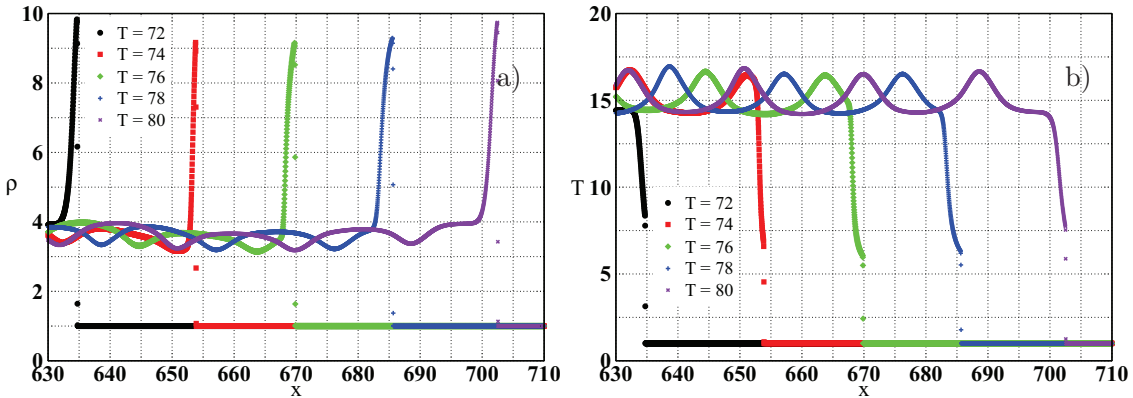


figure 4.4 – a) Distributions spatiales de masse volumique et b) de température à différents instants.

où $K = k\Delta_{1/2}\sqrt{\bar{\rho}_0/\bar{P}_0}$. K est tel que la moitié de la zone de réaction $\Delta_{1/2}$ est égale à l’unité. Celle-ci est définie comme la distance séparant le lieu où commence la réaction chimique et celui où la variable d’avancement du mélange vaut 0.5. Par la suite, on prend

$$K = 230.75, \quad T_a = 50 \quad \text{et} \quad Q = 50$$

La méthode de calcul des états Neumann et CJ théoriques est fournie par l’annexe D. Les variables dans ces états sont regroupées dans le tableau 4.6.

	P	ρ	T	u
Etat Neumann	42.0626	8.7385	4.8134	6.0302
Etat CJ	21.5313	1.7946	11.9976	3.015

tableau 4.6 – Etats Neumann et CJ théoriques.

La vitesse théorique de l’onde de détonation σ_{cj} vaut 6.8095. Le domaine de calcul,

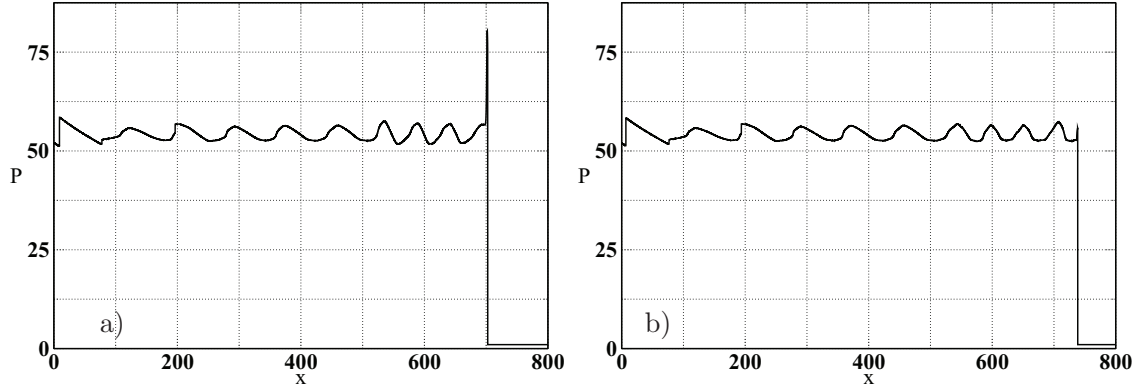


figure 4.5 – Profils de pression à deux instants différents - a) $t = 80$, b) $t = 84$.

correspondant à une longueur $800\Delta_{1/2}$, contient 32000 points répartis uniformément avec 40 points dans $\Delta_{1/2}$. Le CFL est pris égal à 0.5. Les conditions initiales du calcul sont données par

$$\begin{aligned} (P, \rho, u, Z)_{HP} &= (60, 2, 4, 0) \\ (P, \rho, u, Z)_{BP} &= (1, 1, 0, 1) \end{aligned}$$

Le censeur de choc, basé sur l'augmentation relative de la pression, est activé. Les figures 4.3 a et 4.3 b ainsi que les figures 4.4 a et 4.4 b représentent, respectivement, le gradient de la variable d'avancement de la réaction, la pression, la masse volumique et la température à différents instants. Elles illustrent un phénomène de couplage/découplage entre la zone de réaction (région où est localisé le pic du gradient) et le front de choc.

En effet, due à la forte énergie d'activation du mélange $\beta = \bar{E}_a / \bar{\mathcal{R}}_u \bar{T}_{vN} = T_a / T_{vN} \approx 10.39 > 6.14$ (Sharpe 2001 [76]) ce mélange est instable. Les gaz frais, ayant traversé l'onde, ne sont que partiellement brûlés. Ainsi, des poches de gaz frais apparaissent, de façon périodique, dans l'écoulement en aval du choc. Leur combustion tardive engendre des ondes de pression (voir figures 4.5 a et 4.5 b) qui rattrapent le choc et génèrent

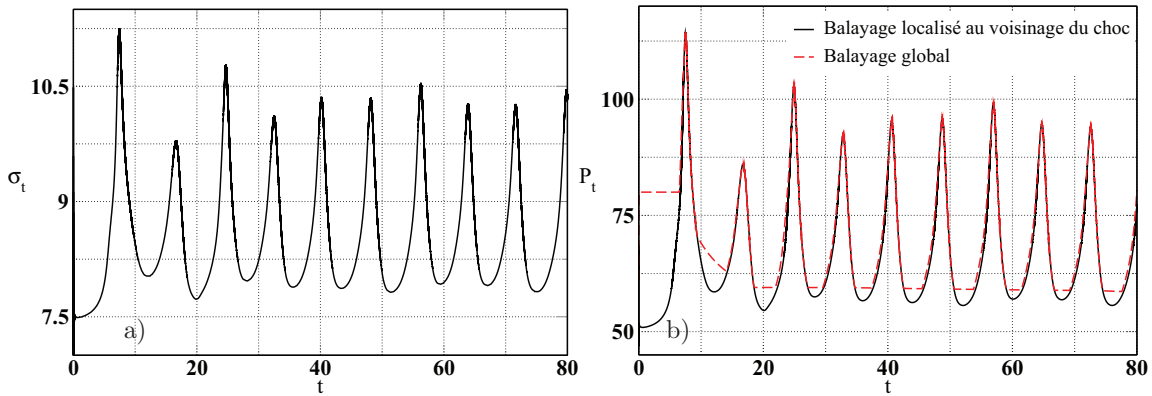


figure 4.6 – a) Evolution temporelle de la vitesse de l'onde - b) Evolution temporelle de la pression du choc.

un régime de surdétonation. Durant la phase d'accélération, la vitesse et la pression atteignent des valeurs largement supérieures à celles fournies par le modèle CJ. A partir d'un certain temps durant la phase d'accélération, l'intensité et la vitesse du choc commencent à décroître, car ce dernier n'a pas été alimenté de nouveau. L'onde entame donc sa phase de ralentissement. Dans le même temps, une onde de pression, générée par la combustion d'une poche de gaz partiellement brûlés, vient alimenter le choc à un instant donné. Ce dernier est alors accéléré et le cycle peut recommencer.

Après plusieurs phases d'accélération et de ralentissement, on obtient l'évolution temporelle de la vitesse de l'onde, tracée sur la figure 4.6 a. La vitesse du choc est obtenue en dérivant sa position instantanée par rapport au temps. Cette vitesse est comprise entre $1.15\sigma_{cj}$ et $1.5\sigma_{cj}$. La vitesse moyenne de l'onde est de $1.26\sigma_{cj}$, soit un facteur de surdétonation de 1.58. Sur la figure 4.6 a, les trois premiers pics sont dus aux conditions initiales, la période temporelle du phénomène vaut approximativement 7.9 soit une fréquence de 0.127. Durant la propagation de l'onde, les ondes de pression, dans l'écoulement en aval du choc peuvent avoir une amplitude supérieure à celle du choc (voir figure 4.5 b). Si toute la distribution spatiale de pression est balayée pour connaître la pression du choc, le profil donnant l'évolution temporelle de ce dernier sera alors erroné comme le montre la courbe en tirets présentée sur la figure 4.6 b.

Il convient de repérer dans un premier temps la position du choc, puis balayer uniquement au voisinage immédiat de cette position pour récupérer la valeur de la pression du choc. La courbe en traits pleins présentée sur la figure 4.6 b est ainsi obtenue. La pression du choc oscille entre 55 et 97 à la fréquence 0.125, proche de celle du phénomène de couplage/découplage entre le choc et la zone de réaction.

4.3 Détonation bidimensionnelle

Le solveur *WENO5M*, validé précédemment, sera utilisé dans la suite. L'énergie d'activation et le facteur préexponentiel du terme source chimique sont diminués par rapport au cas de détonation instable (discuté précédemment). Avec $K = 3.124$, $T_a = 10$ et $Q = 50$, l'onde de détonation résultante se trouve dans un état stable. Les états Neumann et CJ théoriques sont les mêmes que ceux du cas instable, la vitesse théorique de l'onde de détonation est donc la même. Un mécanisme réactionnel simple est employé. Les variables et paramètres de l'écoulement sont également adimensionnalisés, selon la méthode proposée par Deiterding [22].

Tout d'abord, des calculs 1D ont été effectués. Le tube utilisé est séparé en deux parties : une chambre basse pression, dans laquelle le gaz est soumis aux mêmes conditions initiales que celui de la chambre basse pression du cas instable traité précédemment. Les chambres haute et basse pression sont remplies d'un gaz ayant les mêmes propriétés thermiques et chimiques. Afin d'éviter un régime de surdétonation, le gaz est soumis à des conditions thermodynamiques inférieures à celles de l'état CJ. La résolution spatiale est telle qu'il y ait 60 points dans la moitié de la zone de réaction. Le capteur de choc, basé sur l'augmentation relative de la pression, est activé.

La figure 4.7 représente le profil de pression à l'instant $t = 32$. On voit clairement que la pression des états CJ et Neumann est correctement capturée. Le tableau 4.7

fournit les états numériques CJ et Neumann. Ces résultats montrent encore une fois les propriétés intéressantes (robustesse et précision) du schéma WENO5.

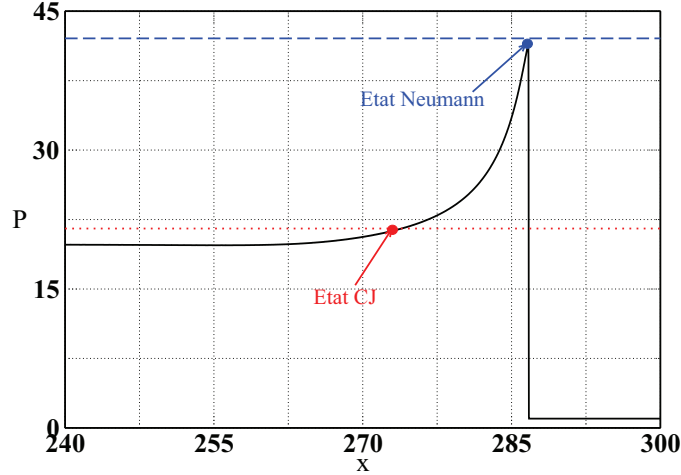


figure 4.7 – Répartition spatiale de la pression à $t = 32$. \dots : Etat CJ théorique ; $-\ -$: Etat Neumann théorique.

			Erreur [%]
Etat Neumann	P_{vn}	41.485	1.373
	ρ_{vn}	8.621	1.345
	T_{vn}	4.7872	0.544
	u_{vn}	5.9761	0.897
Etat CJ	P_{cj}	21.394	0.638
	ρ_{cj}	1.7906	0.403
	T_{cj}	11.948	0.414
	u_{cj}	2.9986	0.546
Vitesse moyenne	σ_{cj}	6.7855	0.352

tableau 4.7 – Etats Neumann et CJ numériques pour une détonation stable 1D, avec $\gamma = 1.2$.

Le profil ZND est ensuite appliqué sur toute la hauteur d'un domaine de calcul. Celui-ci est un canal composé de deux plans parallèles longs de $480\Delta_{1/2}$, distants de $20\Delta_{1/2}$. Par raison de simplicité, seule la moitié du canal sera simulée. Le domaine considéré comporte environ 17 millions de points avec une résolution spatiale de 60 mailles par demi épaisseur de zone de réaction dans les deux directions spatiales.

Comme conditions initiales, une poche de gaz non brûlés, dont la pression et la masse volumique sont de 7% supérieures respectivement à la pression et à la masse volumique de l'état Neumann, est placée devant l'onde incidente comme schématisé sur la figure 4.8. Par ailleurs, il est aussi possible d'initialiser ce calcul autrement, en plaçant la poche de gaz dans la zone de réaction sur l'axe du canal comme le font Oran *et al.* [64], Deiterding [22]. Il est possible aussi de créer une variation sinusoidale de pression post-choc [66] ou encore de laisser se propager un profil ZND 2D dans un

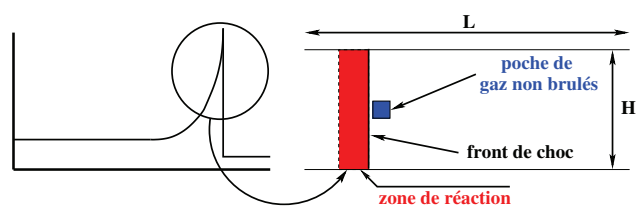


figure 4.8 – Méthode d'initialisation pour la détonation 2D.

milieu dont la masse volumique est oscillante [76]. Ces méthodes permettent d'obtenir assez rapidement une structure multidimensionnelle. Dans notre cas, la combustion de la poche de gaz génère des ondes de pression qui interagissent avec l'onde de choc incidente (voir figure 4.9).

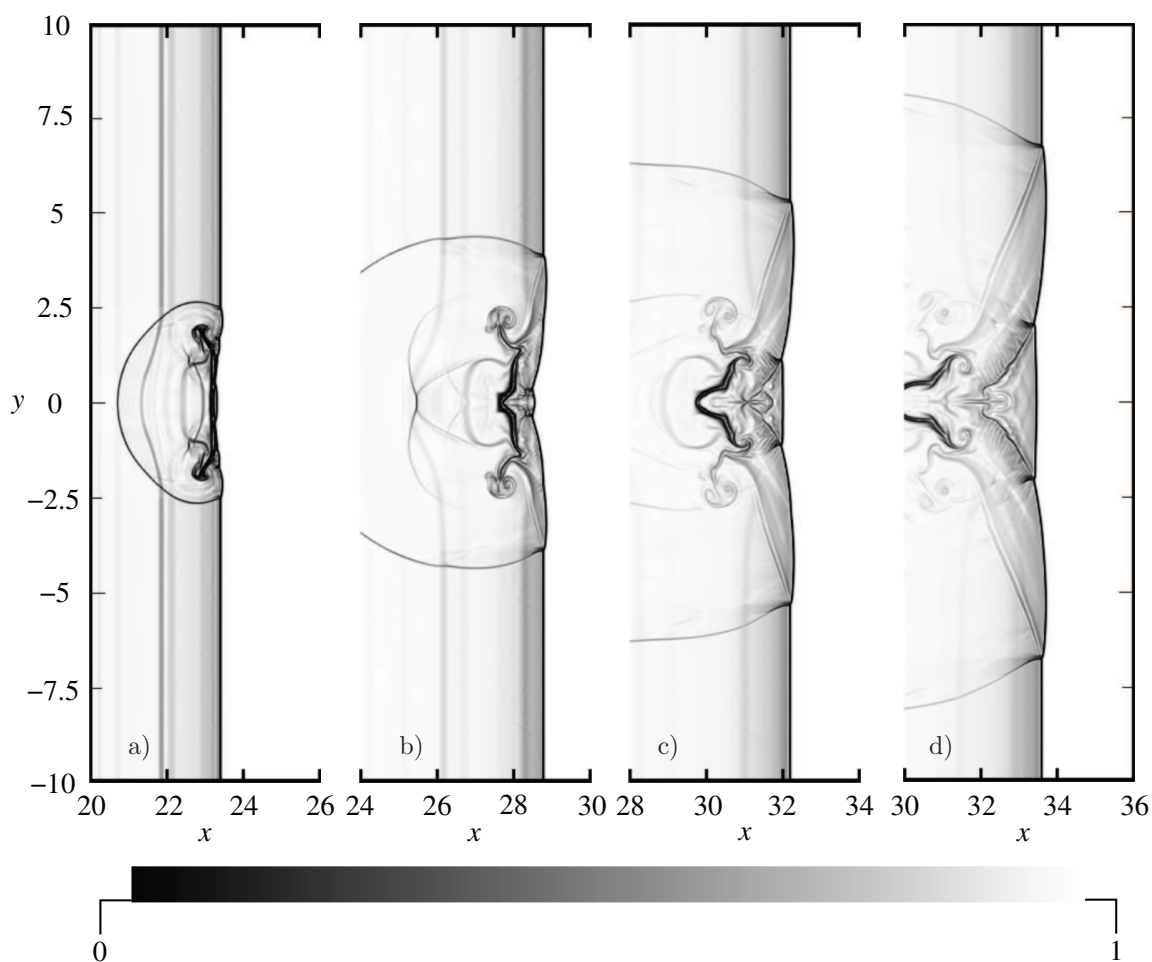


figure 4.9 – Schlierens numériques du gradient de densité aux instants : a) $t = 0.5$ - b) $t = 1$ - c) $t = 1.5$ - d) $t = 2$.

L'interaction entre ces ondes de pression et le choc incident conduit à la formation d'une structure bidimensionnelle (voir figure 4.10). La figure 4.10 montre les champs des normes du gradient de pression et de masse volumique, de la variable d'avancement

ainsi que le champ du taux de décomposition chimique. I est le choc incident, M est le disque de Mach avec un point d'inflexion en k . T est le principal choc transverse qui est en train de se propager vers le bas et vers la droite. Les points A et B sont des points triples, intersection de trois chocs. lg est une ligne de glissement qui, ancrée sur le point triple A , sépare les gaz qui ont subi le passage des chocs incident et transverse des gaz comprimés par le disque de Mach. La zone de réaction, en aval du disque de Mach, est moins épaisse qu'en aval du choc incident, car les amplitudes de ces deux chocs sont différentes. Plus l'amplitude du front est importante, moins l'interface réactive¹ est perméable aux gaz frais. De plus, lg est le siège d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz. Un léger faisceau de détentes, centré au point F , est formé. Une autre ligne de glissement R sépare une poche de gaz non brûlés située assez loin du front de choc des gaz brûlés. Le segment AB est un choc qui s'appuie sur la ligne de glissement. Une partie du choc AB et du choc transverse traversent une région de gaz partiellement brûlés et agissent comme des fronts de détonation.

Les figures 4.11, 4.12, 4.13, 4.14, et 4.15 représentent respectivement les champs des normes du gradient de pression, de masse volumique, de la variable d'avancement, ainsi que les champs de la variable d'avancement et du taux de réaction chimique. Elles décrivent une séquence durant laquelle se produit une collision entre deux points triples au niveau de l'axe du canal.

Lors de la première phase de la séquence, les points triples vont à leur rencontre mutuelle. Celui situé dans la moitié basse du canal se déplace vers le haut tandis que l'autre se déplace vers le bas. Les chocs transverses correspondants sont déjà rentrés partiellement en interférence. Les disques de Mach, de par certainement leur courbure et leur propagation dans la partie divergente de la cellule de détonation, se sont affaiblis. La zone de réaction induite s'épaissit. La portion résiduelle du choc incident est très faible et s'affaiblit d'autant plus que l'énergie libérée derrière ce choc s'amointrit également.

Lors de la deuxième phase de la séquence, l'interaction des deux points triples entraîne une forte compression des gaz, entraînant localement une hausse de la température et du taux de décomposition chimique. Une forte détonation se produit alors, refermant la poche de gaz partiellement brûlés qui se situait derrière le choc incident et s'y propager. Un disque de Mach est ainsi engendré et dans le même temps, une paire de jets de gaz est émise dans les directions opposées. Les disques de Mach avant interférence deviennent des ondes incidentes.

Durant la troisième phase de la séquence, le jet émis vers l'avant rattrape le disque de Mach, le perturbe en faisant apparaître un point d'inflexion. Le jet dirigé vers l'arrière de l'écoulement va interagir avec les lignes de glissement qui se sont détachées du front de choc après interaction. Par rapport à la vitesse du disque de Mach, les gaz plus chauds, contenus dans le jet émis vers l'avant, vont ralentir. Ayant une densité plus faible, leur interaction avec les gaz choqués par le disque de Mach induit des instabilités de type Rayleigh-Taylor (instabilités sous forme de doigts). La surface extérieure des tourbillons sera également déstabilisée par les instabilités de Kelvin-Helmholtz de la ligne de glissement. Après interférence, les points triples s'éloignent l'un de l'autre.

1. La notion d'interface réactive est utilisée pour décrire un front CJ (détonation et/ou déflagration) [53].

Leur inflexion au point k s'atténue. Un nouveau cycle se met ainsi en place. Celui-ci a également lieu lors de l'interaction entre un point triple et une paroi.

En se plaçant sur l'axe du canal et en dérivant la position du choc par rapport au temps, des phases d'accélération et de déccélération sont observées sur la figure 4.16. L'instant où l'accélération est maximale, traduite par un pic de vitesse, correspond à l'interférence des points triples et donc à une explosion. La vitesse moyenne de l'onde vaut $\sigma = 6.8406 \approx 1.005\sigma_{cj}$.

Une onde de détonation est caractérisée par une structure cellulaire. Elle est formée par les trajectoires parcourues par les points triples. Expérimentalement, la méthode la plus utilisée pour l'enregistrement de la structure est le dépôt de suie sur des feuilles souples, épousant les parois internes du tube.

On peut citer la méthode photographique, développée par Campbell et Woodward [10, 11], élaborée à partir d'un tambour. Sur le plan numérique, l'une des méthodes les plus utilisées, pour l'obtention de cette structure, est décrite dans la section 3.7.2. Cette méthode sera adoptée par la suite. Une autre méthode, pouvant être utilisée, est celle basée sur l'enregistrement au cours du temps des maxima locaux de la vorticité de l'écoulement. Ceci est justifié par le fait que les variations maximales de la vitesse ont lieu dans les régions où se situent les points triples [22].

Après une phase transitoire, la structure cellulaire devient auto-similaire et on obtient le résultat montré sur la figure 4.16. La longueur l d'une cellule peut être reliée à la fréquence d'apparition des explosions ou des interférences de points triples et la vitesse moyenne de l'onde.

$$l \approx \frac{\sigma}{f} \approx 42.78\Delta_{1/2} \quad (4.6)$$

La largeur d'une cellule peut être reliée à l'épaisseur ZND , $\lambda = A\Delta_{ZND}$, tel que $A \approx 10$. On peut remarquer que $\lambda/l \approx 0.47$. Généralement, ce rapport est proche de 0.6 [22].

Au début de chaque cellule, on observe des traces de faibles intensités (voir figure 4.18). Elles sont laissées par le parcours des points k , points d'inflexion des disques de Mach.

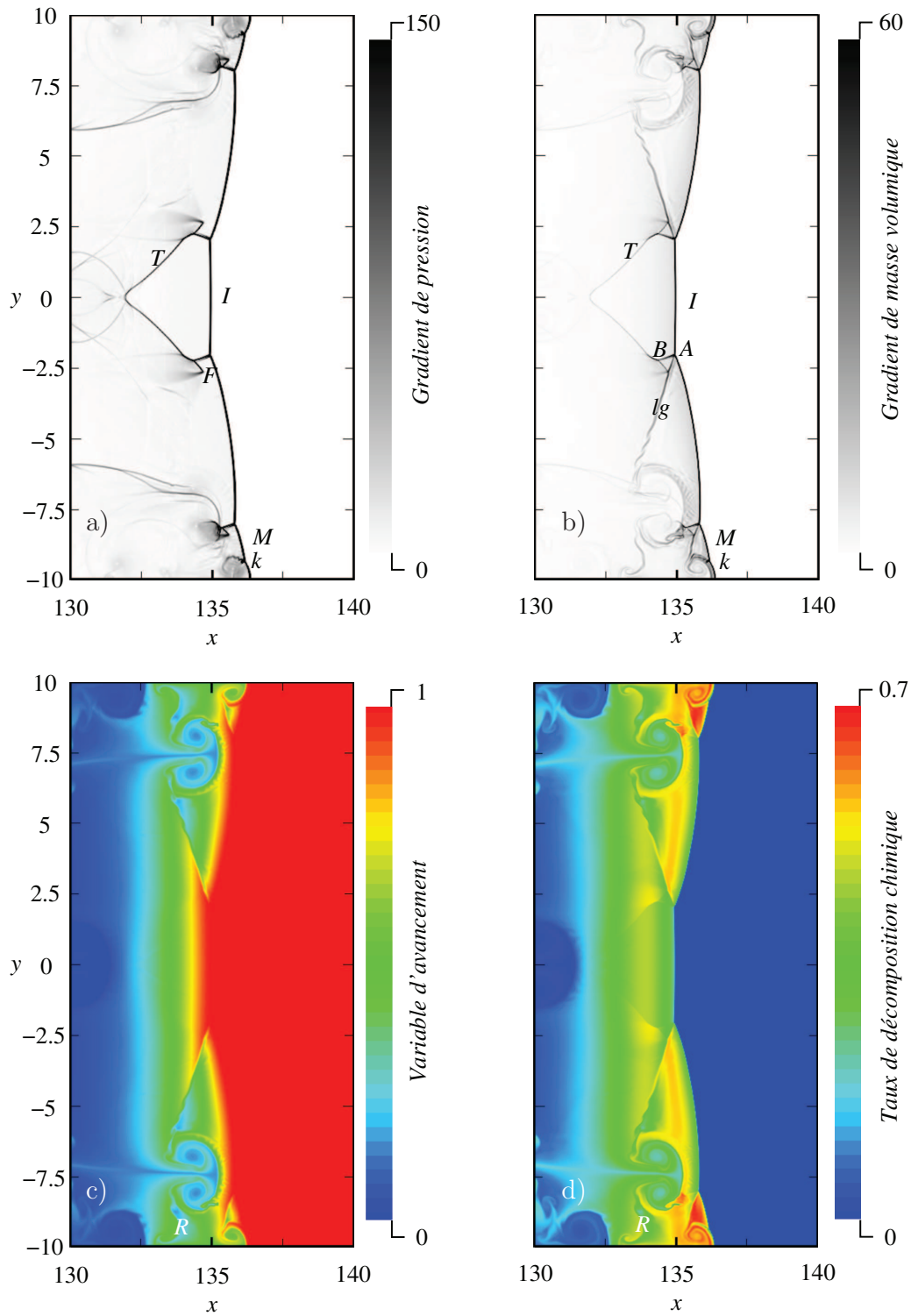


figure 4.10 – Normes des gradients : a) du champ de pression - b) du champ de masse volumique. Champs - c) de la variable d'avancement - d) du taux de décomposition chimique à l'instant $t = 17$.

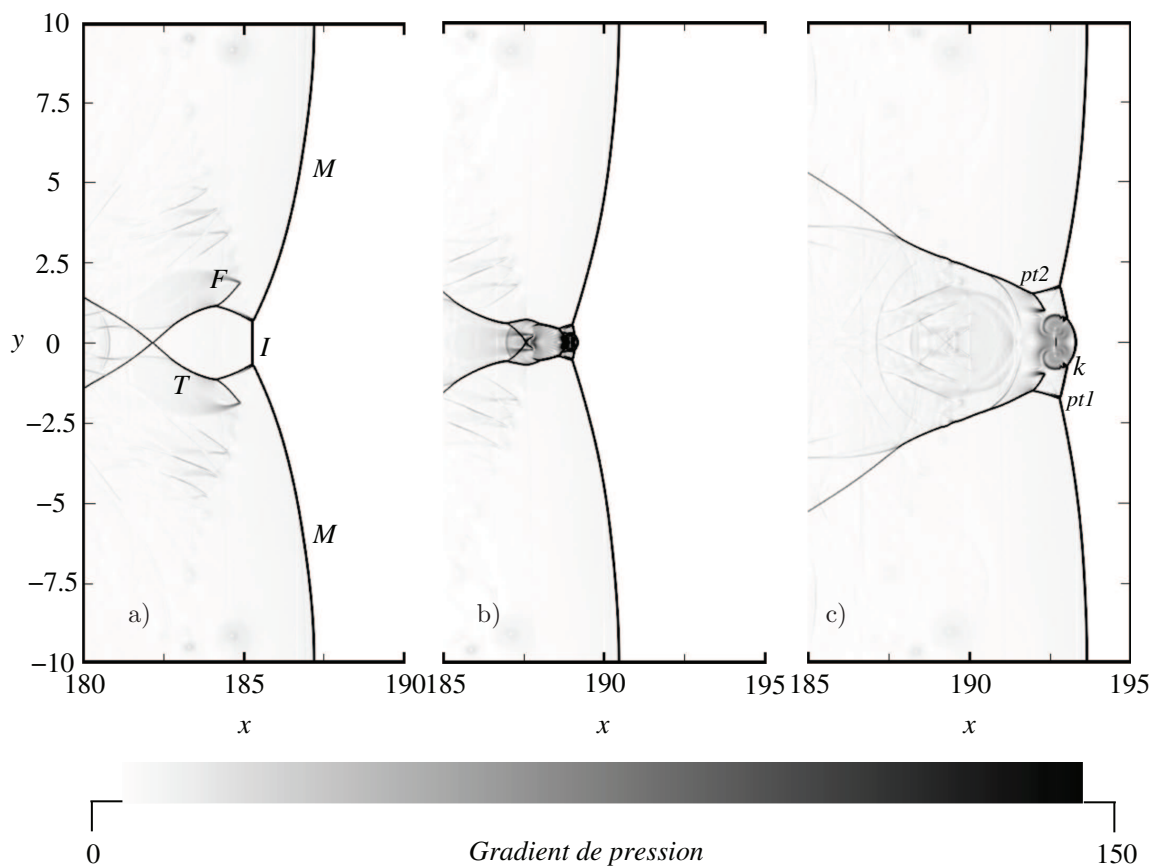


figure 4.11 – Norme du gradient du champ de pression à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$. I : onde incidente, T : onde transverse, M : disque de Mach, F : faisceau de détente, $pt1$: point triple de type 1, $pt2$: point triple de type 2, k : point d'impact du jet sur le disque de Mach.

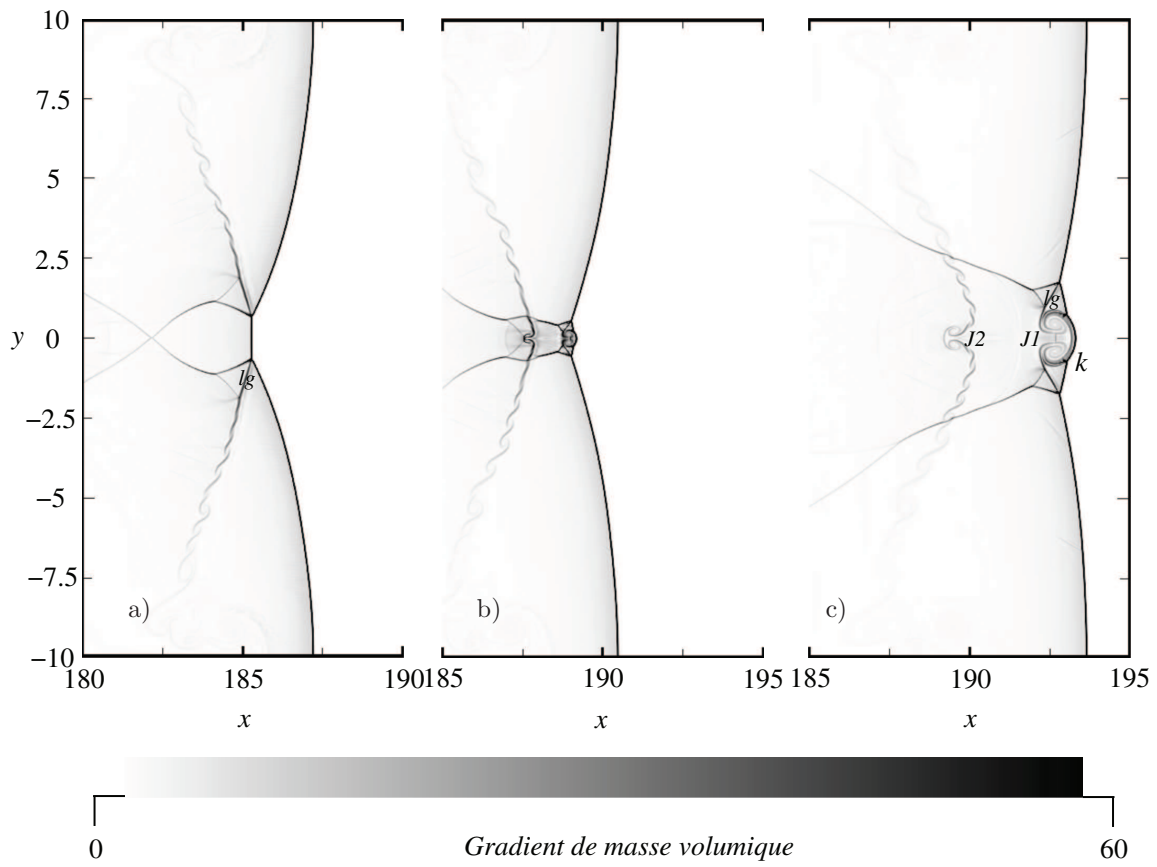


figure 4.12 – Norme du gradient du champ de masse volumique à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$. lg : ligne de glissement, $J1$: jet orienté vers l'avant, $J2$: jet orienté vers l'arrière, k : point d'impact du jet avec le disque de Mach.

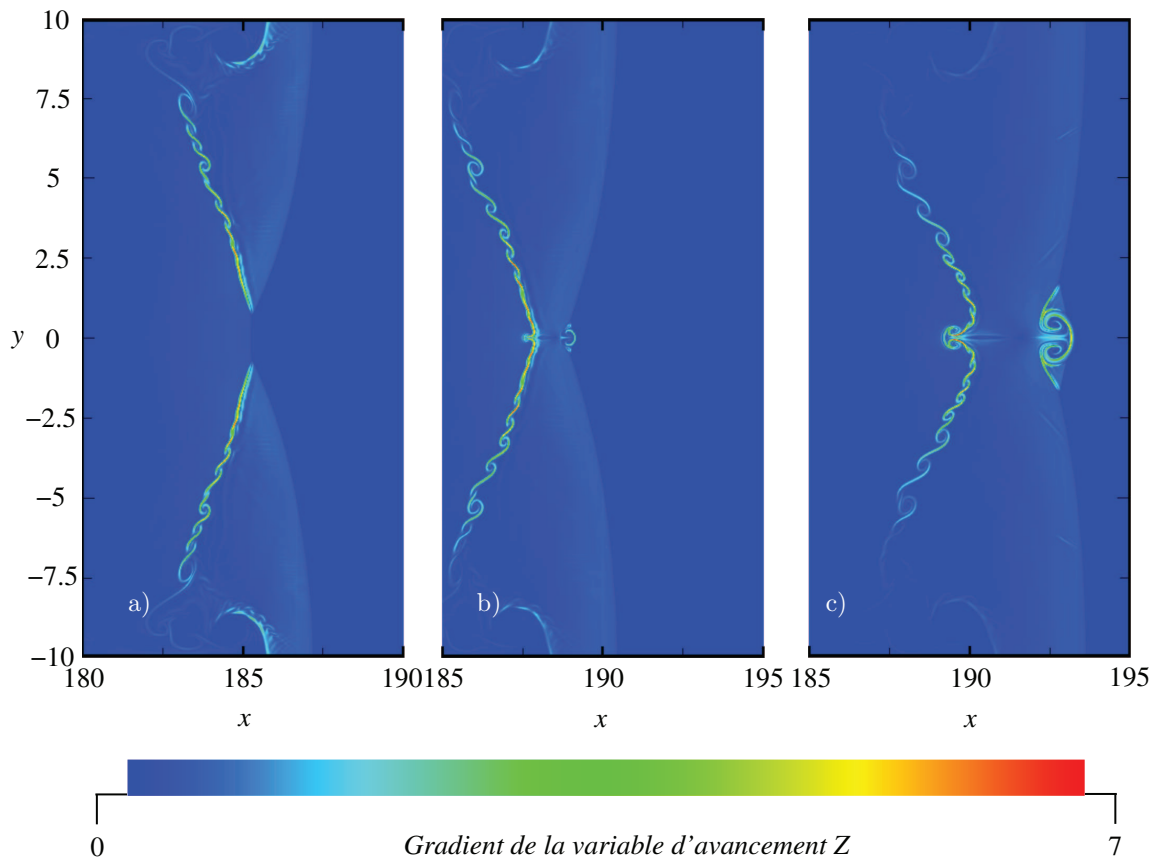


figure 4.13 – Champs de la norme du gradient de Z à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$.

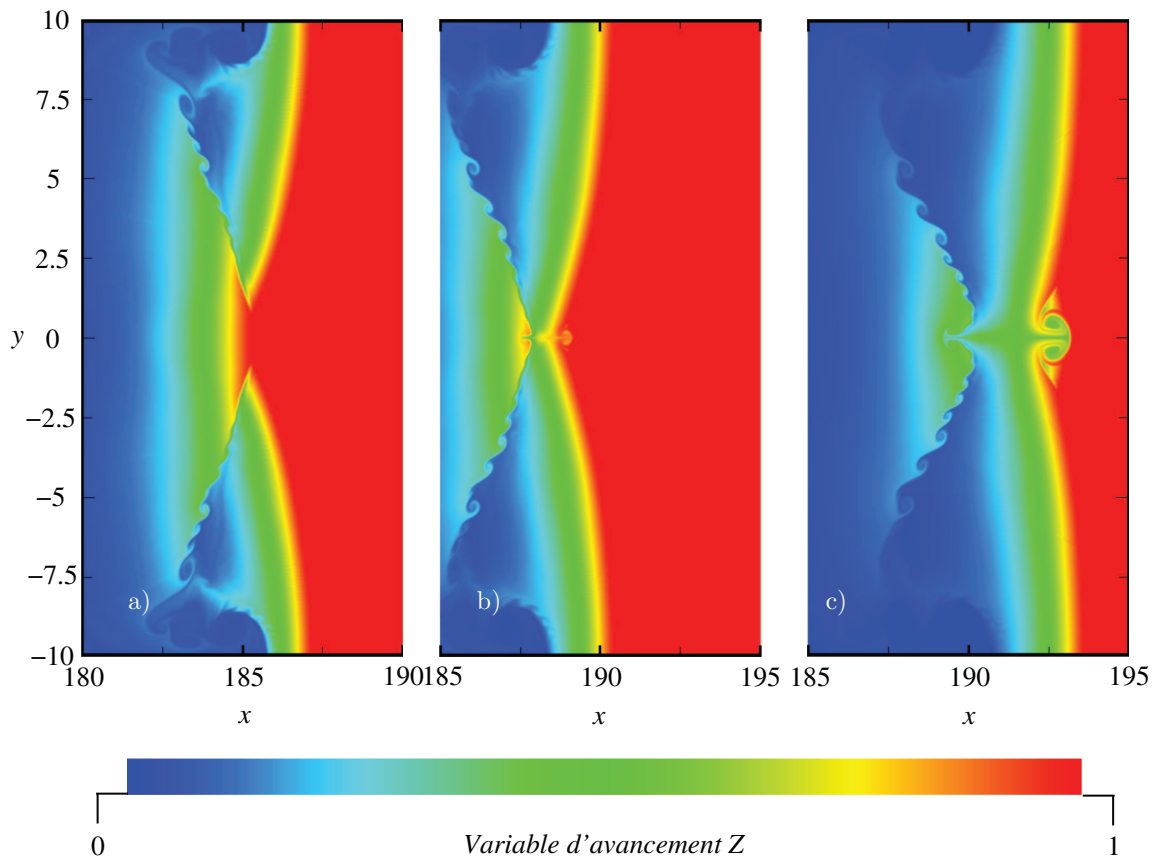


figure 4.14 – Champ de la variable d'avancement à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$.

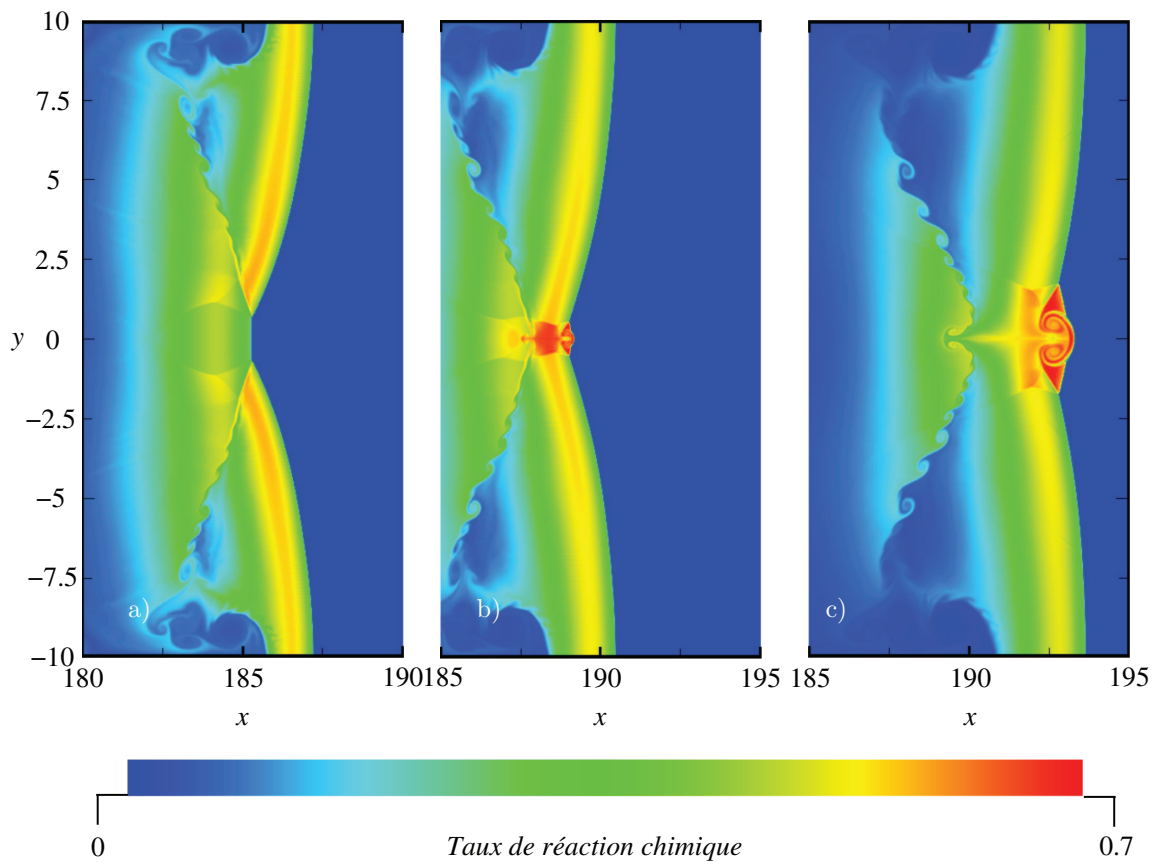


figure 4.15 – Champs du taux de réaction chimique à différents instants : a) $t = 24.5$ - b) $t = 25$ et c) $t = 25.5$.

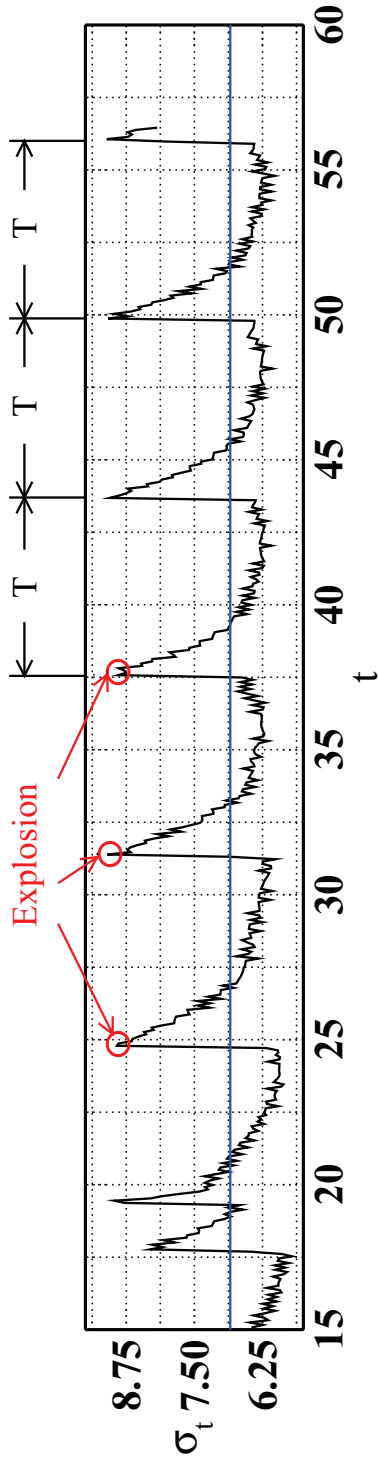


figure 4.16 – Evolution temporelle de la vitesse de l'onde au niveau de l'axe. - : vitesse moyenne.

