



**HAL**  
open science

# Détonations dans les aérosols de gouttelettes liquides réactives. Etude de l'influence des propriétés physicochimiques de la phase liquide et de l'oxydant gazeux

Mohamed El-Amine Benmahammed

► **To cite this version:**

Mohamed El-Amine Benmahammed. Détonations dans les aérosols de gouttelettes liquides réactives. Etude de l'influence des propriétés physicochimiques de la phase liquide et de l'oxydant gazeux. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2013. Français. NNT : 2013ESMA0001 . tel-00789666

**HAL Id: tel-00789666**

**<https://theses.hal.science/tel-00789666>**

Submitted on 18 Feb 2013

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

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

# THESE

Pour l'obtention du Grade de

## DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE

(Diplôme National – Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale :

**Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique**

Secteur de Recherche : **Energétique, Thermique, Combustion**

Présentée par :

**Mohamed El-Amine BENMAHAMMED**

\*\*\*\*\*

**Détonations dans les aérosols de gouttelettes liquides réactives.**

**Etude de l'influence des propriétés physicochimiques  
de la phase liquide et de l'oxydant gazeux**

\*\*\*\*\*

Directeurs de thèse :

**Bernard VEYSSIERE et Boris KHASAINOV**

\*\*\*\*\*

**Soutenue le 15 janvier 2013**

\*\*\*\*\*

– JURY –

Mme	N. CHAUMEIX	Directeur de Recherches CNRS, UPR Icare, Orléans	Rapporteur
Mr	A. CHINNAYYA	Maître de Conférences à l'Université de Rouen, UMR Coria, Rouen	Examineur
Mr	G. DAMAMME	Assistant du Directeur Scientifique du CEA-DAM, Bruyères-Le-Châtel	Examineur
Mr	L. HOUAS	Directeur de Recherches CNRS, UMR Iusti, Marseille	Rapporteur
Mr	B. A. KHASAINOV	Ingénieur de Recherches au CNRS, UPR Institut P <sup>3</sup> , Futuroscope	Examineur
Mr	B. VEYSSIERE	Directeur de Recherches CNRS, UPR Institut P <sup>3</sup> , Futuroscope	Examineur



# Table des matières

## REMERCIEMENTS

### Table des figures

### Table des tableaux

### Nomenclature

## INTRODUCTION..... 1

## Chapitre 1..... 7

### Détonations dans les mélanges biphasiques gaz/gouttelettes liquides ..... 7

#### 1.1 Rappels sur les détonations en phase gazeuse..... 9

##### 1.1.1 Le modèle de détonation de Chapman Jouguet (CJ)..... 9

##### 1.1.2 Le modèle de Zeldovich-von Neumann-Döring ..... 14

##### 1.1.3 Structure tridimensionnelle du front de détonation..... 17

#### 1.2 Détonations en milieu hétérogène gaz/gouttelettes Liquides ..... 20

##### 1.2.1 Introduction..... 20

##### 1.2.2 Synthèse des principaux travaux antérieurs ..... 21

##### 1.2.3 Déficits de célérité ..... 22

##### 1.2.4 Influence du confinement ..... 22

##### 1.2.5 Influence de la taille des gouttelettes ..... 24

##### 1.2.6 Influence des propriétés physico-chimiques des constituants du mélange ..... 25

##### 1.2.7 Structure cellulaire des détonations hétérogènes ..... 25

## Chapitre 2..... 27

### Paramètres physico-chimiques influençant les détonations dans les mélanges hétérogènes Gaz/Gouttelettes Liquides ..... 27