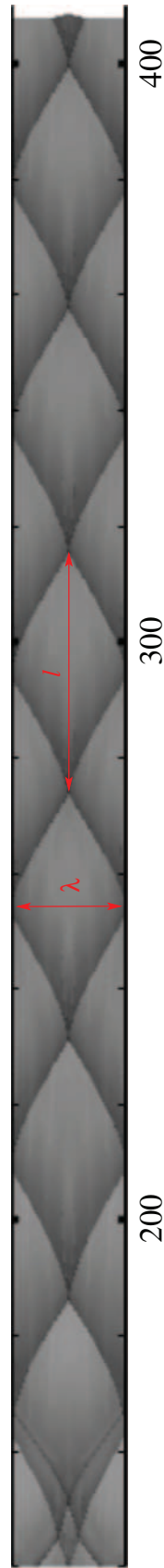


figure 4.17 – Trajectoires des points triples à $t = 57$. l : longueur moyenne d'une cellule, λ : largeur moyenne d'une cellule.

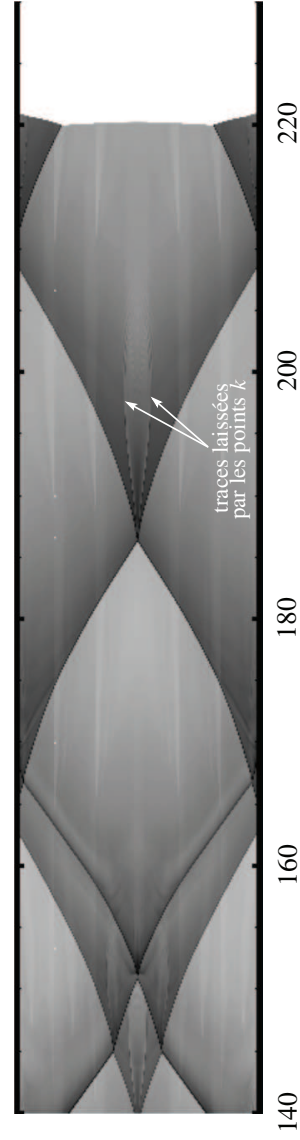


figure 4.18 – Trajectoires des points triples à $t = 29.5$.

4.4 Détonation visqueuse

Cette partie sera consacrée aux différents calculs de détonation de mélanges gazeux ayant les mêmes propriétés thermodynamiques, et de transport que ceux de propane/oxygène non-dilués, pris dans des proportions stœchiométriques.

Premièrement, les phénomènes dissipatifs seront étudiés via le modèle 1D de Zel'dovich. Une étude paramétrique en fonction de la pression amont sera faite et comparée aux résultats expérimentaux de Haloua *et al.* [41].

Ensuite, le confinement d'une onde de détonation sera étudié. Cette partie a pour but de comprendre la physique d'une onde de détonation se propageant dans des canaux à sections réduites. Les différences avec le modèle unidimensionnel seront mises en avant.

4.4.1 Détonation ZND

Une réaction chimique irréversible, impliquant 9 espèces chimiques est utilisé. Nous avons



avec

$$\left\{ \begin{array}{l} F \equiv \text{C}_3\text{H}_8 \\ O \equiv 5\text{O}_2 \\ P \equiv \left\{ \begin{array}{l} 1.047\text{CO}_2 + 1.953\text{CO} + 2.63\text{H}_2\text{O} + 1.12\text{OH} \\ +0.587\text{H}_2 + 0.86\text{O}_2 + 0.4478\text{H} + 0.487\text{O} \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Les coefficients stœchiométriques sont donnés par le logiciel Gaseq [36]. La composition chimique des produits de détonation est la même que celle à l'état d'équilibre Chapman-Jouguet [84], composé de 8 espèces chimiques majoritaires. L'état amont est maintenu à pression atmosphérique et l'énergie chimique Q_r vaut environ 150 kJ.mol^{-1} , soit une énergie réduite $Q_r/\mathcal{R}_u T_0$ de 60 pour une température initiale du mélange de $T_0 = 300 \text{ K}$. Le temps chimique est $\tau_1 = 15 \times 10^{-8}/[\text{O}_2]$.

Un tube de 3 cm de long est utilisé pour le calcul avec les conditions initiales suivantes

$$\begin{aligned} (P, T, u)_{HP} &= (10 \text{ bar}, 3000 \text{ K}, 1500 \text{ m.s}^{-1}) \\ (P, T, u)_{BP} &= (1 \text{ bar}, 300 \text{ K}, 0) \end{aligned}$$

La longueur de la section haute pression vaut 0.5 mm. La résolution spatiale du domaine de calcul est telle qu'il y a 128 points dans la zone de réaction. Le CFL est fixé à 0.4. Le capteur de choc basé sur l'augmentation relative de pression est utilisé.

La figure 4.19 a) représente le profil de pression dans le repère du choc. L'état Neumann est correctement résolu, et est en bon accord avec les résultats de Schultz et Shepherd [74]. La réaction chimique se fait principalement en aval du choc (voir figures 4.20 a et 4.20 b), et toute l'énergie chimique est libérée dans la zone de réaction. En suivant la position du choc, au cours du temps, on peut déterminer la vitesse

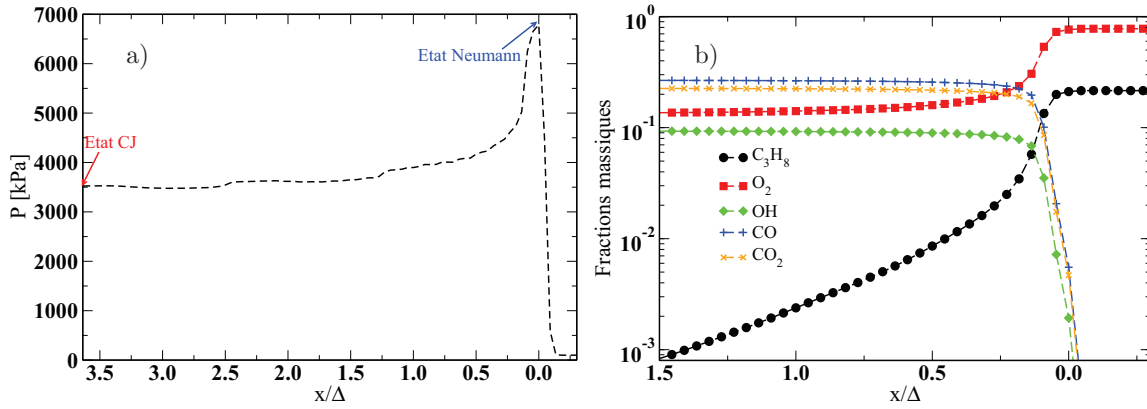


figure 4.19 – Profils de pression a) et des fractions massiques des espèces chimiques majoritaires b) dans le repère du choc.

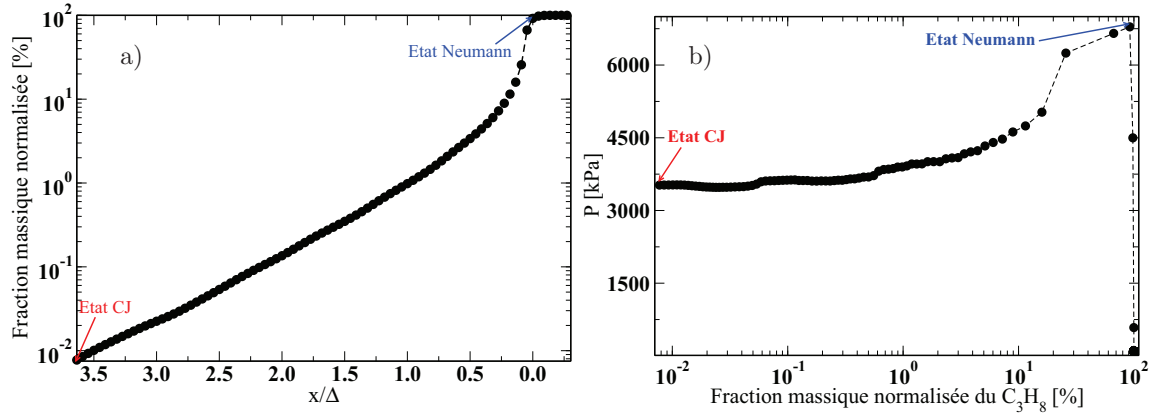


figure 4.20 – a) Distribution spatiale de la fraction massique de C_3H_8 normalisée par sa valeur initiale dans le repère du choc - b) Pression du mélange en fonction de $Y_{C_3H_8}/Y_{C_3H_8}^0$.

instantanée de l'onde de détonation et en déduire sa vitesse moyenne σ . Cette dernière vaut $2360 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, soit 1% de moins par rapport aux données de Schultz et Shepherd [74]. Ce résultat montre, entre autres, l'efficacité du censeur de choc.

On définit Δ comme la distance au choc où la fraction massique du combustible vaut 1% de sa valeur initiale. C'est dans cette région que la majeure partie de l'énergie chimique est libérée. Ici, Δ vaut $33 \mu\text{m}$. Il est à noter que Δ est différent de δ_{sub} . En effet, δ_{sub} est la distance au choc où le nombre de Mach relatif va valoir un. Ici dans le cas idéal ZND, δ_{sub} s'identifie à Δ_{ZND} épaisseur de la zone de réaction ZND, c'est-à-dire quand tout le combustible est consommé. La baisse de pression a principalement lieu dans la zone de longueur Δ . Les produits de détonation tendent ensuite vers leur état d'équilibre CJ (voir figure 4.19 b).

Le temps chimique $\tau_1 = 15 \times 10^{-8}/[O_2]$ utilisé a été calibré de sorte à ce que Δ soit proportionnelle à l'inverse de la pression initiale du mélange, en accord avec les calculs théoriques de [74]. Les ondes de détonation unidimensionnelles obtenues en

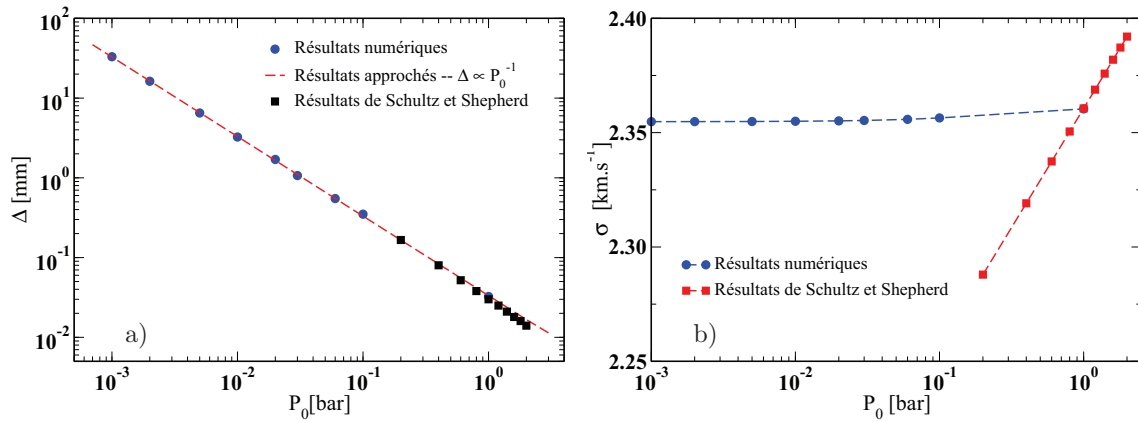


figure 4.21 – a) Epaisseur Δ en fonction de la pression initiale - b) Vitesse moyenne de détonation σ en fonction de la pression initiale.

employant ce temps chimique sont donc stables (pas d'instabilités longitudinales), car l'énergie d'activation est nulle. Lorsque la pression initiale du mélange est réduite, il convient de rallonger le tube, car la phase transitoire d'établissement de l'onde est plus longue. La figure 4.21 a) montre que Δ évolue comme l'inverse de la pression initiale, tendance similaire à Schultz et Shepherd [74] pour des mélanges stœchiométriques de propane/oxygène.

La diminution de la pression initiale n'entraîne quasiment pas de baisse de la vitesse moyenne de l'onde dans le cas non visqueux (voir courbe avec des cercles sur la figure 4.21 b) comme dans [74]. Cela pourrait provenir du mélange de produits de détonation choisi (équation 4.7). En effet, la composition à l'équilibre dépend de la pression. De plus, les niveaux de vitesse qu'observent Schultz et Shepherd, pour des pressions inférieures à 1 bar, sont plus faibles. Cela vient de l'utilisation d'une cinétique chimique détaillée durant leurs simulations, prenant en compte les phénomènes de dissociation des espèces chimiques, qui dépendent à la fois de la température et de la pression. Les résultats obtenus, durant ces calculs, peuvent être discutés sous un autre angle, en analysant le rapport entre les épaisseurs Δ et de la zone subsonique, en fonction de la pression initiale du mélange (voir tableau 4.8). On remarque que la réduction de la pression fait globalement croître ce rapport qui reste malgré tout inférieur à 1 pour l'intervalle de pression considérée.

P_0 [kPa]	100	10	6	3	2	1	0.5	0.2	0.1
Δ/δ_{sub}	0.262	0.303	0.288	0.407	0.348	0.441	0.396	0.465	0.503

tableau 4.8 – Rapport Δ/δ_{sub} en fonction de la pression initiale du mélange.

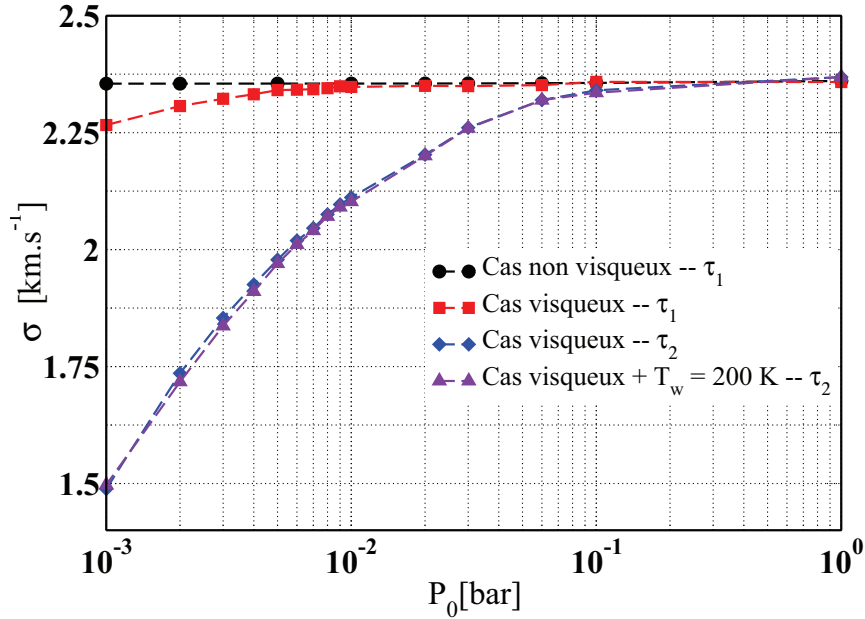


figure 4.22 – Vitesse moyenne de détonation σ en fonction de la pression initiale pour un diamètre de 38 mm.

4.4.2 Influence des effets visqueux sur une détonation unidimensionnelle

Lorsqu'une onde de détonation se propage dans un tube de taille réduite, les effets pariétaux deviennent prédominants. De par les frottements, la vitesse de l'onde diminue. Les effets pariétaux peuvent être variés via le nombre de Reynolds, soit par diminution du diamètre du tube, soit par baisse de pression initiale du mélange. Pour modéliser ce type d'écoulement en 1D, un terme source de frottement visqueux, décrit dans [62], a été ajouté aux équations d'Euler 1D. Il s'agit du modèle de Zel'dovich [95] rappelé ci-dessous

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = S \quad (4.8)$$

avec $S = [0, f_{visq}, 0, \mathcal{W}_k \dot{\omega}_k]^T$. Par la suite, nous prendrons le même mélange réactif que celui utilisé dans le cas non visqueux traité précédemment. Les effets pariétaux seront d'abord étudiés à travers la réduction de la pression initiale du mélange. Cette variation se fera dans un intervalle compris entre 100 kPa et 0.1 kPa, avec un diamètre de tube égal à 38 mm. Ensuite, une étude sur l'influence de la hauteur sera présentée, celle-ci sera variée de 0.25 mm à 0.03 mm pour un mélange de pression initiale de 3 kPa.

4.4.2.1 Effets de la réduction de la pression initiale

Sur la figure 4.21 a), les résultats obtenus avec le temps d'induction chimique τ_1 sont représentés par des symboles carrés. Ces résultats montrent que les phénomènes visqueux commencent à freiner l'onde, par rapport au cas non visqueux, pour une pression inférieure à 200 Pa. Ceci suppose que pour de fortes valeurs de pression, la propagation

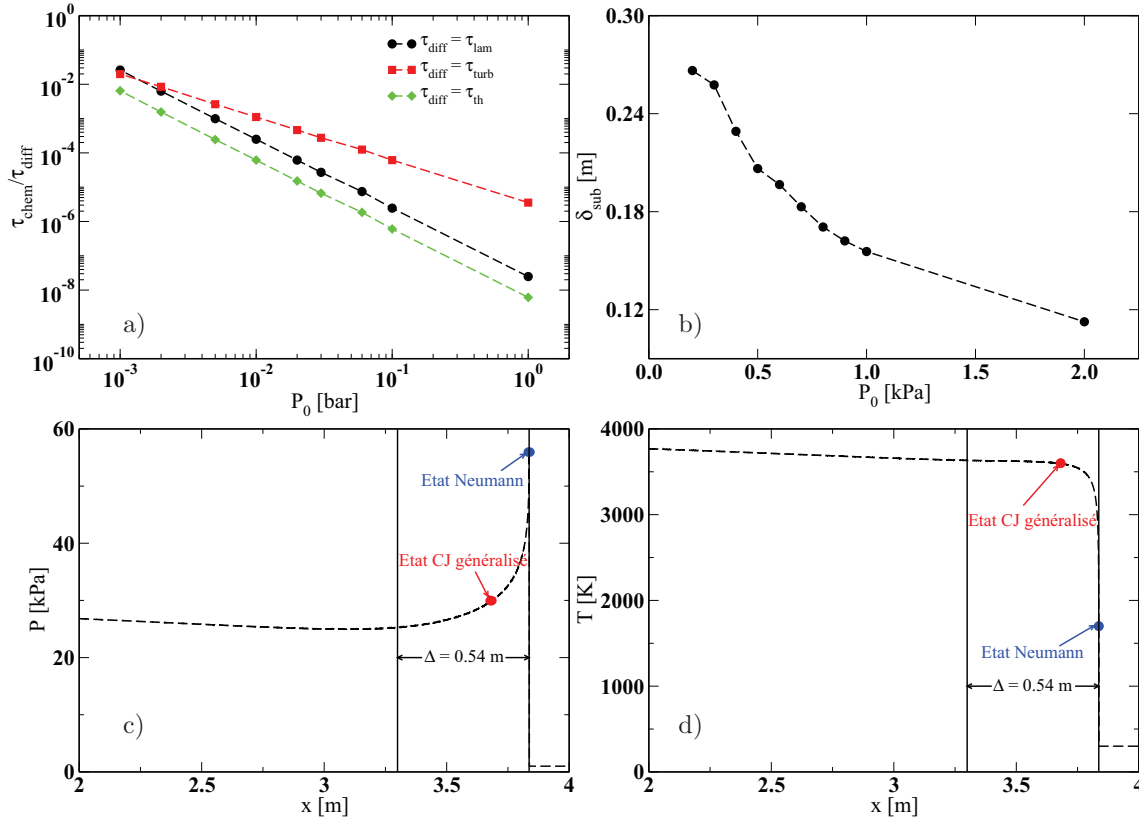


figure 4.23 – a) Rapport entre les différents temps caractéristiques avec un temps d’induction égal à τ_1 - b) Evolution de l’épaisseur de la zone subsonique en fonction de la pression initiale - c) et d), respectivement, profils de pression et de température à $t \approx 1.88$ ms, pour un mélange sous une pression initiale d’1 kPa. b), c) et d) sont obtenus avec un temps d’induction égal à τ_2 .

de l’onde sera essentiellement contrôlée par le processus chimique. En effet, l’échelle de temps associée au processus chimique peut être approchée par $\tau_{chem} = \Delta/(\sigma_{ZND} - u_{cj})$, avec u_{cj} , σ respectivement, la vitesse du fluide à l’état CJ et la vitesse du choc ZND. L’échelle de temps associée aux effets visqueux peut être déterminée à partir de l’équation de conservation de la quantité de mouvement par $\tau_{visc} = 2D/(\psi u_{cj})$. Quand la pression initiale est diminuée, le rapport entre ces deux temps caractéristiques τ_{chem}/τ_{visc} , (voir figure 4.23 a) varie de 10^{-8} à 10^{-2} , si l’écoulement est considéré laminaire (voir courbe avec des symboles ronds) et de 10^{-6} à 10^{-2} dans le cas turbulent (voir courbe avec des symboles carrés).

En multipliant τ_1 par 100 (rapport entre τ_2 et τ_1), la vitesse moyenne des ondes de détonation est réduite de façon plus importante, comme le montre la courbe représentée en symboles diamant sur la figure 4.21 b). L’ordre de grandeur du rapport entre les deux temps caractéristiques varie maintenant de 10^{-5} à 1, dans le cas d’un écoulement laminaire et de 10^{-4} à 1 dans le cas turbulent. Pour ce temps d’induction chimique τ_2 , il existe une réelle compétition entre les deux échelles temporelles. Ainsi, dans ce cas, quand les deux temps caractéristiques deviennent comparables, les frottements jouent un rôle important dans le ralentissement de la vitesse de l’onde de détonation.

En reprenant l'analyse de Zhang et Lee [98], il est possible d'examiner l'origine de la diminution de la vitesse de détonation pour une configuration donnée. Pour une pression initiale de 1 kPa (voir tableau 4.9), l'épaisseur de la zone subsonique, ainsi que la fraction massique du réactif à l'état CJ généralisé, sont toutes deux constantes au cours du temps. Cependant l'épaisseur de la zone de réaction croît au fur et à mesure que l'onde se propage. La longueur moyenne de la zone subsonique, c'est-à-dire la distance entre le front de choc et le point CJ, vaut 0.1557 m quand le pourcentage moyen de la fraction massique du réactif vaut 5.46%.

L'énergie chimique libérée derrière le point sonique est faible. Ainsi, d'après Zhang *et al.* [98], c'est la compétition entre le travail des forces de frottement et l'énergie chimique qui est responsable du déficit de vitesse. La vitesse de l'onde diminuant, la pression à l'état Neumann généralisé diminue par conséquence. Le déficit de vitesse peut donc être relié à la variation relative de la pression au pic de Neumann généralisé. D'après les droites de Rayleigh et en négligeant les variations de volumes massiques

t [ms]	1.59	1.69	1.78	1.88
δ_{sub} [m]	0.156	0.1558	0.1555	0.156
$Y_{C_3H_8}^{CJ}/Y_{C_3H_8}^0$ [%]	5.4548	5.4585	5.4627	5.447

tableau 4.9 – Longueur de la zone subsonique δ_{sub} et fraction massique normalisée du réactif à quatre instants différents, pour un mélange de pression initiale 1 kPa.

entre $1/\rho_{vn}$ et $1/\rho_{vn,ZND}$, on obtient

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_{ZND}}\right)^2 \approx \left(\frac{P_{vn}}{P_{vn,ZND}}\right) \quad (4.9)$$

Ce qui est bien vérifié dans le calcul qui suit. $P_{vn,ZND} = 69.7$ kPa et $P_{vn} = 55.7$ kPa soit : $P_{vn}/P_{vn,ZND} \approx 0.80$, $\sigma = 2113$ m.s⁻¹ et $\sigma_{ZND} = 2352$ m.s⁻¹ soit : $\sigma/\sigma_{ZND} \approx 0.81$. La différence d'énergie totale dans le repère du choc, au point Neumann entre les configurations ZND et visqueuse (la variation de masse volumique et la pression initiale ayant été négligées), peut être approchée par [98]

$$\frac{E_{vn,ZND} - E_{vn}}{E_{vn,ZND} - E^0} \approx \frac{P_{vn,ZND} - P_{vn}}{P_{vn,ZND}} \quad (4.10)$$

4.4.3 Influence des effets visqueux et thermiques sur une détonation unidimensionnelle

Il est difficile de réaliser des expériences avec des parois adiabatiques pour des tubes de faibles diamètres en raison des transferts pariétaux qui peuvent devenir importants. Ainsi, une étude avec parois isothermes a été menée. Dans ce cas, un terme source est rajouté à l'équation de conservation de l'énergie totale pour modéliser les pertes thermiques. Le vecteur terme source s'écrit : $S = [0, f_{visq}, Q_p, \mathcal{W}_k \dot{\omega}_k]^T$. Cette étude est effectuée en utilisant les mêmes paramètres de calculs que ceux de l'étude avec parois adiabatiques. La viscosité n'influençant la propagation de l'onde qu'à basses pressions

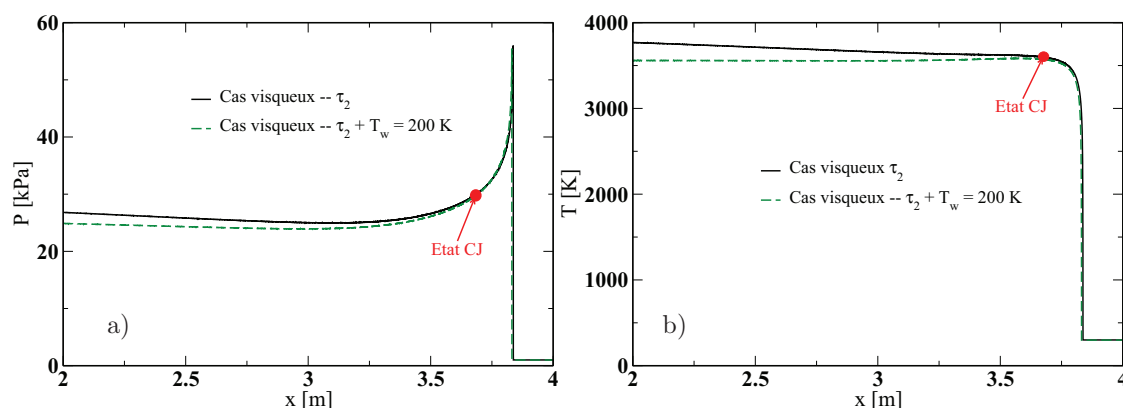


figure 4.24 – a) et b), respectivement, profils de pression et de température dans les cas visqueux avec parois adiabatiques et isothermes à $t \approx 1.88$ ms. La pression initiale du mélange est 1 kPa avec un temps d'induction τ_2 .

en employant le temps d'induction τ_1 , les calculs seront donc effectués uniquement avec le deuxième temps d'induction τ_2 . La température des parois est fixée à 200 K.

P_0 [kPa]	Parois adiabatiques			Parois isothermes		
	δ_{sub} [m]	$Y_{C_3H_8}^{CJ}$ [%]	σ [m.s $^{-1}$]	δ_{sub} [m]	$Y_{C_3H_8}^{CJ}$ [%]	σ [m.s $^{-1}$]
2	0.1126	3.02	2203.0	0.1093	3.12	2200.5
1	0.1556	5.46	2113.1	0.1532	5.46	2102.5
0.9	0.1621	6.0	2096.5	0.1549	6.34	2090.8
0.8	0.1706	6.6	2075.3	0.1622	6.99	2071.1
0.7	0.183	7.26	2045.9	0.1664	7.97	2040.5
0.6	0.1966	8.16	2019.3	0.1763	9.02	2011.0
0.5	0.2064	09.55	1978.3	0.1921	10.25	1970.4
0.4	0.2292	11.11	1925.4	0.2058	12.2	1910.4
0.3	0.2576	13.5	1853.8	0.217	15.34	1836.8
0.2	0.2664	18.74	1735.6	0.2193	21.2	1717.4

tableau 4.10 – Longueur δ_{sub} de la poche subsonique, fraction massique du propane $Y_{C_3H_8}^{CJ}$ à la fin de la zone subsonique et vitesse moyenne σ de l'onde, en fonction de la pression initiale du mélange pour les cas parois adiabatiques et isothermes.

Les résultats représentés par des triangles sur la figure 4.21 b) montrent que la vitesse moyenne des ondes varie peu, malgré la prise en compte des effets thermiques. En faisant une analyse des échelles de temps caractéristiques, similaire à celle qui a été effectuée dans le paragraphe précédent, le rapport entre les temps caractéristiques chimique et thermique $\tau_{th} = 4\lambda/(\rho c_v D^2)$ varie de 10^{-7} à 10^{-1} lorsque la pression initiale du mélange diminue. Pour des pressions initiales suffisamment élevées, cela se traduit par des champs de pression et de température proches de ceux obtenus dans le cas adiabatique, sauf au delà de la zone subsonique, c'est-à-dire en aval de l'état CJ. Ce résultat est illustré sur les figures 4.24 a) et 4.24 b) représentant, respectivement, les

distributions spatiales de pression et de température d'une onde se propageant dans un mélange de pression initiale 1 kPa. Le cas avec parois isothermes est comparé au cas avec parois adiabatiques. Dans le présent cas, nous observons une légère relaxation thermique du mélange au delà de la zone subsonique, en aval de l'état CJ. Cette relaxation n'affecte quasiment pas l'écoulement dans la zone subsonique, dont la longueur (0.1532 m) est très voisine de celle observée dans le cas avec parois adiabatiques (0.1557 m). Ceci induit une faible variation de vitesse (2102.5 m.s⁻¹ dans le cas de parois isothermes et 2113.1 m.s⁻¹ dans le cas contraire).

Pour des pressions initiales plus faibles, la longueur de la zone subsonique augmente au fur et à mesure que la pression diminue comme le présente le tableau 4.10. Elle croît moins vite que dans le cas avec parois adiabatiques. Ce tableau montre également que dans les deux cas, le pourcentage de la fraction massique du propane en fin de zone subsonique augmente quand la pression initiale du mélange diminue. Cela signifie que pour la condition isotherme, l'équilibre sonique sera atteint plus tôt. C'est ce qui explique pourquoi les vitesses sont plus importantes dans le cas adiabatique.

Résolution spatiale. Il est important de noter que la résolution spatiale est choisie en fonction de la pression initiale du mélange. En effet, différentes échelles spatiales sont associées aux phénomènes mis en jeu dans ces écoulements. Il convient donc de connaître ces longueurs caractéristiques afin d'adapter le maillage à chaque cas de calcul. Il s'agit de l'épaisseur Δ dans le cas non visqueux, et des longueurs d'interactions visqueuses laminaire et turbulent δ_{lam} et δ_{turb} , respectivement. La dernière longueur caractéristique est la longueur thermique δ_{th} . L'épaisseur Δ du cas non visqueux étant proportionnelle à l'inverse de la pression initiale du mélange selon la figure 4.21 a), il est possible d'écrire

$$P_0 \Delta = P_{ref} \Delta_{ref}$$

avec P_0 , P_{ref} et Δ_{ref} , respectivement, la pression initiale du mélange, la pression initiale de référence du mélange et l'épaisseur de la zone de réaction de référence. Arbitrairement, $P_{ref} = 1$ bar et $\Delta_{ref} = 33 \mu\text{m}$. La longueur caractéristique, associée aux effets visqueux est obtenue, à partir de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Dans le cas d'un écoulement laminaire derrière le choc, cette échelle spatiale δ_{lam} s'écrit

$$\delta_{lam} = \frac{D}{32} Re_D = \frac{\rho u D^2}{32 \mu}$$

Dans le cas turbulent, la longueur caractéristique, notée δ_{turb} , s'écrit

$$\delta_{turb} = 6.33 D Re_D^{1/4} = 6.33 \left(\frac{\rho u D^5}{\mu} \right)^{1/4}$$

L'échelle spatiale thermique δ_{th} , quant à elle, est obtenue à partir de l'équation de conservation de l'énergie totale. Elle s'écrit

$$\delta_{th} = \frac{\rho c_v D^2 u}{4 \lambda}$$

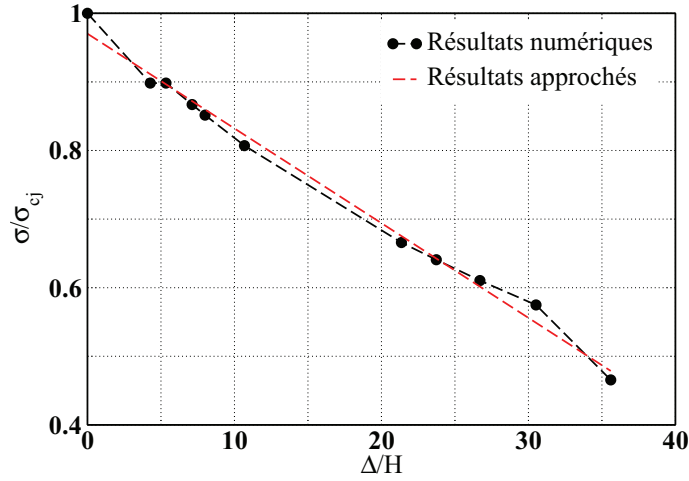


figure 4.25 – Vitesse moyenne de détonation σ en fonction de l'inverse de la hauteur, pour une pression initiale de 3 kPa.

Toutes ces échelles sont calculées en fin de zone de réaction. Les rapports entre l'épaisseur de la zone de réaction et les échelles spatiales des phénomènes diffusifs s'écrivent donc

$$\frac{\Delta}{\delta_{lam}} = \frac{32\mu P_{ref}\Delta_{ref}}{\rho u D^2 P_0}, \quad \frac{\Delta}{\delta_{turb}} = \frac{P_{ref}\Delta_{ref}}{6.33P_0} \left(\frac{\mu}{\rho u D^5} \right)^{1/4}, \quad \frac{\Delta}{\delta_{th}} = \frac{4\mu P_{ref}\Delta_{ref}\lambda}{\rho c_v u D^2 P_0}$$

La comparaison de ces différentes longueurs caractéristiques nous permet de définir le critère le plus discriminant et d'adapter en conséquence la résolution spatiale des calculs. De façon générale, on a entre 30 et 100 points pour décrire la plus petite de ces longueurs.

Les résultats 1D ont montré que les vitesses moyennes de détonation obtenues sont plus élevées que celles relevées par Haloua *et al.* [41], pour la même configuration. Ces résultats s'expliquent par le fait que l'expérience présente une structure de détonation multidimensionnelle qui ne peut être reproduite par un modèle 1D, où les réactions chimiques ont lieu de façon uniforme dans chaque section du tube. Pour mieux appréhender ces phénomènes, des calculs 2D seront présentés par la suite et comparés à l'approche unidimensionnelle.

4.4.3.1 Effet de réduction d'échelle

Le modèle de Zel'dovich, présenté plus haut, a été utilisé. Rappelons que le coefficient de frottement visqueux ψ , dans le cas d'un canal 1D, s'écrit $12/Re_H$ pour un écoulement laminaire. Le terme source chimique employé est τ_1 .

La figure 4.25 représente la vitesse moyenne σ de l'onde de détonation, normalisée par la vitesse CJ, en fonction de l'inverse de la hauteur réduite du canal. La vitesse décroît en $1/H$. Ces résultats peuvent être approchés par l'expression $0.96 - 0.013\Delta/H$. Les vitesses de détonation enregistrées sont plus faibles que dans le cas avec réduction de pression. En effet, l'échelle de temps visqueux $\tau_{visc} = 2H/(\psi u_{CJ})$ diminue au fur

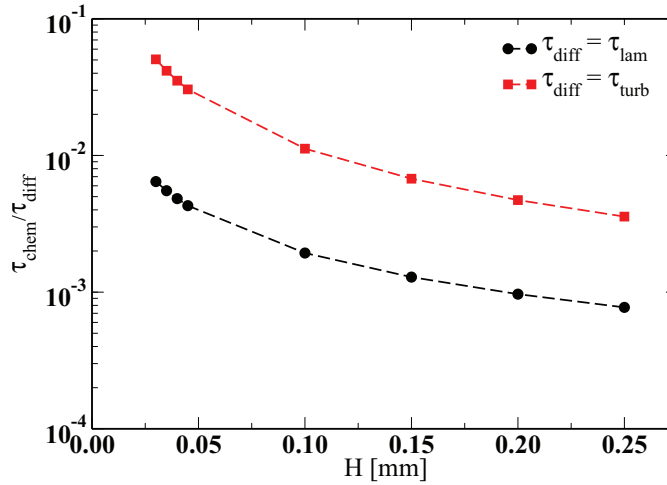


figure 4.26 – Rapports des différents temps caractéristiques pour un temps d’induction égal à τ_1 et pour différentes hauteurs, sous une pression initiale de 3 kPa.

et à mesure que la hauteur est réduite, tandis que celle liée au processus chimique $\tau_{chem} = \Delta / (\sigma_{ZND} - u_{cj})$ reste constante car ne dépendant pas de la taille du domaine. La figure 4.26 montre le rapport entre ces deux échelles temporelles. Ce rapport varie entre $\sim 10^{-3}$ et $\sim 10^{-2}$ dans le cas laminaire et entre $\sim 2 \times 10^{-3}$ et $\sim 5 \times 10^{-2}$ dans le cas turbulent, soit des ordres de grandeurs respectivement $\sim 10^5$ à 1 fois plus grands dans le cas laminaire et 10^3 à 10 fois plus élevés dans le cas turbulent lorsque la pression est variée. La baisse de la vitesse moyenne du cas avec variation de la hauteur par rapport au cas avec variation de pression viendrait donc des effets visqueux, qui sont plus accentués avec la diminution de la hauteur.

4.4.4 Ondes de détonation dans des canaux de faible hauteur

Cette section est dédiée à l’étude de la propagation des ondes détonation entre deux plaques planes parallèles. Il s’agit plus particulièrement d’analyser le comportement des ondes et leurs structures lorsque les effets pariétaux deviennent importants, dus notamment à une réduction d’échelle. Après passage de l’onde de choc, le fluide en aval de ce dernier est choqué et se met rapidement en mouvement. De part les conditions aux limites d’adhérence, une couche limite vient se développer et modifie complètement la structure du front de détonation.

Tout d’abord, le dimensionnement du canal est décrit par la suite. Ensuite, les différentes structures du front de détonation adossé à la zone de réaction, ainsi que la couche limite seront décrites. Finalement, l’influence de la hauteur du canal sur la structure de la détonation sera étudiée.

4.4.4.1 Dimensionnement du canal

On se place dans le cas d’un canal de faible hauteur. Ainsi, la longueur du canal doit être adaptée de façon à ce que la couche limite qui s’y développe reste laminaire.

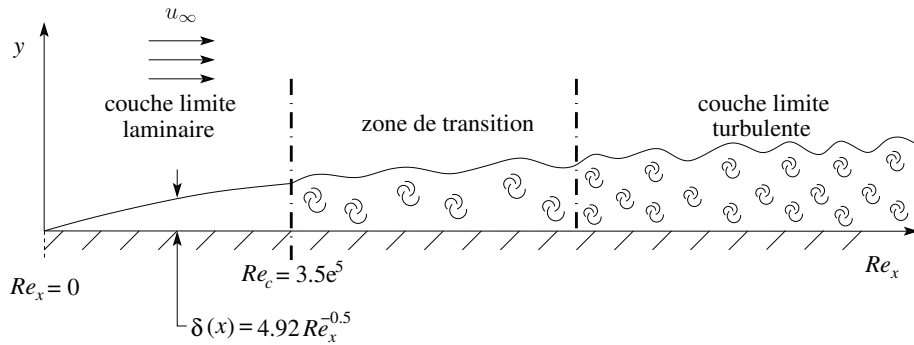


figure 4.27 – Couche limite se développant sur une plaque plane.

P_0 [kPa]	δ_c [mm]	x_c [mm]
100	0.116	12.82
10	1.178	130.4
6	2.028	224.5
3	3.933	435.1

tableau 4.11 – Estimation de l'épaisseur δ_c de la couche limite et de x_c à la fin du régime laminaire.

Considérons le cas d'une couche limite laminaire se développant sur une plaque plane, son épaisseur évolue comme

$$\frac{\delta(x)}{x} = \frac{4.92}{\sqrt{Re_x}} \quad \text{avec} \quad Re_x = \frac{\rho_\infty u_\infty x}{\mu_\infty}$$

où x est la position relative par rapport au choc. u_∞ est la vitesse relative CJ issue d'un calcul ZND et sera considérée comme la vitesse à l'infini.

La condition pour qu'une couche limite se développant sur une plaque plane (figure 4.27) reste laminaire est que le nombre de Reynolds Re_x soit inférieur à $Re_c = 3.5 \times 10^5$. On peut alors connaître la distance x_c à partir de laquelle la couche limite transite à la turbulence. On calcule ainsi l'épaisseur δ_c

$$\delta_c = \frac{4.92 x_c}{\sqrt{Re_c}}$$

La connaissance des longueurs x_c et de δ_c permet de pouvoir estimer les dimensions du canal. On peut ainsi fixer la longueur L du canal égale ou légèrement inférieure à x_c . Lorsque l'on souhaite modéliser un écoulement confiné, la hauteur H du canal doit être du même ordre de grandeur que δ_c . Ces quantités vont varier selon les conditions initiales thermodynamiques du mélange. Le tableau 4.11 propose une tendance des estimations de ces quantités pour des pressions initiales données. Cependant, calibrer un tube en utilisant cette méthode suppose que l'état infini est homogène et constant. Cette condition n'est pas totalement vraie dans le cas d'une détonation. En effet, comme schématisé sur la figure 4.28, la couche limite se développant derrière le front de choc d'une onde de détonation ne voit pas un profil uniforme de vitesse à l'infini.

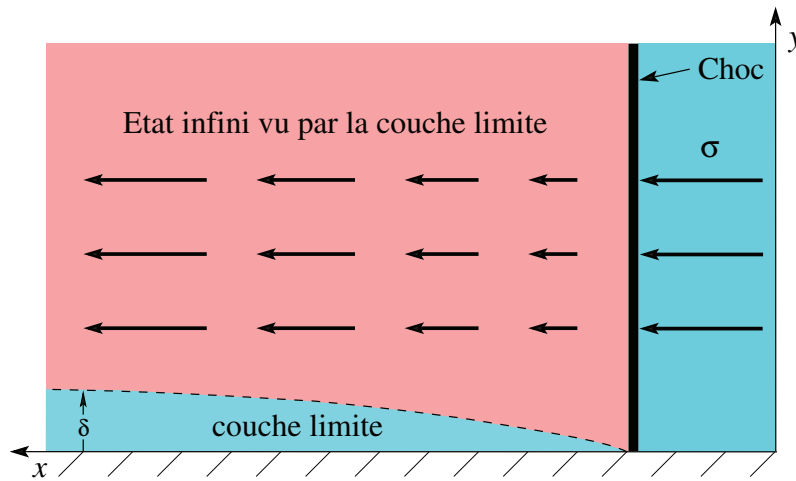


figure 4.28 – Etat infini vu par une couche limite se développant en aval d'un front de détonation. δ représente l'épaisseur de la couche limite et σ la vitesse moyenne de l'onde.

Ainsi, son évolution ne sera a priori pas la même que dans le cas d'un état infini uniforme. Entre l'état Neumann et l'état CJ, la couche limite aura tendance à s'épaissir beaucoup plus rapidement que dans le cas où l'état CJ est considéré comme l'état infini. Ce qui veut dire que la transition vers la turbulence pourrait avoir lieu beaucoup plus tôt. Pour éviter de se retrouver dans ce cas de figure, il convient de prévoir une longueur de domaine beaucoup plus courte. Cependant, cela permet d'avoir une idée de l'ordre de grandeur des dimensions du canal à utiliser pour la modélisation.

Un autre critère est de se baser sur l'épaisseur de la zone où la majeure partie de l'énergie est libérée Δ . Pour une pression initiale de 3 kPa, Δ vaut 1.068 mm. Dans ce cas, la hauteur du tube doit être du même ordre de grandeur que Δ . La longueur du canal, quant à elle, peut être fixée de façon arbitraire, à condition qu'elle soit inférieure à x_c et que la résolution spatiale reste suffisamment fine.

Pour la suite des calculs, le mélange considéré est supposé être à une pression initiale de 3 kPa. Sous ces conditions, la couche limite se développant derrière le choc est relativement épaisse (de l'ordre du millimètre), elle sera plus facile à résoudre que celle se développant dans des conditions atmosphériques.

4.4.4.2 Parois adiabatiques

La longueur L du canal correspond à 74Δ soit 79 mm. La hauteur H correspond à $\Delta/8$. Le mélange réactif utilisé est le même que celui dans l'étude unidimensionnelle avec un temps d'induction chimique $\tau_1 = 15 \times 10^{-8}/[\text{O}_2]$. Les parois sont supposées adiabatiques.

À l'état initial, un profil ZND est appliqué sur toute la hauteur du canal (voir figure 4.8). Après une phase transitoire, la vitesse du front de détonation se stabilise vers une valeur moyenne stationnaire. Pour des raisons de symétrie, seule une moitié du canal est résolue.

Dans un premier temps, une étude sur la convergence du maillage a été effectuée.

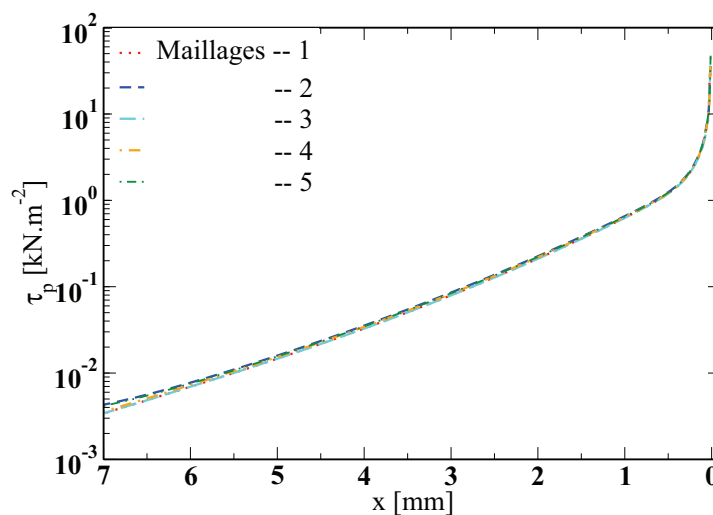


figure 4.29 – Test de convergence par rapport au maillage. Contrainte pariétale τ_p dans le repère du choc.

Cela nous permet de déterminer la résolution nécessaire afin de capturer le développement de la couche limite. Au total, cinq maillages, répertoriés dans le tableau 4.12, ont été utilisés.

Maillages	N_x	\times	N_y
1	9472	\times	25
2	9472	\times	50
3	18944	\times	25
4	18944	\times	40
5	18944	\times	50

tableau 4.12 – Différents maillages testés.