#### 2.1 Schématisation d'une détonation se propageant dans un aérosol de gouttelettes liquides..... 29

#### 2.2 Rappels sur les aspects de cinétique chimique de détonation..... 30

##### 2.2.1 Délai et longueur d'induction chimiques ..... 30

##### 2.2.2 Corrélation taille des cellules $\lambda$ et longueur d'induction $L_i$ ..... 32

#### 2.3 Résultats antérieurs sur la détonation d'aérosols de carburants liquides..... 33

##### 2.3.1 Influence de la volatilité..... 33

##### 2.3.2 Influence de la dilution de la phase oxydante ..... 36

##### 2.3.3 Incorporation d'additifs ..... 41

##### 2.3.4 Influence du poids et de la structure moléculaires ..... 42

##### 2.3.5 Cas des mélanges hybrides ..... 43

2.4	Propriétés des mélanges combustibles et comburants.....	45
2.4.1	Base de données.....	45
2.4.2	Sélection des mélanges réactifs étudiés.....	50
2.5	Estimation des longueurs d'induction chimiques.....	53
2.5.1	Modèles numériques.....	53
2.5.2	Résultats des calculs.....	54
2.6	Conclusions.....	59
<b>Chapitre 3.....</b>		<b>61</b>
<b>Montage expérimental.....</b>		<b>61</b>
3.1	Introduction.....	63
3.2	Le tube à détonation.....	63
3.3	Le dispositif d'amorçage (tube à choc).....	65
3.4	Le générateur d'aérosols.....	66
3.4.1	Introduction.....	66
3.4.2	Principe de fonctionnement.....	66
3.4.3	Description de l'Atomiseur.....	69
3.5	Dispositifs de mesure.....	70
3.5.1	Remplissage du tube avec l'aérosol.....	70
3.5.2	Mesure de la célérité et de la pression de détonation.....	71
3.5.3	Enregistrement de la structure cellulaire de détonation.....	72
3.6	Réalisation des mélanges.....	73
3.6.1	Prémélanges gazeux.....	73
3.6.2	Carburants liquides.....	73
3.6.3	Mélanges biphasiques.....	74
3.7	Système de commande et protocole d'essai.....	75
3.7.1	Système de commande.....	75
3.7.2	Protocole d'essai.....	76
<b>Chapitre 4.....</b>		<b>79</b>
<b>Essais préliminaires et calibration du dispositif expérimental.....</b>		<b>79</b>
4.1	Introduction.....	81
4.2	Caractérisation granulométrique de l'aérosol.....	81
4.2.1	Principe de mesure par PDI (Phase Doppler Interferometry).....	81
4.2.2	Montage de mesure.....	82
4.2.3	Résultats.....	84
4.2.4	Influence du débit d'air sur la taille des gouttelettes.....	85
4.2.5	Effet de la distance X sur la taille des gouttelettes liquides.....	86
4.2.6	Conclusions.....	88
4.3	Initiation de la détonation par choc.....	88
4.3.1	Choix de la méthode d'initiation.....	88
4.3.2	Caractéristiques du choc généré par le booster.....	88

4.4	Conditions de propagation d'un régime de détonation autonome stationnaire .....	91
4.4.1	Initiation de la détonation dans un mélange H <sub>2</sub> /air stœchiométrique par le processus de TDD .....	91
4.4.2	Initiation de la détonation par l'onde de choc produite par le tube à détonation auxiliaire .....	95
4.4.3	Conclusions.....	96
<b>Chapitre 5.....</b>		<b>97</b>
<b>Etude expérimentale de l'influence de la nature du carburant et de la composition de l'atmosphère gazeuse sur la détonation d'aérosols de carburants liquides.....</b>		<b>97</b>
5.1	Introduction .....	99
5.2	Détonation dans les aérosols d'isooctane « M1 ».....	100
5.2.1	Mélanges isooctane-air « M1-D0 ».....	101
5.2.2	Influence de la dilution : Isooctane/(O <sub>2</sub> + βN <sub>2</sub> ) .....	114
5.2.3	Influence de la nature du diluant.....	120
5.2.4	Synthèse des résultats dans les mélanges avec l'isooctane (M1).....	123
5.3	Détonations dans les aérosols d'heptane (Mélanges M2) .....	125
5.3.1	Détonations des mélanges Heptane-air (M2-D0).....	125
5.3.2	Influence de dilution .....	130
5.4	Détonations dans les aérosols d'octane (Mélanges M3) .....	138
5.4.1	Détonations des mélanges n-octane-air (M3-D0).....	138
5.4.2	Influence de la dilution .....	144
5.5	Détonations dans les aérosols de décane (M4).....	152
5.5.1	Mélanges décane-air (M4-D0).....	153
5.5.2	Influence de la dilution β .....	156
5.5.3	Conclusions.....	158
5.6	Détonations dans les aérosols de Dodécane (M5).....	158
5.6.1	Mélanges dodécane-air (M5-D0).....	159
5.6.2	Influence de la dilution β .....	162
5.6.3	Conclusions.....	164
5.7	Détonations dans les aérosols de Nitrométhane (NM) .....	164
5.7.1	Expériences avec des aérosols de granulométrie 30 μm.....	164
5.7.2	Expériences avec des aérosols de granulométrie 8 μm.....	165
5.7.3	Expériences dans des aérosols NM/azote .....	165
5.8	Conclusions sur l'étude expérimentale des détonations biphasiques d'aérosols de carburants liquides.....	168
<b>Chapitre 6.....</b>		<b>171</b>
<b>Modèle numérique pour les détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides .....</b>		<b>171</b>
6.1	Hypothèses.....	173
6.2	Equations de bilan pour les phases liquide et gazeuse .....	174
6.2.1	Equations de bilan pour la phase liquide .....	174

6.2.2	Equations de bilan pour la phase gazeuse.....	177
6.2.3	Paramètres d'interactions entre les phases gazeuse et liquide.....	178
6.2.4	Phases de combustion.....	181
6.3	Méthode numérique, Traitement numérique.....	185
6.3.1	Maillage numérique.....	186
6.3.2	Adaptation du maillage.....	187
6.3.3	Schéma FCT (Flux-Corrected-Transport).....	188
6.3.4	Conditions initiales du problème.....	189
<b>Chapitre 7.....</b>		<b>191</b>
<b>Simulations numériques des détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides.....</b>		<b>191</b>
7.1	Introduction.....	193
7.2	Paramètres d'entrée.....	193
7.2.1	Paramètres thermodynamiques des espèces gazeuses.....	194
7.2.2	Paramètres théoriques CJ en fonction de la richesse.....	195
7.2.3	Paramètres cinétiques.....	198
7.3	Dynamique de formation de la détonation : Calculs monodimensionnels.....	200
7.3.1	Description du maillage.....	200
7.3.2	Résultats et Analyse.....	201
7.4	Simulations numériques bidimensionnelles instationnaires de la détonation dans les aérosols d'isooctane (M1).....	204
7.4.1	Paramètres de simulations bidimensionnelles.....	204
7.4.2	Formation de la détonation.....	205
7.4.3	La structure cellulaire.....	207
7.5	Simulations numériques bidimensionnelles instationnaires de la détonation dans les aérosols d'heptane (M2).....	214
7.5.1	Paramètres de simulations bidimensionnelles.....	214
7.5.2	La structure cellulaire.....	214
7.6	Simulations numériques bidimensionnelles instationnaires de la détonation des aérosols d'octane (M3).....	218
7.6.1	Paramètres de simulations bidimensionnelles.....	218
7.6.2	La structure cellulaire.....	219
7.6.3	Influence du maillage sur les résultats.....	224
7.6.4	Influence du diamètre du tube.....	224
7.7	Caractérisation thermomécanique.....	225
7.7.1	Influence de la richesse.....	225
7.7.2	Influence de la dilution.....	231
7.8	Simulations numériques tridimensionnelles instationnaires des détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides.....	233
<b>CONCLUSIONS.....</b>		<b>237</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE.....</b>		<b>243</b>





## **REMERCIEMENTS**

*Les travaux de recherche présentés dans cette thèse ont été effectués au sein de l'axe Détonique de la branche Combustion de l'Institut P' (UPR 3346 du CNRS), dans les locaux de l'ISAE-ENSMA (Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique) situé sur le site du Futuroscope.*