La figure 4.29 représente la contrainte pariétale $\tau_p = (\mu \partial u / \partial y)_p$ en fonction de la distance par rapport au choc et la figure 4.30, quant à elle, représente le rapport δ/x en fonction de Re_x .

On peut remarquer que le rapport δ/x a atteint son état de convergence pour les maillages employés. Par contre, la contrainte pariétale convergera pour un maillage tel que $N_y > 40$. On peut aussi remarquer qu'au voisinage du choc, cette contrainte pariétale atteint des valeurs proches de 100 kPa qui sont du même ordre de grandeur que la pression du choc.

Pour ces calculs, c'est la CFL visqueuse qui devient de plus en plus discriminante. Ainsi, pour le maillage le plus grossier, le pas de temps du calcul est de l'ordre de 10^{-10} s. Pour le maillage le plus fin (cas doublé dans les deux directions), le pas de temps voit sa valeur réduite jusqu'à 10^{-12} s.

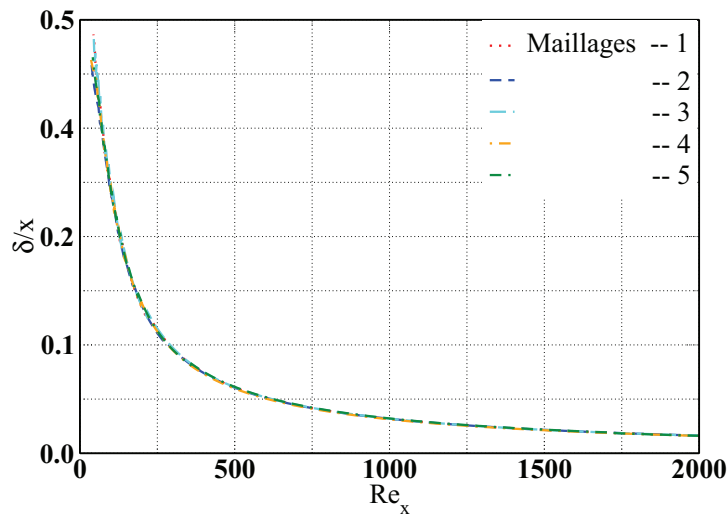


figure 4.30 – Test de convergence par rapport au maillage. Rapport δ/x en fonction du nombre de Reynolds Re_x .

- Structure de l'écoulement

La figure 4.31 représente l'évolution temporelle de la vitesse de l'onde de détonation. On peut observer une phase transitoire où la vitesse de détonation, initialement à 2.2 km.s^{-1} , chute pour atteindre une vitesse inférieure ou égale à 1.75 km.s^{-1} . Au final, l'onde se stabilise à cette vitesse après avoir subi un déficit de 22% par rapport à son état initial.

Il est à noter que la vitesse de détonation peut être obtenue soit de façon directe (comme indiqué en annexe E), soit en dérivant la position axiale du choc en fonction du temps.

En effet, les forces de frottement, issues du développement de la couche limite après passage du choc, ralentissent l'onde de détonation. Sur la figure 4.32, a été tracée pour différents instants, l'ordonnée réduite $y/(0.5H)$ pour laquelle le nombre de Mach relatif est égal à 1, en fonction de la distance réduite x/Δ par rapport à la position du front de détonation. Les courbes sur cette figure déterminent le contour de la poche subsonique, dans le repère du choc, à plusieurs instants. On peut remarquer que sa forme et ses dimensions ne varient pas au cours du temps. Nous pouvons ainsi constater le caractère auto-similaire du front de détonation, ce qui nous permet de travailler sur les valeurs moyennes pour la poursuite de la description de l'écoulement.

La figure 4.33 représente le champ moyen de la vitesse longitudinale, exprimé dans le repère du choc. Une représentation en vecteurs-vitesses est faite pour différentes sections du canal. A travers le choc, le gaz est ralenti et l'écoulement passe du supersonique au subsonique. L'énergie d'activation étant nulle, la libération d'énergie se fait de manière continue en aval du choc. Cela entraîne l'expansion des gaz et leur accélération.

Dans le repère du choc, les conditions d'adhérence à la paroi imposent que la vitesse pariétale est égale à la vitesse du front. Ainsi, proche des parois, l'écoulement est supersonique alors qu'il reste subsonique au cœur du canal. La transition entre ces

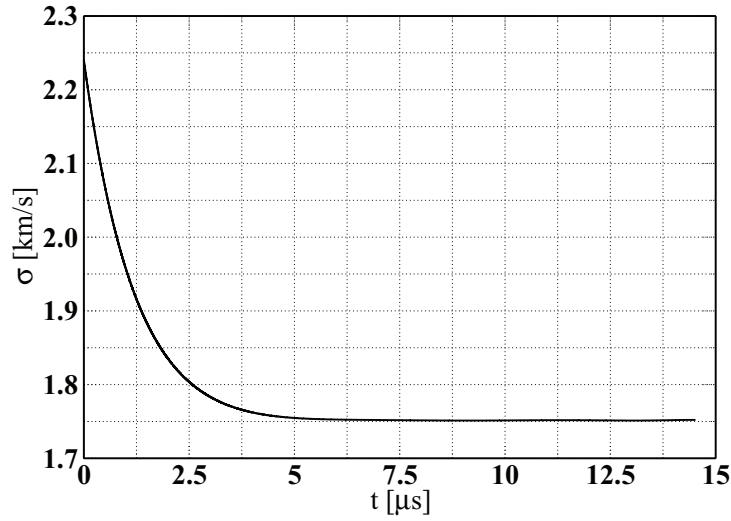


figure 4.31 – Evolution temporelle de la vitesse du front de détonation.

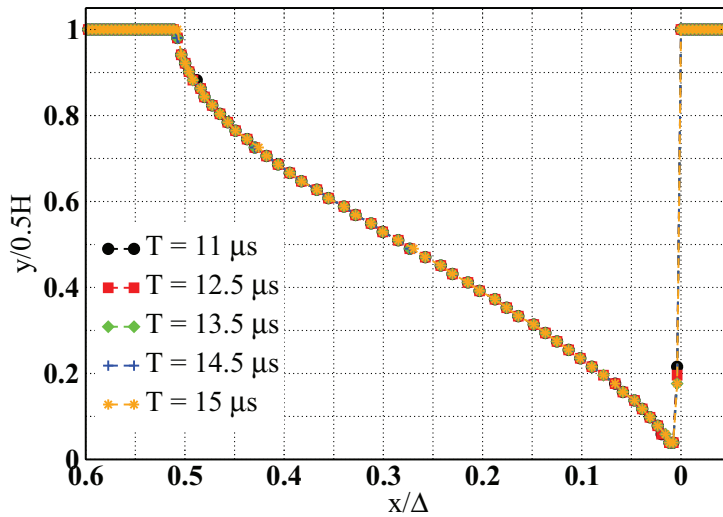


figure 4.32 – Contour de la ligne sonique à cinq instants différents.

deux régimes d'écoulement se fait au travers de la ligne sonique représentée par une ligne blanche sur la figure 4.33. Ainsi, en se plaçant dans le repère du choc, on peut considérer que l'écoulement est accéléré non seulement par la libération d'énergie mais également par les transferts de quantité de mouvement visqueux provenant des parois.

La poche subsonique s'appuie sur le front de détonation qui est quasiment plan. Le bord supérieur est situé à l'intersection entre le pied du choc et le début de la couche limite. Ce point apparaît comme singulier du fait du passage brusque entre les écoulements subsonique et supersonique.

Les figures 4.34-4.38 représentent, respectivement, les champs de pression, de masse volumique, de température, de la fraction massique du combustible F adimensionnée par sa fraction massique initiale et du gradient de cette fraction massique adimen-

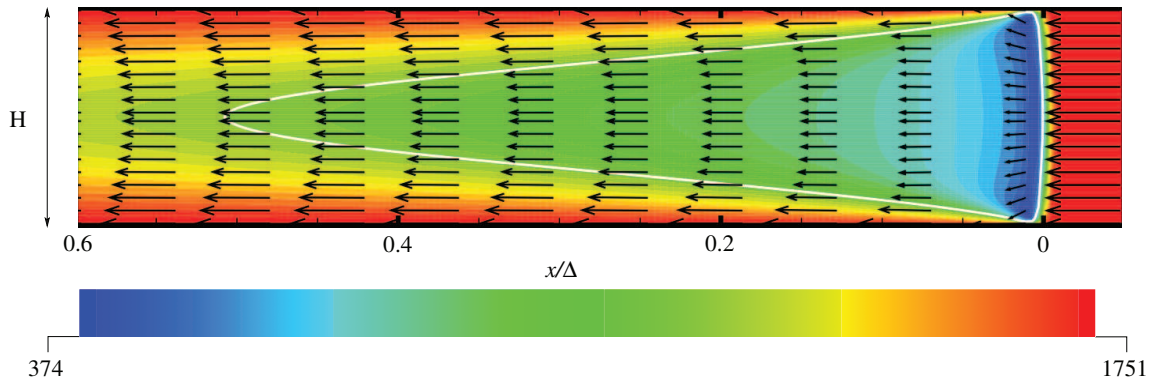


figure 4.33 – Champ moyen de la vitesse longitudinale relative au choc [m.s^{-1}]. Avec la ligne sonique représentée en blanc.

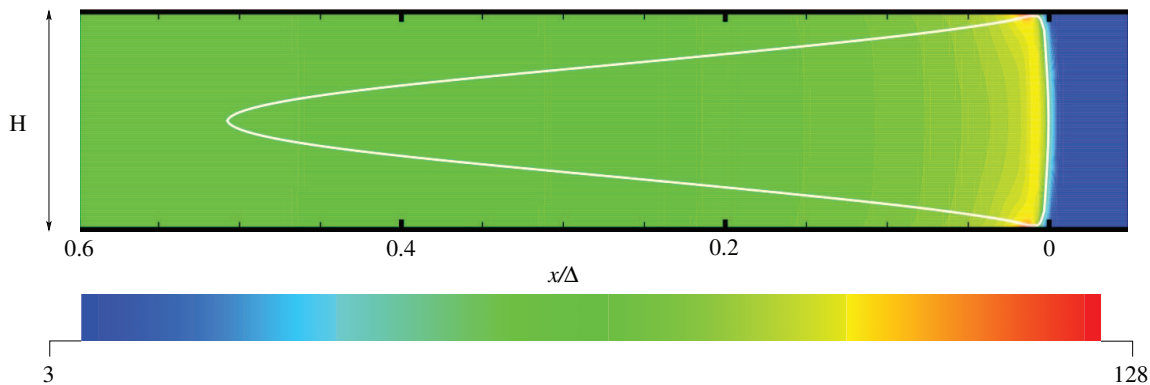


figure 4.34 – Champ de pression [kPa].

sionnée. La pression est quasiment uniforme dans chaque section de l'écoulement. Elle décroît globalement à partir du choc et semble suivre les variations du cœur de l'écoulement. Une partie de l'énergie chimique est libérée en dehors de la zone subsonique (voir figures 4.37 et 4.38). La concavité des isovaleurs du réactif est dans le sens opposé à celui des iso-vitesses. Pour une même section, le temps de séjour d'une particule fluide est plus important sur l'axe qu'au niveau des parois. La consommation de F y sera donc plus importante.

Sur la figure 4.39, les profils longitudinaux du combustible pour différentes ordonnées, pour une abscisse comprise entre le choc et la ligne sonique, ont été reportés. Plus on s'éloigne de l'axe, plus la part d'imbrûlée, sur la ligne sonique, augmente. En effet, la distance entre le choc et la ligne sonique diminue. L'équilibre sonique est atteint plus rapidement. Le processus de combustion continue à s'effectuer dans la zone supersonique, élevant par voie de conséquence la température du fluide (voir figure 4.36).

Les isothermes ont une concavité différente de celle des isovaleurs de la fraction massique de combustible. La température est ainsi plus élevée aux parois par rapport à l'axe. Car l'élévation de température sera plus importante dans une zone supersonique que dans une zone subsonique pour un même temps de séjour, soit pour une même

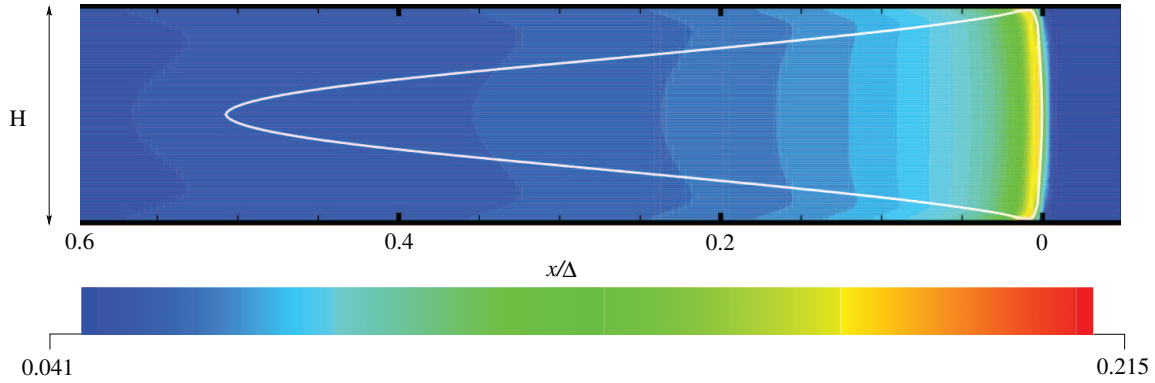


figure 4.35 – Champ de masse volumique [kg m^{-3}].

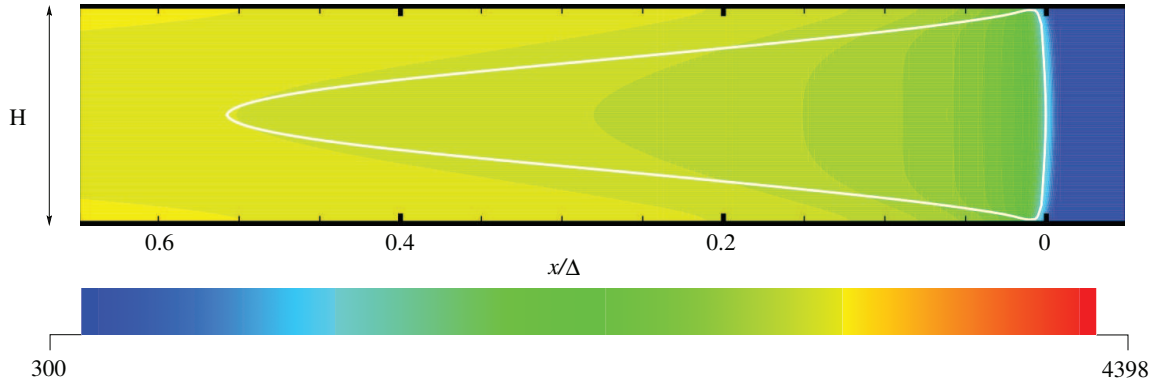


figure 4.36 – Champ de température [K].

concentration de combustible. En effet, dans un écoulement unidimensionnel stationnaire, avec une chimie irréversible à une étape, on peut obtenir la relation suivante

$$u \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\Delta h^0}{\mathcal{R}} \frac{1 - \gamma M_r^2}{1 - M_r^2} \dot{Y}_{produits} \quad \text{soit} \quad u \frac{\partial T}{\partial x} \propto \frac{1 - \gamma M_r^2}{1 - M_r^2} \dot{Y}_{produits} \quad (4.11)$$

Sur les figures 4.34 et 4.35, on peut constater que la pression et la masse volumique sont maximales au niveau de l'intersection du pied de choc et du début de développement de la poche sonique. C'est également le lieu où le rotationnel de la vitesse $\Omega_z = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}$ est maximal (voir figure 4.40). En effet, la norme de la dérivée de la vitesse longitudinale par rapport à l'ordonnée, évaluée à la paroi, croît fortement au fur et à mesure que l'on se rapproche du point d'intersection, lieu de transition entre un écoulement supersonique à la paroi et un écoulement sonique. La vorticit  est presque nulle dans la zone subsonique.

Dans ce cas, la lib ration d' nergie entra ne une l g re d viation des lignes de courant vers l'axe (Bdzil [5], Gamezo et Oran [34]). En effet, dans cette zone proche de l'axe, le front de d tonation est quasiment plan, avec une l g re courbure du choc. En aval imm diat de ce dernier, les lignes de courant sont d vi es vers la paroi, tandis que la r action chimique exothermique d vie les lignes de courant vers l'axe. A partir

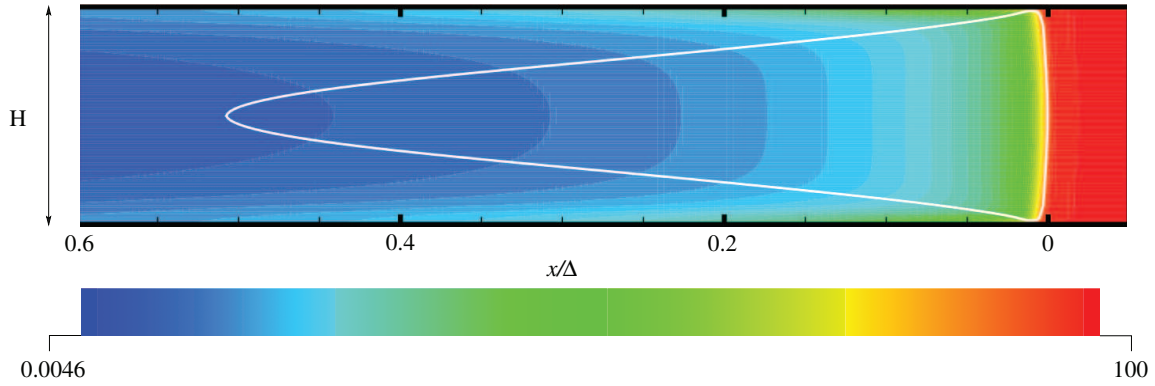


figure 4.37 – Champ de fraction massique adimensionnée [%].

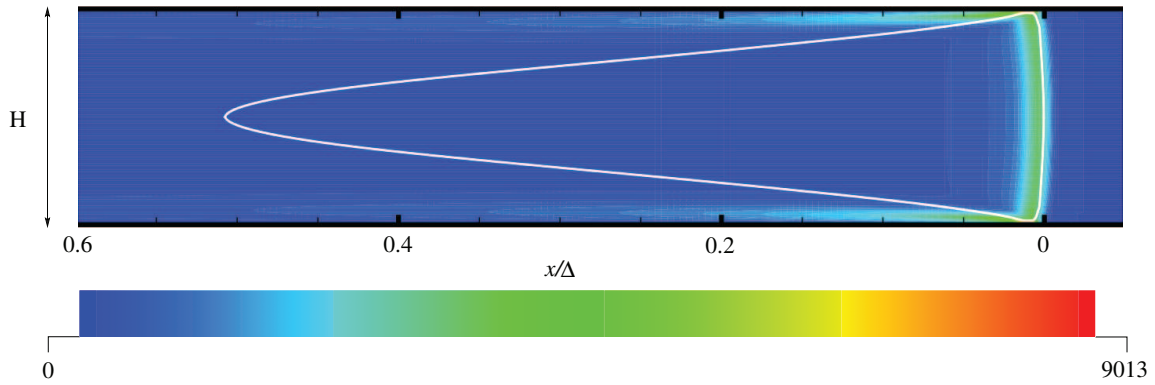


figure 4.38 – Champ du gradient de $Y_{C_3H_8}/Y_{C_3H_8}^0$ [m^{-1}].

des équations d'Euler réactive, il est possible de d'obtenir une relation permettant de connaître la variation de la tangente de l'angle de déviation, en fonction des conditions de l'écoulement. Celle-ci s'écrit, dans le repère de la figure 4.41, comme [5]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) \propto \frac{u_2 (\gamma - 1) q}{u^2 u_1^2 - c^2} \dot{r} \quad (4.12)$$

où \dot{r} est le taux de production chimique de la fraction massique des produits de détonation et q l'énergie chimique massique. u_1 et u_2 étant les composantes de la vitesse du fluide dans le repère curviligne associé à l'onde (voir figure 4.41).

Comme la courbure du choc est faible, les effets de la réactivité du mélange sont plus importants. Ainsi, bien que le choc soit légèrement courbe, le gradient longitudinal de pression dans la zone de réaction est plus important que celui dans la direction parallèle au choc.

Les traits blancs de la figure 4.42 a) représentent le lieu où v/u est nulle. Ce rapport est la tangente de l'angle que fait la ligne de courant avec l'horizontale. On distingue sur cette figure que les lignes de courant sont bien déviées vers l'axe.

Les traits verts sur la figure 4.42 b) représentent le lieu où $\partial(v/u)/\partial x$ est nulle. La variation de la tangente de l'angle de déviation ne s'annule pas sur toute la ligne sonique (voir figure 4.42 b). En effet, dans notre cas, les effets visqueux ont tendance

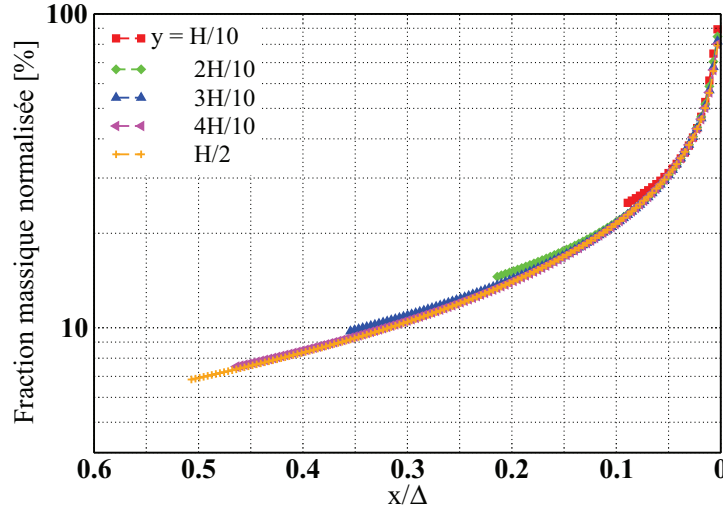


figure 4.39 – Profil axial de $Y_{C_3H_8}/Y_{C_3H_8}^0$ pour différentes ordonnées, pour une abscisse comprise entre le choc et la ligne sonique.

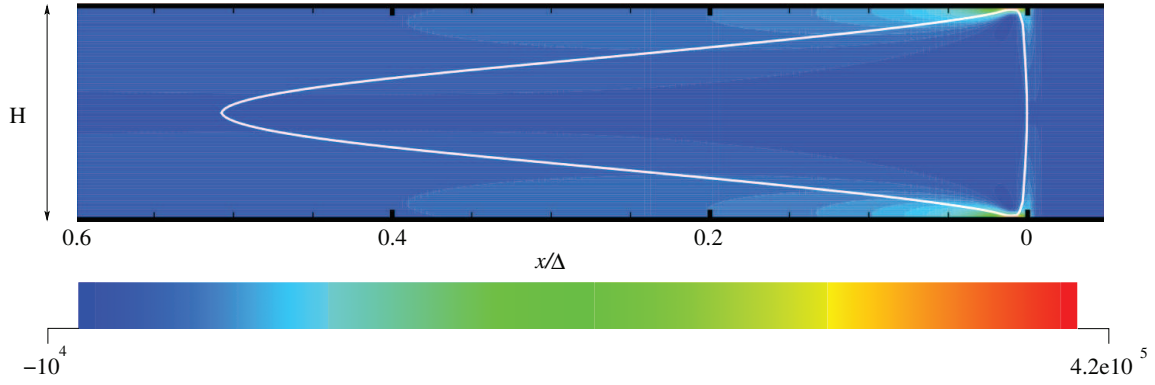


figure 4.40 – Champ du rotationnel [$m s^{-2}$].

à accélérer l'alignement des lignes de courant avec l'axe et la paroi.

La zone à forte vorticit  est induite par la singularit  li e   l'intersection du pied de choc avec le d but de la poche subsonique. Les traits noirs sur la figure 4.43 montrent les deux familles de caract ristiques dans la partie supersonique.

En chaque point de l'espace, passent deux familles de caract ristiques C^+ et C^- , correspondant respectivement   $\alpha_M > 0$ et $\alpha_M < 0$. $\alpha_M = \pm \arcsin(1/M_r)$ est l'angle de Mach fait par les lignes de courant et les caract ristiques. M_r est le nombre de Mach local bas  sur la vitesse relative au choc. C^+ et C^- ont  t  construites en tra ant les lignes de courant ( quation (4.13)) des vecteurs-vitesse ayant subi une rotation d'angles $\pm\alpha_M$.

$$\|\vec{u}\| \begin{pmatrix} \cos(\beta \pm \alpha_M) \\ \sin(\beta \pm \alpha_M) \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

$\|\vec{u}\|$ est la norme du vecteur vitesse et $\beta = \arccos((u - \sigma)/\|\vec{u}\|)$ est l'angle que fait

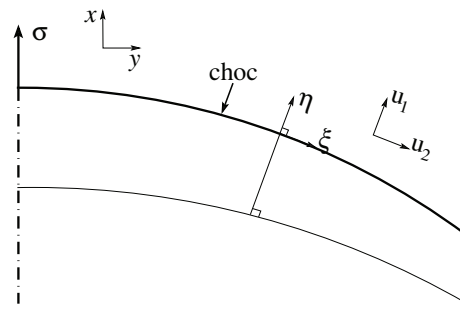


figure 4.41 – (η, ξ) repère curviligne associé à une onde de détonation courbe [5].

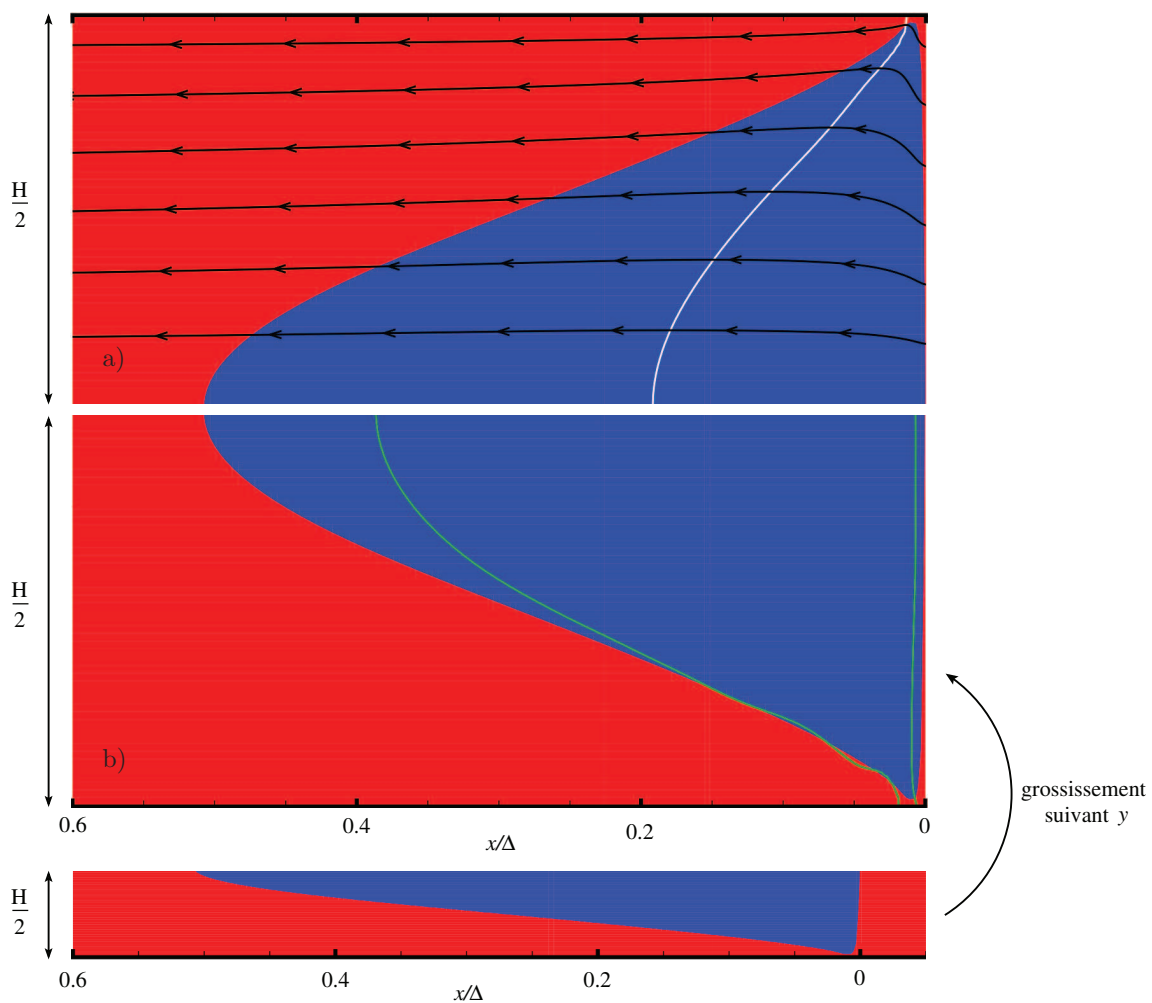


figure 4.42 – a) $v/u = 0$ est représenté par des traits blancs, les traits noirs représentent les lignes de courant - b) $\partial(v/u)/\partial x = 0$ (traits verts).

la vitesse avec l'horizontale (voir figure 4.44). On peut constater que les lignes caractéristiques C^+ sont tangentes à la poche subsonique. L'influence des effets pariétaux se fait principalement à travers les caractéristiques C^- . Les lignes de courant ne sont

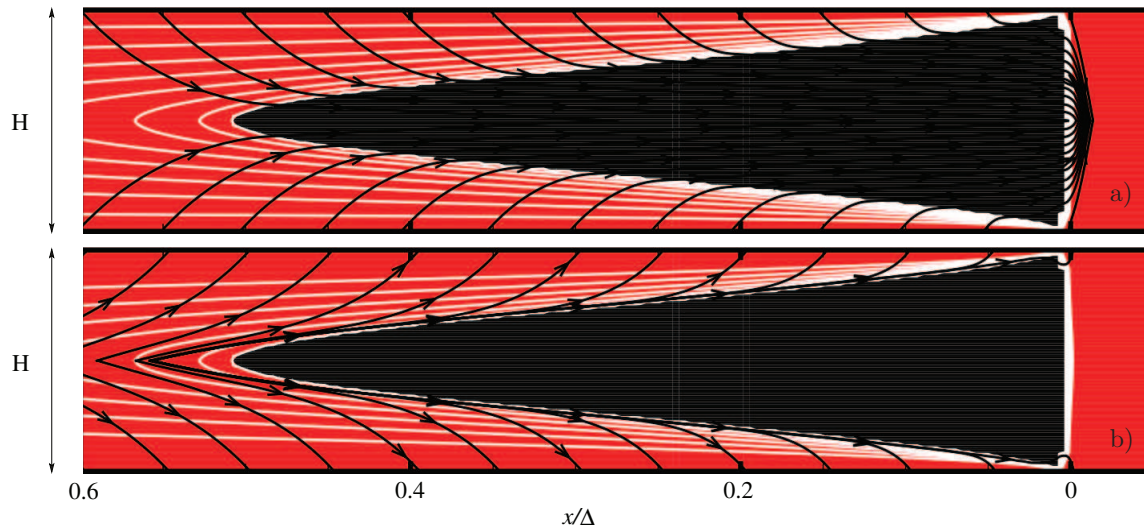


figure 4.43 – Réseau des lignes caractéristiques. a) C^- - b) C^+ . Les traits blancs représentent des Iso-Mach.

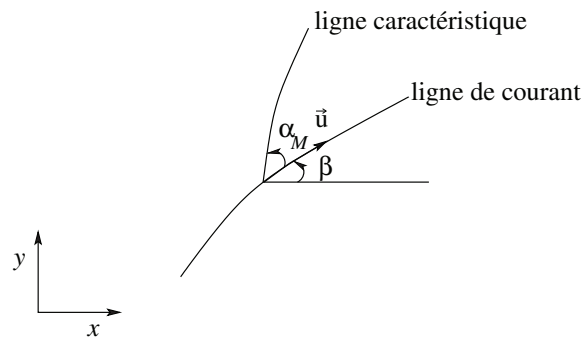


figure 4.44 – Représentation d'une ligne caractéristique et d'une ligne de courant.

pas perpendiculaires aux lignes caractéristiques, indiquant une singularité, présente également dans [34]. Ces caractéristiques véhiculent les informations transmises par le confinement, c'est-à-dire des parois vers la poche subsonique. Ainsi, l'éventail des lignes représentées en trait blanc sur la figure 4.43, issu du point singulier, indique la présence d'un faisceau de détonés issu de ce point. Bien que les configurations envisagées dans [5] et [34] concernent un faible confinement, la singularité semble être également du type Prandtl-Meyer dans notre configuration de fort confinement. Au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'endroit de cette singularité, on s'attend à ce que la poche subsonique soit de moins en moins influencée par les parois. Ceci expliquerait le point d'inflexion que l'on peut observer sur la structure de la poche subsonique (voir figure 4.32).

- Etude de la couche limite

Lors de la propagation d'une discontinuité dans un milieu au repos, le fluide en aval se met en mouvement. Les parois du canal étant adhérentes et non-adsorbantes, la vitesse du fluide aux parois est nulle. Une couche limite se développe alors entre

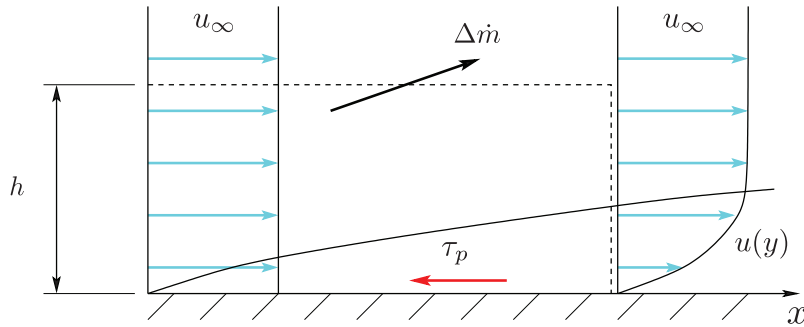


figure 4.45 – Développement d’une couche limite laminaire sur une plaque plane dans un champ de pression uniforme. $\Delta \dot{m}$ est la partie du débit masse déviée par la couche limite et h est la hauteur du volume de fluide.

les parois et le cœur de l’écoulement. Dans le cas d’un écoulement sur une plaque plane, l’évolution de la vitesse longitudinale dans la couche limite permet de définir les grandeurs caractéristiques de cette couche limite, notamment son épaisseur $\delta(x)$. Celle-ci est classiquement définie comme étant la position transversale où la vitesse atteint 99% de la vitesse à l’infini, u_∞ .

Dans le cas d’un écoulement sans gradient de pression (u_∞ uniforme) on a

$$\delta(x) = 4.92 \left(\frac{\nu_\infty x}{u_\infty} \right)^{1/2} \quad (4.14)$$

Dans le cadre de notre étude, l’état infini désigne le fluide au niveau de l’axe du canal, la vitesse du fluide u_∞ étant relative par rapport au choc. L’épaisseur de déplacement $\delta^*(x)$ est donnée par Dans le cas compressible, nous avons à partir d’un bilan de masse

$$\delta^*(x) = \int_0^h \left(1 - \frac{\rho u}{\rho_\infty u_\infty} \right) dy \quad (4.15)$$

Sur une plaque plaque, la contrainte visqueuse pariétale τ_p , se calcule de la façon suivante

$$\tau_p = \frac{d\theta}{dx} \rho u_\infty^2 \quad \text{avec} \quad \theta(x) = \int_0^h \frac{\rho u}{\rho_\infty u_\infty} \left(1 - \frac{\rho u}{\rho_\infty u_\infty} \right) dy \quad (4.16)$$

θ étant l’épaisseur de quantité de mouvement, exprimant la perte de quantité de mouvement dans la couche limite.

La figure 4.46 présente la moitié du contour moyen de la poche subsonique, les épaisseurs de couche limite δ , δ^* et θ . Toutes ces quantités sont normalisées par la demi-hauteur du canal et sont tracées dans le repère du choc. L’abscisse est normalisée par Δ d’un calcul non visqueux. Comme on peut le voir, une partie de la couche limite se situe dans la poche subsonique et l’écoulement peut être scindé en trois parties. Une zone A dans laquelle la couche limite se développe et une zone B dans laquelle cette couche limite a atteint la saturation avant la fin de la poche subsonique. La zone C correspond à la région située en aval de la poche subsonique.

Les nombres de Reynolds $Re_x = (\rho u / \mu)_{axe} x$ et $Re_H = (\rho u / \mu)_{axe} H$ sont respectivement inférieurs à 3.5×10^5 et 2500. x étant la distance au front du choc et u vitesse

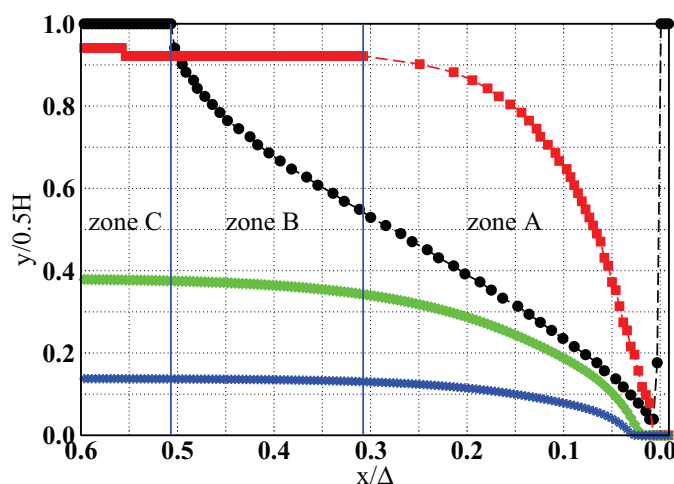


figure 4.46 – Contour de la poche subsonique (points noirs), épaisseur de la couche limite (carrés rouges), épaisseur de déplacement (diamants verts) et épaisseur de quantité de mouvement (étoiles bleues). Canal de hauteur H_{ref} .

relative. L'écoulement reste donc laminaire dans tout le canal. Le calcul des rapports δ^*/δ et θ/δ dans la partie pleinement développée de la couche limite, c'est-à-dire la zone C donne, respectivement, 0.422 et 0.156, soit environ 12% de plus par rapport aux valeurs prévues par la théorie des couches limites laminares.

La figure 4.47 a) représente le coefficient de frottement $C_{fx} = \tau_{paroi}/0.5(\rho u^2)_{axe}$ en fonction de Re_x . La figure 4.47 b) représente le rapport de l'épaisseur de la couche limite et de la distance au choc δ/x , en fonction de Re_x .

Le nombre de Reynolds augmente lorsqu'on s'éloigne du choc car $(\rho u)_{axe}$ augmente en aval du choc. Il en est également de même pour la température et la viscosité. Cette dernière augmente plus rapidement car les espèces majoritaires des produits de détonation ont une viscosité plus importante que les réactifs. Ceci conduit, dans un premier temps, à une chute de $(\rho u/\mu)_{axe}$ et par voie de conséquence à une décroissance de Re_H , sur une certaine distance par rapport au choc, pour augmenter par la suite et se stabiliser (voir figure 4.49). Les différents effets combinés font que Re_x augmente sur une longue distance.

Le coefficient C_{fx} est plus important que celui donné par la théorie et peut être approché par $C_f(x) \approx 19.7/Re_x^{1.1}$. Cet écart vient du fait d'une contrainte pariétale plus forte que dans le cas d'une couche limite sans gradient de pression. La couche limite croît moins vite que ce que prévoit la théorie car en effet, le gradient de pression est négatif (voir figure 4.47 c) et l'accélération du fluide sur l'axe est important dans la zone de réaction.

Les figures 4.47 d) et 4.48 a) représentent le coefficient local de frottement $C_{fH} = \tau_{paroi}/0.5(\rho u^2)_{axe}$, en fonction du nombre de Reynolds hydraulique, respectivement dans les trois zones. Re_H évolue de la même façon que $(\rho u/\mu)_{axe}$. Sur une partie de la figure 4.47 d), le coefficient C_{fH} est supérieur à celui prévu par la théorie, pour les

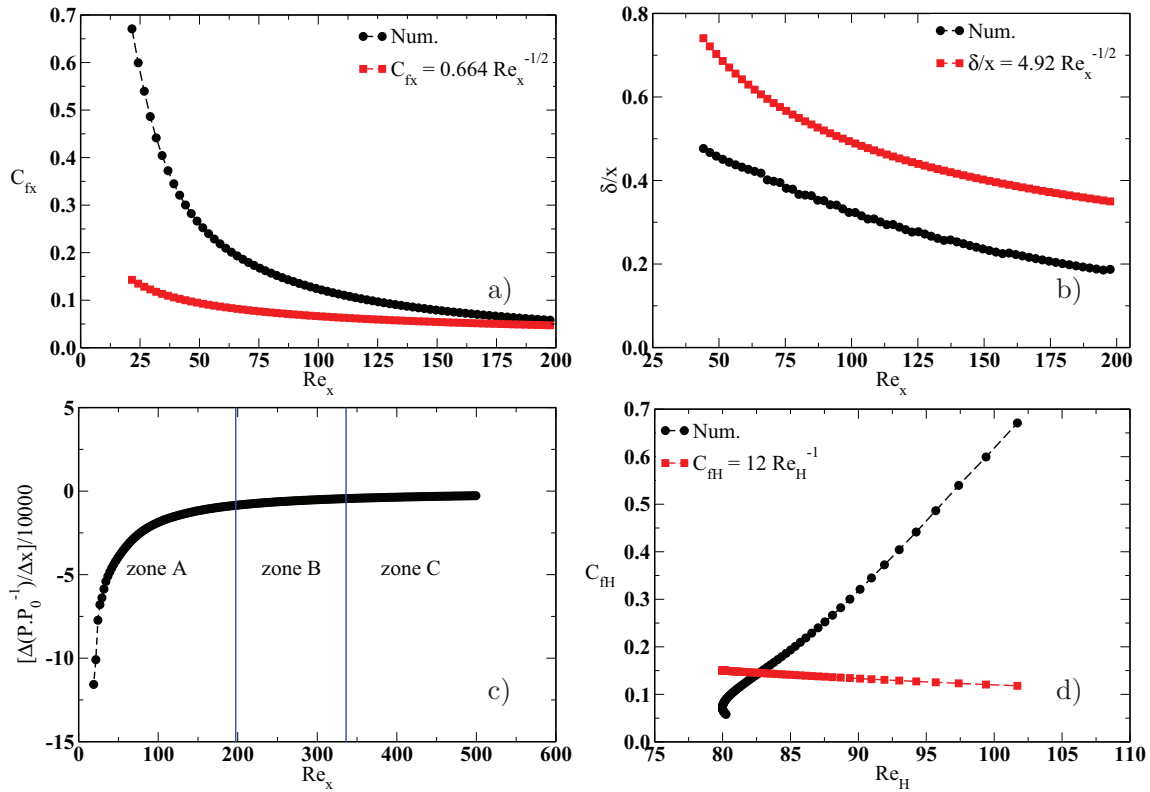


figure 4.47 – a) et b) respectivement C_{fx} et δ/x en fonction de Re_x dans la zone A - c) gradient de la pression normalisée en fonction de Re_x - d) C_{fH} en fonction de Re_H dans la zone A.

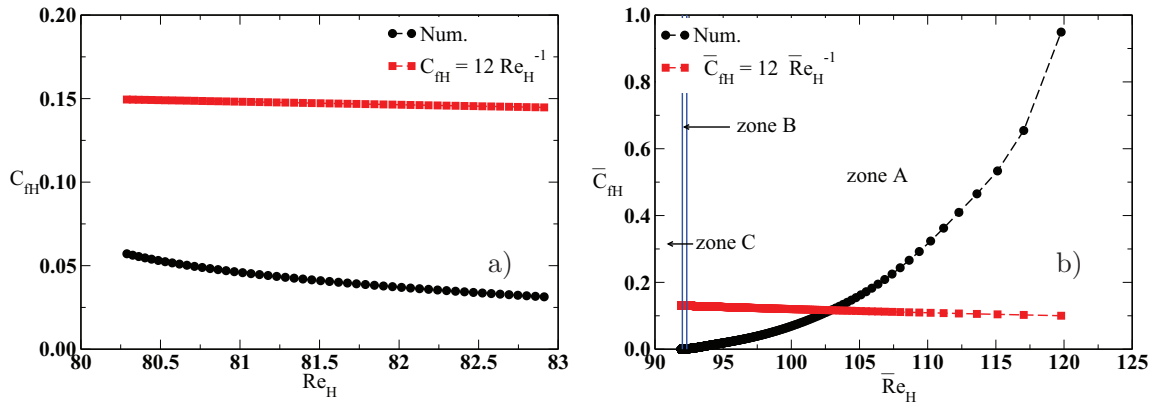


figure 4.48 – a) C_{fH} en fonction de Re_H dans la zone B - b) Coefficient de frottement moyen, au sens de Favre, \bar{C}_{fH} , en fonction nombre de Reynolds \bar{Re}_H , moyenné au sens de Favre.

mêmes raisons que celles évoquées précédemment. Par contre, dans la seconde partie, le coefficient de frottement est inférieur à $12/Re_H$ pour un écoulement de Poiseuille entre deux plaques planes. Il en est de même sur la figure 4.48 a, qui présente les résultats numériques et théoriques de C_{fH} en fonction de Re_H , dans la zone B.

La figure 4.48 b) présente la valeur moyenne de C_{fH} en fonction de la valeur moyenne

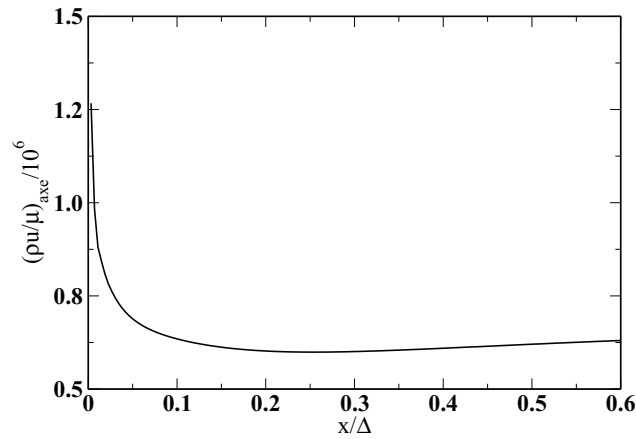


figure 4.49 – $(\rho u/\mu)_{axe}$ en fonction de x .

du nombre de Reynolds, au sens de Favre. L'interprétation reste la même que celle faite pour C_{fH} . A savoir que dans une partie de la zone A, le coefficient moyen est plus élevé que celui prévu par la théorie. C'est probablement la raison qui a conduit Ishii *et al.* [47, 48] et Kitano *et al.* [50] à augmenter les coefficients de frottement de leur modèle unidimensionnel afin d'obtenir des résultats proches des données expérimentales.