*Tout d'abord, je voudrais remercier MM. H-N. PRESLES et M. BELLENOUE, Directeurs successifs de la branche Combustion de l'Institut P', pour leur accueil pendant la durée de la thèse.*

*Je remercie vivement tout particulièrement mes deux Directeurs de thèses, Mr B. VEYSSIERE et Mr B. KHASAINOV, qui m'ont encadré pendant toute cette durée de thèse et m'ont permis de partager leurs grandes expériences et connaissances. Je les remercie sincèrement pour leur totale disponibilité et leurs encouragements, en particulier pendant la dernière ligne droite (lors de la rédaction de ce manuscrit).*

*Je remercie les Directeurs de Recherches Mme N. CHAUMEIX de l'ICARE-Orléans et Mr L. HOUAS de l'IUSTI-Marseille d'avoir bien voulu juger ce travail en étant les rapporteurs, ainsi que Mr A. CHINNAYYA, Maître de Conférence à l'Université de Rouen, et Mr G. DAMAMME, Assistant du Directeur Scientifique du CEA-DAM, d'avoir accepté de faire partie du jury.*

*Un grand merci à Mr V. MONTASSIER pour sa précieuse aide et ses conseils techniques notamment dans la partie expérimentale. Merci également à tout le personnel technique du laboratoire en particulier Mr A. CLAVERIE, Mr Y. SARRAZIN, Mr B. RUTTUN, Mr N. PAPIN, Mr B. CARME, Mr F. MERCIER, Mr H. DOREAU, ainsi que Mr F. VIROT, qui tous ont contribué au bon avancement des travaux de la thèse.*

*Un remerciement amical pour Mr M. MAR, où régnait une très bonne entente pendant toute la durée de la thèse.*

*Je remercie également l'ensemble des personnels administratifs de l'ENSMA et en particulier ceux du laboratoire de Combustion pour l'ambiance conviviale qui y existe. Une pensée particulière à Mme Jocelyne BARDEAU pour sa gentillesse et sa sympathie.*

*Enfin, je tiens à remercier tous mes proches, famille et amis, et plus particulièrement mes parents, ma femme et mes enfants (et petits enfants) qui m'ont soutenu tout le long de cette thèse. Je leur exprime toute ma reconnaissance.*

*Pour terminer, je tiens à rendre un vif hommage à mon défunt père, décédé il y a une année.*





# Table des figures

Fig. 1. 1 – Représentation schématique d’une onde de détonation stationnaire selon la théorie de Chapman Jouguet se propageant dans les gaz frais, dans le référentiel lié à l’onde. ....	10
Fig. 1. 2 – Représentation schématique des positions de la droite de Rayleigh-Michelson (RM) par rapport à l’adiabatique de Crussard (C) selon la célérité $D$ de l’onde de détonation. ....	12
Fig. 1. 3 – Représentation schématique de l’onde de détonation selon le modèle ZND.....	15
Fig. 1. 4 – Représentation schématique de l’adiabatique d’Hugoniot (H) et de Crussard (C) passage de l’état choqué (ZND) à l’état final (CJ).....	16
Fig. 1. 5 – Schéma d’une cellule de détonation et de l’évolution de la célérité de l’onde de détonation le long de l’axe de la cellule (Takai et al., 1974 ; Dormal et al., 1983) .....	18
Fig. 1. 6 – Exemple de traces dans le cas d’une détonation hélicoïdale (Viro, 2009) .....	20
Fig. 1. 7 – Célérités de détonation expérimentales pour un aérosol de décane dans de l’oxygène, en fonction de la richesse et du diamètre du tube (Bowen et al., 1971).....	23
Fig. 2. 1 – Schéma de la structure d’une détonation hétérogène.....	29
Fig. 2. 2 – Représentation schématique du profil de température et de sa dérivée temporelle dans l’onde de détonation.....	31
Fig. 2. 3 – Energie d’initiation d’un aérosol Hexane/air en fonction de la richesse (Bull et al., 1979).....	34
Fig. 2. 4 – Energie d’initiation de la détonation de mélanges d’hexane et de dodécane en fonction de la proportion de dodécane (Bull et al., 1979).....	34
Fig. 2. 5 – Largeur $\lambda$ de la cellule de détonation à la stœchiométrie pour divers alcanes en fonction du poids moléculaire (Benedick et al., 1989).....	35
Fig. 2. 6 – Célérités de détonation des mélanges hexane et JP-4 dans un oxydant gazeux ( $N_2/O_2$ ) en fonction de la dilution, et pour deux richesses différentes (Beeson et al., 1990)...	36
Fig. 2. 7 – Largeur $\lambda$ de cellules de détonation de l’hexane (a) et du JP4 (b) en fonction de la dilution, et pour deux richesses différentes (Beeson et al., 1990).....	37
Fig. 2. 8 – Largeur $\lambda$ des cellules de détonation pour un mélange JP10/ $O_2$ en fonction de la dilution, $P_0 = 100$ kPa (sauf pour les cas $\beta = 2$ et 3), $T_0 = 373$ K. Comparaison avec le propane à température ambiante (Austin et Shepherd, 2003) .....	39
Fig. 2. 9 – Taille de cellules de détonation pour des mélanges Hexane/ $O_2$ en fonction de la dilution (Austin et Shepherd, 2003) .....	39
Fig. 2. 10 – Effet d’insaturation de liaisons sur la taille des cellules de détonation ( $r = 1$ , $T = 100^\circ C$ et $P = 1$ atm), (Tieszen et al., 1991).....	43
Fig. 2. 11 – Variation de la largeur des cellules de détonation pour des mélanges hybrides Hexane/carburant gazeux /air (carburant gazeux : (a) $H_2$ , (b) $C_2H_2$ ou (c) $C_2H_4$ ), (Austin et Shepherd, 2003) .....	45

Fig. 2. 12 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse des mélanges d’isooctane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (1 <sup>er</sup> schéma cinétique Chemkin II).	56
Fig. 2. 13 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges de décane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (1 <sup>er</sup> schéma cinétique Chemkin II).	57
Fig. 2. 14 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges d’heptane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique de Cantera).	57
Fig. 2. 15 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges d’octane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique de Cantera).	58
Fig. 2. 16 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges de décane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique de Cantera).	58
Fig. 2. 17 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges de dodécane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique Cantera).	59
Fig. 3. 1 – Schéma du dispositif expérimental	64
Fig. 3. 2 – Mécanisme de formation d’un aérosol par atomisation ultrasonique. - Etapes de formation (Dobre, 2003)	67
Fig. 3. 3 – Schéma global de l’injecteur	68
Fig. 3. 4 – Schéma de l’atomiseur ultrasonique	69
Fig. 3. 5 – Photographies (a) de l’atomiseur ultrasonique et (b) de son montage dans le mélangeur	69
Fig. 3. 6 – Opacimètre	71
Fig. 3. 7 – Débitmètres de gaz et de carburant liquide	74
Fig. 3. 8 – Système de commande et de sécurité	76
Fig. 4. 1 – Schéma descriptif de l’Interférométrie à Phase Doppler « PDI »	82
Fig. 4. 2 – Photographie du dispositif de granulométrie PDI	83
Fig. 4. 3 – Distribution granulométrique d’un aérosol dans un écoulement d’air ( $X/\phi_b = 185$ , $U_{air} = 0,34$ m/s).	84
Fig. 4. 4 – Effet du débit d’air sur le diamètre moyen $D_{10}$ des gouttelettes	86
Fig. 4. 5 – Effet de la distance X par rapport à l’orifice de la buse sur le diamètre moyen $D_{10}$ des gouttelettes	87
Fig. 4. 6 – Effet de la distance X par rapport à l’orifice de la buse sur le diamètre de Sauter $D_{32}$ des gouttelettes	87
Fig. 4. 7 – Evolution de la célérité du choc généré dans le tube à détonation en fonction de la distance, dans le cas du booster seul contenant différents mélanges $C_2H_4/O_2$ et $H_2/O_2$ à $r=1$	89