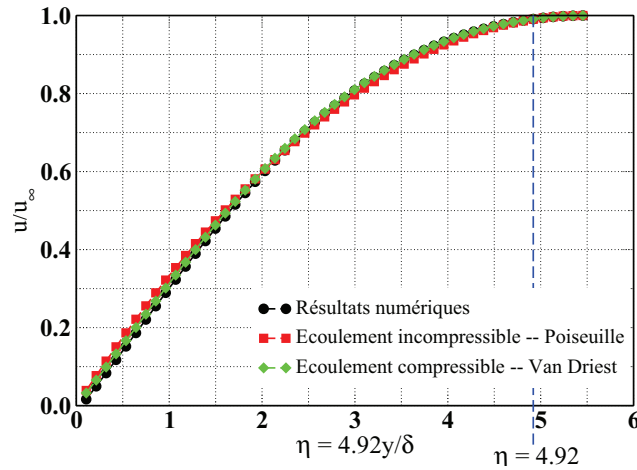


figure 4.50 – u/u_∞ en fonction de $\eta = 4.92y/\delta$, à 0.3 mm en aval du choc (zone A).

Les figures 4.50, 4.51 a) et 4.51 b) représentent le rapport entre la vitesse du fluide, dans le repère absolu, à différentes ordonnées et celle au niveau de l'axe en fonction de la variable adimensionnée $\eta = 4.92y/\delta$, respectivement, à 0.3 mm, 0.5 mm et 0.8 mm en aval du choc. Dans la zone A, l'écoulement est légèrement différent de celui de Poiseuille incompressible. Par contre, la corrélation de van Driest (équation 4.17) [88] permet d'approcher correctement la vitesse du fluide. Dans les zones B et C, l'écoulement est très différent de celui de Poiseuille, pendant que la vitesse suit toujours

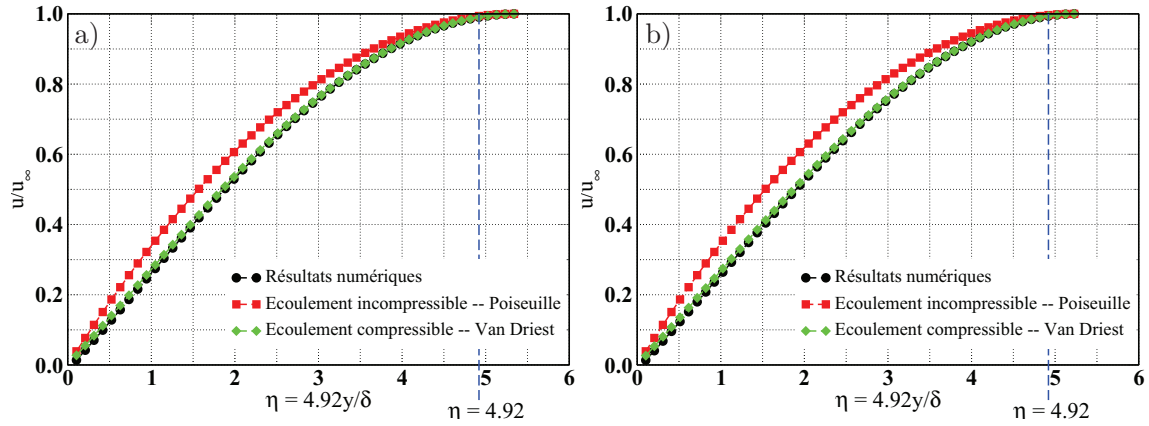


figure 4.51 – a) et b) respectivement u/u_∞ en fonction de η , à 0.5 mm en aval du choc (zone B) et à 0.8 mm en aval du choc (zone C).

une évolution de type van Driest.

$$\underbrace{u = u_\infty \left(1 - \left(\frac{y}{H}\right)^2\right)}_{\text{Poiseuille}}, \quad \underbrace{u_{vd}^+ = \int_0^{u^+} \sqrt{\rho/\rho_p} du^+}_{\text{van Driest}} \quad (4.17)$$

Avec ρ_p la masse volumique à la paroi et $u^+ = u/u_\tau$ et $u_\tau = \sqrt{\tau_p/\rho_p}$. Dans le repère relatif, en posant $\sigma^+ = \sigma/u_\tau$ et $u'^+ = \sigma^+ - u^+$, l'expression de la vitesse relative d'un écoulement de Poiseuille et celle de la transformée de van Driest deviennent

$$\underbrace{u' = u'_\infty \left(1 - \left(\frac{y}{H}\right)^2\right) + \sigma \left(1 - \left(\frac{y}{H}\right)^2\right)}_{\text{Poiseuille}}, \quad \underbrace{u'_{vd} = \int_{\sigma^+}^{\sigma^+ - u^+} \sqrt{\rho/\rho_p} du'^+}_{\text{van Driest}} \quad (4.18)$$

- Importance relative des effets dissipatifs sur le critère de sonicité

En se plaçant dans le repère associé au choc, il est possible d'effectuer le changement de repère suivant

$$t' = t, \quad x' = \sigma t - x, \quad y' = -y, \quad u' = \sigma - u \quad \text{et} \quad v' = -v$$

En appliquant ce changement de repère aux équations de Navier-Stokes, en omettant les primes sur les variables et en considérant le régime stationnaire, on arrive à l'équation du bilan énergétique dont la démonstration est donnée en annexe G.

$$\mathcal{H} + \mathcal{P}_{visq} = (\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) \quad (4.19)$$

avec

$$\mathcal{H} = \rho(c^2 - u^2) \frac{\partial u}{\partial x} + \rho(c^2 - v^2) \frac{\partial v}{\partial y} - \rho uv \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

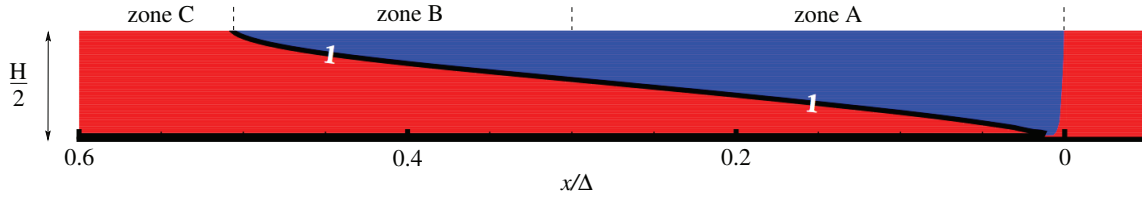


figure 4.52 – Critère de thermicité avec prise en compte des contraintes visqueuses et des flux thermiques.

la puissance des contraintes visqueuses $\mathcal{P}_{visq} = \vec{u} \cdot \text{div} (\bar{\bar{\tau}})$

$$\mathcal{P}_{visq} = u \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) + v \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right)$$

l'énergie chimique libérée dans l'écoulement par unité de temps est

$$\dot{q} = \sum_k \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho,P} \mathcal{W}_k (\nu_k'' - \nu_k') \dot{\xi} \quad (4.20)$$

avec

$$\left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho,P} = h_k - c_{p,m} T \frac{\mathcal{W}}{\mathcal{W}_k} \quad (4.21)$$

et $\dot{\xi}$ est la variable d'avancement de la réaction chimique. Si les capacités calorifiques des différentes espèces chimiques étaient égales entre elles ainsi que les masses molaires, \dot{q} se réduirait à $\dot{q} = q \mathcal{W} \dot{\xi}$, $q = \Delta h_R < 0$ étant la chaleur massique de réaction. Dans notre cas, \dot{q} représente la puissance fournie à l'écoulement par les réactions chimiques. Le taux de dissipation visqueuse $\Phi = \text{div} (\bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{u}) - \vec{u} \cdot \text{div} (\bar{\bar{\tau}})$ est

$$\Phi = \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \quad (4.22)$$

Le flux thermique $\dot{q}_{th} = \text{div} (\lambda \overrightarrow{\text{grad}} (T))$ est

$$\dot{q}_{th} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (4.23)$$

Le flux des enthalpies des espèces chimiques est

$$\begin{aligned} \dot{q}_{diff} &= \sum_k \text{div} (\rho D_{k,m} h_k \overrightarrow{\text{grad}} (Y_k)) - \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho,P} \text{div} (\rho D_{k,m} \overrightarrow{\text{grad}} (Y_k)) \\ \dot{q}_{diff} &= \begin{cases} \sum_k \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \\ - \sum_k \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho,P} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \end{cases} \quad (4.24) \end{aligned}$$

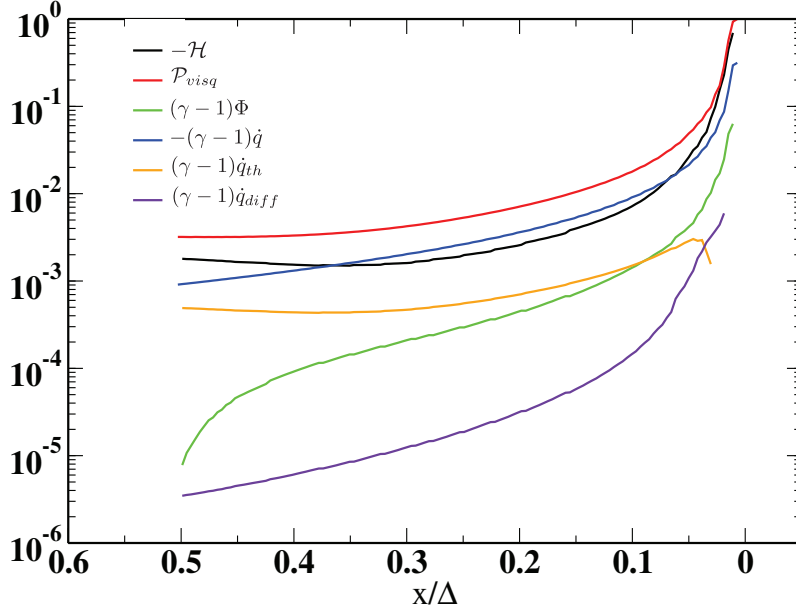


figure 4.53 – Evaluation des différents termes du bilan d'énergie sur la ligne sonique.

Dans le repère de Frenet local (\vec{l}, \vec{n}) , \mathcal{H} s'écrit

$$\mathcal{H} = \rho \left(c^2 - \|\vec{u}\|^2 \right) \frac{\partial \|\vec{u}\|}{\partial l} + \rho c^2 \|\vec{u}\| \frac{\partial \theta}{\partial n} \quad (4.25)$$

avec θ l'angle de déviation des lignes de courant. $\partial\theta/\partial n$ représente dans ce cas la divergence locale des lignes de courant.

Une singularité apparaît alors quand $M = 1$, soit $\|\vec{u}\| = c$. Il s'agit du critère de sonicité. De la même manière on peut obtenir le critère de thermicité

$$\rho c^2 \|\vec{u}\| \frac{\partial \theta}{\partial n} + \mathcal{P}_{visq} = (\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) \quad (4.26)$$

Les différentes expressions seront évaluées via la simulation numérique. Ainsi, quand $M = 1$, on obtient

$$\mathcal{H} = \rho v^2 \frac{\partial u}{\partial x} + \rho u^2 \frac{\partial v}{\partial y} - \rho uv \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (4.27)$$

La figure 4.52 représente en bleu la zone subsonique et en rouge la zone supersonique. L'isoligne 1, tracée en noir, représente l'endroit où le critère de thermicité est vérifié. On peut remarquer la bonne concordance entre le critère de thermicité et la ligne sonique.

La figure 4.53 représente les valeurs prises par les différents termes du bilan d'énergie sur la ligne sonique. Elles ont été normalisées par la valeur maximale atteinte par \mathcal{P}_{visq} . Proche de la singularité de Prandtl-Meyer, les contributions des flux diffusifs d'espèces chimiques et thermiques sont négligeables. Ainsi, c'est bien le développement de la couche limite dynamique qui est prépondérant et est responsable de la localisation de la ligne sonique.

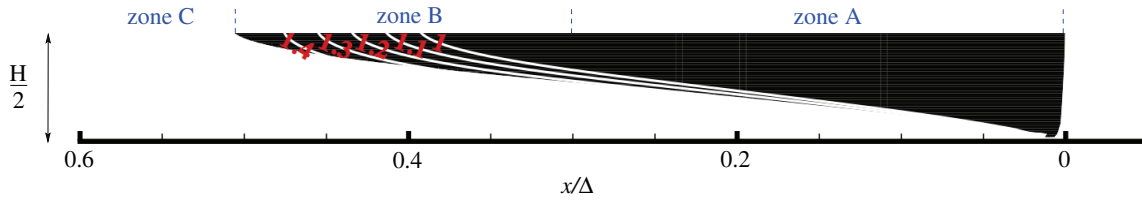


figure 4.54 – Critère de thermicité avec prise en compte uniquement des contraintes visqueuses.

Lorsque l'on s'éloigne de la singularité, toutes les grandeurs diminuent. On peut remarquer qu'à la fin de la poche subsonique, les flux d'espèces et le taux de dissipation visqueuse sont négligeables. Cependant, les flux thermiques ne peuvent être négligés.

Afin de distinguer les contributions des flux visqueux des flux thermiques, les grandeurs \mathcal{H}' et \mathcal{P}'_{visq} ont été normalisées de la façon suivante (sans prise en compte des flux thermiques)

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\mathcal{H}}{-\dot{q} + \Phi} \quad (4.28)$$

et

$$\mathcal{P}'_{visq} = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\mathcal{P}_{visq}}{-\dot{q} + \Phi} \quad (4.29)$$

Sur la figure 4.54, les isolignes, pour lesquelles la quantité $\mathcal{H}' + \mathcal{P}'_{visq}$ vaut 1, 1.1, 1.2, 1.3 et 1.4, ont été tracées. Sont représentées en noir la zone subsonique et en blanc la zone supersonique.

L'isoligne 1 est à l'intérieur de la poche subsonique. Dans la zone A, l'écart entre la ligne sonique et l'isoligne 1 est faible, ce qui signifie que ce sont bien les effets dynamiques qui dominent. Cependant cet écart tend à se creuser vers la fin de la zone B. En effet, les flux thermiques ne peuvent plus être négligés. Dans le repère du choc, les effets visqueux ont tendance à accélérer le fluide, ce qui entraîne une augmentation du nombre de Mach. La poche subsonique serait donc, a priori, localisée au voisinage de l'isoligne 1 en absence de gradient de température. Les températures sont plus élevées dans la région supersonique, les flux thermiques vont augmenter la température des gaz se situant dans la zone subsonique. La vitesse locale du son va augmenter et le nombre de Mach diminuer. Ainsi, les isolignes sont repoussées plus en aval du choc.

- Influence de la hauteur du canal

L'étude précédente nous a permis de décrire la structure du front de détonation pour une hauteur de canal fixée. Il est possible de faire varier l'intensité des phénomènes dissipatifs de deux façons. La première consiste à garder les mêmes conditions thermodynamiques initiales, tout en faisant varier la hauteur du canal. La deuxième consiste à faire varier la pression initiale. La première approche sera adoptée pour la suite de l'étude. Sur le plan expérimental, en revanche, il est plus pratique de faire varier la pression. Faire varier la hauteur d'un canal ou le diamètre d'un tube nécessite

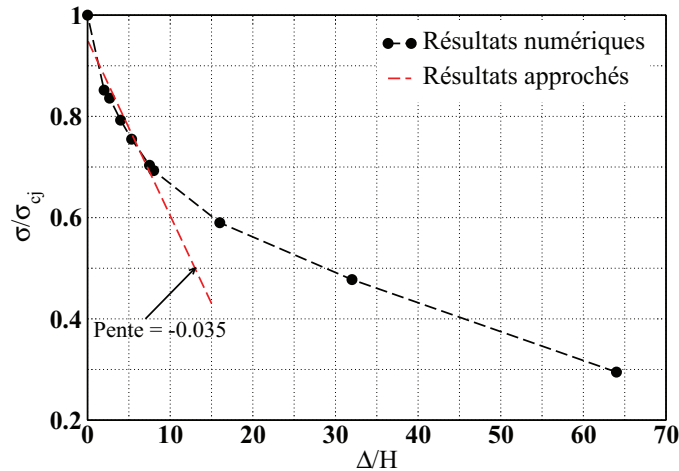


figure 4.55 – Vitesse moyenne de l’onde normalisée, prise sur l’axe, en fonction de l’inverse de la hauteur du canal.

très souvent de démonter une partie du dispositif expérimental ou tout l’ensemble, sauf quand celui-ci est conçu de telle sorte que la hauteur soit réglable [48].

En plus de la hauteur de référence $H_{ref} = \Delta/8$, cinq autres hauteurs ($4H_{ref}$, $3H_{ref}$, $2H_{ref}$, $H_{ref}/2$ et $H_{ref}/4$) ont été considérées. La procédure d’initialisation reste la même que celle utilisée pour les cas précédents. On conservera une résolution spatiale identique à celle de l’étude précédente, quelque soit la hauteur du canal.

La figure 4.55 présente la vitesse du front normalisée par σ_{c_j} en fonction de l’inverse de la hauteur du canal, normalisée par l’épaisseur Δ d’un calcul non visqueux. La vitesse diminue au fur et à mesure que la hauteur du canal est réduite. Cette diminution est plus prononcée pour les plus grandes hauteurs. En approchant cette partie de la courbe par une regression linéaire, le rapport entre la vitesse de l’onde et la valeur théorique évolue comme $1 - 0.035\Delta/H$. Cette expression est similaire à celle proposée par Eyring *et al.* [27] pour des détonations de charges non confinées. La valeur prise par le coefficient directeur de cette droite dépend de la nature du mélange et de son degré de confinement. A partir d’une certaine hauteur, la pente devient plus douce, traduisant le fait que la déccélération de l’onde faiblit. La décroissance est plutôt globalement quadratique, partageant un autre trait commun avec les détonations courbes.

La figure 4.56 présente la comparaison entre les résultats 2D et 1D de la vitesse normalisée du front, en fonction de l’inverse de la hauteur normalisée par Δ . En raison des frottements plus intenses dans la configuration bidimensionnelle (figure 4.47 d) pour la hauteur de référence H_{ref} , la vitesse moyenne de l’onde décroît plus rapidement que dans la configuration 1D.

La figure 4.57, présentant le contour de la poche subsonique pour les différentes hauteurs, montre que la taille de la poche subsonique diminue lorsque H devient faible.

La diminution de la taille de la poche subsonique est due à l’augmentation relative des effets visqueux. Cela crée ainsi un déficit de vitesse important.

Sur la figure 4.57, le contour des poches subsoniques, pour les plus grandes hauteurs,

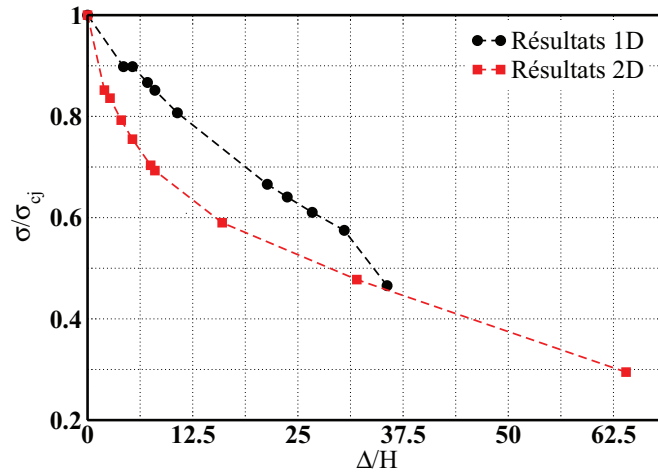


figure 4.56 – Vitesse moyenne de détonation 1D et 2D, en fonction de la hauteur.

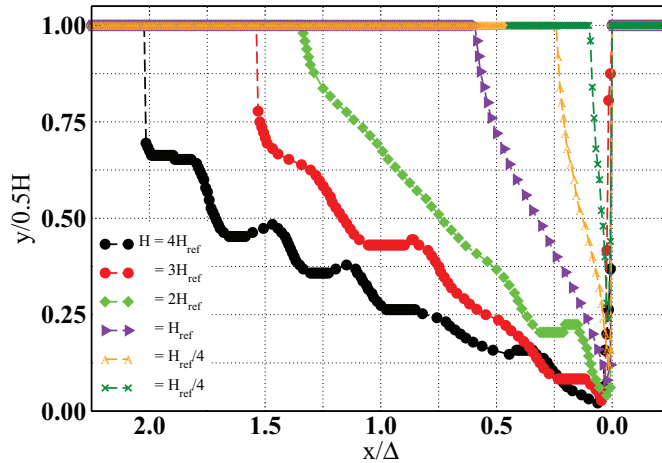


figure 4.57 – Contour de la poche subsonique pour différentes hauteurs du canal.

présente de nombreux points d'inflexion, provenant des instabilités transverses. En effet, le coefficient polytropique des produits de détonation, comme celui des réactifs, est aux alentours de 1.2. La chaleur réduite est de 60 et l'énergie d'activation réduite est nulle. Short *et al.* [78] ont montré que pour un facteur de surdétonation de 1, le mélange ne présentait pas d'instabilités longitudinales mais pouvait présenter des instabilités transverses. Avec l'augmentation de la hauteur du canal, les effets dissipatifs pariétaux diminuent. La couche limite voit alors un état non-homogène oscillant, notamment au voisinage de l'axe, comme le montre la figure 4.58. Cette dernière présente la vitesse instantanée de l'onde, prise sur l'axe, pour le canal de hauteur $4H_{ref}$. La couche limite sera donc affectée par ces oscillations (essentiellement sur sa frontière). La forme de la poche subsonique étant influencée par la couche limite, elle verra des oscillations se développer sur son contour.

La figure 4.60 présente l'aire réduite de la poche subsonique en fonction de la hauteur du canal évoluant en $1.3H$. Nous n'avons pas observé de phénomènes d'extinction dans

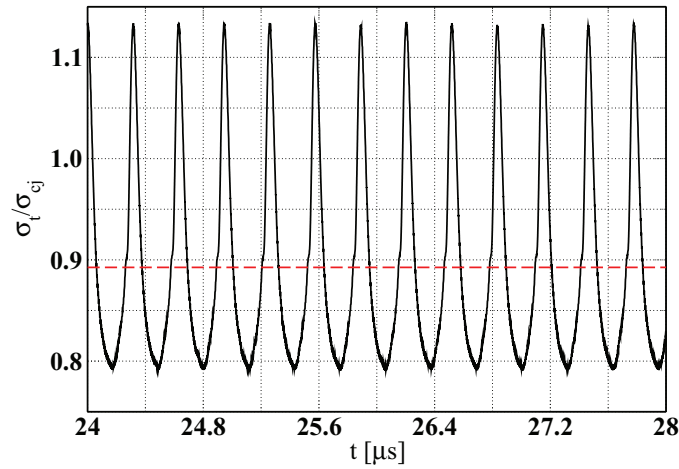


figure 4.58 – Vitesse instantanée normalisée de l’onde, prise sur l’axe, pour le canal de hauteur $4H_{ref}$. La droite en tirets représente la vitesse moyenne.

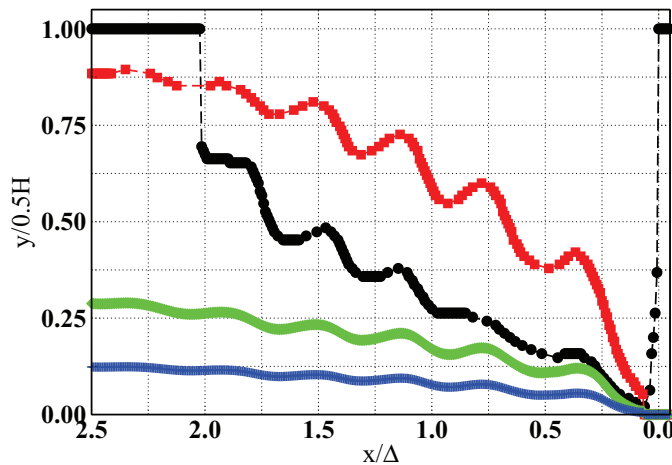


figure 4.59 – Contour de la poche subsonique (point noirs), épaisseur de la couche limite (carrés rouges), épaisseur de déplacement (diamants verts), épaisseur de quantité de mouvement (étoiles bleues). Canal de hauteur $4H_{ref}$.

nos simulations. En effet, le taux de décomposition chimique pour la fraction massique de F dépend linéairement de la pression. Bien que la configuration soit différente, l’analyse de Bdzil [5] indique que cette dépendance linéaire ne peut pas mener à l’extinction.

Pour certaines hauteurs, notamment les plus grandes, du fait des instabilités transverses intrinsèques à l’onde bidimensionnelle, l’onde présente une structure de type cellulaire. C’est la présence des points triples sur le front de choc, auquel sont adossées des lignes de glissement et des ondes transverses, qui permet la formation et la viabilité

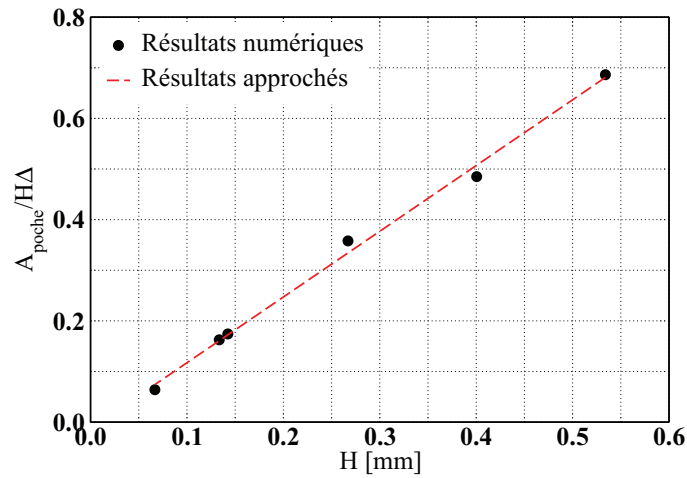


figure 4.60 – Aire normalisée des poches subsoniques pour différentes hauteurs.

de cette structure cellulaire. Au fur et à mesure que la hauteur du canal est diminuée, cette structure cellulaire dégénère comme on peut le voir sur la figure 4.61. Cette dé-

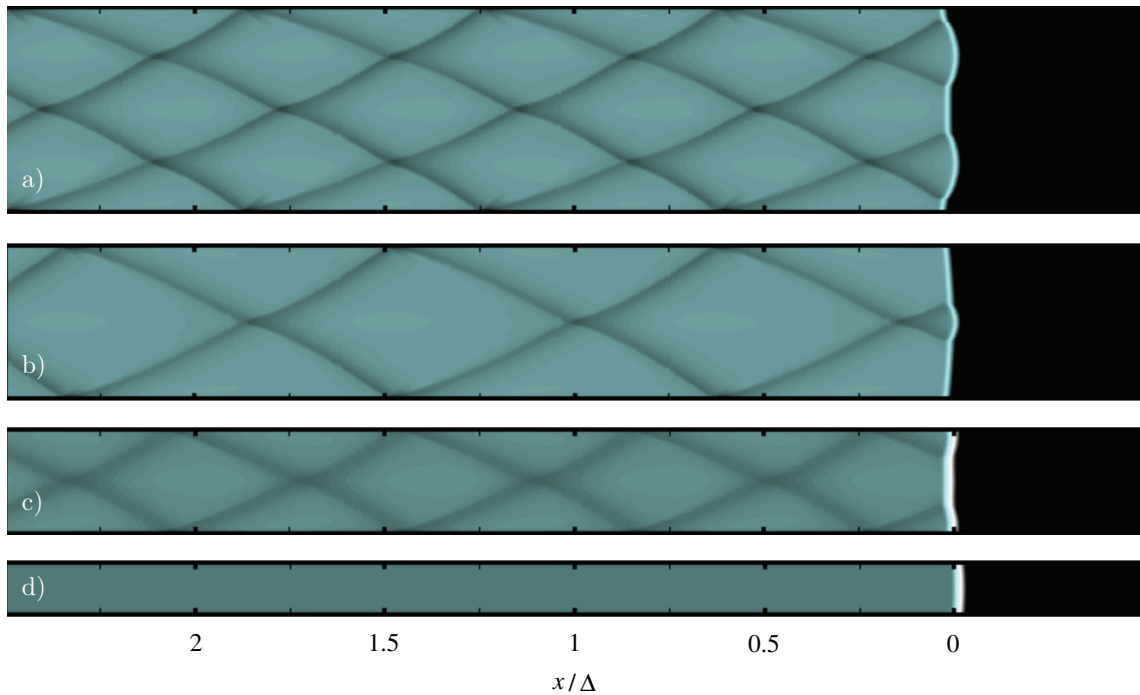


figure 4.61 – Trajectoires des points triples pour différentes hauteurs de canal. a) $H = 4H_{ref}$; b) $H = 3H_{ref}$; c) $H = 2H_{ref}$; d) $H = H_{ref}$.

générescence est liée à l'effet combiné de l'augmentation des effets visqueux avec la réduction de la hauteur du canal et à l'absence d'énergie d'activation du mélange. En effet, cette absence d'énergie d'activation permet de réduire l'amplitude des instabilités. Ces dernières sont minimisées davantage au fur et à mesure que la hauteur du canal est réduite. A partir d'une certaine hauteur, généralement comprise entre $2H_{ref}$

et H_{ref} , la structure cellulaire disparaît. La propagation de l'onde reste assurée, malgré le fort confinement auquel l'onde est soumise.

Il convient de noter que la présence d'une structure cellulaire, pour des mélanges à énergie d'activation négligeable, a déjà été prédite théoriquement [16]. Selon [16], le mouvement ondulatoire des lignes de courant, à travers le front de choc instable, perturbe le taux de dégagement d'énergie et excite les pulsations longitudinales de ce type de mélange. Ces instabilités, liées à l'aérodynamique de la structure interne d'une détonation, sont dues à l'expansion, à pression constante, des gaz brûlés.

Hormis le canal de hauteur $3H_{ref}$, pour lequel la largeur moyenne de la cellule de détonation vaut $3H_{ref}$, la largeur moyenne de la cellule de détonation vaut approximativement $2H_{ref}$. Il en est de même pour la longueur moyenne qui vaut 0.75Δ pour $H = 3H_{ref}$, alors qu'elle est approximativement de 0.62Δ pour les autres hauteurs. Le rapport entre la largeur et la longueur moyennes est d'environ 0.5 pour le canal de hauteur $3H_{ref}$ et 0.4 pour les autres configurations.

4.5 Récapitulatif

Dans ce chapitre, les résultats des différentes simulations, effectuées durant cette étude, ont été présentés. La première partie du chapitre a été consacrée aux détonations non visqueuses. Le premier calcul concerne une détonation ZND, proposée par Fiorina et Lele [32], avec un terme source chimique obéissant à la loi d'Arrhénius. L'onde présente une structure stable suite à une faible valeur de l'énergie d'activation. Ce test nous a permis de proposer un détecteur de choc basé sur la compression d'un volume de fluide contenu dans une maille de calcul. Grâce à cet outil, nous avons pu obtenir des résultats corrects sur des maillages peu denses. En augmentant l'énergie d'activation du mélange, des instabilités longitudinales apparaissent de façon périodique dans l'écoulement. Ces instabilités sont générées par la combustion de poches de gaz partiellement brûlés, présentes dans la zone de réaction. D'autres instabilités, de type transverse cette fois-ci, peuvent se développer dans des écoulements 2D, même pour des mélanges à faible énergie d'activation. Ainsi, un calcul de détonation 2D, d'un mélange à faible énergie d'activation, a été effectué. Les instabilités transverses présentes dans cet écoulement sont générées à la fois par la combustion, dans la zone de réaction, de poches de gaz partiellement brûlés, et par l'expansion à pression constante, dans la zone de réaction, des gaz brûlés [16]. Ces instabilités entraînent l'apparition de points triples sur le front de détonation et donc d'une structure cellulaire dans l'écoulement. Les dimensions des cellules de cette structure ont été corrélées à la fréquence d'oscillation de la vitesse du front d'onde et à sa vitesse moyenne.

Dans la deuxième partie de ce chapitre, des calculs de détonation 1D visqueux ont été menés. Les mélanges considérés ont des propriétés de transport et thermodynamiques similaires à ceux d'un mélange stœchiométrique de propane/oxygène. Le modèle cinétique est à une étape irréversible, avec un terme source chimique dont l'énergie d'activation est nulle. A diamètre fixé, en faisant diminuer la pression amont du mélange, la vitesse de l'onde ne varie quasiment pas dans le cas non visqueux. Il en est de même du cas visqueux, sauf pour des pressions très faibles. Cela est dû au fait que la

propagation de l'onde est dominée par le processus chimique. En revanche, lorsque le temps chimique est multiplié par 100, on observe une diminution de la vitesse moyenne de l'onde. Avec un temps chimique plus grand, en prenant en compte les pertes thermiques, nous n'observons quasiment pas de différences par rapport au cas avec parois adiabatiques. Les pertes thermiques ont une influence négligeable par rapport aux effets visqueux, dans la propagation et l'atténuation de l'onde. Pour une pression fixée à 3 kPa, la vitesse moyenne de l'onde diminue avec la réduction du diamètre. En effet, l'intensité des frottements augmente avec la diminution du diamètre.

La dernière partie de ce chapitre est dédiée à l'étude du confinement d'une détonation dans un canal plan avec des parois adiabatiques. Le mélange est le même que celui du cas 1D précédent. Après une phase transitoire, durant laquelle la vitesse de l'onde décroît, le régime de propagation de l'onde devient stationnaire. Cela se traduit par une vitesse constante au cours du temps et par une autosimilarité de la poche subsonique. Le contour de cette poche sépare l'écoulement supersonique évoluant proche des parois de l'écoulement subsonique à l'intérieur de la poche. Sur cette dernière, nous observons une singularité de Prandtl-Meyer. C'est le lieu où le pied du choc, la couche limite naissante et la poche subsonique se joignent. Cette singularité est aussi le point d'origine des détentes de Prandtl-Meyer qui contournent la poche subsonique et se referment sur l'axe. Aux alentours de cette singularité, la pression, la masse volumique et la vorticit  sont maximales. Cette forte vorticit  entra ne une d viation, vers le bas, des lignes de courant. Ces lignes sont   nouveau d vi es, cette fois-ci, par la lib ration de l' nergie chimique et par les effets visqueux. Il convient de noter qu'une partie de l' nergie chimique est lib r e hors de la poche subsonique. Cela contribue   la r duction de la vitesse de l'onde par rapport au cas 1D. Les conditions d'adh rence   la paroi entra nent le d veloppement d'une couche limite proche de la paroi. Cette couche limite  volue moins vite que les pr dictiones th oriques. Cela peut  tre d    la forte acc l ration du fluide sur l'axe et au gradient n gatif de pression. L' volution transversale de la vitesse longitudinale du fluide semble suivre la corr lation de van Driest. Pour ce qui est du crit re de sonicit , il est v rifi  lorsque les effets dissipatifs sont pris en compte dans les  quations de Navier-Stokes. Toutefois, le flux des enthalpies des esp ces chimiques est n gligeable. Lorsque l'on diminue la hauteur du canal, on observe une baisse de la vitesse de d tonation. Cela est provoqu  par la r duction de l' nergie chimique lib r e dans la poche subsonique. Pour des hauteurs  lev es, la poche subsonique et la couche limite pr sentent des oscillations qui sont li es   la pr sence d'instabilit s transverses dans l' coulement. Ces instabilit s sont att nu es avec la r duction de la hauteur.

Chapitre 5

Conclusion générale

Cette thèse traite, par simulation numérique, les phénomènes liés à la propagation d'ondes de détonation en milieu gazeux, avec prise en compte des effets dissipatifs. Après avoir passé en revue les différentes études sur les ondes de choc inertes en milieu confiné, l'accent a été mis sur la compréhension physique des effets visqueux sur la structure des écoulements gazeux. Ensuite, un panorama général des modèles d'ondes de détonation a été présenté. Il s'agit, dans un premier temps, des modèles classiques de Chapman-Jouguet et de Zel'dovich, von Neumann et Döring (ZND). Par la suite, différentes relations analytiques exprimant le déficit de vitesse d'une onde de détonation ont été présentées et discutées. Les instabilités d'ondes de détonation ont, par ailleurs, été abordées, ainsi que leur influence sur la structure et le comportement du front d'onde.

Sur le plan de la modélisation numérique, les équations résolues sont celles de Navier-Stokes en formulation compressible, multi-espèces, réactives, munie d'une loi de gaz parfaits. Les capacités calorifiques étant calculées à partir des tables de JANAF, les coefficients de transport des différentes espèces sont déterminés en s'inspirant des travaux de Cloutman [17]. Ces coefficients ont été implémentés au sein d'un solveur compressible développé au CORIA, appelé CHOC-WAVES¹. En effet, les écoulements considérés présentent de fortes discontinuités qui sont prises en compte par le solveur aérodynamique WENO5, pour la partie convective. Les flux diffusifs sont, quant à eux, discrétisés à l'aide d'un schéma compact d'ordre 4 avec un avancement en temps type Runge-Kutta d'ordre 3. Après avoir testé le code de calcul sur plusieurs cas d'épreuve, tel que les tubes à choc, une étude comparative sur le taux de convergence a permis de sélectionner la version WENO5 Mapped, pour la modélisation des fronts de détonation. En ce qui concerne la modélisation des ondes de détonation, la prise en compte de la réactivité du mélange s'est faite à l'aide d'un splitting de Strang et d'une intégration explicite des termes sources chimiques. Un calcul de surdétonation galopante a, d'abord, été effectué, ce qui a permis de conclure quant à la pertinence de l'utilisation d'un censeur de choc pour la capture des pics de surpression. Ainsi, l'énergie alimentant le front est complètement libérée dans la zone de réaction et non dans l'épaisseur numérique du choc.

Comme cela a été discuté dans la littérature, un mélange ne présentant pas d'insta-

1. Compressible **H**igh-Order Code using **W**eno **A**dapti**V**E **S**tencils.

bilités longitudinales peut développer des instabilités transverses dans un écoulement multidimensionnel. Ainsi, un calcul de détonation bidimensionnelle d'un mélange, ayant une faible énergie d'activation réduite, a été effectué. Bien qu'assez complexe, la structure de l'onde semble régulière avec des cellules visibles sur le tracé des points triples. Le front d'onde obtenu est composé de multiples disques de Mach et de chocs incidents. Egalement, les résultats détaillés font apparaître des instabilités de Kelvin-Helmholtz et de Rayleigh-Taylor, au niveau des lignes de glissement, ancrées sur les points triples. L'ensemble des phénomènes décrit dans la littérature [76] a ainsi pu être fidèlement reproduit. En particulier, il a été montré que la fréquence de la vitesse de détonation est liée au parcours des points triples. Bien que la résolution de nos calculs soit globalement la même, la déstabilisation du mouvement ondulatoire des instabilités de Kelvin-Helmholtz et de son interaction avec les instabilités de Rayleigh-Taylor semblent être mieux résolues par le schéma WENO5 que par un schéma d'ordre 2, même si ce dernier est couplé à une technique de raffinement de maillage [22, 76].

Dans l'objectif d'étudier la structure d'une onde de détonation dans un canal de faible hauteur, le choix a été porté sur un mélange présentant le moins d'instabilités possibles, tout en ayant des propriétés thermodynamiques et de transport représentatives d'un cas réel. Ainsi, le prémélange choisi concerne le couple propane/oxygène supposé être à la stoechiométrie. Les produits de détonation sont déterminés à l'état CJ, pour des conditions initiales de pression et de température ambiantes. Un mécanisme réactionnel binaire se fait selon une étape irréversible. Afin de minimiser le nombre et l'amplitude des instabilités, l'énergie d'activation a été annulée. Cependant, l'énergie chimique réduite est assez élevée pour laisser apparaître des instabilités transverses.

Préalablement, une étude unidimensionnelle a été effectuée en utilisant le modèle de Zel'dovich. Celui-ci est basé sur les équations d'Euler réactives, auxquelles sont rajoutés des termes sources pour la prise en compte des effets dissipatifs pariétaux. Une étude paramétrique a été menée en faisant varier le nombre de Reynolds acoustique, via la variation de pression et les dimensions du canal. Cette étude a montré, entre autres, l'importance relative de la hauteur du canal sur la diminution de la vitesse de détonation (les pertes thermiques étant négligées).

Du constat précédent, une étude bidimensionnelle a été menée, en faisant varier la hauteur du canal avec des conditions de parois adiabatiques. La hauteur a été choisie de sorte à ce qu'elle soit inférieure à l'épaisseur de la zone de réaction ZND. Une poche subsonique autosimilaire, se propageant à la même vitesse que le front de détonation, a été ainsi mise en évidence. C'est la libération d'énergie au sein de cette poche subsonique qui permet de soutenir le choc, ce dernier présentant une très légère courbure. En aval de ce choc, se développe une couche limite majoritairement supersonique, mais dont une partie se situe dans la poche subsonique. La transition entre les états subsonique et supersonique étant faite au niveau de la ligne sonique, il existe alors un point singulier qui est la rencontre du front de choc, au pied de la couche limite naissante, avec le début de la ligne sonique. La singularité observée est du type Prandtl-Meyer [5]. De plus, des ondes de pression, générées dans la zone supersonique, sont véhiculées de la paroi vers la ligne sonique, venant ainsi influencer sur la forme de la poche subsonique.

Par ailleurs, l'évolution de la couche limite dans la zone subsonique est caractérisée par une phase transitoire, suivie d'une phase pleinement développée. Il s'agit d'une

couche limite avec un fort gradient de pression, dont les propriétés globales (épaisseurs, facteur de forme, coefficient de frottement) diffèrent de celle d'une couche limite établie. De plus, le coefficient de frottement pariétal se trouve modifié suite à la forte libération d'énergie. Ces résultats montrent qu'il est important d'ajuster l'expression de ce coefficient dans le cas d'un modèle simplifié, type Zel'dovich.

Grâce au bilan énergétique, il a été montré que le critère de sonicité était associé à un critère de thermicité et qu'il y a donc un équilibre entre les différents termes. C'est la relation classique CJ généralisée, qui est ici écrite pour une configuration bidimensionnelle dans le cadre des équations de Navier-Stokes. On a pu montrer que nos résultats de simulation numérique corroboraient bien cette analyse. Cet équilibre concerne essentiellement l'énergie chimique libérée dans l'écoulement, la puissance des contraintes visqueuses, le taux de dissipation visqueuse, les flux thermiques et les flux de diffusion d'espèces. Cette analyse a également montré que les flux d'espèces étaient à peu près négligeables. Par ailleurs, il a été montré que le développement de la poche subsonique était fortement influencé par les effets visqueux, les effets thermiques n'étant importants que vers la fin de la poche subsonique. Les effets visqueux ont tendance à accélérer l'alignement des lignes de courant avec l'axe et la paroi au sein de la poche subsonique, et non sur la ligne sonique comme le suggère Bdzil [5]. En plus, les résultats ont permis de constater que la forte vorticit , produite au niveau de la singularit  de Prandtl-Meyer, n glig e dans l'analyse de Bdzil, diffusait au sein de la poche subsonique.

Dans le cas particulier d'une  nergie d'activation nulle, les analyses ont montr  l'existence d'instabilit s transverses, responsables de la structure cellulaire de d tonation. Cette structure dispara t avec la diminution de la hauteur du canal du fait que les effets dissipatifs pari taux att nuent fortement les ondes transverses. Une analogie peut  tre faite avec l'absorption des ondes transverses par des parois poreuses [69]. L' volution de la vitesse de d tonation, en fonction de l'inverse de la hauteur, est quadratique et non lin aire, pr sentant une autre similitude avec les travaux de Bdzil [5].

Perspectives

A la suite de ces travaux, il est possible de d gager quelques pistes int ressantes pour la suite de l' tude. Il s'agit par exemple :

- L' tude de l'influence des pertes thermiques et de la pression amont sur le front de d tonation.
- L' tude de l'influence de la courbure du front d'onde sur la d tonation, dans le cas d'une configuration cylindrique o  le diam tre du tube diminuerait fortement.
- Une possible description de la structure de la poche subsonique par les  quations de type "Prandtl r actif", autrement dit, voir si les approximations usuelles pour la description des couches limites sont susceptibles d'approcher l' coulement dans la zone pleinement d velopp e.
- Et enfin, la relaxation d'une des deux contraintes suivantes,   savoir, l' nergie d'activation r duite et une faible hauteur de canal. D'autre part, comme l'ont montr  les travaux de Radulescu *et al.* [69] et Shepherd [77], des instabilit s transverses et longitudinales r appara tront n cessairement, avec pour corollaire une poche sub-

sonique turbulente. Ainsi, les différents éléments du tenseur de Reynolds pourront être évalués, permettant de quantifier dans quelle mesure le critère de sonicité peut être modifié [71, 91].