Fig. 4. 8 – Modification de la section du tube lors de l’entrée dans la chambre d’enregistrement.....	90
Fig. 4. 9 – Evolution de la célérité de détonation en fonction de la distance, pour les mélanges H <sub>2</sub> /air stœchiométriques (initiation par inflammateur électrique et spirale de Schelkin) .....	92
Fig. 4. 10 – Principe de détermination de la valeur expérimentale P <sub>exp</sub> de la pression de détonation.....	92
Fig. 4. 11 – Exemple de détermination de la pression de détonation expérimentale P <sub>exp</sub> .....	93
Fig. 4. 12 – Profil de pression du mélange gazeux H <sub>2</sub> /air stœchiométrique .....	94
Fig. 4. 13– Enregistrement de la structure cellulaire de détonation dans le mélange stœchiométrique H <sub>2</sub> /Air.....	94
Fig. 4. 14 – Evolution de la célérité de détonation en fonction de la distance, dans le cas du tube principal contenant un prémélange H <sub>2</sub> /Air, pour différentes conditions d’amorçage de la détonation .....	95

Fig. 5. 1 – Profils de pression et diagramme de marche enregistrés sur les capteurs K1, K2, K3, K4, K5, K6 et K7 de la détonation du mélange stœchiométrique « M1-D0-1,0 ».....	101
Fig. 5. 2– Mélange M1-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	103
Fig. 5. 3 – Profils de pression et diagramme de marche enregistrés sur les capteurs K1, K2, K3, K4, K5, K6 et K7 de la détonation du mélange stœchiométrique « M1-D0-0,6 ».....	104
Fig. 5. 4– Mélange M1-D0-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	106
Fig. 5. 5– Mélange M1-D0-1,1 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	108
Fig. 5. 6– Mélange M1-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	109
Fig. 5. 7– Mélange M1-D0-1,4 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	110
Fig. 5. 8– Mélange M1-D0-1,7 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	111
Fig. 5. 9 – Variations de la célérité moyenne de détonation mesurée D <sub>exp</sub> en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/air « M1-D0 ».....	112
Fig. 5. 10 – Variations de la pression moyenne de détonation mesurée P <sub>exp</sub> en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/air « M1-D0 ».....	113
Fig. 5. 11 – Variations de la taille λ des cellules de détonation en fonction de la richesse des mélanges réactifs isooctane/air (293 K, 1 bar) « M1-D0 ».....	113
Fig. 5. 12– Mélange M1-D1-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	115
Fig. 5. 13 – Variations de la célérité moyenne de détonation D <sub>exp</sub> en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/(O <sub>2</sub> +2N <sub>2</sub> ), « M1-D1 ».....	116

Fig. 5. 14 – Variations de la pression moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+2N_2$ ), « M1-D1 ».....	116
Fig. 5. 15 – Variations de la taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+2N_2$ ), « M1-D1 ».....	117
Fig. 5. 16 – Structure cellulaire multitêtes du mélange isooctane/( $O_2+2N_2$ ) à richesse 0,6...117	
Fig. 5. 17– Mélange M1-D2-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	118
Fig. 5. 18 – Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+N_2$ ), « M1-D2 ».....	119
Fig. 5. 19– Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+N_2$ ), « M1-D2 ».....	119
Fig. 5. 20 – Variations de la taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+N_2$ ), « M1-D2 ».....	120
Fig. 5. 21– Mélange M1-D3-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	121
Fig. 5. 22– Mélange M1-D4-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	122
Fig. 5. 23 – Célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+\beta N_2$ ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ « M1 ».....	123
Fig. 5. 24 – Pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+\beta N_2$ ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ « M1 ».....	124
Fig. 5. 25 – Taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/( $O_2+\beta N_2$ ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ « M1 ».....	124
Fig. 5. 26– Mélange M2-D0-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	126
Fig. 5. 27– Mélange M2-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	127
Fig. 5. 28– Mélange M2-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	128
Fig. 5. 29 – Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/air, « M2-D0 ».....	129
Fig. 5. 30 – Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/air, « M2-D0 ».....	129
Fig. 5. 31 – Variations de la taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/air, « M2-D0 ».....	129
Fig. 5. 32– Mélange M2-D1-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	131
Fig. 5. 33 – Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/( $O_2+2N_2$ ), « M2-D1 ».....	132
Fig. 5. 34 – Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/( $O_2+2N_2$ ), « M2-D1 ».....	132