Bibliographie

- [1] R. K. Agarwal, K. Y. Yun and R. Balakrishnan (2001), *Beyond Navier-Stokes : Burnett equations for flows in the continuum-transition regime*, Physics of Fluids, **13(10)** : 3061-3086.
- [2] J. M. Austin, F Pintgen and J. E. Shepherd (2005), *Reaction zones in highly unstable detonations*, Proceedings of Combustion Institute, **30** : 1849-1857.
- [3] J. M. Austin (2003), *The Role of Instability in Gaseous Detonation*, Ph.D. thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California.
- [4] P. Batten, M. Leschziner and UC. Goldberg (1997), *Average-State Jacobians and Implicit Methods for Compressible Viscous and Turbulent Flows*, Journal of Computational Physics, **137** : 38-78.
- [5] J. B. Bdzil (1981), *Steady-state two-dimensional detonation*, Journal of Fluid Mechanics, **108** : 195-226.
- [6] A. Bourlioux, A. J. Majda and V. Roytburd (1991), *Theoretical and numerical structure fur unstable one-dimensionnal detonations*, SIAM Journal of Applied Mathematics **2**, **51** : 303-343.
- [7] M. Brouillette (2003), *Shock waves at microscales*, Shock Waves, **13** : 3-12.
- [8] D. C. Bull, J. E. Elsworth, P. J. Shuff and E. Metcalfe (1982), *Detonation cells structures in fuel/air mixtures*, Combustion and Flame, **45** : 7-22.
- [9] A. Camargo, H. D. Ng, J. Chao, and J. H. S. Lee (2010), *Propagation of near-limit gaseous detonations in small diameter tubes*, Shock Waves Journal, In press, April. 6, 2010. (DOI 10.1007/s00193-010-0253-3)
- [10] C. Campbell and D. W. Woodhead (1926), *The ignition of gases by an explosion-wave. Part I. Carbon monoxyde and hydrogen mixtures*, Journal of Chemical Society, 3010-3021.
- [11] C. Campbell and D. W. Woodhead (1927), *Striated photographic records of explosion-waves*, Journal of Chemical Society, 1572-1578.
- [12] J. Chao, H.D. Ng, J.H.S. Lee (2009), *Detonability limits in thin annular channels*, Proceedings of the Combustion Institute, **32** :2349-2354.

-
- [13] A. Chinnayya, E. Daniel and R. Saurel (2004), *Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials*, Journal of Computational Physics, **196** :490-538.
- [14] R. S. Chue, J. H. Lee, F. Zhang and G. M. Makhviladze (1993), *On the structure of pulsating detonation*, Russian Academy of Sciences, Institute for problems in mechanics, Moscow.
- [15] G. Ciccarelli and S. Dorofeev (2008), *Flame acceleration and transition to detonation in ducts*, Progress in Energy and Combustion Science, **34** : 499-550.
- [16] P. Clavin (2004), *Theory of gaseous detonations*, Chaos, **14(3)** : 825-839.
- [17] L. D. Cloutman (2000), *A selected library of transport coefficients for combustion and plasma physics application*, UCRL-ID-139893, US Department of energy, Lawrence Livermore National Laboratory.
- [18] S. Colin et L. Baldas (2004), *Effets de raréfaction dans les micro-écoulements gazeux*, Compte Rendus de Physique, **5** : 521-530.
- [19] E. Davoudzadeh, J. Nicholls and R. Morrison (1965), *The influence of a compressible boundary on the propagation of gaseous detonations*, Proceedings of the 10th International Symposium on Combustion, Combustion Institute : 817-830.
- [20] S. F. Davis (1988), *Simplified Second-Order Godunov-Type Methods*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, **9(3)** : 445-473.
- [21] F. Davoudzadeh, H. Mc Donald and B. E. Thompson (1995), *Accuracy evaluation of unsteady CFD numerical schemes by vortex preservation*, Computer and Fluids, **24** :883-895.
- [22] R. Deiterding (2003), *Parallel Adaptive Simulation of Multi-dimensional Detonation structures*, Ph.D. thesis, Fakultät für Mathematik, Naturwissenschaften und Informatik der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus.
- [23] YN. Denisov and YK Troshin (1961), *On the mechanism of denotative combustion*, Proceeding of Combustion Institute, **8** : 62-63.
- [24] R. E. Duff (1959), *Shock-tube performance at low initial pressure*, Physics of Fluids, **2** :207-216.
- [25] G. Dupré, O. Péraldi, J. Joannon, J. H. S. Lee and R. Knystautas (1991), *Limit criterion of detonations in circular tubes*, "Dynamics of Detonations and Explosions", Progress in Astronautics and Aeronautics, **133** :156-169.
- [26] J. J. Erpenbeck (1964), *Stability of idealized one-reactions detonations*, Physics of Fluid, **7** :684-696.
- [27] H. Eyring, R. E. Powell, G. H. Duffey and R. B. Parlin (1948), *The stability of detonation*, Princeton University, Princeton, New Jersey.

-
- [28] J. A. Fay (1959), *Two-dimensional gaseous detonations : Velocity deficit*, Physics of Fluid, **2, 3** :283-289.
- [29] A. C. Fernandez-Pello (2002), *Micropower generation using combustion : Issues and approaches*, Proceedings of the Combustion Institute, **29** :883-899.
- [30] J. H. Ferziger and H. G. Kaper (1972), *Mathematical theory of transport processes in gases*, North-Holland, Amsterdam.
- [31] W. Fickett and W. C. Davis (1979), *Detonation, Theory and Experiment*, Dover Publications, New York.
- [32] B. Fiorina and S.K. Lele (2007), *An artificial nonlinear diffusivity method for supersonic reacting flows with shocks*, Journal of Computational Physics, **222** :246-264.
- [33] S. M. Frolov (1994), *On the Zel'dovich theory of detonability limits*, Proceedings of the Zel'Dovich Memorial International Conference on Combustion, Detonation, Shock Waves, Moscow, Russia, 12-17 September.
- [34] V. N. Gamezo and E. S. Oran (1997), *Reaction-zone structure of a steady-state detonation wave in a cylindrical charge*, Combustion and Flame, **109** :253-265.
- [35] V. N. Gamezo, D. Desbordes and E. S. Oran (1999) *Formation and Evolution of Two-dimensional Cellular Detonations*, Combustion and Flame, **116** :154-165
- [36] GASEQ, A Chemical Equilibrium Program for Windows, disponible sur : <http://www.arc102.dsl.pipex.com>
- [37] Groupement Français de Combustion (2004), *Les mots de la combustion*.
- [38] P. B. Gooderum (1958), NACA Tech. Note 4243.
- [39] *GRI-Mech Version 3.0 Thermodynamics released 7/30/99. NASA Polynomial format for CHEMKIN-II*. Disponible sur : <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/version30/files30/thermo30.dat>
- [40] A. Hadjadj and A. Kudryavtsev (2005), *Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics*, Journal of Turbulence, **6(16)** ISSN :1468-5248.
- [41] F. Haloua, M. Brouillette, V. Lienhart and G. Dupré (2000), *Characteristics of unstable detonations near extinction limits*, Combustion and Flame, **122** :422-438.
- [42] A. Harten, P.D. Lax and B. van Leer (1983), *On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws*, SIAM Journal, **25** :35-61.
- [43] A. K. Hayashi and M. Hishida (1991), *Numerical study on pulsed jet combustion*, 4th International Symposium on Computational Fluid Dynamics, University of California at Davis, Sept. 9-12, **3** :19-24.

- [44] A. K. Henrick, T. D. Aslam and J. M. Powers (2005), *Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes : Achieving optimal order near critical points*, Journal of Computational Physics, **207** :542-567.
- [45] C. Hirsch (2002), *Numerical computation of internal and external flows*, Volume 2, John Wiley & Sons.
- [46] P. Hwang, R. P. Fedkiw, B. Merriman, T. D. Aslam, A. R. Karagozian and S. J. Osher (2000), *Numerical resolution of pulsating detonation waves*, Combustion Theory and Modelling, **4**, **3** :217-240.
- [47] K. Ishii and H. Gröning (1998), *Behavior of detonation waves at low-pressure*, Shock Waves, **8** :55-61.
- [48] K. Ishii, K. Itoh and T. Tsuboi (2002), *A study on velocity deficits of detonation waves in narrow gaps*, Proceedings of the Combustion Institute, **29** :2789-2794.
- [49] G. S. Jiang and C-W. Shu (1996), *Efficient implementation of Weighted ENO Schemes*, Journal of Computational Physics, **126** :202-228.
- [50] S. Kitano, M. Fukao, A. Susa, N. Tsuboi, A. K. Hayasho and M. Koshi (2009), *Spinning detonation and velocity deficit in small tubes*, Proceedings of the Combustion Institute, **32** :2355-2362.
- [51] R.J. Kee, F.M. Rupley, E. Meeks and J.A. Miller, *CHEMKIN-III : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gaz phase chemical and plasma kinetics*, Sandia National Laboratories, Livermore. CA, 94551-0969.
- [52] J. J. Lee, G. Dupré, R. Knystautas and J. H. Lee (1995), *Doppler interferometry study of unstable detonations*, Shock Waves, **5** :175-181.
- [53] O. Le Métayer, J. Massoni and R. Saurel (2005), *Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers*, Journal of Computational Physics, **205** :567-610.
- [54] N. Manson et H. Guénoche (1957), *Effect of charge diameter on the velocity of detonation waves in gas mixtures*, Proceedings of the 6th Symposium (International) on Combustion, 631-639. Reinhold Publishing, New York.
- [55] V. I. Manzhalei (1992), *Detonation regimes of gases in capillaries*, Combustion, Explosion and Shock Waves, **28** :93-99.
- [56] V. I. Manzhalei (1999), *Low-velocity detonation limits of gaseous mixtures*, Combustion, Explosion and Shock Waves, **35** :296-302.
- [57] S. Mathur, P. K. Tondon and S. C. Saxena (1967), *Thermal conductivity of binary, ternary, and quaternary mixtures of rares gases*, Molecular Physics, **12** :569.
- [58] F. Miniatti and P. Collela (2007), *A modified higher order Godunov's scheme for stiff source conservative hydrodynamics*, Journal of Computational Physics, **224** :519-538.

-
- [59] G. Mirshekari and M. Brouillette (2009), *One-dimensional model for microscale shock tube flow*, Shock Waves, **19** :25-38.
- [60] D. R. Mott, E. S. Oran and B. van Leer (2000), *A Quasi-Steady-State Solver for the stiff ordinary differential equations of reaction kinetics*, Journal of Computational Physics, **164** :407-428.
- [61] S. B. Murray (2008), *Numa Manson on velocity deficits and detonation stability*, Shock Waves, **18** :255-268.
- [62] D. Ngomo, A. Chinnayya, A. Hadjadj and A. Chaudhuri (2010), *Numerical study of shock propagation and attenuation in narrow tubes including friction and heat losses*, Computer and Fluids, **39(9)** :1711-1721.
- [63] H. Ockendon, JR Ockendon and S. Falle (2001), *The Fanno model for turbulent compressible flow*, Journal of Fluid Mechanics, **441** :187-206.
- [64] E. S. Oran, J. W. Weber Jr, E. I. Stefaniw, M. H. Lefebvre and J. D. Anderson Jr (1998), *A numerical study of two-dimensional H₂-O₂-Ar detonation using a detailed chemical reaction model*, Combustion and Flame, **113** :147-163.
- [65] M. V. Papalexandris, A. Leonard and P. Dimotakis (1997), *Unsplit schemes for hyperbolic conservation laws with source terms in one space dimension*, Journal of Computational Physics, **134** :31-61.
- [66] M. V. Papalexandris, A. Leonard and P. E. Dimotakis (2002), *Unsplit algorithms for multidimensional systems of hyperbolic conservation laws with source terms*, Computers and Mathematics with Applications, **44** : 25-49.
- [67] F. Petitpas, R. Saurel, E. Franquet and A. Chinnayya (2009), *Modelling detonation waves in condensed energetic materials : multiphase CJ conditions and multidimensional computations*, Shock Waves, **19** : 377-401.
- [68] A. V. Pinaev (1994), *Combustion modes and flame propagation criteria for encumbered space*, Combustion, Explosion, and Shock Waves, **30** : 454-461.
- [69] M. I. Radulescu and J. H. S. Lee (2002), *The failure mechanism of gaseous detonations : experiments in porous wall tubes*, Combustion and Flame, **131(1-2)** : 29-46.
- [70] M. I. Radulescu, G. J. Sharpe, J. H. S. Lee, C. B. Kiyanda, A. J. Higgins and R. K. Hanson (2005), *The ignition mechanism in irregular structure gaseous detonations*, Proceedings of the Combustion Institute, **30** :1859-1867.
- [71] M. I. Radulescu, G. J. Sharpe, C. K. Law and J. H. S. Lee (2007), *The hydrodynamic structure of unstable cellular detonations*, Journal of Fluid Mechanics, **580** : 31-81.
- [72] K. I. Schelkin and Ya. K. Troshin (1965), *Gasdynamics of combustion*, MONO BOOK Corp., Baltimore. Md

- [73] K. I. Schelkin (1940), *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **10** :823.
- [74] E. Schultz and J. Shepherd (2000), *Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation*. Explosion Dynamics Report FM99-5.
- [75] G. J. Sharpe and S. A. E. G. Falle (1998), *One-dimensional numerical simulations of idealized detonations*, *Proceeding of the Royal Society London A*, **455** :1203-1214.
- [76] G. J. Sharpe (2001), *Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations*, *Journal of Fluid Mechanics*, **447** : 31-51.
- [77] J. E. Shepherd (2009), *Detonation in gases*, *Proceedings of the combustion Institute*, **32** :83-98.
- [78] M. Short and D. S. Stewart (1998), *Cellular detonation stability. Part 1. A normal-mode linear analysis*, *Journal of Fluid Mechanics*, **368** :229-262.
- [79] C-W. Shu (1989), *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes*, *Journal of Computational Physics*, **83** :32-78.
- [80] C-W. Shu (1997), *Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*. NASA/CR-97-206253 ICASE Report No 97-65, 1997.
- [81] D. S. Stewart (2002), *Towards the miniaturization of explosive technology*, *Shock Waves*, **11** :467-473.
- [82] G. Strang (1968), *On the construction and comparison of difference schemes*, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **3(5)** :506-517
- [83] E. F. Toro, M. Spruce and W. Speares (1994), *Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver*, *Shock Waves*, **4** :25-34.
- [84] S. Trélat (2006), *Impact de fortes explosions sur les bâtiments représentatifs d'une installation industrielle*. Thèse soutenue à l'Université d'Orléans.
- [85] S. Tsugé (1971), *The effect of boundaries on the velocity deficit and the limit of gaseous detonations*, *Combustion Science and Technology*, **3** :195-205.
- [86] D. Valiev, V. Bychkov, V. Akkerman, L-E. Eriksson and M. Marklund (2008), *Heating of the fuel mixture due to viscous stress ahead of accelerating flames in deflagration-to-detonation transition*, *Physics Letters A*, **372** :4850-4857.
- [87] D. Valiev, V. Bychkov, V. Akkerman and L-E. Eriksson (2009), *Different stages of flame acceleration from slow burning to Chapman-Jouguet deflagration*, *Physical Review E*, **80** :03617.
- [88] E. R. van Driest (1951), *Turbulent boundary layer in compressible fluids*, *Journal of the Aeronautical Sciences*, **18(3)** :145-160.

-
- [89] F. Virot (2009), *Contribution à l'étude expérimentale et numérique du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes H_2 , CH_4 , $C_2H_6 - O_2$ dilués ou non par N_2 ou Ar* . Thèse soutenue à l'ENSMA, Poitiers.
- [90] C. R. Wilke (1950), *A viscosity equation for gas mixtures*, Journal of Chemical Physics, 18-517.
- [91] D. R. White (1961), *Turbulent Structure of Gaseous Detonation*, Physics of Fluids, **4(4)** : 1958-1988.
- [92] W. W. Wood and J. G. Kirkwood (1954), *Diameter effect in condensed explosives. The relation between velocity and radius of curvature of the detonation wave*, Journal of Chemical Physics, **22(11)** : 1920-1924.
- [93] M-H. Wu, M. P. Burke, S. F. Son and R. A. Yetter (2007), *Flamme acceleration and the transition to detonation of stoichiometric ethylen/oxygen in microscale tubes*, Proceedings of the Combustion Institute, **31** : 2429-2436.
- [94] H. C. Yee, M. Vinokur and M. J. Djomehri (2000), *Entropy splitting and numerical dissipation*, Journal of Computational Physics, **162** :33-81.
- [95] Ya. B. Zel'dovich (1940), *On the theory of detonation propagation in gaseous systems*, Zhur. Eksptl. Teoret. Fiz. **10**, 542; translated in NACA Tech. Mem. 1261.
- [96] Ya. B. Zel'dovich, B. E. Gelfand, Ya. M. Kazhdan and S. M. Frolov (1986), *Detonation propagation in a rough tube taking account of deceleration and heat transfer*, Fizika Goreniya i Vzryva, **23** :103-112.
- [97] D. E. Zeitoun and Y. Burtschell (2006), *Navier-Stokes computations in micro shock tubes*, Shock Waves, **15** :241-246.
- [98] F. Zhang and J. H. S. Lee (1994), *Friction-induced oscillatory behavior of one-dimensional detonations*, Proceeding of Royal Society, **446** :87-105.
- [99] Y. J. Zhu, J. Chao and J.H.S. Lee (2007), *An experimental investigation of the propagation mechanism of critical deflagration waves that lead to the onset of detonation*, Proceedinds of the Combustion Institute, **31** :2455-2462.

Annexe A

Coefficients $a_{n,k}$ de la table thermodynamique, capacités calorifiques et coefficients polytropiques

Les tableaux récapitulatifs A.1, A.2 et A.3 contiennent les coefficients $a_{n,k}$ de la base thermodynamique, utilisée pour le calcul des capacités calorifiques, des enthalpies des différentes espèces chimiques impliquées dans les mélanges étudiés. Les figures A.1 a), A.1 b) et A.1 c) représentent, respectivement, les capacités calorifiques à pression constante, les coefficients polytropiques de chaque espèces chimiques et les coefficients polytropiques des mélanges initiaux et finaux¹ en fonction de la température.

1. On suppose la composition chimique des mélanges reste invariante quelque soit la température

$T(K)$	$a_{n,k}$	Espèces chimiques		
		C_3H_8	CO	CO_2
300 à 1000K	a_1	0.08969208×10^1	0.03262451×10^2	0.02275724×10^2
	a_2	0.02668986×10^0	$0.15119409 \times 10^{-2}$	$0.09922072 \times 10^{-1}$
	a_3	$0.05431425 \times 10^{-4}$	$0.05431425 \times 10^{-4}$	$-0.10409113 \times 10^{-4}$
	a_4	$-0.02126000 \times 10^{-6}$	$-0.03881755 \times 10^{-4}$	$0.06866686 \times 10^{-7}$
	a_5	$0.09243330 \times 10^{-10}$	$0.05581944 \times 10^{-7}$	$-0.02117280 \times 10^{-10}$
	a_6	-0.13954918×10^5	$-0.02474951 \times 10^{-10}$	-0.04837314×10^6
	a_7	0.01935533×10^3	-0.14310539×10^5	0.10188488×10^2
1000 à 4000K	a_8	0.07525217×10^2	0.04848897×10^2	0.04453623×10^2
	a_9	0.01889034×10^0	0.03025078×10^2	$0.14426885 \times 10^{-2}$
	a_{10}	$-0.06283924 \times 10^{-4}$	$-0.06283924 \times 10^{-4}$	$-0.05630827 \times 10^{-5}$
	a_{11}	$0.09179373 \times 10^{-8}$	$0.09179373 \times 10^{-8}$	$0.10185813 \times 10^{-9}$
	a_{12}	$-0.04812410 \times 10^{-12}$	$-0.04812410 \times 10^{-12}$	$-0.0691095 \times 10^{-13}$
	a_{13}	-0.16464548×10^5	-0.16464548×10^5	-0.14268350×10^5
	a_{14}	-0.01784390×10^3	-0.01784390×10^3	0.06108217×10^2

tableau A.1 – Coefficients $a_{n,k}$ pour C_3H_8 , CO et CO_2 .

$T(K)$	$a_{n,k}$	Espèces chimiques		
		H_2	H	H_2O
300 à 1000	a_1	0.03298124 × 10 ²	0.25000000 × 10 ¹	0.03386842 × 10 ²
	a_2	0.08249441 × 10 ⁻²	-0.230842973 × 10 ⁻¹⁰	0.03474982 × 10 ⁻¹
	a_3	-0.08143015 × 10 ⁻⁵	0.161561948 × 10 ⁻¹³	-0.06354696 × 10 ⁻⁴
	a_4	-0.09475434 × 10 ⁻⁹	-0.473515235 × 10 ⁻¹⁷	0.06968581 × 10 ⁻⁷
	a_5	0.04134872 × 10 ⁻¹¹	-0.02506588 × 10 ⁻¹⁰	-0.08768554 × 10 ⁻¹¹
	a_6	-0.10125209 × 10 ⁴	0.254736599 × 10 ⁵	-0.03020811 × 10 ⁶
	a_7	-0.03294094 × 10 ²	-0.446682914 × 10 ⁰	0.02590232 × 10 ²
1000 à 4000	a_8	0.02991423 × 10 ²	0.250000000 × 10 ¹	0.02672145 × 10 ²
	a_9	0.07000644 × 10 ⁻²	0.705332819 × 10 ⁻¹²	0.03056293 × 10 ⁻¹
	a_{10}	-0.05633828 × 10 ⁻⁶	-0.199591964 × 10 ⁻¹⁴	-0.08730260 × 10 ⁻⁵
	a_{11}	-0.09231578 × 10 ⁻¹⁰	0.230081632 × 10 ⁻¹⁷	0.12009964 × 10 ⁻⁹
	a_{12}	0.15827519 × 10 ⁻¹⁴	-0.927732332 × 10 ⁻²¹	-0.06391618 × 10 ⁻¹³
	a_{13}	-0.08350340 × 10 ⁴	0.254736599 × 10 ⁵	-0.02989921 × 10 ⁶
	a_{14}	-0.13551101 × 10 ¹	-0.446682853 × 10 ⁰	0.06862817 × 10 ²

tableau A.2 – Coefficients $a_{n,k}$ pour H_2 , H et H_2O .

$T(K)$	$a_{n,k}$	Espèces chimiques		
		O_2	O	OH
300 à 1000	a_1	0.03212936 × 10 ²	0.02946428 × 10 ²	0.03637266 × 10 ²
	a_2	0.11274864 × 10 ⁻²	-0.16381665 × 10 ⁻²	0.01850910 × 10 ⁻²
	a_3	-0.05756150 × 10 ⁻⁵	0.02421031 × 10 ⁻⁴	-0.16761646 × 10 ⁻⁵
	a_4	0.13138773 × 10 ⁻⁸	-0.16028431 × 10 ⁻⁸	0.02387202 × 10 ⁻⁷
	a_5	0.498197357 × 10 ⁻²¹	0.03890696 × 10 ⁻¹¹	-0.08431442 × 10 ⁻¹¹
	a_6	-0.10052490 × 10 ⁴	0.02914764 × 10 ⁶	0.03606781 × 10 ⁵
	a_7	0.06034737 × 10 ²	0.02963995 × 10 ²	0.13588605 × 10 ¹
1000 à 4000	a_8	0.03697578 × 10 ²	0.02542059 × 10 ²	0.02882730 × 10 ²
	a_9	0.06135197 × 10 ⁻²	-0.02755061 × 10 ⁻³	0.10139743 × 10 ⁻²
	a_{10}	-0.12588420 × 10 ⁻⁶	-0.06283924 × 10 ⁻⁴	-0.02276877 × 10 ⁻⁵
	a_{11}	0.01775281 × 10 ⁻⁹	0.09179373 × 10 ⁻⁸	0.02174683 × 10 ⁻⁹
	a_{12}	-0.11364354 × 10 ⁻¹⁴	-0.04812410 × 10 ⁻¹²	-0.05126305 × 10 ⁻¹⁴
	a_{13}	-0.12339301 × 10 ⁴	-0.16464548 × 10 ⁵	0.03886888 × 10 ⁵
	a_{14}	0.03189165 × 10 ²	-0.01784390 × 10 ³	0.05595712 × 10 ²

tableau A.3 – Coefficients $a_{n,k}$ pour O_2 et O et OH.

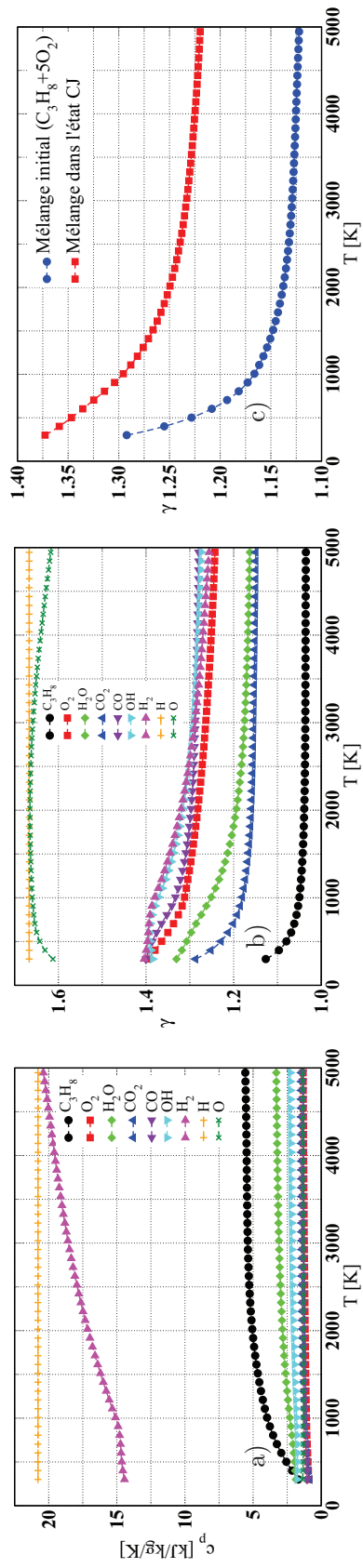


figure A.1 – a) Capacités calorifiques à pression constante - b) Coefficients polytropiques des différentes espèces chimiques -c) Coefficients polytropiques des mélanges initiaux et finaux, en fonction de la température.

Annexe B

Base de données pour les propriétés de transport

Dans cette annexe, nous présentons les propriétés de transport de quelques espèces chimiques ainsi que celles des mélanges qu'ils composent.

Espèces	\mathcal{W} (kg/kmol)	Géom.	ε_k/k_B (K)	$\Sigma(10^{-10}\text{m})$	$\bar{\mu}(D)$	$\alpha(10^{-30}\text{m})$	Z_{rot}^*
C ₃ H ₈	44	2	266.8	4.982	0.000	0.000	001.0
CO	28	1	098.1	3.650	0.000	1.950	001.8
CO ₂	44	1	244.0	3.763	0.000	2.650	002.1
H ₂	2	1	038.0	2.920	0.000	0.790	280.0
H	1	0	145.0	2.050	0.000	0.000	000.0
H ₂ O	18	2	572.4	2.605	1.844	0.000	004.0
O ₂	16	1	107.4	3.458	0.000	1.600	003.8
O	16	0	080.0	2.750	0.000	0.000	000.0
OH	17	1	080.0	2.750	0.000	0.000	000.0

tableau B.1 – Paramètres issus de la théorie cinétique des gaz pour quelques espèces chimiques, disponible dans [39]. L'unité de $\bar{\mu}$ est le Debye.

La première colonne du tableau B.1 présente la formule chimique des espèces, la deuxième donne les masses molaires, la troisième des indications sur la géométrie de la molécule (0 pour une molécule monoatomique, 1 pour une molécule linéaire et 2 pour une molécule non-linéaire). La quatrième colonne regroupe le rapport entre le potentiel de Lennard-Jones et la constante de Boltzmann. La cinquième colonne présente le diamètre de collision de Lennard-Jones. La sixième colonne regroupe le moment dipolaire. La septième colonne fournit les valeurs de la polarisabilité et enfin la dernière colonne donne le nombre de relation rotationnel à 298 K.

Les figures B.1 a, B.1 b, B.1 c et B.2 représentent respectivement la viscosité dynamique, la conductivité thermique, les nombres de Prandtl des espèces chimiques ainsi que ceux des mélanges initial et final¹ en fonction de la température.

1. On suppose que la composition des mélanges ne varie pas avec la température.

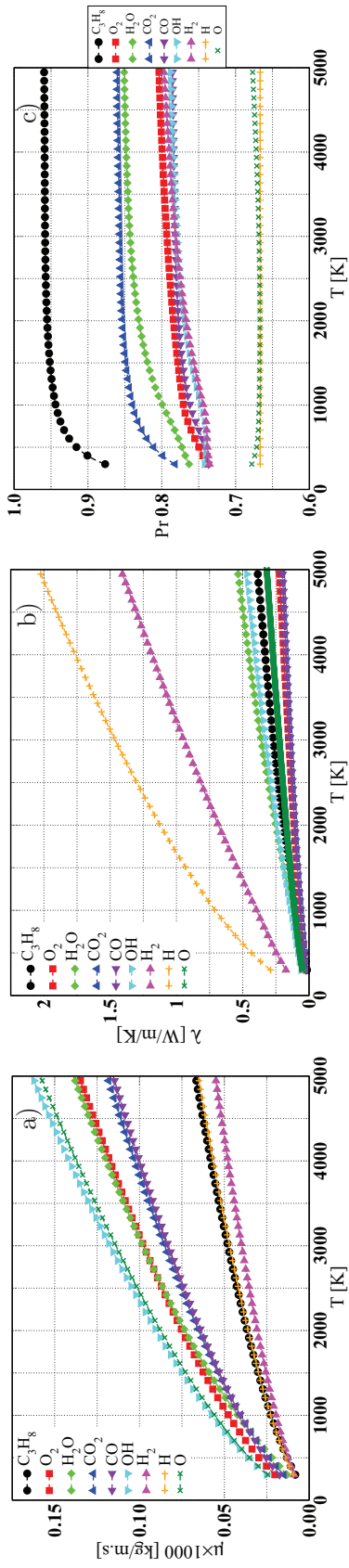


figure B.1 – a) Viscosité dynamique - b) Conductivité thermique - c) Nombre de Prandtl des espèces chimiques en fonction de la température.

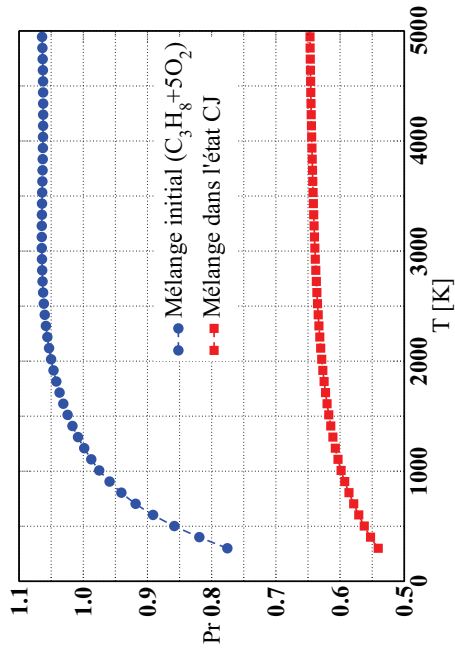


figure B.2 – Nombre de Prandtl des mélanges initial et final en fonction de la température.

Annexe C

Matrices de passage

Les procédures de décomposition des équations et de diagonalisation des matrices, employées dans ce chapitre, sont largement inspirées de celles fournies par Hirsch dans [45].

C.1 Forme conservative des équations d'Euler

Rappelons ici les équations d'Euler 3D multi-espèces sous la forme conservative. L'écoulement de fluide parfait, composé de \mathcal{N}_{sp} espèces chimiques, décrit par ces équations, évolue dans le repère cartésien (x, y, z) . γ est la capacité calorifique moyenne du mélange.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.1})$$

avec

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ \rho_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho v u \\ \rho w u \\ (\rho E + P)u \\ \rho_1 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} u \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v u \\ \rho v^2 + P \\ \rho w v \\ (\rho E + P)v \\ \rho_1 v \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} v \end{bmatrix}, H = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho w u \\ \rho v w \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_1 w \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{\mathcal{N}_{sp}} w \end{bmatrix}$$

L'équation C.1 peut être réécrite de la façon suivante

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial U} \right) \cdot \vec{\nabla} U = 0 \quad (\text{C.2})$$

ou encore

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} U = 0 \quad (\text{C.3})$$

ou plus explicitement

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{A}_1 \cdot \frac{\partial U}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \cdot \frac{\partial U}{\partial y} + \mathbf{A}_3 \cdot \frac{\partial U}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.4})$$

avec $\mathbf{A}_1 = \frac{\partial \vec{F}}{\partial U}$, $\mathbf{A}_2 = \frac{\partial G}{\partial U}$, $\mathbf{A}_3 = \frac{\partial H}{\partial U}$ les matrices jacobiennes du vecteur flux \vec{F} et $\vec{\mathbf{A}} = \frac{\partial \vec{F}}{\partial U}$ fonction des matrices \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 et \mathbf{A}_3 . La matrice jacobienne \mathbf{A} du système hyperbolique C.1 est obtenue par la relation entre les vecteurs $\vec{\mathbf{A}}$ et \vec{i} suivante

$$\mathbf{A} = \vec{\mathbf{A}} \cdot \vec{i} = \mathbf{A}_1 \cdot i_x + \mathbf{A}_2 \cdot i_y + \mathbf{A}_3 \cdot i_z \quad (\text{C.5})$$

où \vec{i} est un vecteur arbitraire donnant le sens de propagation des valeurs propres du système C.1. Les expressions des matrices jacobiennes \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 et \mathbf{A}_3 ne seront pas données ici. Néanmoins, la matrice \mathbf{A} est exprimée ci-dessous

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & i_x & i_y & i_z & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \hat{\gamma} E_k i_x - \mathbf{V}u & A_{21} & ui_y - \hat{\gamma} vi_x & ui_z - \hat{\gamma} wi_x & \hat{\gamma} i_x & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \hat{\gamma} E_k i_y - \mathbf{V}v & vi_x - \hat{\gamma} ui_y & A_{32} & vi_z - \hat{\gamma} wi_y & \hat{\gamma} i_y & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \hat{\gamma} E_k i_z - \mathbf{V}w & wi_x - \hat{\gamma} ui_z & wi_y - \hat{\gamma} vi_z & A_{43} & \hat{\gamma} i_z & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ (2\hat{\gamma} E_k - \gamma E)\mathbf{V} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & \gamma \mathbf{V} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -\mathbf{V}Y_1 & Y_1 i_x & Y_1 i_y & Y_1 i_z & 0 & \mathbf{V} & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -\mathbf{V}Y_{N_{sp}} & Y_{N_{sp}} i_x & Y_{N_{sp}} i_y & Y_{N_{sp}} i_z & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \mathbf{V} \end{bmatrix}$$

où

$$\vec{\mathbf{V}} = [u, v, w]^T : \text{ vecteur vitesse du fluide}$$

$$\mathbf{V} = \vec{\mathbf{V}} \cdot \vec{i}$$

$$\hat{\gamma} = \gamma - 1$$

$$E_k = \frac{\mathbf{V}^2}{2}$$

$$E = c_v T + E_k : \text{ énergie totale du mélange}$$

$$A_{21} = \mathbf{V} + (2 - \gamma)ui_x$$

$$A_{32} = \mathbf{V} + (2 - \gamma)vi_y$$

$$A_{43} = \mathbf{V} + (2 - \gamma)wi_z$$

$$A_{52} = (\gamma E - \hat{\gamma} E_k) i_x - \hat{\gamma} \mathbf{V}u$$

$$A_{53} = (\gamma E - \hat{\gamma} E_k) i_y - \hat{\gamma} \mathbf{V}v$$

$$A_{54} = (\gamma E - \hat{\gamma} E_k) i_z - \hat{\gamma} \mathbf{V}w$$

C.2 Forme primitive des équations d'Euler

On peut encore écrire les équations d'Euler 3D sous la forme primitive. Le système d'équations C.1 devient alors

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \left(\vec{\tilde{\mathbf{A}}} \cdot \vec{\nabla} \right) V = 0 \quad (\text{C.6})$$

où $V = [\rho, u, v, w, E, Y_1, \dots, Y_{\mathcal{N}_{sp}}]^T$ est le vecteur des variables primitives. C.6 peut être écrite sous la forme suivante

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \tilde{\mathbf{A}}_1 \cdot \frac{\partial V}{\partial x} + \tilde{\mathbf{A}}_2 \cdot \frac{\partial V}{\partial y} + \tilde{\mathbf{A}}_3 \cdot \frac{\partial V}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.7})$$

En posant $\mathbf{M} = \frac{\partial U}{\partial V}$, les matrices jacobiennes $\tilde{\mathbf{A}}_1$, $\tilde{\mathbf{A}}_2$ et $\tilde{\mathbf{A}}_3$ sont données respectivement par $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}_1\mathbf{M}$, $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{M}$ et $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}_3\mathbf{M}$. La matrice \mathbf{M} et son inverse \mathbf{M}^{-1} quant à elles, sont données ci-dessous

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ u & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ v & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ w & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ E_k & \rho u & \rho v & \rho w & 1/\hat{\gamma} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ Y_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ Y_{\mathcal{N}_{sp}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \rho \end{bmatrix} \quad (\text{C.8})$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -u/\rho & 1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -v/\rho & 0 & 1/\rho & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -w/\rho & 0 & 0 & 1/\rho & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \hat{\gamma}E_k & -\hat{\gamma}u & -\hat{\gamma}v & -\hat{\gamma}w & \hat{\gamma} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -Y_1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\rho & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -Y_{\mathcal{N}_{sp}}/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1/\rho \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

La matrice $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{M}$ s'écrit

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \mathbf{V} & \rho i_x & \rho i_y & \rho i_z & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \mathbf{V} & 0 & 0 & i_x/\rho & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{V} & 0 & i_y/\rho & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{V} & i_z/\rho & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \rho c^2 i_x & \rho c^2 i_y & \rho c^2 i_z & \mathbf{V} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{V} & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \mathbf{V} \end{bmatrix} \quad (\text{C.10})$$

avec

$$c = \sqrt{\gamma p/\rho}, \quad \text{la vitesse du son du fluide.} \quad (\text{C.11})$$

La diagonalisation de la matrice $\tilde{\mathbf{A}}$ permet l'obtention des valeurs propres λ des équations d'Euler 3D réactives multi-espèces.

$$\lambda = \{\mathbf{V}, \mathbf{V}, \mathbf{V}, \mathbf{V}, \mathbf{V}, \dots, \mathbf{V}, \mathbf{V} + c, \mathbf{V} - c\} \quad (\text{C.12})$$

L'ensemble de ces valeurs propres peut être mis sous forme matricielle pour obtenir la matrice des valeurs propres Λ ci-dessous.

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \mathbf{V} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{V} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{V} & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{V} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{V} & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \mathbf{V} + c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \mathbf{V} - c \end{bmatrix} \quad (\text{C.13})$$

On peut ainsi déduire la matrice des vecteurs propres à gauche \mathbf{L}^{-1} et son inverse \mathbf{L} .

$$\mathbf{L}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -1/c^2 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & i_y + i_z & i_x & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & i_z & i_x + i_y & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 \\ 0 & i_x & i_y & i_z & 1/\rho c & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & i_x & i_y & i_z & -1/\rho c & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{C.14})$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho/2c & -\rho/2c \\ 0 & i_y + i_z & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & i_x/2 & i_x/2 \\ 0 & i_x & i_z & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & i_y/2 & i_y/2 \\ 0 & 0 & i_x + i_y & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & i_z/2 & i_z/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho c/2 & -\rho c/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{C.15})$$

La matrice jacobienne conservative \mathbf{A} peut aussi être diagonalisée

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{M} = \mathbf{L}\mathbf{\Lambda}\mathbf{L}^{-1}$$

d'où

$$\mathbf{A}\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{L}\mathbf{\Lambda}\mathbf{L}^{-1} \quad \text{soit} \quad \mathbf{A} = \mathbf{M}\mathbf{L}\mathbf{\Lambda}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{M}^{-1}$$

On peut ainsi définir la matrice \mathbf{P} et son inverse \mathbf{P}^{-1} , respectivement par $\mathbf{M}\mathbf{L}$ et $\mathbf{L}^{-1}\mathbf{M}^{-1}$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho/2c & -\rho/2c \\ u & \rho(i_y + i_z) & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho/2c(u + ci_x) & -\rho/2c(u - ci_x) \\ v & \rho i_x & \rho i_z & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho/2c(v + ci_y) & -\rho/2c(v - ci_y) \\ w & 0 & \rho(i_x + i_y) & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho/2c(w + ci_z) & -\rho/2c(w - ci_z) \\ E_k & P_{52} & P_{53} & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \rho(h_t + \mathbf{V}c)/2c & -\rho(h_t - \mathbf{V}c)/2c \\ Y_1 & 0 & 0 & \rho & \cdot & \cdot & 0 & \rho Y_1/2c & -\rho Y_1/2c \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ Y_{N_{sp}} & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \rho & \rho Y_{N_{sp}}/2c & -\rho Y_{N_{sp}}/2c \end{bmatrix}$$

avec

$$h_t = c_p T + E_k : \quad \text{Enthalpie totale du gaz}$$

$$P_{52} = \rho v i_x + \rho u (i_y + i_z)$$

$$P_{53} = \rho w (i_x + i_y) + \rho v i_z$$

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 - \hat{\gamma} E_k c^2 & \hat{\gamma} u / c^2 & \hat{\gamma} v / c^2 & \hat{\gamma} w / c^2 & -\hat{\gamma} / c^2 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ P_{21}^{-1} & (i_y + i_z) / \rho & i_x / \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ P_{31}^{-1} & 0 & i_z / \rho & (i_x + i_y) / \rho & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -Y_1 / \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 / \rho & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -Y_{N_{sp}} / \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 / \rho \\ \eta & \xi_x & \xi_y & \xi_z & \hat{\gamma} / \rho c & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -\eta & \xi_x & \xi_y & \xi_z & -\hat{\gamma} / \rho c & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \end{bmatrix}$$

où

$$\begin{aligned}
 P_{21}^{-1} &= -(vi_x + ui_y + ui_z)/\rho \\
 P_{31}^{-1} &= -(wi_x + wi_y + vi_z)/\rho \\
 \eta &= (\hat{\gamma}E_k - \mathbf{V}c)/\rho c \\
 \xi_x &= (ci_x - \hat{\gamma}u)/\rho c \\
 \xi_y &= (ci_y - \hat{\gamma}v)/\rho c \\
 \xi_z &= (ci_z - \hat{\gamma}w)/\rho c
 \end{aligned}$$

La figure C.1 récapitule les liens existants entre les différentes variables. Pour passer des variables conservatives aux variables primitives, il suffit de multiplier les variables conservatives par l'inverse de la matrice \mathbf{M} . Faire l'opération inverse si l'on souhaite passer des variables primitives aux variables conservatives. Cette procédure est la même pour le passage entre les autres variables.

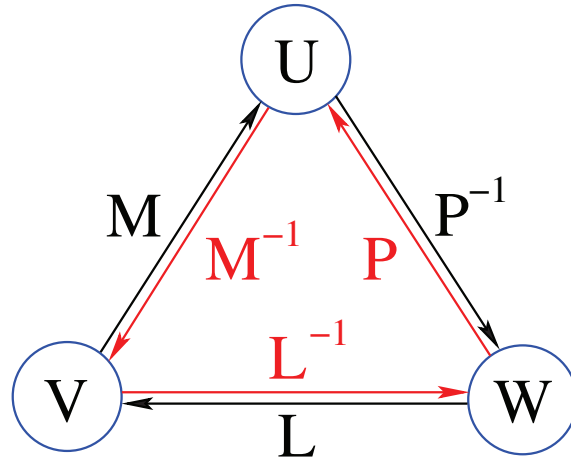


figure C.1 – Récapitulatif des relations entre les variables conservatives U , les variables primitives V et les variables caractéristiques W .

Annexe D

Equation d'Hugoniot des gaz brûlés

Considérons une onde de détonation qui se propage de la gauche vers la droite à une vitesse moyenne σ (voir figure D.1). En utilisant les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans le repère du choc à l'état stationnaire (équations (D.1)), on peut connaître l'état thermodynamique du fluide dans l'état 2 après passage de l'onde.

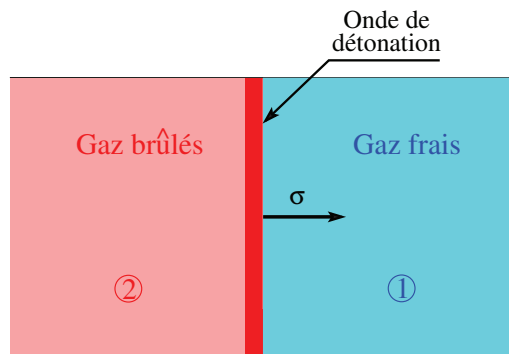


figure D.1 – Front de détonation selon Chapman et Jouguet.

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (\text{D.1a})$$

$$P_1 + \rho_1 u_1^2 = P_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (\text{D.1b})$$

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (\text{D.1c})$$

L'équation D.1c peut s'écrire à nouveau

$$\underbrace{e_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + h_2^0 + \frac{u_2^2}{2}}_{h_2} = \underbrace{e_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + h_1^0 + \frac{u_1^2}{2}}_{h_1} \quad (\text{D.2})$$

soit

$$e_2 - e_1 + \frac{P_2}{\rho_2} - \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{u_2^2 - u_1^2}{2} + \underbrace{h_2^0 - h_1^0}_{-q} = 0 \quad (\text{D.3})$$

où q est la quantité d'énergie échangée durant le passage de l'état 1 à l'état 2. Dans ce cas précis, il s'agit de l'énergie fournie par les réactions chimiques. D'après l'équation de conservation de la quantité de mouvement, nous avons

$$P_1 + \rho_1 u_1^2 = P_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (\text{D.4})$$

d'où l'on tire

$$u_1^2 = P_2 + \rho_2 u_2^2 - P_1 \rho_1 \quad \text{et} \quad u_2^2 = P_1 + \rho_1 u_1^2 - P_2 \rho_2 \quad (\text{D.5})$$

Nous avons alors

$$e_2 - e_1 + \frac{P_2}{\rho_2} - \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{P_1 + \rho_1 u_1^2 - P_2}{2\rho_2} - \frac{P_2 + \rho_2 u_2^2 - P_1}{2\rho_1} - q = 0 \quad (\text{D.6})$$

que nous pouvons réécrire

$$e_2 - e_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{P_2}{\rho_2} - \frac{P_1}{\rho_1} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{P_1}{\rho_2} - \frac{P_2}{\rho_1} + \frac{\rho_1 u_1^2}{\rho_2} - \frac{\rho_2 u_2^2}{\rho_1} \right) - q = 0 \quad (\text{D.7})$$

Or

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad \text{soit} \quad \frac{\rho_1 u_1^2}{\rho_2} = \frac{\rho_2 u_2^2}{\rho_1} \quad (\text{D.8})$$

Nous obtenons donc

$$e_2 - e_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{P_2}{\rho_2} - \frac{P_1}{\rho_1} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{P_1}{\rho_2} - \frac{P_2}{\rho_1} \right) - q \quad (\text{D.9})$$

soit

$$\boxed{e_2 - e_1 + \frac{P_2 + P_1}{2} \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) - q = 0} \quad (\text{D.10})$$

L'équation (D.10) est connue sous le nom de relation d'Hugoniot réactif avec $e_2 = e_2(P_2, \rho_2)$ et $e_1 = e_1(P_1, \rho_1)$. De l'équation de conservation de quantité de mouvement (D.1b), on peut écrire

$$P_2 - P_1 + \rho_2 u_2^2 - \rho_1 u_1^2 = 0 \quad (\text{D.11})$$

Dans l'état Chapman Jouget, $u_2 = c_2$, où c_2 est la vitesse du son du milieu 2. En remplaçant u_2 par c_2 dans l'équation ci-dessus, nous obtenons

$$P_2 - P_1 + \rho_2 c_2^2 - \rho_1 u_1^2 = 0 \quad \text{soit} \quad P_2 - P_1 + \frac{\rho_2^2 c_2^2}{\rho_2} - \frac{\rho_1^2 u_1^2}{\rho_1} = 0 \quad (\text{D.12})$$

nous retrouvons la droite de Rayleigh (équation D.13)

$$\boxed{P_2 - P_1 + (\rho_2 c_2)^2 \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) = 0} \quad (\text{D.13})$$

Cette équation relie les états initial et final du fluide.

D.1 Détermination de l'état Chapman-Jouguet

Afin de déterminer l'état Chapman-Jouguet, à savoir les propriétés thermodynamiques ainsi que la vitesse du gaz à l'endroit où le nombre de Mach du fluide dans le repère du choc vaut 1, il convient de résoudre l'équation (D.10). Pour cela, la méthode d'itération de Newton-Raphson, brièvement décrite dans 3.5, sera utilisée.

$$f = f(P_2) = e_2 - e_1 + \frac{P_2 + P_1}{2} \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) - q \quad (\text{D.14})$$

En dérivant cette fonction par rapport à P_2 , nous obtenons

$$f'(P_2) = \frac{df}{dP_2} = \frac{de_2}{dP_2} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) + \frac{P_2 + P_1}{2} \frac{d(1/\rho_2)}{dP_2} \quad (\text{D.15})$$

Or

$$de_2 = \frac{\partial e_2}{\partial \rho_2} d\rho_2 + \frac{\partial e_2}{\partial P_2} dP_2 \quad (\text{D.16})$$

Dans le cas d'un gaz parfait, avec γ constant, l'équation d'état devient

$$e_2 = \frac{P_2}{\rho_2(\gamma - 1)} \quad (\text{D.17})$$

et la vitesse du son c_2 dans l'état 2 s'écrit

$$c_2^2 = \frac{\gamma P_2}{\rho_2} \quad (\text{D.18})$$

les dérivées partielles de l'équation d'état peuvent alors s'écrire

$$\frac{\partial e_2}{\partial \rho_2} = -\frac{P_2}{\rho_2^2(\gamma - 1)} \quad \text{et} \quad \frac{\partial e_2}{\partial P_2} = \frac{1}{\rho_2(\gamma - 1)} \quad (\text{D.19})$$

Pour exprimer $d\rho_2/dP_2$ et $d(1/\rho_2)/dP_2$, nous utilisons la droite de Rayleigh (équation (D.13)) qui peut être réécrite de la façon ci-dessous

$$P_2 - P_1 + \frac{\rho_2^2 \gamma P_2}{\rho_2} \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) = 0 \quad (\text{D.20})$$

ou encore

$$P_2 - P_1 + \gamma P_2 - \frac{\gamma P_2 \rho_2}{\rho_1} = 0 \quad (\text{D.21})$$

nous obtenons

$$P_2 - P_1 + \gamma P_2 = \frac{\gamma P_2 \rho_2}{\rho_1} \quad \text{soit} \quad \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{P_2 - P_1 + \gamma P_2}{\gamma P_2} \quad (\text{D.22})$$

d'où

$$\boxed{\rho_2 = \rho_1 \left(\frac{P_2 - P_1 + \gamma P_2}{\gamma P_2} \right)} \quad (\text{D.23})$$

nous avons alors

$$\frac{d\rho_2}{dP_2} = \frac{\rho_1 P_1}{\gamma P_2^2} \quad \text{et} \quad \frac{d(1/\rho_2)}{dP_2} = -\frac{\gamma P_1}{[(\gamma + 1)P_2 - P_1]^2} \quad (\text{D.24})$$

ainsi

$$f'(P_2) = -\frac{\rho_1 P_1}{\gamma \rho_2^2 (\gamma - 1) P_2} + \frac{1}{\rho_2 (\gamma - 1)} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) - \frac{\gamma P_1 (P_2 + P_1)}{2 [(\gamma + 1) P_2 - P_1]^2} \quad (\text{D.25})$$

La procédure d'itération se fait de la façon ci-après. D'abord on calcule la pression P_{cj}

$$P_{cj} = P_2 - \frac{f(P_2)}{f'(P_2)} \quad (\text{D.26})$$

ensuite, la masse volumique ρ_{cj} est déduite

$$\rho_{cj} = \rho_1 \left(1 + \frac{P_{cj} - P_1}{\gamma P_{cj}} \right) \quad (\text{D.27})$$

Ces calculs sont effectués jusqu'à convergence. Les valeurs de P_{cj} et de ρ_{cj} étant connues, il est donc possible de calculer la vitesse du son dans l'état CJ via l'expression

$$c_{cj} = \sqrt{\frac{\gamma P_{cj}}{\rho_{cj}}} \quad (\text{D.28})$$

En utilisant l'équation de conservation de masse $\rho_1(\sigma_{cj} - u_1) = \rho_2 c_{cj}$, nous déduisons la vitesse de propagation σ_{cj} de l'onde

$$\sigma_{cj} = \frac{\rho_2 c_{cj}}{\rho_1} + u_1 \quad (\text{D.29})$$

A partir de là, nous pouvons déduire la vitesse du fluide après passage de l'onde de détonation

$$u_2 = \sigma_{cj} - c_{cj} \quad (\text{D.30})$$

La température à l'état CJ, quant à elle, s'obtient à l'aide de l'expression suivante

$$T_{cj} = \frac{P_{cj} \mathcal{W}_m}{\mathcal{R}_u \rho_{cj}} \quad (\text{D.31})$$

où \mathcal{W}_m est la masse molaire du mélange à l'état CJ.

D.2 Détermination de l'état Neumann

La procédure de détermination de l'état Neumann est la même que celle utilisée pour l'état Chapman-Jouguet. Pour cela, il nous faut d'abord déterminer la fonction f et sa dérivée f' . Notons qu'il est nécessaire de connaître la vitesse de propagation de l'onde pour déterminer l'état Neumann. C'est pour cela que l'état Chapman-Jouguet doit être déterminée en premier lieu. Nous partons toujours des équations de conservation à l'état stationnaire :

- Bilan de masse

$$\rho_1(\sigma_{cj} - u_1) = \rho_{vn}(\sigma_{cj} - u_{vn}) \quad \text{soit} \quad \boxed{u_{vn} = \sigma_{cj} - \frac{\rho_1(\sigma_{cj} - u_1)}{\rho_{vn}}} \quad (\text{D.32})$$

- Bilan de quantité de mouvement

$$P_{vn} + \rho_{vn}(\sigma_{cj} - u_{vn})^2 = P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 \quad (\text{D.33})$$

soit

$$P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 - P_{vn} = \rho_{vn}(\sigma_{cj} - u_{vn})^2 \quad (\text{D.34})$$

$$= \rho_{vn} \left[\sigma_{cj} - \sigma_{cj} + \frac{\rho_1(\sigma_{cj} - u_1)}{\rho_{vn}} \right]^2 \quad (\text{D.35})$$

$$= \rho_{vn} \left[\frac{\rho_1(\sigma_{cj} - u_1)}{\rho_{vn}} \right]^2 \quad (\text{D.36})$$

$$(\text{D.37})$$

Nous avons alors

$$\frac{\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2}{\rho_{vn}} = P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 - P_{vn} \quad (\text{D.38})$$

La masse volumique dans l'état Neumann est ainsi obtenue

$$\rho_{vn} = \frac{\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2}{P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 - P_{vn}} \quad (\text{D.39})$$

de même son inverse

$$\boxed{\frac{1}{\rho_{vn}} = \frac{P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 - P_{vn}}{\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2}} \quad (\text{D.40})$$

- Bilan d'énergie

$$e_{vn} - e_1 + \frac{P_2 + P_1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{vn}} - \frac{1}{\rho_1} \right) = 0 = f(P_{vn}) \quad (\text{D.41})$$

La dérivée $f'(P_{vn})$ de $f(P_{vn})$ s'écrit alors

$$f'(P_{vn}) = \frac{df}{dP_{vn}} = \frac{\partial e_{vn}}{\partial \rho_{vn}} \frac{d\rho_{vn}}{dP_{vn}} + \frac{\partial e_{vn}}{\partial P_{vn}} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{vn}} - \frac{1}{\rho_1} \right) + \frac{P_{vn} + P_1}{2} \frac{d(1/\rho_{vn})}{dP_{vn}} \quad (\text{D.42})$$

Pour un gaz parfait avec γ constant, les dérivées partielles de e_{vn} s'écrivent

$$\frac{\partial e_{vn}}{\partial \rho_{vn}} = -\frac{P_{vn}}{\rho_{vn}^2(\gamma - 1)} \quad \text{et} \quad \frac{\partial e_{vn}}{\partial P_{vn}} = \frac{1}{\rho_{vn}(\gamma - 1)} \quad (\text{D.43})$$

Les dérivées de ρ_{vn} et de son inverse sont données par les expressions suivantes

$$\frac{d\rho_{vn}}{dP_{vn}} = \frac{\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2}{[P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 - P_{vn}]^2} \quad \text{et} \quad \frac{d(1/\rho_{vn})}{dP_{vn}} = -\frac{1}{\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2} \quad (\text{D.44})$$

nous pouvons donc réécrire $f'(P_{vn})$

$$f'(P_{vn}) = \frac{-\frac{P_{vn}\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2}{\rho_{vn}^2(\gamma - 1)[P_1 + \rho_1(\sigma_{cj} - u_1)^2 - P_{vn}]^2}}{+\frac{1}{\rho(\gamma - 1)} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\rho_{vn}} - \frac{1}{\rho_1}\right) - \frac{P_{vn} + P_1}{2\rho_1^2(\sigma_{cj} - u_1)^2}} \quad (\text{D.45})$$

La procédure d'itération est la même que celle décrite pour le calcul de l'état Chapman-Jouguet.

Annexe E

Détermination numérique de la vitesse d'une onde de détonation

En utilisant les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie totale 1D à l'état stationnaire, il est possible d'obtenir une relation permettant de déterminer la vitesse de propagation σ d'une onde de détonation monodimensionnelle. Dans le repère absolu, le bilan de masse fournit

$$\frac{d\rho u}{dx} = 0 \quad (\text{E.1})$$

en explicitant l'expression ci-dessus au travers du choc, nous obtenons

$$(\rho u)_1 = (\rho u)_2 \quad (\text{E.2})$$

Les quantités indicées par 1 sont celles de l'état avant le choc tandis que celles indicées par 2 sont celles de l'état choqué. Dans le repère relatif au choc, nous pouvons écrire

$$\rho_1(u'_1 - \sigma) = \rho_2(u'_2 - \sigma) \quad (\text{E.3})$$

u'_1 et u'_2 sont respectivement les vitesses du gaz en amont et en aval du choc, dans le repère de ce dernier. En arrangeant l'équation ci dessus, nous pouvons écrire

$$\sigma = \frac{\rho_2 u'_2 - \rho_1 u'_1}{\rho_2 - \rho_1} \quad (\text{E.4})$$

Or, nous savons que la masse volumique et la vitesse d'une onde de détonation atteignent leurs valeurs maximales dans l'état 2, numériquement cela se traduit par

$$\sigma = \frac{(\rho u')_{max,i} - \rho_1 u'_1}{\rho_{max,i} - \rho_1} \quad (\text{E.5})$$

Dans le cas d'une onde de détonation multidimensionnelle, l'équation ci-dessus est toujours valable si elle est prise en chaque plan $j = cte$.

Annexe F

Censeur de choc

Après passage d'un choc, le volume des particules fluides d'un gaz subit une compression. Mathématiquement, cela se traduit par une valeur négative de la divergence de la vitesse de l'écoulement. Les expressions qui vont suivre serviront à établir le critère permettant de localiser un choc à partir des estimations des vitesses de Davis du solveur de Riemann *HLLC*. Pour des écoulements réactifs résolus avec le solveur *WENO5-HLLC*, ce critère permettra de cibler les endroits où les réactions chimiques doivent être ou non activées.

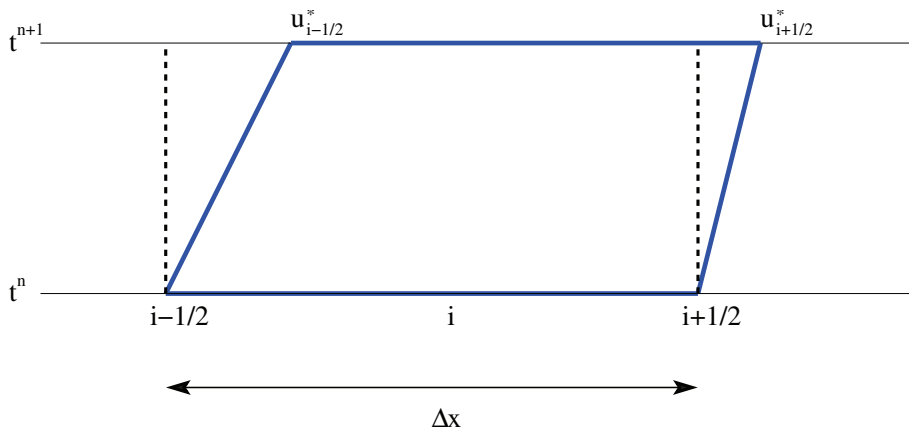


figure F.1 – Diagramme (x, t) schématisant la variation du volume des particules fluides après passage d'un choc.

Soit un écoulement unidimensionnel discontinu. La figure F.1 représente un diagramme (x, t) , schématisant la variation temporelle du volume d'une particule fluide après passage d'une onde. Lorsqu'il s'agit d'une onde de choc, le volume de la particule fluide est diminuée. $u_{i-1/2}^*$ et $u_{i+1/2}^*$ sont les vitesses de l'écoulement dans lequel se trouve la particule fluide, respectivement aux interfaces $i - 1/2$ et $i + 1/2$ délimitant le volume de la particule fluide à l'instant t^n . La divergence de l'écoulement à l'instant t^n selon cette figure s'écrit

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \frac{u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*}{\Delta x_i^n} \quad (\text{F.1})$$

Cependant

$$\Delta x_i^{n+1} = \Delta x_i^n + \Delta t \left(u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^* \right) \quad (\text{F.2})$$

soit encore

$$\frac{\Delta x_i^{n+1} - \Delta x_i^n}{\Delta x_i^n} = \frac{\Delta t}{\Delta x_i^n} \left(u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^* \right) \quad (\text{F.3})$$

que l'on peut encore réécrire

$$\frac{\Delta x_i^{n+1}}{\Delta x_i^n} = 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x_i^n} \left(u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^* \right) \quad (\text{F.4})$$

avec $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Si

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \epsilon < 0 \quad (\text{F.5})$$

Cela veut dire que

$$\frac{\Delta x_i^{n+1}}{\Delta x_i^n} = 1 + \epsilon = \epsilon' < 1 \quad (\text{F.6})$$

La particule fluide a subit un choc. Durant les calculs réactifs, les réactions chimiques ne sont pas activées quand $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} > \epsilon = 0.001$.

Annexe G

Critère de sonicité

Dans un repère cartésien (x, y) , les équations de Navier-Stokes s'écrivent

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [F(U) - F_v(U)] + \frac{\partial}{\partial y} [G(U) - G_v(U)] = S(U) \quad (\text{G.1})$$

avec

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_{sp}} \end{bmatrix}, \quad F(U) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ (\rho E + P)u \\ \rho_1 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_{sp}} u \end{bmatrix}, \quad G(U) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ (\rho E + P)v \\ \rho_1 v \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_{sp}} v \end{bmatrix}$$

$$F_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{yx} \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix}, \quad G_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix}, \quad S(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathcal{W}_1 \dot{\omega}_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathcal{W}_{N_{sp}} \dot{\omega}_{N_{sp}} \end{bmatrix}$$

Considérons le changement de repère suivant (figure G.1)

$$t' = t, \quad x' = \sigma t - x, \quad y' = -y, \quad u' = \sigma - u \quad \text{et} \quad v' = -v$$

où σ est la vitesse moyenne de l'onde de détonation. La dérivée partielle par rapport au temps s'écrit comme suit

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial t}}_{=0} + \frac{\partial}{\partial y'} \frac{\partial y'}{\partial t} \quad (\text{G.2})$$



figure G.1 – Changement de repère.

ainsi, les dérivées dans le repère de l'onde s'écrivent

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t'} + \sigma \frac{\partial}{\partial x'} \\ \frac{\partial}{\partial x} &= -\frac{\partial}{\partial x'} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= -\frac{\partial}{\partial y'}\end{aligned}\tag{G.3}$$

Dans les équations de Navier-Stokes, nous pouvons donc évaluer les contraintes visqueuses. Par exemple

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ &= \frac{4}{3}\mu \left(-\frac{\partial(\sigma - u')}{\partial x'} \right) - \frac{2}{3}\mu \left(-\frac{\partial(-v')}{\partial y'} \right) \\ &= \frac{4}{3}\mu \left(\frac{\partial u'}{\partial x'} \right) - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial v'}{\partial y'} \right) \\ &= \tau_{x'x'}\end{aligned}$$

De même, les autres contraintes visqueuses deviennent

$$\tau_{xy} = \tau_{x'y'} \quad \text{et} \quad \tau_{yy} = \tau_{y'y'}$$

Les équations de continuité, de conservation de quantité de mouvement et de conservation des espèces chimiques restent inchangées

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} + \frac{\partial \rho u'}{\partial x'} + \frac{\partial \rho v'}{\partial y'} = 0\tag{G.4}$$

$$\frac{\partial \rho u'}{\partial t'} + \frac{\partial(\rho u'^2 + P)}{\partial x'} + \frac{\partial \rho u' v'}{\partial y'} = \frac{\partial \tau_{x'x'}}{\partial x'} + \frac{\partial \tau_{x'y'}}{\partial y'}\tag{G.5}$$

$$\frac{\partial \rho v'}{\partial t'} + \frac{\partial \rho u' v'}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho v'^2 + P)}{\partial y'} = \frac{\partial \tau_{x'y'}}{\partial x'} + \frac{\partial \tau_{y'y'}}{\partial y'}\tag{G.6}$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t'} + \frac{\partial(\rho u' Y_k)}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho v' Y_k)}{\partial y'} = \mathcal{W}_k \dot{\omega}_k + \frac{\partial}{\partial x'} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial x'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y'} \right)\tag{G.7}$$

L'équation de conservation de l'énergie totale reste également inchangée

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho E'}{\partial t'} + \frac{\partial}{\partial x'} (\rho E' u' + P u') + \frac{\partial}{\partial y'} (\rho E' v' + P v') &= \frac{\partial}{\partial x'} (\tau_{x'x'} u' + \tau_{x'y'} v') \\
&+ \frac{\partial}{\partial y'} (\tau_{x'y'} u' + \tau_{y'y'} v') \\
&+ \frac{\partial}{\partial x'} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y'} \right) \\
&+ \sum_k \frac{\partial}{\partial x'} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x'} \right) \\
&+ \sum_k \frac{\partial}{\partial y'} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial y'} \right)
\end{aligned} \tag{G.8}$$

Les équations de Navier-Stokes réactives sont effet invariantes par rotation et translation galiléennes. L'énergie totale E' , dans le repère de l'onde, s'écrit $E' = e + (u'^2 + v'^2)/2$. Par la suite, pour des raisons de simplicité, les primes seront omises. En explicitant l'équation de l'énergie totale, nous pouvons obtenir l'équation sur l'énergie interne

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u \frac{\partial e}{\partial x} + v \frac{\partial e}{\partial y} \right) + P \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}'_{diff} \tag{G.9}$$

avec le taux de dissipation visqueuse Φ

$$\Phi = \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \tag{G.10}$$

le flux thermique \dot{q}_{th}

$$\dot{q}_{th} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \tag{G.11}$$

et les flux d'enthalpies des espèces chimiques \dot{q}'_{diff}

$$\dot{q}'_{diff} = \sum_k \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \tag{G.12}$$

La différenciation de l'énergie interne donne

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_{\rho, Y_k} dP + \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{P, Y_k} d\rho + \sum_k \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho, P} dY_k \tag{G.13}$$

Or on a $e = \sum_k Y_k h_k(T) - \frac{P}{\rho}$ tel que $h_k = h_k^0 + \int_{T^0}^T c_{p,k}(\tau) d\tau$ et $T = \frac{PW}{R\rho}$. Donc

$$e = \sum_k Y_k h_k \left(\frac{PW}{R\rho} \right) - \frac{P}{\rho} \tag{G.14}$$

Les dérivées partielles peuvent alors se mettre sous la forme

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_{\rho, Y_k} &= \sum Y_k \frac{dh_k}{dT} \frac{\mathcal{W}}{R\rho} - \frac{1}{\rho} \\
 &= \left(\sum_k Y_k c_{p,k}\right) \frac{\mathcal{W}}{R\rho} - \frac{1}{\rho} \\
 &= c_{p,m} \frac{\mathcal{W}}{R\rho} - \frac{1}{\rho} \\
 &= \frac{1}{(\gamma - 1)\rho}
 \end{aligned} \tag{G.15}$$

et

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_{P, Y_k} &= -\sum Y_k \frac{dh_k}{dT} \frac{P\mathcal{W}}{R\rho^2} + \frac{P}{\rho^2} \\
 &= \frac{P}{\rho^2} \left(1 - c_{p,m} \frac{\mathcal{W}}{R}\right) \\
 &= -\frac{P}{(\gamma - 1)\rho^2}
 \end{aligned} \tag{G.16}$$

et ensuite

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k}\right)_{\rho, P} &= h_k + \sum_i Y_i c_{p,i} \frac{P}{R\rho} \frac{-\mathcal{W}^2}{\mathcal{W}_k} \\
 &= h_k - c_{p,m} T \frac{\mathcal{W}}{\mathcal{W}_k}
 \end{aligned} \tag{G.17}$$

A partir de l'équation de l'énergie interne, nous pouvons obtenir l'équation sur la pression. Ainsi, les équations des variables primitives (u, v, P) sont alors

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \tag{G.18}$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \tag{G.19}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + u \frac{\partial P}{\partial x} + v \frac{\partial P}{\partial y} + \rho c^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = (\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) \tag{G.20}$$

avec \dot{q} l'énergie fournie à l'écoulement par les réactions chimiques, par unité de temps

$$\dot{q} = \sum_k \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho, P} \mathcal{W}_k (\nu_k'' - \nu_k') \dot{\xi} \tag{G.21}$$

où $\dot{\xi}$ est la variable d'avancement de la réaction chimique.

En régime stationnaire, nous avons $\partial/\partial t = 0$. L'équation sur la pression nous donne alors le bilan énergétique suivant

$$\boxed{\mathcal{H} + \mathcal{P}_{visq} = (\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff})} \tag{G.22}$$

avec

$$\mathcal{H} = \rho(c^2 - u^2) \frac{\partial u}{\partial x} + \rho(c^2 - v^2) \frac{\partial v}{\partial y} - \rho uv \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (\text{G.23})$$

\mathcal{P}_{visq} la puissance des contraintes visqueuses

$$\mathcal{P}_{visq} = u \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) + v \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) \quad (\text{G.24})$$

\dot{q} l'énergie fournie à l'écoulement par les réactions chimiques, par unité de temps

$$\dot{q} = \sum_k \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho, P} \mathcal{W}_k (\nu_k'' - \nu_k') \dot{\xi} \quad (\text{G.25})$$

où $\dot{\xi}$ est la variable d'avancement de la réaction chimique.

Le taux de dissipation visqueuse Φ est

$$\Phi = \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \quad (\text{G.26})$$

le flux thermique \dot{q}_{th}

$$\dot{q}_{th} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (\text{G.27})$$

le flux des enthalpies des espèces chimiques

$$\dot{q}_{diff} = \begin{cases} \sum_k \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \\ - \sum_k \left(h_k - c_{p,m} T \frac{\mathcal{W}}{\mathcal{W}_k} \right) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \end{cases} \quad (\text{G.28})$$

Annexe H

Courbure des lignes de courant

L'analyse qui sera présentée par la suite est inspirée des travaux de Bdzil [5], elle sera menée dans le repère curviligne associé à un front de détonation courbe (voir figure H.1). Le point de départ est l'identité suivante

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) = \frac{\Omega_z}{u} - \frac{v}{u^2} \cdot \text{div } \vec{u} + \frac{1}{2u^2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \|\vec{u}\|^2 \quad (\text{H.1})$$

avec la vorticité $\Omega_z = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$

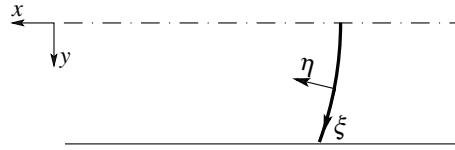


figure H.1 – (η, ξ) repère curviligne associé à un front de détonation courbe.

Pour des chocs forts dont la courbure du front est faible, la vorticité post-choc est faible. De plus, le terme source de production de vorticité associé aux réactions chimiques est faible. C'est ce qui incite Bdzil [5] à négliger la vorticité. La deuxième hypothèse consiste à négliger les dérivées par rapport à ξ car elles sont $\mathcal{O}(1/R)$.

Le paramétrage de coordonnées curvilignes est

$$\eta = x - x_s(y) \quad (\text{H.2})$$

$$\xi = x + \int \frac{dy}{x'_s} \quad (\text{H.3})$$

$x_s(y)$ décrit le front de détonation et x'_s la dérivée de $x_s(y)$ suivant y . Nous avons donc

$$dx = \frac{x_s'^2}{1 + x_s'^2} d\xi + \frac{1}{1 + x_s'^2} d\eta \quad (\text{H.4})$$

$$dy = \frac{x'_s}{1 + x_s'^2} d\xi - \frac{x'_s}{1 + x_s'^2} d\eta \quad (\text{H.5})$$

En notant $f = \frac{x'_s}{\sqrt{1+x_s'^2}}$, nous obtenons alors

$$\left\| \frac{\partial \vec{M}}{\partial \xi} \right\| = f \quad \text{et} \quad \left\| \frac{\partial \vec{M}}{\partial \eta} \right\| = \sqrt{1-f^2} \quad (\text{H.6})$$

Ainsi, les opérateurs de divergence et de gradient dans le repère des coordonnées curvilignes sont

$$\text{div } \vec{F} = f^{-1} (1-f^2)^{-1/2} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} (F_\eta f) + \frac{\partial}{\partial \xi} (F_\xi (1-f^2)^{1/2}) \right] \quad (\text{H.7})$$

et

$$\overrightarrow{\text{grad}} \Phi = (1-f^2)^{-1/2} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \vec{\eta} + f^{-1} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \vec{\xi} \quad (\text{H.8})$$

avec

$$\vec{F} = F_\xi \cdot \vec{\xi} + F_\eta \cdot \vec{\eta} \quad (\text{H.9})$$

où F_ξ et F_η sont les composantes du vecteur \vec{F} dans le repère curviligne. Les vecteurs unitaires sont reliés entre eux par

$$\vec{\eta} = (1-f^2)^{1/2} \vec{i} - f \vec{j} \quad (\text{H.10})$$

$$\vec{\xi} = f \vec{i} + (1-f^2)^{1/2} \vec{j} \quad (\text{H.11})$$

Nous avons alors

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \vec{i} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \Phi \quad \text{et} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \vec{j} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \Phi \quad (\text{H.12})$$

soit

$$\frac{\partial \Phi}{\partial y} = -f (1-f^2)^{-1/2} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + f^{-1} (1-f^2)^{-1/2} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \quad (\text{H.13})$$

et

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \quad (\text{H.14})$$

d'où l'équation H.1 devient (en supposant que la vorticit  est n gligeable)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) = -\frac{v}{u^2} \cdot \text{div } \vec{u} + \frac{1}{2u^2} \left[-f (1-f^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 + f^{-1} (1-f^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \xi} \|\vec{u}\|^2 \right] \quad (\text{H.15})$$

De plus, nous avons

$$\text{div } \vec{u} = \frac{1}{\|\vec{u}\|^2 (1-f^2)^{1/2}} \left[\frac{u_\eta}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 - u_\xi u^2 \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{v}{u} \right) \right] + f^{-1} \frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} - u_\eta x_s'' (1-f^2)^{3/2} \quad (\text{H.16})$$

$$\vec{u} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} (|\vec{u}|^2) = u_\eta (1 - f^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 + u_\xi f^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi} \|\vec{u}\|^2 \quad (\text{H.17})$$

et

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{v}{u} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{v}{u} \right) \quad (\text{H.18})$$

En négligeant les dérivées suivant ξ , les 2 relations précédentes deviennent

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) \approx \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{v}{u} \right) \quad (\text{H.19})$$

et

$$\vec{u} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} (|\vec{u}|^2) \approx u_\eta (1 - f^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \quad (\text{H.20})$$

Nous obtenons alors

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) \approx -\frac{v}{u^2} \cdot \text{div } \vec{u} - \frac{f(1 - f^2)^{-1/2}}{2u^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \quad (\text{H.21})$$

et la divergence de la vitesse devient

$$\text{div } \vec{u} = \frac{1}{\|\vec{u}\|^2 (1 - f^2)^{1/2}} \left[\frac{u_\eta}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 - u_\xi u^2 \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{v}{u} \right) \right] \quad (\text{H.22})$$

En combinant les équations H.21 et H.22, nous avons finalement

$$\text{div } \vec{u} = (1 - f^2)^{-1/2} \frac{1}{2u_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \quad (\text{H.23})$$

$$\vec{u} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} (|\vec{u}|^2) = u_\eta (1 - f^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \quad (\text{H.24})$$

La condition de sonicité s'écrit (voir annexe G)

$$\rho c^2 \text{div } \vec{u} - \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} (|\vec{u}|^2) + \mathcal{P}_{visq} = (\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) \quad (\text{H.25})$$

avec \mathcal{P}_{visq} la puissance des contraintes visqueuses

$$\mathcal{P}_{visq} = u \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) + v \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) \quad (\text{H.26})$$

\dot{q} l'énergie fournie à l'écoulement par les réactions chimiques, par unité de temps

$$\dot{q} = \sum_k \left(\frac{\partial e}{\partial Y_k} \right)_{\rho, P} \mathcal{W}_k (\nu_k'' - \nu_k') \dot{\xi} \quad (\text{H.27})$$

où $\dot{\xi}$ est la variable d'avancement de la réaction chimique.

Le taux de dissipation visqueuse Φ est

$$\Phi = \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \quad (\text{H.28})$$

le flux thermique \dot{q}_{th}

$$\dot{q}_{th} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (\text{H.29})$$

le flux des enthalpies des espèces chimiques

$$\dot{q}_{diff} = \begin{cases} \sum_k \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \\ - \sum_k \left(h_k - c_{p,m} T \frac{\mathcal{W}}{\mathcal{W}_k} \right) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{k,m} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) \right] \end{cases} \quad (\text{H.30})$$

En considérant les deux approximations précédentes, à savoir, une vorticit  et des d riv es suivant ξ n gligeables, le crit re de sonicit  devient

$$\rho (c^2 - u_\eta^2) (1 - f^2)^{-1/2} \frac{1}{2u_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 = (\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) - \mathcal{P}_{visq} \quad (\text{H.31})$$

L' quation H.21 devient

$$\begin{aligned} -u^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) &= -v \operatorname{div} \vec{u} + \frac{f(1 - f^2)^{-1/2}}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \\ &= \left(\frac{v}{u_\eta} + f \right) (1 - f^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \end{aligned} \quad (\text{H.32})$$

$$\begin{aligned} -u^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) &= (1 - f^2)^{-1/2} u_\xi \frac{(1 - f^2)^{-1/2}}{2u_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \\ &= \frac{u_\xi}{2u_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \|\vec{u}\|^2 \end{aligned} \quad (\text{H.33})$$

$$-u^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) = \frac{(\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) - \mathcal{P}_{visq}}{c^2 - u_\eta^2} (1 - f^2)^{1/2} u_\xi \quad (\text{H.34})$$

D'o 

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right) = \frac{u_\xi}{u^2} (1 - f^2)^{1/2} \frac{(\gamma - 1) (-\dot{q} + \Phi + \dot{q}_{th} + \dot{q}_{diff}) - \mathcal{P}_{visq}}{u_\eta^2 - c^2}} \quad (\text{H.35})$$

Sur les figures H.2 et H.3, diff rentes zones de l' coulement sont repr sent es. En noir, nous avons la zone subsonique et en blanc, la zone supersonique. Les lignes blanches qu'on observe sur ces figures repr sentent les lieux o  $\partial(v/u)/\partial x$ s'annule. Sur la figure H.2 la vorticit  est prise en compte, alors qu'elle ne l'est pas sur la figure H.3. Nous pouvons constater que lorsque la vorticit  est prise en compte, la variation de l'angle de d viation s'annule plus loin en aval du choc, en comparaison au cas o  la vorticit  est n glig e. Cette diff rence provient d'une forte vorticit  au niveau de la singularit  de Prandtl-Meyer qui diffuse dans la poche subsonique.

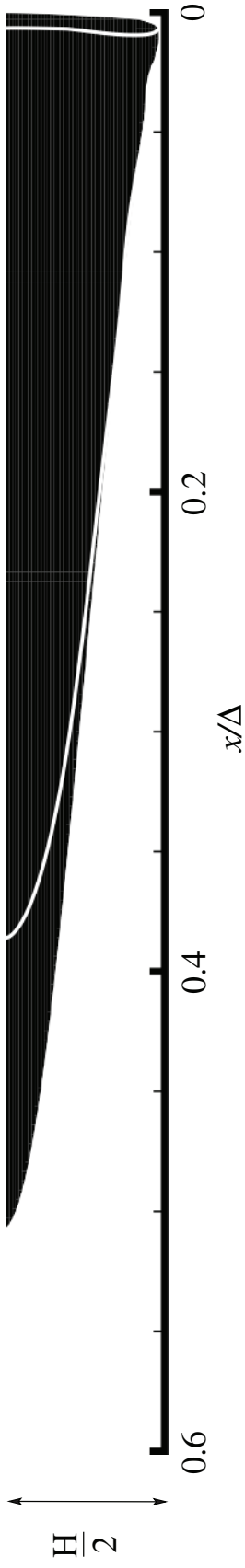


figure H.2 – La ligne blanche représente l'ensemble de points où $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right)$ s'annule avec prise en compte de la vorticit .

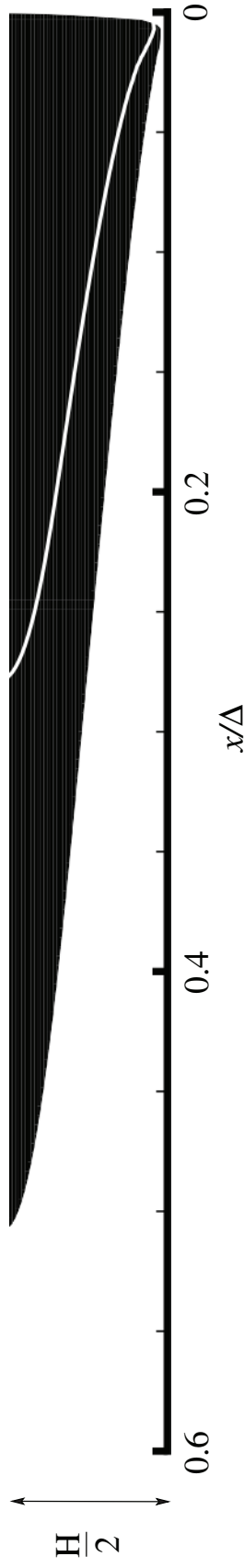


figure H.3 – La ligne blanche repr sente l'ensemble de points o  $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v}{u} \right)$ s'annule sans prise en compte de la vorticit .

Annexe I

Article publié dans “*Computer & Fluids*”



Numerical study of shock propagation and attenuation in narrow tubes including friction and heat losses

D. Ngomo, A. Chaudhuri, A. Chinnayya, A. Hadjadj *

CORIA, CNRS UMR 6614, INSA & University of Rouen, 76801 Saint Etienne du Rouvray, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 6 November 2009
Received in revised form 25 March 2010
Accepted 8 June 2010
Available online 15 June 2010

Keywords:

WENO schemes
Shock propagation
Friction
Heat losses

ABSTRACT

Numerical simulations of shock propagation and attenuation in narrow tubes are carried out using a one-dimensional approach. The discretization of the convective terms is based on the fifth-order weighted essentially non-oscillatory interpolation. The influence of the dissipative processes such as momentum and heat losses is investigated. Viscosity as well as heat losses are found to play a key role in the attenuation of the shock speed as well as the shock intensity in the long-time evolution, demonstrating the transition from a hyperbolic behavior towards a diffusive regime. Specifically, when only strong heat exchanges are considered, numerical tests, corroborated by a simple asymptotic analysis, showed a transition from a hyperbolic adiabatic regime to an isothermal regime. Furthermore, the influence of the scaling parameter $ReD/4L_s$, through the variation of the tube diameter, D , the viscous length scale, L_s , and the Reynolds number on the shock propagation behavior is examined.

© 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Micro/Nano Electro-Mechanical Systems (MEMS/NEMS) have become a growing and prosperous field for research and development in science and technology nowadays. An important problem in the development of MEMS is the design of devices that are able to produce mechanical work from chemical heat release, *i.e.* the micro-engines. The dynamics of fluids and their interaction with surfaces in microsystems are very much different from those in large-scale systems. In addition, at miniaturization level, the time scales associated with heat-loss mechanisms are reduced dramatically while the characteristic time scales for heat release stay virtually independent of scale. Thus, the efficiency of conventional devices such as internal combustion engines and gas turbines is seriously degraded when they are scaled to small sizes. One possibility to overcome this difficulty is to accelerate the heat release using shock-induced (or shock-assisted) combustion. However, this technique requires a deeper insight into the mechanisms governing microscale shock waves with friction and heat transfer at walls.

Understanding the fluid flow properties and characteristics of shock waves (propagation and attenuation) in narrow channels as well as meso- and microscales shock tube or in any other microdevices still need strong theories to be formulated together with reliable smart experiments. Wall heat transfer and shear stresses have to be accurately quantified. Similarly, the effects of wall ther-

mal losses have to be compared with pressure losses arising from wall friction in order to evaluate the attenuation of the shock wave speed and its amplitude. The effect of boundary-layer formation behind the shock has been studied by many authors both experimentally and numerically [2,7–10,14,18,27,30]. In this context, Brouillette [6] proposed a zeroth-order model which exhibits relevant features of shock wave propagation in shock tubes. Conservation laws were integrated over a control volume including the shock wave up to the contact discontinuity. With a reduction of the tube size, friction and heat losses could no longer be neglected for a given pressure ratio between the driver and driven chamber. Indeed, as the shock propagates into the low-pressure chamber, the thicknesses of the viscous and thermal boundary layers increase and attenuate the post-shock pressure. Similarly, Zeitoun and Burtschell [30] investigated numerically adiabatic micro-shock tubes solving unsteady Navier–Stokes equations. A parametric study on the scaling ratio ($ReD/4L_s$) has been reported, with Re being the Reynolds number based on the speed of sound in the low-pressure chamber, D the tube diameter and L_s the distance crossed by the shock. For low values of the scaling ratio, the shock wave transforms into a compression wave. The strongest transformation appears with the lowest scaling ratio. It has been reported that for a given pressure ratio, the viscous effects are more important when the initial pressure ratio is decreased.

Recently, Mirshekari and Brouillette [18] have proposed a one-dimensional model for micro-shock tubes. The model consists of the three conservation laws supplemented by an equation giving the evolution of the boundary-layer thickness after the passage of the shock wave. The latter was considered to be mainly driven

* Corresponding author.

E-mail address: hadjadj@coria.fr (A. Hadjadj).

by the part of the flow which was not yet affected by the boundary layer. Additional mass acting as a source term was added to the Euler equations, which removes the influence of the boundary layer to this main flow. Significant wall heat transfer rates are shown to induce wave propagation disturbances traveling at a speed lower than the speed of sound.

From numerical point of view, the use of low-dissipative high-order shock-capturing schemes can significantly improve the quality of the numerical resolution by providing more accurate solutions using fewer grid points for both steady and unsteady flow solutions. High-order schemes also provide much lower numerical dissipation for unsteady flow applications, rendering them more attractive for simulating shocks, contact discontinuities, and fine-scale flow structures. In particular, the version of the fifth-order Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO5) scheme, developed by Jiang and Shu [15], performs well. Additionally, two approaches of flux splitting schemes have been proposed, namely the Global Lax–Friedrichs flux splitting (GLF) and the Local Lax–Friedrichs flux splitting (LLF). The WENO scheme can also be used in conjunction with the Harten–Lax–van Leer restored Contact (HLLC) flux [12,16]. However, recent work of Henrick et al. [13] showed that the fifth-order WENO schemes family is only third-order accurate at critical points for scalar equations. A patch was proposed to modify the weighting near critical points to maintain the desired accuracy everywhere. The resulting scheme is known as Mapped WENO scheme (WENO5M).

The objective of the present work is to study the influence of viscosity and thermal losses on shock propagation and attenuation in narrow channel flows using robust and efficient high-order WENO methods. In a more general context, the objective of this work is to develop an accurate solver capable to capture both shocks and fine scale turbulence in the framework of direct and large-eddy simulations of shock/turbulence and shock/combustion interactions. The present work is a part of a wider domain that includes shock/viscous flow (laminar or turbulent) including heat transfer. Subsequently, with more suitable methods for solving stiff source terms and accurate schemes for capturing weakly vanishing (viscous) shocks, the proposed work will be able to shade more physical insight for the considered problem. The paper is organized as follows: In Section 2, we briefly present the mathematical model based on Rayleigh–Fanno flow for one-dimensional problems. In Section 3, we review different numerical strategies based on approximate Riemann solvers with high-order WENO interpolation as well as source terms integration. Section 4 contains an assessment of the solvers including an inviscid test case, in addition to a second one which accounts for the effects of stiff heat source terms [17]. Further results are presented in Section 4 to illustrate the two kinds of long-time flow regimes arising from friction and thermal losses depending on different flow parameters. Conclusions are drawn in Section 5.

2. Mathematical formulation: one-dimensional approach

The classical theory of one-dimensional inviscid flow of a perfect gas in a tube cannot be applied to situations where the flow is viscous and where the tube is long enough for wall drag to be important. A more realistic model than that of inviscid flow is the Fanno flow model [19], which includes a drag term in the momentum balance while leaving the equations of mass and energy conservation unaltered. For non-adiabatic flows, the Fanno model can be extended to account for wall thermal losses [1]. In this study, we derived a simple one-dimensional model by adding heat losses to Fanno model to investigate shock waves propagation and attenuation through long tubes. As shown in Fig. 1, the frictional forces and thermal losses are modeled using an elementary

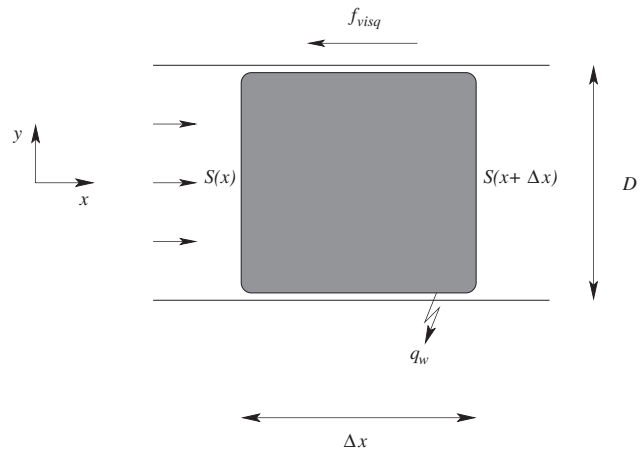


Fig. 1. Control volume from which the source term are calibrated.

control volume of fluid as shear stresses at the wall with uniform properties over any cross section of the tube.

Thus, the resulting time-dependent model for mass, momentum and energy conservation of one-dimensional viscous gas flow can be written as

$$\mathcal{U}_t + \mathcal{F}_x(\mathcal{U}) = \mathcal{S}(\mathcal{U}) \quad (1)$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &= [\rho, \rho u, \rho E]^T \\ \mathcal{F} &= [\rho u, (\rho u^2 + P), (\rho E + P)u]^T \\ \mathcal{S} &= [0, -f_{visq}, \mathcal{Q}_{th}]^T \end{aligned}$$

where ρ , u and E are density, velocity and total energy per unit mass, respectively. The symbols t and x denote time and space and are independent variables. The associated subscripts in (1) denote partial differentiation. Note that the contribution of the work done by the viscous forces in the total energy equation is neglected as in [19,20]. This can be justified by the fact that the flow is evolving at relatively high-Reynolds number (due to the high pressure in the driver gas) and that the viscous effects are mainly bounded in the vicinity of the wall (plug flow). Therefore, when averaging the source term across the tube their contribution to the energy equation falls to zero. Note that the assumption of plug flow holds for our case since the local Reynolds number reaches values as high as 10^5 at the later stage of the simulation. Also, a demonstration is given in Appendix B to show that neglecting this term will not lead to entropy violation, i.e. the entropy production remains positive. Additionally, as shown in Section 4.2.4, the contribution of this term has almost no influence on the shock dynamics. The system of hyperbolic equations is closed by the equation of state for a thermally perfect gas

$$P = (\gamma - 1)(\rho E - \rho u^2/2) \quad (2)$$

with the ratio of specific heats $\gamma = 1.4$ for air.

The drag force, f_{visq} , is modeled in term of pressure drop as

$$f_{visq} = \psi \frac{\rho |u| u}{2D} \quad (3)$$

For simplicity, we use the following explicit relations to express the friction coefficient as $\psi = 64/Re_D$ for laminar flow and $\psi = 0.316/Re_D^{1/4}$ for turbulent flow. The latter formula is applicable in the range of $2300 < Re_D < 10^5$, which covers all turbulent cases presented in this study. $Re_D = uD/\nu$ is the Reynolds number based on the tube diameter D and the local velocity u . The local kinematic

viscosity ν is given by: $\nu = \mu/\rho$. μ is obtained with the Sutherland law. The volumetric heat loss through solid walls can be expressed as

$$q_{th} = \frac{4\lambda}{D^2}(T_w - T) \quad (4)$$

with T_w the wall temperature and λ the thermal conductivity of the gas given by [11]

$$\lambda = 0.25\mu c_v(9\gamma - 5)$$

where c_v is the specific heat per unit mass at constant volume.

3. Numerical methods

3.1. Spatial discretization

In this section, we briefly describe the numerical procedure for a spatial discretization of a one-dimensional hyperbolic system. On a regular computational mesh, the numerical scheme may be cast into the semi-discretized form

$$u_t = -\frac{1}{\Delta x}(\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2}) = \mathcal{L}_h \quad (5)$$

in which $\hat{f}_{i+1/2}$ is a numerical approximation of $f(u(x_{i+1/2}))$ and \mathcal{L}_h is a discretization of the spatial operator. Once the right-hand side of Eq. (5) is evaluated, numerical techniques for solving ordinary differential equations, such as Runge–Kutta methods, may be employed to advance the solution in time.

To ensure robust and accurate spatial solutions, the numerical flux $\hat{f}_{i+1/2}$ can be evaluated using high-order interpolation with polynomials construction from bandwidth stencils. A class of highly accurate essentially non-oscillatory schemes has been developed by Shu [23,24] to implement this solution technique. This type of schemes is especially suitable for problems containing both shocks and complicated smooth flow features, since it changes smoothly the stencil in the neighborhood of a discontinuity in order to avoid spurious numerical oscillations. The version of Jiang and Shu [15] is briefly described hereafter to illustrate the WENO methodology for one-dimensional problem. The numerical flux $f_{i+1/2}$ at the interface (the “hat” is omitted for simplicity) is split into positive and negative parts. The flux $f_{i+1/2}^+$ (as opposed to $f_{i+1/2}^-$) is reconstructed using an essentially non-oscillatory interpolation along the following three “stencils”:

$$\begin{cases} S^{(1)} = [i - 2, i - 1, i] \\ S^{(2)} = [i - 1, i, i + 1] \\ S^{(3)} = [i, i + 1, i + 2] \end{cases}$$

To achieve high-order accuracy in smooth regions, the scheme uses a convex combination of these neighboring fluxes at $x_{i+1/2}$. In smooth regions, the ideal weights tend to their optimal values, α_k , with $\alpha_1 = 1/10$, $\alpha_2 = 6/10$ and $\alpha_3 = 5/10$. This yields a truly fifth-order numerical accuracy. Nevertheless, these optimal values are not desirable in region of large discontinuities. Therefore, a smoothness indicator, which is a sum of L^2 norms of all derivatives of the interpolation polynomial $f^{(k)}$ over the interval $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, is designed for each stencil

$$\beta_k = \Delta x \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{df^{(k)}}{dx}\right)^2 dx + \Delta x^3 \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{d^2f^{(k)}}{dx^2}\right)^2 dx$$

The normalized weights are modified using smoothing parameters so that weights from stencils with large variation are minimized, whereas weights from stencils in smooth regions approach their optimal values. The weights of interpolated function are given by

$$\omega_i = \frac{\tilde{\omega}_i}{\sum_k \tilde{\omega}_k} \quad \text{with} \quad \tilde{\omega}_k = \frac{\alpha_k}{(\epsilon + \beta_k)^2} \quad (6)$$

where ϵ is a small parameter to prevent the denominator becoming zero and is usually taken as $\epsilon = 10^{-6}$ [15]. Finally, the interface approximation of the positive flux for the fifth-order WENO scheme is given by:

$$f_{i+1/2}^+ = \sum_{k=1}^3 w^{(k)} f_{i+1/2}^{(k)+} \quad (7)$$

For the evaluation of the negative flux, $f_{i+1/2}^-$, the procedure should be modified symmetrically with respect to $x_{i+1/2}$.

3.1.1. WENO5-Lax–Friedrichs solver

The WENO reconstruction of positive and negative fluxes is performed in characteristic space because of the self-similar nature of the local Riemann problem for the Euler equation at $x_{i+1/2}$. This reconstruction is more expensive than the component-wise reconstruction. However, due to the interaction of discontinuities of different characteristic fields [21], oscillations can develop in the latter case. For achieving numerical stability and for avoiding entropy violation solutions, upwinding and flux-splitting approaches are used in constructing the characteristic flux. The flux is then written as a sum of the positive and negative parts

$$f(u) = f^+(u) + f^-(u)$$

where $f^+(u)$ has positive eigenvalues and $f^-(u)$ has negative eigenvalues. There are several choices for defining the flux, a simple one being given by Lax–Friedrichs which produces very smooth fluxes

$$f^\pm(u) = \frac{1}{2}(f(u) \pm \alpha w)$$

where w is the characteristic variable governed by $w_t + Aw_x = 0$, with $A = \text{diag}[u - c, u, u + c]$, and α is taken as $\max_u |f'(u)|$ over the relevant range of u . If the range is locally defined, it is called the local Lax–Friedrichs (LLF) splitting; if the range is global, it is called the global Lax–Friedrichs splitting (GLF). The WENO interpolation is then applied to negative and positive characteristic contributions $f^\pm(u)$. Finally, the interface flux is recomposed as the product of the matrix of the right eigenvectors, $\mathcal{R}_{i+1/2}$, by the vector of characteristic fluxes

$$\mathcal{F}_{i+1/2} = \mathcal{R}_{i+1/2} \cdot \{f_{i+1/2}\} \quad (8)$$

The state at the cell boundary $i + 1/2$ is obtained by Roe averaging.

3.1.2. WENO5-HLLC solver

The HLLC solver is an extension of the HLL (Harten–Lax–van Leer [12]) method in which the contact wave is restored [3,28]. Since the solution to the Riemann problem consists of a contact wave and two nonlinear waves, which may be either shocks or expansion fans, the HLLC solver requires an estimation of the speed

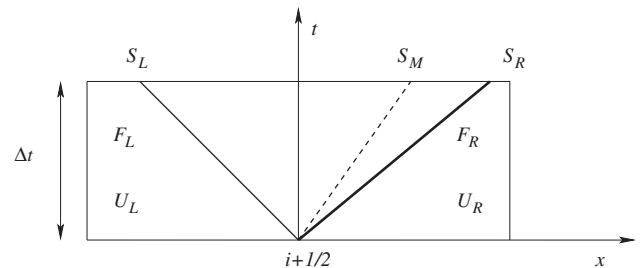


Fig. 2. Schematic illustration of the shock-shock approximation as figured by the HLLC solver of the local Riemann problem at $i + 1/2$ in the (x, t) diagram.

methods. This test consists of solving the one-dimensional Euler equation of a perfect gas in a tube of length of two units with initial data:

$$\begin{aligned} \rho_L = 1.0, \quad u_L = 0, \quad P_L = 1.0, \quad x < 1 \\ \rho_R = 0.125, \quad u_R = 0, \quad P_R = 0.1, \quad x \geq 1 \end{aligned}$$

The left and right states are separated by a diaphragm positioned in the middle of the tube. The domain is discretized with 500 computing cells and the Courant number of the computations is taken 0.7. At the bursting of the diaphragm, the initial discontinuity between the two states breaks into leftward (rarefaction) and rightward (shock) moving waves, which are separated by a contact surface. If viscous effects are negligible along the tube walls and assuming that the tube is infinitely long in order to avoid reflections at the tube ends, the exact solution of the full Euler equations can be obtained on the basis of a simple wave analysis. Fig. 3 shows comparison between the computed solutions, shown in symbols, and the exact solution, shown by solid lines. The output time is 0.4 units and the quantities shown are density and temperature. The four schemes produce good agreement with the analytical solution and their performances are almost comparable. In particular, the results demonstrate the monotonicity-preserving properties of the WENO solvers and their robustness in capturing properly shock wave and contact discontinuity. Similar results are also reported in many CFD studies (see for instance [4,15,22,29]). However, close examination of the plots shows that the WENO5M gives the sharpest contact discontinuity (see the enlarged view of density and temperature profiles in Fig. 3). Additionally, based on the resolution of the contact discontinuity, one can suggest the following trend of degeneration in accuracy of the considered schemes: $WENO5M > WENO5-LLF \sim WENO5-GLF > WENO5-HLLC$.

4.1.2. Influence of thermal losses on shock propagation

The second example deals with the influence of non-adiabatic walls on the propagation of different waves patterns in the Riemann problem. In this case, high-pressure (driver) and low-pressure (driven) gases are initially at rest and have the same temperature as solid walls (not combustion driving). The initial data is chosen so that there is no jump in temperature across the diaphragm, i.e., $T_L = T_R = T_w = 348$ K, where T_w is a fixed wall temperature. The other initial quantities are chosen such as $P_L/P_R = \rho_L/\rho_R = 2.5$, with the driven gas assumed to be at ambient conditions. The source term acting as heat losses in the energy equation is modeled as $\varrho_{th} = -\kappa(e - e_w)$, where $\kappa \sim \lambda D^{-2}/c_v$ and e_w is

the wall internal energy ≈ 0.25 MJ/kg. In this study, different values of κ are considered (0, 500, 5000, 10,000 and $\kappa \rightarrow \infty$). The computational domain of unit length is discretized with 1000 points and the Courant number is 0.4. It is worth noticing that all schemes show comparable performances. Therefore, only results of WENO5M are shown here for discussions. Fig. 4 shows that the post-shock temperature (from both sides of the contact discontinuity) relaxes towards the wall temperature, T_w , as the heat losses increase. Since the pressure is uniform across the interface, the density jump dies down with a subsequent weakening in the contact-discontinuity strength. Consequently, the relaxation zone between driver and driven gases tends to spread out until it disappears finally as $\kappa \rightarrow \infty$. Through the compression and rarefaction waves, one can notice that the local density as well as the local pressure gradients become sharper when κ increases. These two processes resulting from the gradual energy reduction, generating a large amplitude steepening compression and expansion waves, will progressively change the initial shock and rarefaction waves into isothermal shock and rarefaction waves, respectively [6]. In fact, each positive increment in the relaxation velocity sends out a compression (right) and expansion waves (left), the gradual increase of heat losses will generate a train of compression and expansion waves which must overtake each other to form strong shock (right) and rarefaction waves (left). In this limit, the solution of the Riemann problem consists mainly of two nonlinear waves (see Fig. 5). This behavior is confirmed by the asymptotic analysis given in Appendix A, where the characteristic speeds of the equilibrium thermal system in the limit of infinite cooling $h = c_v \kappa \rightarrow \infty$ are $u \pm c_{eq}$, such as $c_{eq}^2 = P/\rho$. Note that the equilibrium speed of sound is lower than the adiabatic counterpart $c^2 = \gamma P/\rho$, and the heat losses induce a significant decrease in the shock speed. Additionally, one can notice that the isothermal shock is captured properly within few points, respecting hence the high-resolution monotonicity-preserving properties of WENO schemes for stiffness conditions [17].

4.2. Viscous shock tube

This section is devoted to the study of the influence of wall friction on shock wave propagation. Unlike the inviscid theory which considers the shock velocity as constant, it was found in shock tube experiments [10] that the shock strength attenuates with distance, decreasing hence the shock velocity significantly. The main reason of this attenuation is the boundary layer that develops upstream of the shock. Since the majority of shock tubes operate in the high-

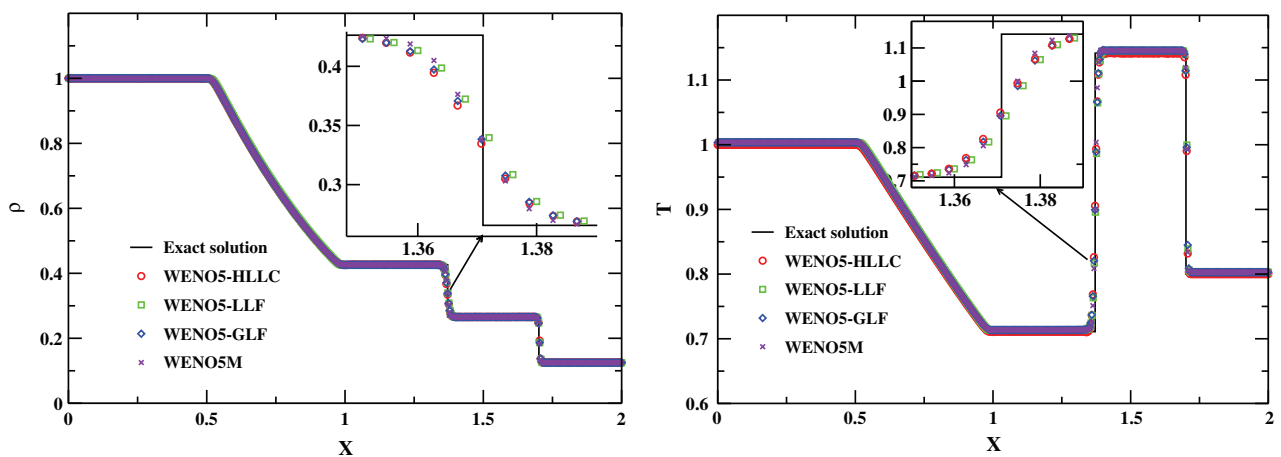


Fig. 3. Density and temperature profiles for Sod's problem.

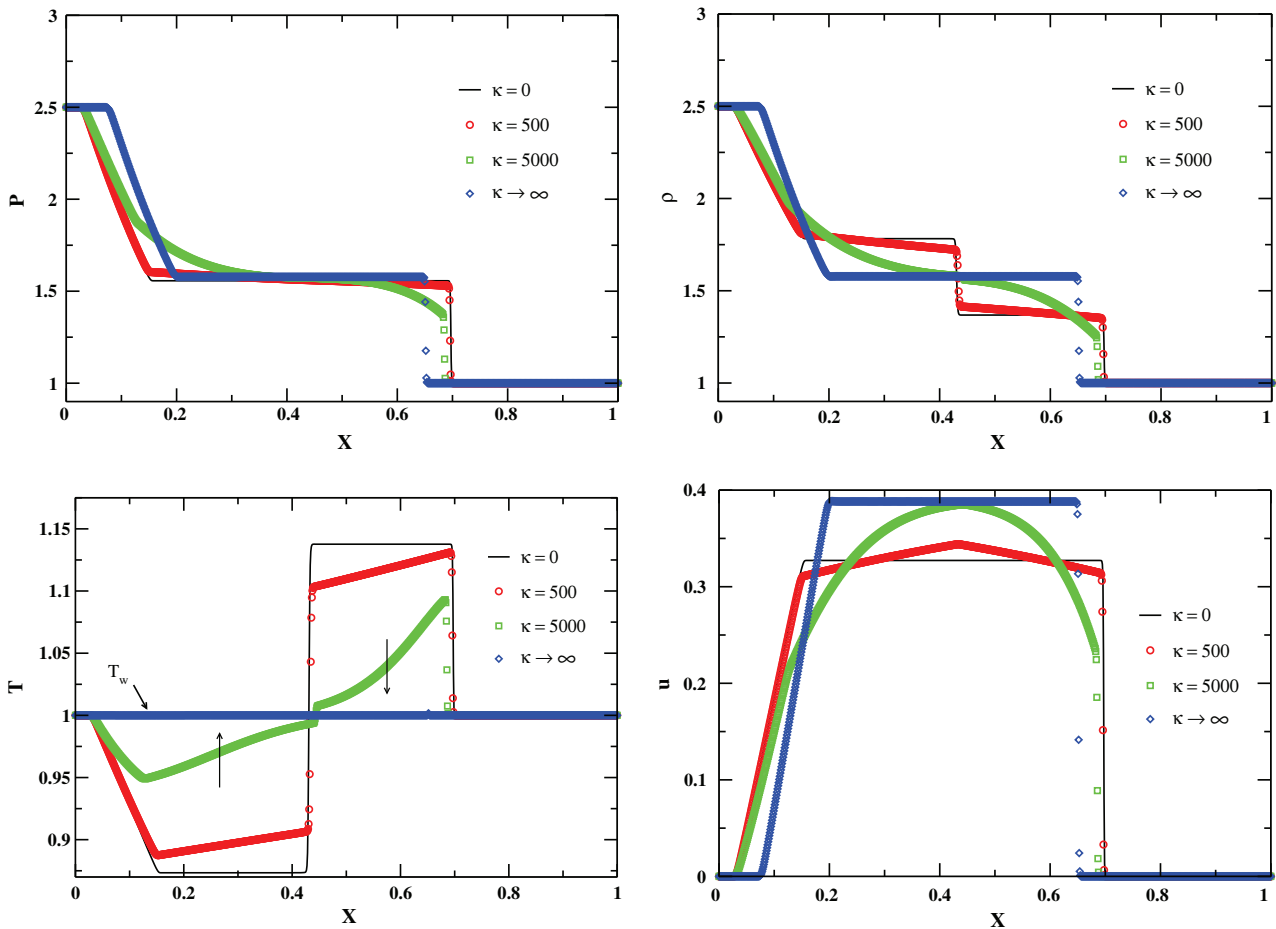


Fig. 4. Normalized pressure, density, temperature and velocity profiles for WENO5M solver.

Reynolds number range (due to high initial pressures) they mainly involve fully turbulent flow in both driven and driver sections. Consequently, the departure from the inviscid behavior becomes especially marked for long tubes with dramatic increase in linear pressure drop that causes strong shock attenuation. In order to investigate numerically the effect of viscosity on the transient flow in shock tube and to see how it affects the strength and the speed of the shock, viscous simulations have been accomplished for the same initial conditions as in the simulation presented in Section 4.1.2. To capture the viscous attenuation phenomenon, the computational domain is extended up to $L = 300$ m with a very refined mesh ($\Delta x \simeq 100 \mu\text{m}$) and different tube diameters are considered varying from 3 mm to 50 mm. The diaphragm is located at $x_0^* = 1/3$ (where $x^* = x/L$) and the CFL number is set to 0.4 in all the reported simulations. Also, as for case Section 4.1.2, only results arising from the use of WENOM scheme will be presented and discussed hereafter. The dimensionless time $t^* = ta_1/D$ (a_1 being the speed of sound in the unperturbed low-pressure gas) is used to analyze the results and the shock position is estimated from the location of the maximum of $|\nabla^2 P|$ over the whole domain. This criterion helps to distinguish the shock from the contact discontinuity.

4.2.1. Adiabatic case

The first series of test-cases consider an adiabatic shock tube with fixed initial temperature and diaphragm pressure ratio. During the early stage corresponding to the diaphragm opening, the transient solution closely resembles the classical Riemann problem

consisting of the three classical waves as described previously. Later, the pressure jump across the shock vanishes as it propagates into the tube (see Fig. 6) and its velocity decreases.

On the other hand, the contact discontinuity, which moves with the fluid velocity, accelerates (figure not shown), and thereby reducing the time interval between the shock and the contact surface. This time interval, also called testing-time, is of particular interest in experiments and is given at some point in the tube by the time difference between the shock and the contact discontinuity passing that point. As pointed out by Badcock [2], the acceleration behavior of the contact surface can be explained by the existence of a virtual converging-diverging nozzle formed by the development of the viscous layer along the tube wall. Consequently, apart from the diaphragm, the flow velocity increases up to the contact surface and then decreases thereafter. After a long time or large distance of travel, both discontinuities decelerate due to friction towards the speed of sound. To highlight the attenuation effects, plots are generated comparing the speed and the strength of the Mach wave, with respect to time, for different tube diameters at a diaphragm pressure ratio of 2.5. Here, the shock strength is defined as the pressure ratio across it, *i.e.* $\xi = P_2/P_1$ (where the subscript '2' refers to the driven gas after the shock passage). The attenuated vs. ideal shock behavior is depicted in Fig. 7, showing that the shock velocity decreases nonlinearly as time evolves.

Further evidence of the nonlinear attenuation on the shock is found by examining the pressure ratio required to produce a shock of a specific strength as a function of time (see Fig. 8). Additionally,

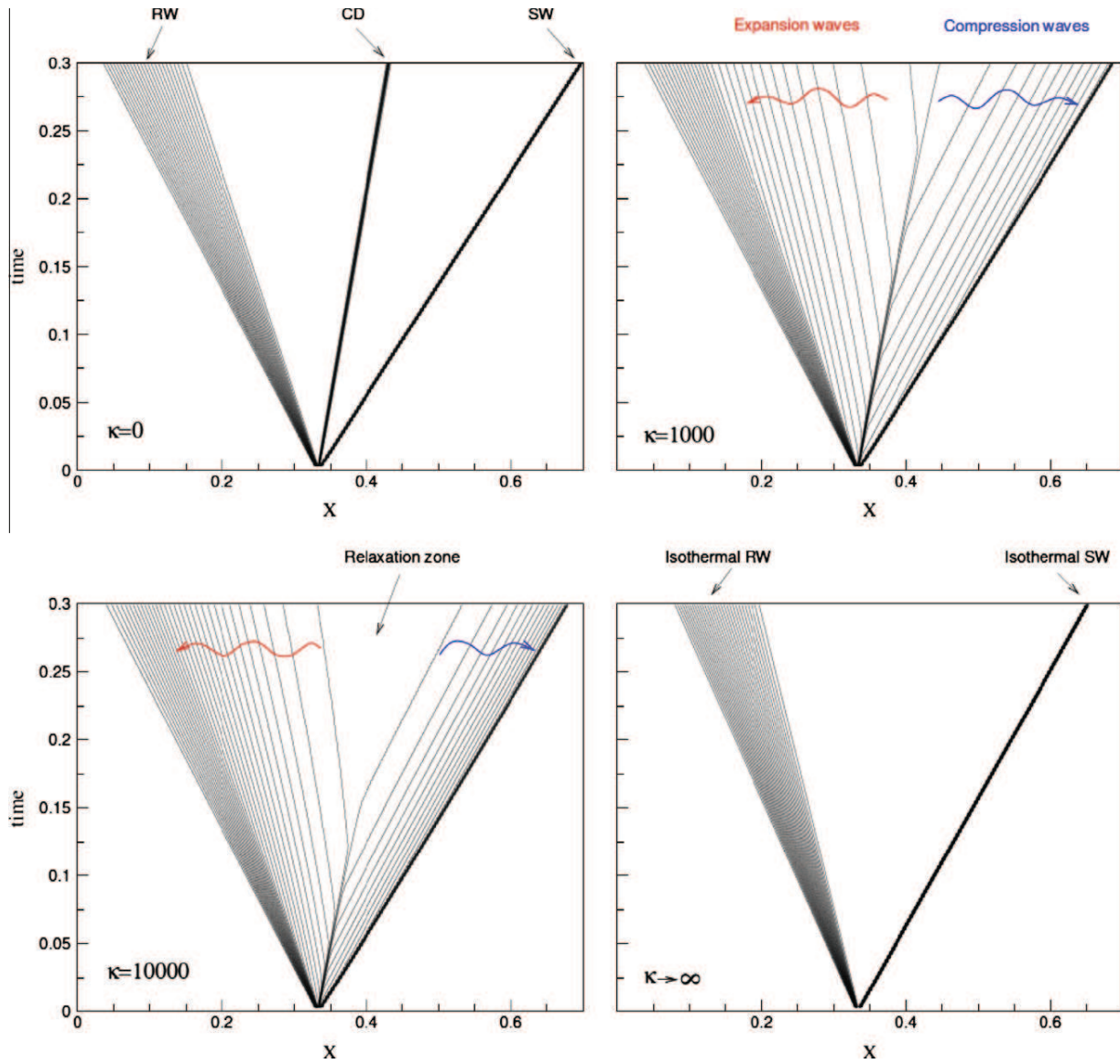


Fig. 5. $x-t$ diagrams for different values of κ . Notation: SW – shock wave, CD – contact discontinuity, RW – rarefaction waves.

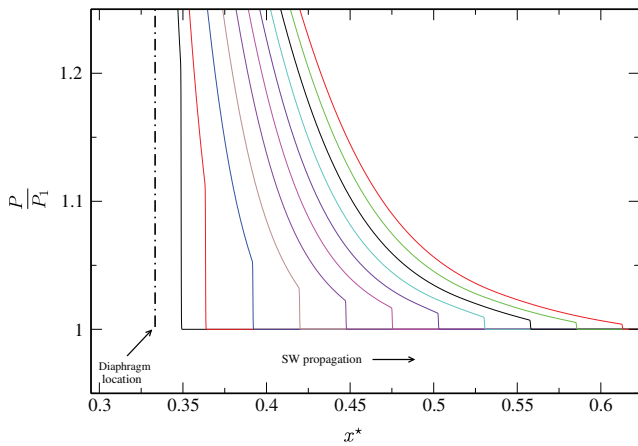


Fig. 6. Time history of pressure-jump attenuation across the shock in a viscous shock tube of 5 mm diameter (focus on the shock region). y -axis scaled by P_1 , which is the pressure in the undisturbed gas ahead of the shock.

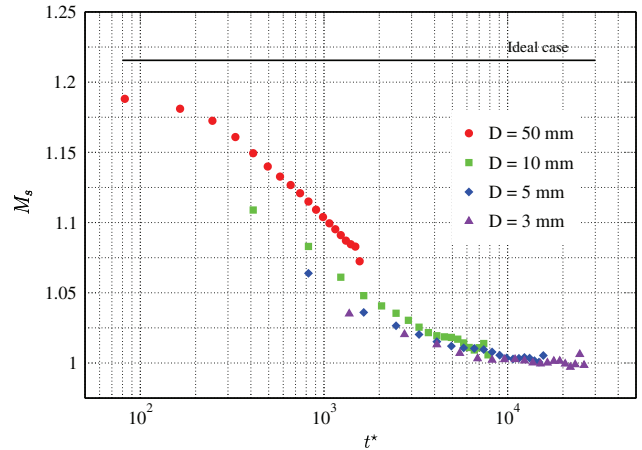


Fig. 7. Time evolution of shock speed for different diameters at diaphragm pressure ratio 2.5.

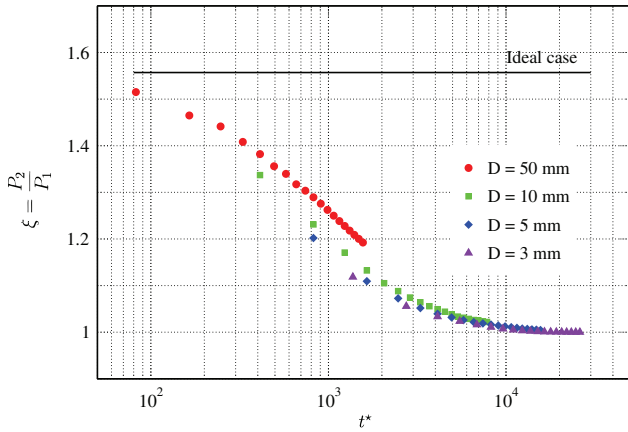


Fig. 8. Time evolution of shock strength for different diameters at diaphragm pressure ratio 2.5.

it can be seen that the decrease of the diameter leads to an attenuation of the shock speed and the shock strength as well. Since viscous forces depend nonlinearly on the inverse of the tube diameter ($f_{visq} \propto D^{-2}$ or $\propto D^{-5/4}$ for different flow regimes), the influence of friction on the propagation of the shock is strongly amplified. As noted above, far from the diaphragm, the shock wave vanishes and transforms into compression waves traveling at the speed of sound. Note the small undulations in Mach number close to unity, i.e. in long-time evolution, which illustrates the difficulty in determining the location of a vanishingly weak shock wave.

4.2.2. Long-time flow evolution

In the long-time behavior, wall friction loss tends to be predominant. Therefore, the flow from the high-pressure chamber to the low-pressure converges to a diffusive Darcy-type flow (see Fig. 9), where the viscous force and pressure gradient have been normalized by the upstream pressure and the tube length.

At equilibrium state, the pressure gradient finally balances the source term. It is evident that very long tubes (more than 200 m) are needed to observe this phenomenon. In the case of shock tubes in laboratories which have larger diameters, more longer tubes will be necessary to enable the observation of this phenomenon. From numerical point of view, it is worth noticing that special care must be taken regarding the mesh refinement when triggering the transition from a hyperbolic flow to a diffusive flow. According to Bouchut et al. [5], the mesh size should be smaller than u/α , where α is

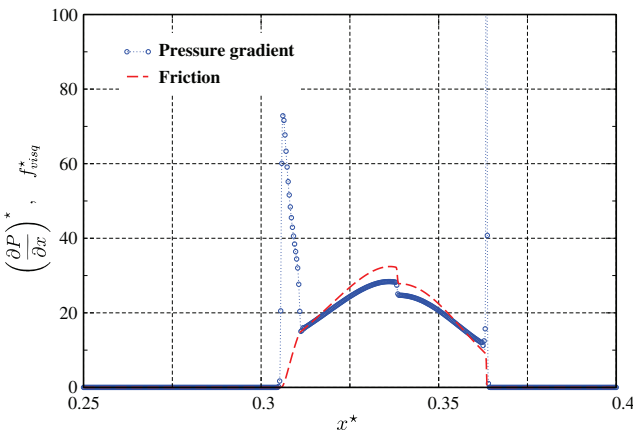


Fig. 9. Profiles of normalized viscous forces and pressure gradient at $t^* \approx 1650$ for $D = 5$ mm (y-axis normalized by P_1/L).

the friction coefficient. This implies that $\Delta x \sim \frac{D}{32} Re_D$ (for laminar flow) and $\Delta x \sim 6D Re_D^{1/4}$ (for turbulent flow). Numerical investigations have shown that unless this criterion is respected, the balance between friction and pressure gradient is difficult to achieve and thus the Darcy-type flow cannot be numerically well captured.

4.2.3. Influence of diaphragm pressure ratio

In shock tube experiments, increasing shock strength requires a dramatic increase in pressure ratio. For a calorically perfect gas with a constant γ and an initially constant temperature, the ideal diaphragm pressure ratio required to produce a shock of a given Mach number M_s is obtained as

$$\left[\frac{P_4}{P_1} \right]_{ideal} = \frac{[1 + (1 + \zeta^{-1})(M_s^2 - 1)]}{[1 - \zeta^{-1}(M_s - \frac{1}{M_s})]^{(1+\zeta)}} \tag{16}$$

where $\zeta = (\gamma + 1)/(\gamma - 1)$. P_4 is the high pressure in the expansion chamber (driver section) and P_1 is the low pressure in the compression chamber (driven section). The Mach shock is defined as $M_s = u_s/a_1$, where u_s is the speed of the shock. An interesting note concerning the shock velocity is its limiting value. When the diaphragm pressure ratio approaches infinity, the maximum shock Mach number can be determined from the condition that the denominator of Eq. (16) vanishes. This gives

$$M_{s,max} = \frac{\zeta}{2} + \sqrt{1 + \left(\frac{\zeta}{2}\right)^2} \text{ as } P_4 \rightarrow \infty$$

In particular, $\gamma = 1.4$ leads to $M_{s,max} \approx 6.16$.

To account for viscous shock-tube attenuation, Duff [10], through shock tube experiments at low initial pressures, proposed a simple one-dimensional model combining expressions for the pressure jump across the shock, the pressure decrease through the steady expansion between the shock and the contact surface and the unsteady expansion in the driver that gives

$$\left[\frac{P_4}{P_1} \right]_{Duff} = \left[1 - \frac{1 - \zeta - M_s^2}{(1 - \zeta)[1 - (1 + \zeta)M_s^2]} \right]^{\frac{(1+\zeta)}{2}} \times \left[\frac{P_4}{P_1} \right]_{ideal} \tag{17}$$

As an example, for a pressure ratio of 10, Duff's model predicts a Mach number of 1.5, whereas the inviscid theory gives an ideal Mach number of 1.6. Fig. 10 depicts the effect of scaling parameter $ReD/4L_s$ on the variation of P_4/P_1 with M_s . In order to vary this parameter, different choices of the distance travelled by the shock, L_s , have been made to generate each curve shown in this figure for

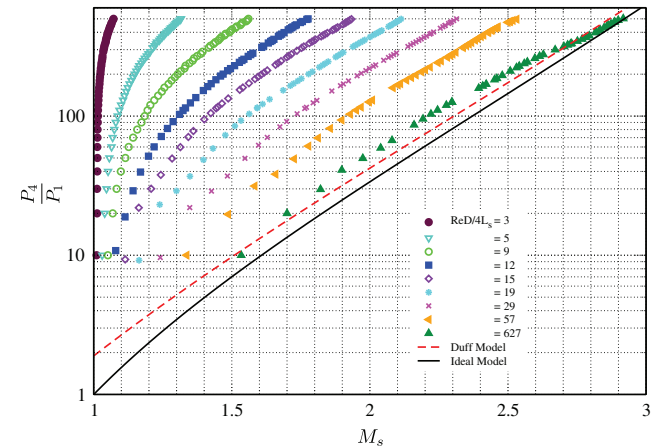


Fig. 10. Diaphragm pressure ratio vs. local shock Mach number recorded for different values of the scaling parameter.

a fixed $D = 5$ mm and $Re = 90,768$. The pressure ratio range covered in these simulations is from 10 to 500. The dashed curve represents the relation (17), while the solid line (Eq. (16)) gives the ideal tendency. It is observed that for a given Mach number, Duff's model predicts required pressure ratios about 2–3 times higher than those from the ideal inviscid theory. As introduced by Brouillette [6], time and length scales can be related through Reynolds number (based on the speed of sound) using the scaling parameter, $ReD/4L_s$. Therefore, it can be seen that, as the length scale is increased, via a reduction in the $ReD/4L_s$ factor, the pressure jump is increased for a given Mach number. As an example with $ReD/4L_s = 19$, the diaphragm pressure ratio has to be one order of magnitude higher than the Duff's case to obtain $M_s = 1.7$. For smaller values of the scaling parameter, i.e. for long-time evolution, the shock wave is observed to decelerate further as the length travelled by the shock increases, emphasizing the dominant role played by the viscous processes. It can be noted that the Duff's curve is approximately recovered for $ReD/4L_s = 627$. However, the previous findings of Brouillette [6] and Zeitoun and Burtschell [30] reveal that the scaling parameter is non-unique in the limit of Duff's model. This gives rise to the inconsistency of the scaling parameter as proposed in [6]. Indeed, the same value of this parameter can be achieved by varying any one of the three constituent variables. It can be realized that at low pressure ratios, intensity of the moving shock wave is weak and the viscous effects are dominant for lower scaling parameter. Fig. 11 shows that within this limit, the scaling parameter is consistent. However, for high pressure ratios, this parameter appears inconsistent as differences in shock wave propagation can be observed. This requires further modifications of the scaling parameter to achieve the global consistency for complete range of pressure ratios. It is worth noticing that the scaling parameter should contain the properties of the driver gas and flow characteristics between expansion fan and the contact discontinuity.

4.2.4. Isothermal case

In order to study the influence of both viscosity and thermal losses on the shock wave propagation, the same shock tube with similar initial conditions is considered. The heat loss term (Eq. (4)) was activated including different wall temperatures varying from 200 K to 300 K.

Fig. 12 shows that the shock is significantly slowed down when compared to the ideal case. However, it can be seen that within the range of the considered temperatures and the length of interest,

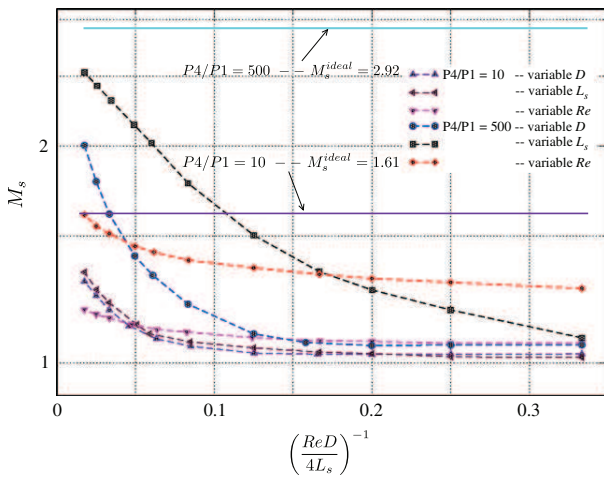


Fig. 11. Local shock Mach number vs. inverse of the scaling parameter for two different pressure ratios.

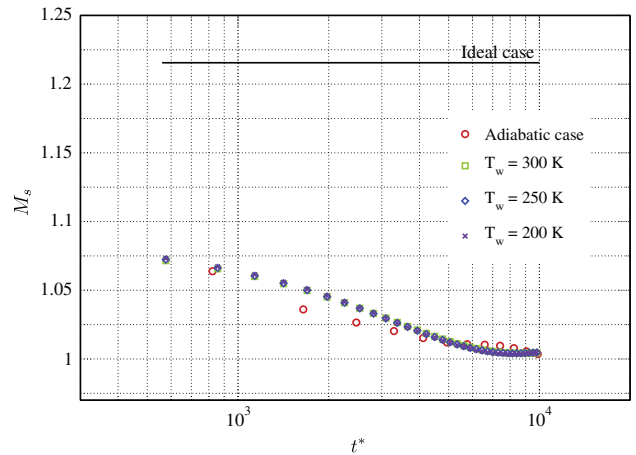


Fig. 12. Time evolution of the shock Mach number with different wall temperatures at $P_4/P_1 = 2.5$ and $D = 5$ mm.

the heat losses do not change significantly the behavior of the shock attenuation. This is expected because the development of shear stresses represent an increasingly large perturbation to the shock and the perturbing effect of the wall temperatures is relatively weak. In order to investigate the effect of the work done by the viscous force for this case, additional computation has been performed including this term. The time evolution of shock velocity depicted in Fig. 13 shows that this work has negligible influence on the shock propagation and attenuation.

It is worth noticing that for stronger cooling (large energy extraction), it is expected to see, as in case Section 4.1.2, an important shock attenuation due to thermal effects. In reality, to keep an acceptable wall temperatures with significant heat fluxes, the driver gas should be heated, for instance, through a chemical reaction process such as to increase significantly the difference in temperature between the hot gas and the cooled wall. This issue is actually out of the scope of the present investigations and may be examined later.

5. Conclusions

In this study, a one-dimensional model based on Rayleigh–Fanno flow has been developed for the study of shock wave propagation

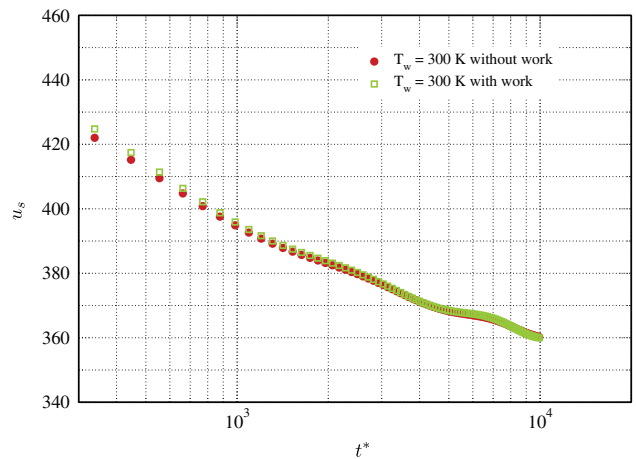


Fig. 13. Comparison of velocities of shocks in $m s^{-1}$ for $T_w = 300$ K, $P_4/P_1 = 2.5$ and $D = 5$ mm with and without the work of the viscous force.

and attenuation through long tubes. The numerical integration is achieved through different high-order WENO interpolations. For all the considered schemes, the construction is carried out in characteristic variables rather than component-wise reconstructions which results in oscillation-free solutions. Validation is performed using Sod's problem. The obtained results are in good agreement with the exact solution. Results of this test are used to assess the accuracy of different WENO schemes among them the Mapped version appears to perform well.

Regarding the propagation of shock waves in cooled narrow tubes, numerical tests corroborated by a simple asymptotic analysis showed a transition from a hyperbolic adiabatic regime to an isothermal regime in the limit of infinite cooling. Further results achieved from the viscous shock tube computations showed that the viscosity is the primary cause for the attenuation of the propagating shock. As the shock wave travels from the burst diaphragm, its velocity and strength are dramatically decreased. Also, in small diameter shock tubes, the shock is transformed into compression waves for a long-time evolution, demonstrating the transition from a hyperbolic behavior towards a diffusive regime. Within the limits of this latter regime, the scaling parameter proposed by Brouillette is consistent. Additionally, when strong heat losses are included, the gas temperature relaxes rapidly towards the wall temperature. Based on the present study, it can be concluded that the observed shock attenuation may result mainly from the diffusive processes due to shear stress, as well as from attenuating effects of energy losses to the wall. In closing, the results of this study provide in general a better understanding of the main characteristics of shock propagation and attenuation in narrow tubes that are not easily accessible experimentally, and may be used to optimize the design of shock tubes at small scales.

Appendix A. Asymptotic analysis

In this appendix, an asymptotic analysis is conducted to assess the nature of the hyperbolic system and its modified eigenvalues in presence of a stiff source term in the limit of infinite cooling ($h \rightarrow \infty$). Here, $h = 4\lambda/D^2$ is the convective heat coefficient, D is the diameter of the tube and λ is the thermal gas conductivity. Note that if $h \rightarrow \infty \Rightarrow \lambda \rightarrow \infty$ or $D \rightarrow 0$ (the latter case corresponds to vanishingly small tubes). Let us denote the reference states by u_{ref} , ρ_{ref} , P_{ref} , L , and the corresponding normalized quantities by $\bar{x} = x/L$, $\bar{t} = t/\tau_u$, $\varepsilon = \tau/\tau_u$, with $\tau_u = L/u_{ref}$ and $\tau = \rho_{ref}c_p/h$. For compactness, all dimensionless variables can be written as:

$$\bar{\varphi}(x, t) = \bar{\varphi}^0(x, t) + \varepsilon \bar{\varphi}^1(x, t) + \dots$$

with $\bar{\varphi} = \varphi/\varphi_{ref}$. At leading order ($\varepsilon \rightarrow 0$), the dimensionalized variables are $\varphi^0(x, t) = \varphi_{ref} \bar{\varphi}^0(x, t)$. For clarity, (x, t) will be omitted in the remaining text. Note that the temperature can be expressed as $T/T_w = 1 + \varepsilon \bar{T}^1 + \dots$.

The internal-energy equation can be obtained from the total energy by

$$\rho(e_t + ue_x) + Pu_x = h(T_w - T) \tag{18}$$

Then

$$\bar{T}_t + \bar{u}\bar{T}_x + (\gamma - 1)\bar{P}\bar{u}_x = -\frac{\gamma}{\varepsilon}(\bar{T} - 1) \tag{19}$$

At leading order, $\bar{T}_t + \bar{u}\bar{T}_x \rightarrow 0$ and the following equilibrium between flow divergence and heat losses holds:

$$\bar{P}^0 \bar{u}_x^0 = -\frac{\gamma}{\gamma - 1} \bar{T}^1 \tag{20}$$

From the enthalpy equation

$$\rho c_p(T_t + uT_x) = P_t + uP_x + h(T_w - T) \tag{21}$$

we get the following dimensionless temperature equation:

$$\bar{T}_t + \bar{u}\bar{T}_x = \frac{P_{ref}}{\rho_{ref}c_p T_{ref}} (\bar{P}_t + \bar{u}\bar{P}_x) + \frac{\tau_u}{\tau} (\bar{T} - 1) \tag{22}$$

Then,

$$\frac{\gamma - 1}{\gamma} (\bar{P}_t + \bar{u}\bar{P}_x) - \bar{T}^1 = 0 \tag{23}$$

Finally,

$$\bar{P}_t^0 + \bar{u}^0 \bar{P}_x^0 + \bar{P}^0 \bar{u}_x^0 = 0 \tag{24}$$

Back to the non-normalized form, the pressure equation reads

$$P_t^0 + u^0 P_x^0 + P^0 u_x^0 = 0 \tag{25}$$

This equation indicates that the pressure evolution is the same as the density. The same expansion can be done for the momentum equation. The velocity and pressure equations are thus given in primitive form by

$$\begin{cases} u_t^0 + u^0 u_x^0 + P_x^0 / \rho^0 = 0 \\ P_t^0 + u^0 P_x^0 + P^0 u_x^0 = 0 \end{cases} \tag{26}$$

The characteristic speeds of the new equilibrium thermal system are $u^0 \pm c^0$, where $c^0 = \sqrt{P^0/\rho^0}$.

Appendix B. Entropy production in the Fanno model

This appendix deals with the entropy production in the Fanno model given by the following set of equations:

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0 \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + P)_x = -f_{visq} \\ (\rho E)_t + [(\rho E + P)u]_x = 0 \end{cases} \tag{27}$$

The Gibbs relation reads along the material derivative

$$T \frac{Ds}{Dt} = \frac{De}{Dt} + P \frac{D(1/\rho)}{Dt} \tag{28}$$

where s is the entropy and $\frac{D\mathcal{U}}{Dt} = \mathcal{U}_t + u\mathcal{U}_x$ denotes the total derivative. The internal-energy equation can be derived from the total energy and momentum equations

$$\rho \frac{De}{Dt} + Pu_x = f_{visq}u \tag{29}$$

The divergence term can be expressed through the mass conservation equation

$$u_x = -\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \tag{30}$$

Thus Eq. (29) becomes

$$\rho \frac{De}{Dt} - \frac{P}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = f_{visq}u \tag{31}$$

which is

$$\frac{De}{Dt} + P \frac{D(1/\rho)}{Dt} = \frac{f_{visq}u}{\rho}$$

Therefore

$$T \frac{Ds}{Dt} = \frac{f_{visq}u}{\rho}$$

where $f_{visq} = \psi \frac{\rho|u|u}{2D}$. The following inequality is readily obtained:

$$T \frac{Ds}{Dt} = \psi \frac{\rho|u|u^2}{2D} \geq 0 \tag{32}$$

One consequence of the proposed model is that the entropy production is always positive.

References

- [1] Anderson JD. Modern compressible flow, with historical perspective. McGraw-Hill; 1982.
- [2] Badcock KJ. A numerical simulation of boundary layer effects in a shock tube. *Int J Numer Methods Fluids* 1992;14:1151–71.
- [3] Batten P, Leschziner M, Goldberg UC. Average-state Jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows. *J Comput Phys* 1997;137:38–78.
- [4] Borges R, Carmona M, Costa B, Don WS. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *J Comput Phys* 2009;227:3191–211.
- [5] Bouchut F, Ounaissa H, Perthame B. Upwinding of the source term at interfaces for Euler equations with high friction. *Comput Math Appl* 2007;53:361–75.
- [6] Brouillette M. Shock waves at microscales. *Shock Waves* 2003;13:3–12.
- [7] Chigullappalli S, Venkattraman A, Alexeenko AA. Modeling of viscous shock tube using ES-BGK model kinetic equations. *AIAA paper* 2009-1317.
- [8] Daru V, Tenaud C. Numerical simulation of the viscous shock tube problem by using a high resolution monotonicity-preserving scheme. *Comput Fluids* 2009;38:664–76.
- [9] Daru V, Tenaud C. Evaluation of TVD high resolution schemes for unsteady viscous shocked flows. *Comput Fluids* 2001;30:89–113.
- [10] Duff RE. Shock-tube performance at low initial pressure. *Phys Fluids* 1959;2:207–16.
- [11] Ferziger JH, Kaper HG. Mathematical theory of transport processes in gases. Amsterdam: North-Holland; 1972.
- [12] Harten A, Lax PD, van Leer B. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM J* 1983;25:35–61.
- [13] Henrick AK, Aslam TD, Powers JM. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: achieving optimal order near critical points. *J Comput Phys* 2005;207:542–67.
- [14] Iancu F, Muller N. Efficiency of shock wave compression in a microchannel. *Microfluid Nanofluid* 2006;2:50–63.
- [15] Jiang GS, Shu C-W. Efficient implementation of Weighted ENO Schemes. *J Comput Phys* 1996;126:202–28.
- [16] Johnsen E, Colonius T. Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems. *J Comput Phys* 2006;219:715–32.
- [17] Miniati F, Colella P. A modified higher order Godunov's scheme for stiff source conservative hydrodynamics. *J Comput Phys* 2007;224:519–38.
- [18] Mirshekari G, Brouillette M. One-dimensional model for microscale shock tube flow. *Shock Waves* 2009;19:25–38.
- [19] Ockendon H, Ockendon JR, Falle S. The Fanno model for turbulent compressible flow. *J Fluid Mech* 2001;445:187–206.
- [20] Novikovs A, Ockendon H, Ockendon JR. Numerical solutions of the unsteady Fanno model for compressible pipe flow. *J Fluid Mech* 2007;579:493–507.
- [21] Qiu J, Shu C-W. On the construction, comparison, and local characteristic decomposition for high-order central WENO schemes. *J Comput Phys* 2002;183:187–209.
- [22] Shen Y, Yang G, Gao Z. High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws. *J Comput Phys* 2006;216:114–37.
- [23] Shu C-W. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes. *J Comput Phys* 1989;83:32–78.
- [24] Shu C-W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. NASA/CR-97-206253 ICASE report no. 97-65; 1997.
- [25] Shu C-W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J Comput Phys* 1988;77:439–71.
- [26] Strang G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J Numer Anal* 1968(3):506–17.
- [27] Sun M, Ogawa T, Takayama K. Shock propagation in narrow channels. ISSW23I, Fort Worth (TX); 2001.
- [28] Toro EF, Spruce M, Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves* 1994;4:25–34.
- [29] Yamaleev NK, Carpenter MH. A systematic methodology for constructing high-order energy stable WENO schemes. *J Comput Phys* 2009;228:4248–72.
- [30] Zeitoun D, Burtshell Y. Navier–Stokes computations in micro shock tubes. *Shock Waves* 2006;15:241–6.

Annexe J

Article extrait de la conférence
ISIS18 (18th International Shock
Interaction Symposium)

ON THE USE OF HIGH-ORDER SHOCK-CAPTURING METHODS FOR GASEOUS DETONATION

D. K. Ngomo¹, A. Chinnayya and A. Hadjadj

CORIA, CNRS UMR 6614, 76801 Saint Etienne du Rouvray, France

Abstract: This paper deals with the computation of gaseous one-dimensional detonation using a high-order shock capturing scheme. For a ZND stable detonation, the CJ and Neumann states are not well resolved within a classical Strang splitting. A new strategy based on a shock sensor that circumvents this problem is described. A shock sensor is designed with respect to the solution of the Riemann problem. It prevents the chemical source term from being active in the reaction zone. A particular attention is paid to the fifth-order WENO interpolation for mass fractions to maintain saturation constraint.

Key words: Detonation, HLLC, JANAF table, Multispecies, WENO5.

INTRODUCTION

Most simulations of gaseous detonation in literature are based on second-order numerical schemes. In order to cope with the instabilities that can occur within the reaction zone of a fully multidimensional gaseous detonation, a higher order numerical method is required. This paper is mainly concerned with the development of high-order numerical methods for the solution of reacting flows with shock waves and detonation fronts. The model used in this study is based on the solution of multispecies Euler equations including chemical source terms and variable thermodynamic properties [3]. The numerical fluxes are approximated using an HLLC Riemann solver [1],[8], while a fifth-order WENO TVB interpolation [6] is used for the spatial derivatives of the characteristic variables. A particular attention is paid to the interpolation procedure of mass fractions in order to maintain the saturation constraint. Time advancement is achieved with a third-order TVD Runge-Kutta integration. A Quasi-Steady-State-Approximation is used to integrate the source terms [4]. The coupling between the chemistry and the aerodynamics is done with a splitting method [7]. A one-dimensional reactive shock tube problem is computed and numerical results are compared with the theoretical model of ZND.

The paper is organized as follows. At first, the influence of grid resolution is examined

¹Corresponding author: ngomo@coria.fr

which will exhibit a convergence problem. To circumvent this problem, a shock sensor is designed. It enables a better convergence to ZND profile. Finally, a stoichiometric propane-oxygen detonation is simulated.

INFLUENCE OF MESH RESOLUTION

The influence of the mesh resolution is made through the test case of [2]. The normalized reactive shock tube is initialized as follows: the left chamber is filled with products at the CJ conditions. Normalized pressure, velocity and density are respectively 21.5672, 2.886, 1.6812. In the right chamber, the initial conditions are respectively 1, 0, 1. The tube length is 1. The results are shown for time $t = 0.14$ and are done with $CFL = 0.4$, $\gamma = 1.4$ and heat of reaction equals 50. The number of grid points are varied from $N_x = 100, 500, 1000$ to 2000. It can be seen from Fig. 1 that the Neumann peak has been well captured with higher grid resolution. Nevertheless, the density Neumann state needs further grid resolution. A further increase of grid resolution will lead to high storage and more CPU time. A new method has been proposed which avoids this requirement of refined mesh to get better results. This method prevents the activation of the reaction source term in all the domain. According to the ZND theory, the shock has theoretically zero thickness. Therefore, the source term should not be activated within the shock thickness which appears due to numerical diffusion.

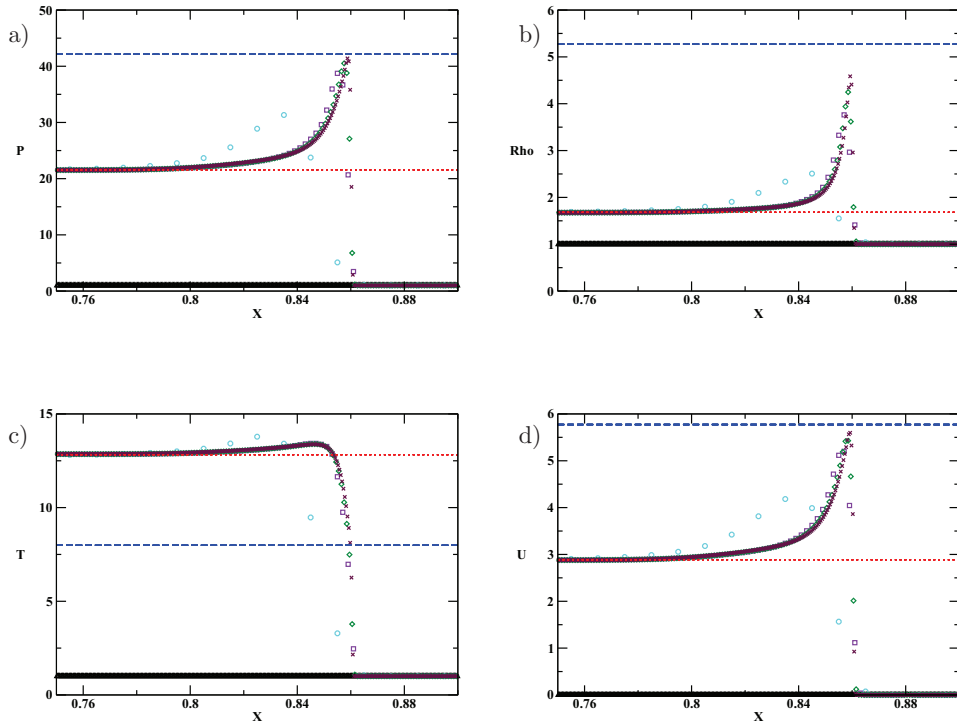


Fig. 1: Pressure a), density b), temperature c) and velocity d) profiles for different grids. \circ : $N_x = 100$; \square : $N_x = 500$; \diamond : $N_x = 1000$; \times : $N_x = 2000$; ... : CJ state; - - - : Neumann state.

INFLUENCE OF SHOCK SENSOR

Across a shock there is a relative change in volume cells between two consecutive time steps. To estimate the shock position, the following criteria, based on the Riemann problem solution i.e. $1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}(U_{i+1/2}^* - U_{i-1/2}^*) > \epsilon$, is used. If this criteria exceeds a certain threshold, the source term is not activated. This shock detection procedure is better than the classical formula based on pressure increase, i.e. $\frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{P_i^n} > \epsilon'$, that may not work in the case of a stationary detonation wave.

The initial conditions are similar to the previous case. The comparison made between the two strategies are shown on Fig. 2. When the chemical energy is available only in the reaction zone, which is the case with the use of shock sensor, more accurate results are obtained. As compared with the previous section, the Neumann's peak is correctly captured.

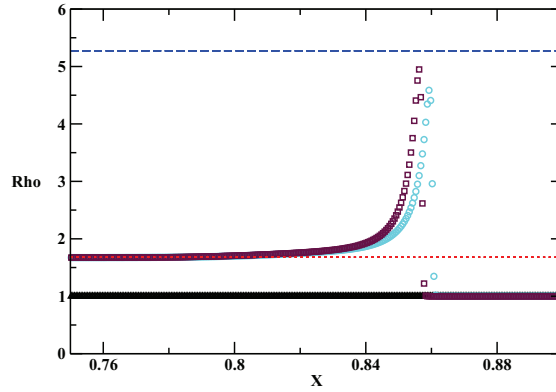


Fig. 2: Comparison of density profiles. \circ : without sensor; \square : with sensor; \dots : CJ state; $---$: Neumann state.

DETONATION OF STOICHIOMETRIC PROPANE-OXYGEN MIXTURE

With a non-linear WENO5 interpolation, there is no guarantee to satisfy basic requirements of mass fractions saturation for multi-species problems. In this study, the following correction is made:

$$\tilde{Y}_{k,i+1/2}^* = \frac{Y_{k,i+1/2}^{weno5}}{\sum_k Y_{k,i+1/2}^{weno5}}$$

This formula preserves the fifth-order accuracy and ensures that the numerical integration of the conservation law for mass fractions retains the saturation constraint. With this criteria, a reactive shock tube of stoichiometric propane-oxygen mixture is simulated. The kinetic mechanism used is based on a single irreversible reaction. The composition of the nine products is the same as in the CJ state [9]. The whole domain of 5 cm is filled with reacting mixtures. In the left part of the tube, the pressure, velocity and temperature are respectively 10 bar, 1500 m/s, 3000 K, whereas in the right side, the values are set respectively to 1 bar, 0 m/s, 300 K. The mesh contains

5000 points and the CFL number is fixed to 0.4. Fig. 3 shows results at time $0.2 \mu\text{s}$ and are comparable to that reported in [5]. At the left side of the tube, a constant-volume combustion starts with continuously raising pressure and temperature, until a shock wave is formed. Deflagration waves then develop and catch up the shock front to form the detonation wave, whose velocity tends to the CJ speed, where fully developed detonation front propagation is formed.

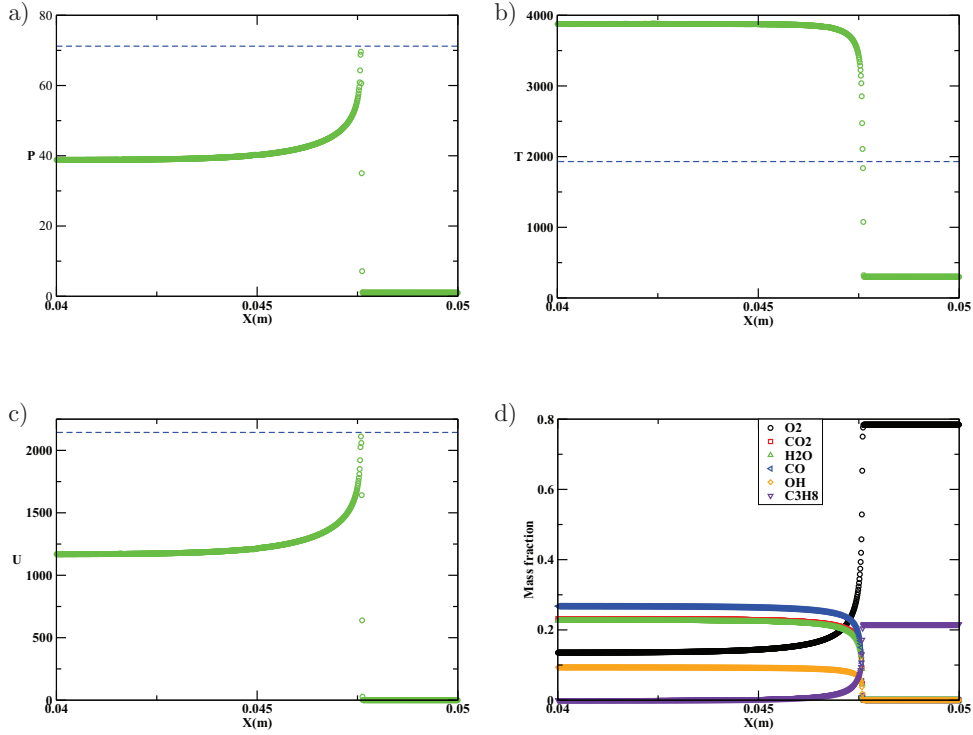


Fig. 3: Pressure (bar) a), temperature (K) b), velocity (m/s) c), main species d) profiles; — : CJ state [5]; - - - : Neumann state [5].

CONCLUSIONS

A one-dimensional detonation model with a single-step irreversible chemical reaction is developed. An HLLC Riemann solver is used to evaluate the numerical fluxes along with a fifth-order WENO interpolation of the characteristic variables. A particular attention has been paid to the mass fraction interpolation to ensure a saturation constraint. Time is advanced using a third-order TVD Runge-Kutta scheme, while a Quasi-Steady-State-Approximation is employed for the integration of the chemical source terms. The detonation of propane-oxygen mixture shows that the newly developed numerical scheme, based on a high-order shock interpolation and shock sensor technique, is able to capture most detonation flow features accurately. In particular, very interesting results are obtained when chemical energy is released essentially within the reaction zone, showing that it is possible to get finer resolution of the detonation front without the use of adaptive mesh refinement.

REFERENCES

- [1] P. Batten, M.A. Leschziner and U.C. Goldberg (1997), Average-State Jacobians and Implicit Methods for Compressible Viscous and Turbulent Flows. *J. Comp. Phys.*, 137:38-78.
- [2] B. Fiorina and S.K. Lele (2007), An artificial nonlinear diffusivity method for supersonic reacting flows with shocks. *J. Comp. Phys.*, 222:246-264.
- [3] R.J. Kee, F.M. Rupley, E. Meeks and J.A. Miller, CHEMKIN-III: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gaz phase chemical and plasma kinetics. *Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 94551-0969*.
- [4] D. R. Mott, E. S. Oran and B. van Leer (2000), A Quasi-Steady-State Solver for the stiff ordinary differential equations of reaction kinetics. *J. Comp. Phys.*, 164:407-428.
- [5] E. Schultz, J. Shepherd (2000), Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation. *Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5*
- [6] C.W. Shu (1997), Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *NASA/CR-97-206253 ICASE Report No 97-65*.
- [7] G. Strang (1968), On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Num. Anal. No 3, 5:506-517*.
- [8] E.F. Toro, M. Spruce and W. Speares (1994), Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves, 4:25-34*.
- [9] A Chemical Equilibrium Program for Windows. <http://www.arcl02.dsl.pipex.com>

Annexe K

Article extrait de la conférence
ECCOMAS 2010 (5th European
Conference on Computational Fluid
Dynamics)

NUMERICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF DISSIPATIVE EFFECTS ON THE PROPAGATION OF DETONATION WAVES IN NARROW CHANNELS

Davy Ngomo, Ashwin Chinnayya and Abdellah Hadjadj

CORIA, CNRS UMR 6614, INSA & Université de Rouen
76801 Saint Etienne du Rouvray, France
e-mail: ngomo@coria.fr, chinnayya@coria.fr, hadjadj@coria.fr

Key words: viscous detonation, WENO scheme, narrow shock tubes

Abstract. *A numerical study of the propagation of propane/oxygen detonation waves is conducted in the context of narrow shock tubes undergoing strong confinement effects. To deal with shock waves, chemical reactions, heat and viscous stresses, a high-order Navier-Stokes solver based on WENO scheme, coupled with the Strang's splitting method, is used in the framework of multi-species reacting mixtures. Results show that the development of viscous and thermal boundary layers behind the shock wave tends to decrease the speed of the detonation wave compared to the Chapman-Jouguet detonation velocity, σ_{CJ} . More specifically, the boundary layer effects lead to changes in the reaction zone, by reducing the amount of energy behind the leading shock front and decrease the propagation velocity, which finally causes large velocity fluctuations. A scenario, based on the energy deficit in the boundary layer, is proposed to explain the cause of the attenuation of the detonation velocity. This energy loss, which represent a fraction of the total energy, is trapped in the vicinity of the walls and does not contribute to drive the shock front.*

1 Introduction

MEMS/NEMS (Micro/Nano Electro-Mechanical Systems) have become a growing and prosperous field for research and development in science and technology nowadays. An important problem in the development of MEMS is the design of devices that are able to produce mechanical work from chemical heat release, *i.e.* the micro-engines. At miniaturization level, the time scales associated with heat-loss are reduced dramatically while the characteristic time scales for heat release stay virtually independent of scale. Thus, the efficiency of conventional devices such as internal combustion engines and gas turbines is seriously degraded when they are scaled to small sizes. One possibility to overcome this difficulty is to accelerate the heat release using shock-induced (or shock-assisted) combustion. However, this technique requires a deeper insight into the mechanisms governing microscale shock waves and detonation with friction and heat transfer at walls. Recent studies [2, 14, 15] have shown that the viscosity and heat losses play a key role in the attenuation of the shock speed as well as the shock intensity in the long-time evolution, demonstrating the transition from a hyperbolic behavior towards a diffusive regime. More specifically, regarding the propagation of detonation waves in narrow shock tubes, Haloua *et al.* [7], for instance, investigated experimentally unstable gaseous detonation of stoichiometric propane/oxygen mixtures, diluted or not with argon or helium in a shock tube of 38 mm diameter. By varying the initial pressure from 1 to 0.003 bar, four modes of propagation were clearly identified: stable detonation, stuttering mode, galloping mode, and fast flame. The last mode corresponds to the slowest one which is dominated by the dissipative effects. Also, Zel'dovich *et al.* [20] performed one-dimensional detonation studies including friction and thermal losses in rough tubes. By decreasing the tube diameter, a reduction of detonation velocity is observed, confirming earlier findings [18]. On the other hand, in the coordinates associated with the detonation front, the excess of mass through the boundary layer was taken into account in Fay [4] by assuming an effective increase in the tube area. The sonic line was then determined by solving a reacting-flow model in a slowly divergent flow. Manson and Guénoche [11] postulated that chemical reactions were inhibited or significantly modified in a layer adjacent to the tube walls behind the detonation front. The classical detonation equations were then modified by assuming different heats of reaction in the boundary layer and the potential core of the flow. Also, they noted that the CJ surface retains its usual meaning throughout the entire section, except in near-wall regions. Therefore, the shock front receives less energy compared to the ideal case, leading to a velocity deficit of the shock front and sometimes to an extinction of the detonation, if the boundary layer becomes sufficiently large.

In spite of many studies on the subject, the mechanisms of detonation waves propagation and attenuation in narrow tubes are quite complex, and fundamental knowledge of flow physics in presence of strong shocks interacting with chemical reactions, viscosity and heat release is still needed. Additionally, due to strong flow unsteadiness at very

small scales, a direct insight into these processes needs to be clarified in the light of high-fidelity numerical simulations. Subsequently, the recent progress made in computer science and numerical methods allows the use of robust and accurate solvers based on high-order shock-capturing methods to solve complex compressible flows in presence of stiff gradients confined within very thin reaction zones. The present work uses a fifth-order WENO scheme coupled with the Strang’s splitting method to numerically study the detonation propagation and attenuation in narrow channels including viscous effects. The objective is to shade more physical insight for the considered problem. The paper is organized as follows. In section 2, the mathematical model as well as the numerical methods are briefly described. Then, results are presented in section 3 starting with one-dimensional inviscid and viscous computations. The objective is to assess the performance of the methods and to partially validate the proposed methodology. Then, subsection 4 is devoted to the study of two-dimensional propane/oxygen detonation waves in a narrow channel. The comparison between inviscid and viscous detonations are provided, leading to the conclusion given in section 5.

2 Mathematical and numerical methods

Even though small-scale channels are considered with moderate Mach numbers, the corresponding Reynolds numbers can reach relatively high values due to high pressures caused by the detonation waves. Therefore, the continuum approach (low Knudsen numbers, $K_n \sim M/R_e < 10^{-3}$) is still valid, allowing thereby the use of Navier-Stokes equations for the numerical simulations of this problem. In this study, a one-dimensional formulation is first used (for simplicity), in which viscosity and heat transfers are integrated as source terms in the momentum and energy equations, respectively. Then, two-dimensional computations are conducted using fully compressible NS equations, where the viscosity of the mixture is calculated via the Wilke law [19], and the thermal conductivity is obtained using the Ferziger’s expression [5]. The molecular diffusion coefficient of each species is evaluated with mixture law provided by [3]. The gas is supposed to be thermodynamically perfect and obeys to the perfect gas law. The specific heats at constant pressure for each species are described by the JANAF Tables [10]. In both formulations, the chemical reactions are modeled using a single step irreversible mechanism.

The numerical strategy developed in this study includes a variety of modern high-order low-dissipation shock-capturing schemes (WENO-5 [9] and Mapped WENO [8]) and the Strang’s splitting method [17] in order to couple the chemical source terms with the NS solver. A Quasi-Steady-State-Approximation [12] is chosen to integrate the source terms. Note that for the 1D solver, the numerical fluxes are evaluated with an HLLC (Harten, Lax, van Leer with restored contact discontinuity) solver [1], whereas a fifth-order Mapped WENO [8] is used to evaluate the characteristic fluxes in a 2D case. For both cases, a third-order TVD Runge-Kutta method is used for time advancement.

3 Results and discussion

Following the classical ZND (Zel’dovich, Von Neumann, Döring) theory, a detonation front consists of a shock wave followed by a reaction zone of finite length. In the ideal case, the detonation front travels at a constant speed, which is determined by the Chapman-Jouguet (CJ) state as a locus of tangency of the Rayleigh line and the reactive Hugoniot curve. In real cases and due to boundary layer effects, the reaction zone is affected by friction and heat losses, which tend to dissipate the energy and thereby reduce the velocity of the detonation wave.

3.1 1D detonation

This section deals with one-dimensional computations of detonation. In the first part of this section, the inviscid configuration will be presented. Then in the second part, viscous effects as well as thermal losses will be accounted for by means of the Zel’dovich model [20].

3.1.1 Inviscid *vs.* viscous detonation

The working fluid is a propane/oxygen mixture in stoichiometric proportions. As said previously, the kinetic mechanism used is based on a single irreversible reaction. The composition of the eight main products (H_2O , CO_2 , CO , O_2 , OH , H , O , H_2) is the same as at the equilibrium CJ state [6]. The configuration is a reactive shock tube, in which we are mainly interested in the detonation wave self-similarity propagation. In the low-pressure chamber, the fresh gases are at rest, under thermodynamic conditions of 1 bar and 300 K. The left part of the tube contains the same mixture moving from the left to the right at $1500 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ under 10 bar and 3000 K. The length of the domain is 3 cm. The computational domain is made of 20000 cells. CFL number is fixed to 0.4.

In the left side of the tube, a constant-volume combustion is taking place, continuously raising pressure and temperature. Simultaneously, an incident shock wave travels through the fresh gases, where reactions take place. The outcome is that the pressure waves, coming from the heat release and the strengthening driver pressure gas will catch up the incident shock front. The overdriven detonation wave that follows, will stabilize close to its theoretical value. On physical insight, no chemical reactions should occur within the unavoidable numerical shock wave thickness. So, to be able to capture the correct pressure jump across the shock, a shock sensor has been designed [13]. Doing so, the chemical energy is only released in the reaction zone and is available to sustain the detonation wave near its theoretical value.

The numerical results at $2 \mu\text{s}$ are shown in Fig. 1. The pressure profile is depicted in Fig. 1a. The overall numerical strategy allows us to capture the Neumann spike, which is comparable to the theoretical Von Neumann state obtained from [16]. In Fig. 1b, the products and reactants mass fraction profiles are shown. We can see that the propane is consumed through the reaction zone of length $32.5 \mu\text{m}$, which is stuck to the detonation

front, and that products are formed. At the end of the reaction zone, the products tend to their equilibrium state.

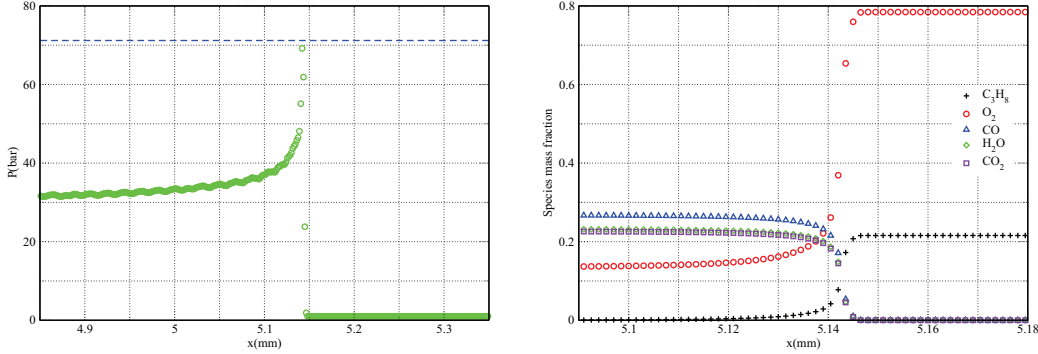


Figure 1: Pressure profile (in bar) with - - - : Neumann state (left) and species mass fraction distribution (right).

The chemical induction time $\tau_1 = 15 \times 10^{-8} [\text{O}_2]^{-1}$ used for this computation has been calibrated so that the reaction zone length in the inviscid case varies as the inverse of the initial pressure of the mixture as found in [16]. In the computation, with decreasing pressure, the length of the tube is increased in order to get stabilized numerical detonation waves. The reaction zone is defined as the distance between the shock front and the place where the mass fraction of propane is equal to 1% of its initial value. Fig. 2a shows that the reaction zone Δ evolves as the inverse of the initial pressure, as in the work of Schultz and Shepherd [16] for non-diluted stoichiometric propane-oxygen mixtures. In the same way, the decrease of initial pressure of mixture leads to a slight decrease of the detonation velocity as depicted in the inviscid case of Fig. 2b.

As the detonation propagates through a narrow tube, wall effects become predominant with the decrease of diameter or pressure. Indeed, viscous boundary layer develops behind the detonation front. Due to the induced friction, the detonation front is slowed down. Furthermore, it is expected that the thermal losses extracts some of the chemical heat released into the reaction zone, decreasing further the detonation velocity. The Zel'dovich model consists of the reactive Euler equations, in which the dissipative effects are accounted for by inclusion of a drag force and heat losses respectively in the momentum and energy equations. The reactive mixture is the same as in the previous subsection. The diameter will be fixed at $D = 38$ mm. And the wall effects will be studied through the initial pressure decrease. The drag force or friction term is modeled as a pressure loss $-\psi \rho |u| u / (2D)$, with ρ , u and ψ are respectively the density of fluid, its local velocity and the friction coefficient. The latter equals to $64 R_e^{-1}$ when the local Reynolds number based on the tube diameter D is below 2500. This friction coefficient is written as $0.316 R_e^{-1/4}$

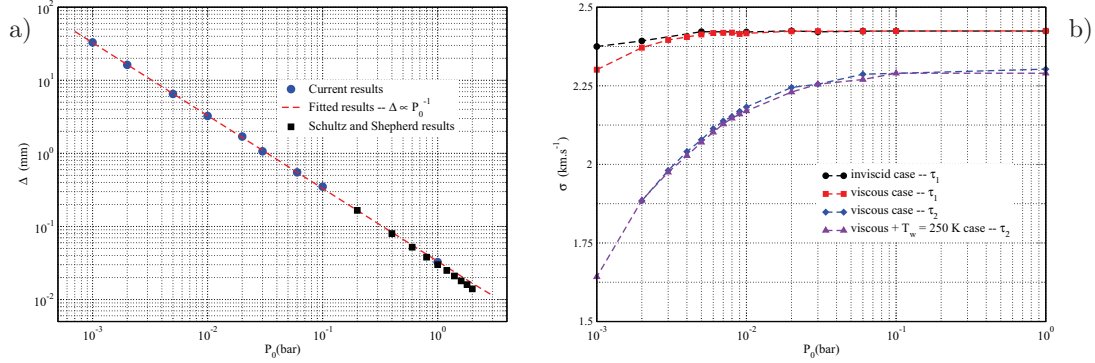


Figure 2: a) Thickness of Reaction Zone Δ (mm) vs. Initial Pressure P_0 (bar) - b) Detonation Velocity σ (km.s $^{-1}$) vs. Initial Pressure P_0 (bar).

when the Reynolds number is increased from 2500 to 10^5 . The initial pressure is varied from 1 bar to 100 Pa.

In Fig. 2b, the numerical results obtained with the chemical induction time τ_1 are represented by the curve with squares. It shows that viscosity begins to decelerate the detonation wave velocity compared to the inviscid case represented by the curve with circles when the pressure is less than 200 Pa. This means that at high pressures, chemical time scale clearly controls the wave propagation through the tube. Indeed, the chemical time scale is $\tau_{chem} = \Delta/(\sigma - u_{CJ})$, with Δ , σ and u_{CJ} respectively the reaction zone length, the detonation speed and the fluid velocity at CJ state in the inviscid case. The viscous time scale can be defined from the momentum equation as $\tau_{visc} = 2D/(\psi u_{CJ})$. The ratio of chemical and viscous time scales τ_{chem}/τ_{visc} can be shown to vary now from 10^{-5} to 10^{-2} when the upstream pressure is decreased within the studied range. This is clearly highlighted when the chemical time scale is increased. By multiplying τ_1 by 100 to obtained τ_2 and keeping viscous time scale unchanged, the detonation velocity is drastically reduced as shown by the curve with diamonds in Fig. 2b. The order of magnitude of the ratio between the chemical and viscous time scales is now varied from 10^{-3} to 1. In this case, there is a competition between both time scales.

In order to study the influence of both viscosity and heat transfer on the detonation wave propagation, calculations with similar initial conditions as in viscous case with τ_2 have been carried out. The expression $4\lambda(T_w - T)/D^2$ models the energy source term coming from the thermal losses through the wall, where λ is the thermal conductivity of the mixture and $T_w = 250$ K is the wall temperature. The results depicted on curve with up triangles in Fig. 2b shows that the influence of the thermal losses seem to be negligible in the attenuation of detonation wave propagation. By making a similar time scales analysis as previously between the viscous and thermal time scales, the obtained

ratio varies from 10^{-4} to 10^{-1} .

However, it can be noted that the detonation wave speed obtained in the previous simulations are greater than those of Haloua *et al.* [7]. That is probably due to the fact that the experimental data exhibit a multidimensional detonation structure that cannot be completely captured by a 1D model where the chemical reactions occur in the same way on each section of the tube. Therefore, in order to highlight these phenomena, two-dimensional detonation computations have been performed.

4 2D detonation

This section is devoted to the study of two-dimensional detonations of stoichiometric propane/oxygen mixtures in a narrow channel. After the passage of the detonation front, there is a velocity jump. A boundary layer then develops near the walls in the downstream flow and after a certain distance from the shock front location, the thickness of the boundary layer is of the same order of magnitude than the diameter of the tube. This is specifically true for low diameter tubes. In order to bring out how this confinement affects the structure of the detonation, viscous computations with adiabatic walls have been made in a tube with 79 mm length and 0.267 mm half-height. The initial pressure is 3kPa and the initial temperature is 300 K.

A ZND profile has been used for initialization. The latter has been duplicated along the height of the tube. The mesh size is such that there is 128 points in the reaction zone for the conditions mentioned above. The cartesian grid is $N_x \times N_y = 9472 \times 95$. The latter grid has been chosen after a grid convergence study. The initial reaction zone of 1.068 mm length is perturbed by a pocket of unburnt gases. The combustion of this pocket generates compression waves that perturb the leading shock front. The instabilities of the initial planar shock will lead to transverse structures. The simulations have been pursued until a mature detonation structure. It means that the detonation velocity at the centerline of the channel is constant in time average (cf. Fig. 3) and that the detonation structure is self-similar. From this figure, in the inviscid case, the detonation front propagates at a mean constant velocity, 2.4275 km.s^{-1} which corresponds to a little increase of 0.24 % compared to the one-dimensional ZND inviscid calculation and at 2.1119 km.s^{-1} in the viscous case, which corresponds to a decrease of 13 % compared to the two-dimensional inviscid result. Fig. 3 also reveals oscillations of the detonation velocity at frequency f , which is about the same in both cases.

After attainment of a mature detonation structure, intersection of oblique shocks and reflection with walls will give rise to triple point-shock interactions as depicted in Fig. 4. This figure represents the numerical schlieren based on pressure at $28 \mu\text{s}$. The locus where the interactions mentioned above occur are triple points, where the fluid pressure and density are highest. Their trajectories have been monitored by recording the local maximum of the pressure gradient in time. Detonation cells are then formed, as shown in Fig. 5. In the viscous case, these cells have 0.6722 mm length and 0.2868 mm width. It is interesting to note that the length of the detonation cells is approximately equal to

the averaged detonation wave velocity divided by the frequency f .

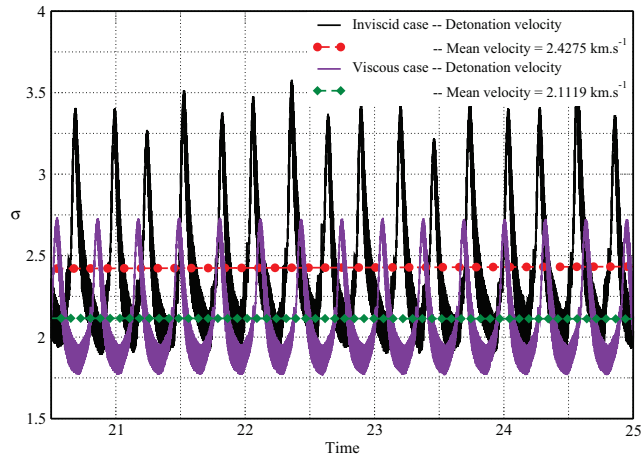


Figure 3: Detonation velocity, σ (km.s^{-1}) take at centerline vs time (μs).

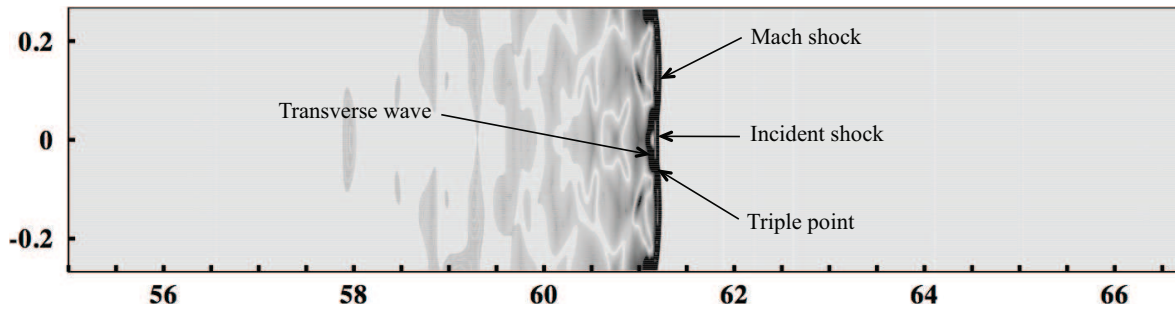


Figure 4: Numerical schlieren of pressure at $28 \mu\text{s}$.

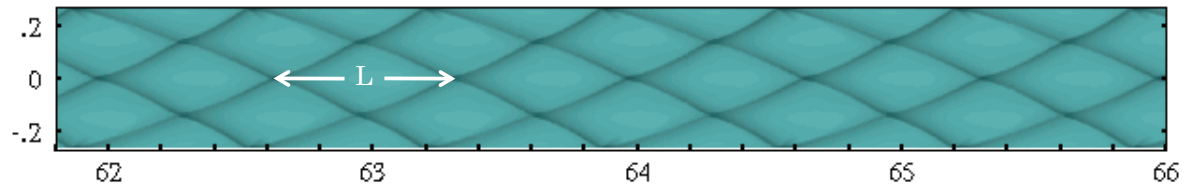


Figure 5: Triples points trajectories in viscous case.

The oscillations of the detonation velocity can be explained by the periodic passage of the triple point at the centerline of the channel. The sudden increase in detonation

velocity corresponds to the triple shocks reflections, while the low-velocity excursions correspond to the incident shock propagation.

Fig. 6 depicts the mass fraction gradient of propane at the top and the mass fraction gradient of OH at the bottom for different times. The mass fraction are expressed here as Y_k/Y_k^0 , with Y_k^0 the initial mass fraction. The local Mach number relative to the time average detonation velocity σ is $M_r = (\sigma - u)/c$. The sonic locus where $M_r = 1$ is in white line. The subsonic region lies between the shock front and the sonic locus. Its topology is different from the picture given by [11]. The supersonic region lies everywhere else. It can be seen that the subsonic region is self-similar.

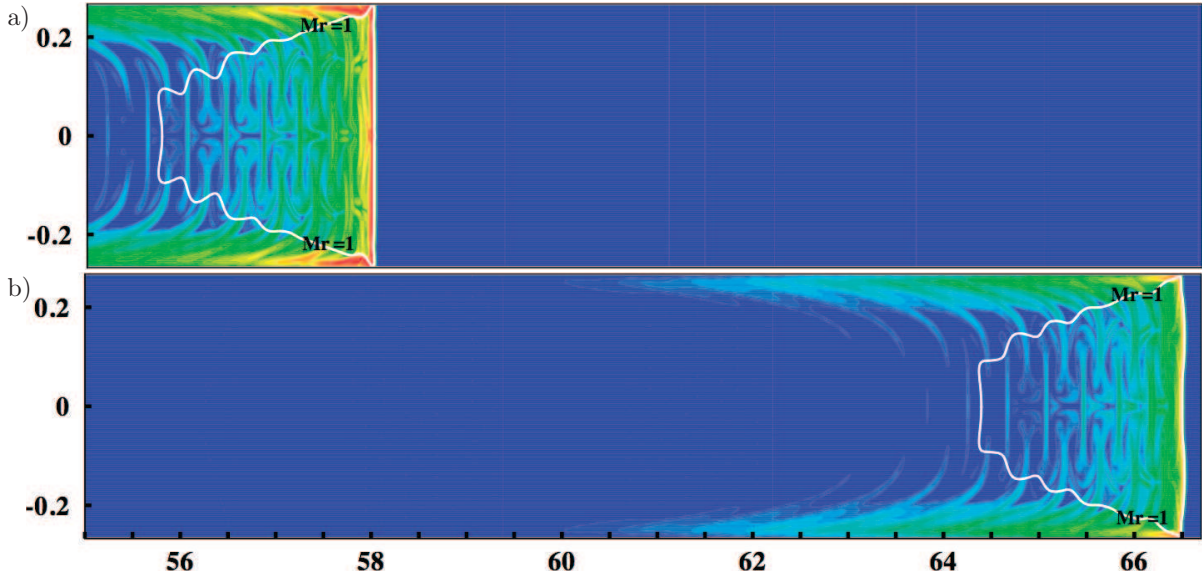


Figure 6: a) Gradient of Propane mass fraction at 26.5 μs - b) Gradient of OH mass fraction at 30.5 μs .

All pressure waves generated from heat release in the subsonic zone will catch up the detonation front. Therefore, all energy released by the chemical reactions in the reaction zone is available to sustain the shock propagation. The reaction zone lies beyond the subsonic region. Some propane is still present within the boundary layers. Thus a non-negligible part of chemical reactions occur outside the subsonic region. This can explain the detonation velocity decrease as shown in Fig. 3. It is remarkable that at the centerline of the channel, the relative Mach number is sonic when the propane is almost burnt. The length of the subsonic reaction zone is taken as the distance between the detonation front and the sonic locus at the centerline. Due to the development of the boundary layer in downstream flow, the fluid is slowed down near the walls and the length of the subsonic reaction zone is thus increased compared to the inviscid case, respectively of 1.324 mm and 1.23 mm. The chemical energy released near the walls is not available to sustain the detonation front but rather to heat the walls which are adiabatic. This results in the

attenuation of the detonation across the shock.

5 Conclusions

In this study, computations of detonation waves propagating in narrow channels have been performed using high-order numerical schemes. The numerical methodology proposed in this study, which includes a fifth-order WENO schemes with the Strang's splitting method, has been first validated through a one-dimensional inviscid ZND detonation. The obtained results agree well with those found in the literature. Two sets of numerical simulations have been carried out. The one-dimensional viscous simulations revealed that the detonation wave propagation is attenuated at very low initial pressures or when the chemical time scale is of the same order of magnitude as the viscous time scale. The order of magnitude of the thermal time scale does not seem to be low enough to affect the wave speed and explain the velocity deficit observed in the experiments. Additionally, two dimensional computations have been conducted to highlight the detonation waves attenuation, in term of velocity deficit, undergoing strong confinement effects. The attenuation of the detonation is attributed to the fact that a part of the chemical energy is released in the boundary layer and did not contribute to sustain the shock front. Moreover, it has been shown that the reaction length is increased in the viscous case compared to the inviscid one. Finally, one should notice that since the current computations have been done with adiabatic walls, further studies with isothermal boundary conditions and heat losses are needed.

REFERENCES

- [1] P. Batten, M. Leschziner and U. C. Goldberg, Average-State Jacobians and Implicit Methods for Compressible Viscous and Turbulent Flows, *Journal of Computational Physics*, **137**, 38-78 (1997).
- [2] M. Brouillette, Shock waves at microscales, *Shock Waves* **13**, 3-12 (2003).
- [3] L. D. Cloutman (2000), A selected library of transport coefficients for combustion and plasma physics application, UCRL-ID-139893, US Department of energy, Lawrence Livermore National Laboratory.
- [4] J. A. Fay, Two-dimensional gaseous detonations: Velocity deficit, *Physics of fluids*, **2**, **3**, 283-289 (1959).
- [5] J. H. Ferziger and H. G. Kaper (1972), Mathematical theory of Transport Processes in Gases, North-Holland, Amsterdam.
- [6] GASEQ, A Chemical Equilibrium Program for Windows, available at <http://www.arcl02.dsl.pipex.com>.

- [7] F. Haloua, M. Brouillette, V. Lienhart and G. Dupré, Characteristics of Unstable Detonations Near Extinction Limits, *Combustion and Flame*, **122**, 422-438 (2000).
- [8] A. K. Henrick, T. D. Aslam and J. M. Powers, Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: Achieving optimal order near critical points, *Journal of Computational Physics*, **207**, 542-567 (2005).
- [9] G. S. Jiang and C-W. Shu, Efficient implementation of Weighted ENO Schemes, *Journal of Computational Physics*, **126**, 202-228 (1996).
- [10] R. J. Kee, F. M. Rupley, E. Meeks and J.A. Miller, CHEMKIN-III : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gaz phase chemical and plasma kinetics, Sandia National Laboratories, Livermore.CA, 94551-0969.
- [11] N. Manson and H. Guénoche, Effect of charge diameter on the velocity of detonation waves in gas mixtures, *In: Proceedings of the 6th International Symposium on Combustion*, 631-639, Reinhold Publishing, New York, (1957).
- [12] D. R. Mott, E. S. Oran and B. van Leer, A Quasi-Steady-State Solver for the stiff ordinary differential equations of reaction kinetics, *Journal of Computational Physics*, **164**, 407-428 (2000).
- [13] D. Ngomo, A. Chinnayya and A. Hadjadj, Recent progress in the development of high order numerical method for gaseous detonation, *18th International Shock Interaction Symposia*, Rouen, France (2008).
- [14] D. Ngomo, A. Chaudhuri, A. Chinnayya and A. Hadjadj, Numerical study of shock propagation and attenuation in narrow tubes including friction and heat losses, *Computer and Fluids*, (2009).
- [15] H. Ockendon, JR. Ockendon and S. Falle, The Fanno model for turbulent compressible flow, *Journal of Fluid Mechanics*, **441**, 187-206 (2001).
- [16] E. Schultz and J. Shepherd, Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation, *Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5* (2000).
- [17] G. Strang, On the construction and comparison of difference schemes, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **3**, **5**, 506-517 (1968).
- [18] S. Tsuge, The effect of boundaries on the velocity deficit and the limit of gaseous detonations, *Combustion Science and Technology* **3**, 195-205 (1971).
- [19] C.R. Wilke, A viscosity equation for gas mixtures, *Journal of Chemical Physics*, 18-517 (1950).