Fig. 5. 35 – Variations de la taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O <sub>2</sub> +2N <sub>2</sub> ), « M2-D1 ».....	132
Fig. 5. 36– Mélange M2-D2-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	134
Fig. 5. 37 – Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> ), « M2-D2 ».....	135
Fig. 5. 38 – Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du n-heptane/(O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> ), « M2-D2 ».....	135
Fig. 5. 39 – Variations de la taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> ), « M2-D2 ».....	136
Fig. 5. 40 – Célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O <sub>2</sub> + $\beta$ N <sub>2</sub> ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ , « M2 ».....	136
Fig. 5. 41 – Pression de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O <sub>2</sub> + $\beta$ N <sub>2</sub> ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ , « M2 ».....	137
Fig. 5. 42 – Taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O <sub>2</sub> + $\beta$ N <sub>2</sub> ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ , « M2 ».....	137
Fig. 5. 43– Mélange M3-D0-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	139
Fig. 5. 44– Mélange M3-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	140
Fig. 5. 45– Mélange M3-D0-1,5 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	141
Fig. 5. 46 – Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/air, « M3-D0 ».....	142
Fig. 5. 47 – Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/air, « M3-D0 ».....	143
Fig. 5. 48 – Taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/air, « M3-D0 ».....	143
Fig. 5. 49 – Mélange M3-D1-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	145
Fig. 5. 50 – Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> +2N <sub>2</sub> ), « M3-D1 ».....	146
Fig. 5. 51 – Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> +2N <sub>2</sub> ), « M3-D1 ».....	146
Fig. 5. 52 – Variations de la taille $\lambda$ des cellules de détonation en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> +2N <sub>2</sub> ), « M3-D1 ».....	146
Fig. 5. 53– Mélange M3-D2-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	148
Fig. 5. 54– Variations de la célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> ), « M3-D2 ».....	149
Fig. 5. 55 – Variations de la pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> ), « M3-D2 ».....	149

Fig. 5. 56 – Variations de la taille $\lambda$ des cellules de détonation en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> ), « M3-D2 ».....	149
Fig. 5. 57 – Célérité moyenne de détonation $D_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> + $\beta$ N <sub>2</sub> ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ , « M3 ».....	150
Fig. 5. 58 – Pression moyenne de détonation $P_{exp}$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> + $\beta$ N <sub>2</sub> ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ , « M3 ».....	150
Fig. 5. 59 – Taille des cellules de détonation $\lambda$ en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/(O <sub>2</sub> + $\beta$ N <sub>2</sub> ), pour $\beta = 3,76 ; 2$ et $1$ , « M3 ».....	151
Fig. 5. 60 – Taille $\lambda$ des cellules de détonation des mélanges M1 et M3 en fonction de la richesse, à différentes dilutions (293 K, 1 bar).....	152
Fig. 5. 61 – Mélange M4-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	154
Fig. 5.62 – Mélange M4-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	155
Fig. 5.63 – Mélange M4-D2-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	157
Fig. 5.64 – Mélange M5-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	160
Fig. 5.65 – Mélange M5-D0-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	161
Fig. 5.66 – Mélange M5-D1-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	163
Fig. 5.67 – Mélange NM-D0-0,25 avec $d_0 = 30 \mu\text{m}$ : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	166
Fig. 5.68 – Mélange NM-D0-0,25 avec $d_0 = 8 \mu\text{m}$ : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression.....	167

Figure 6. 1 – Maillage numérique 3D.....	186
Figure 6. 2 □ (a) Evolution de la taille de mailles numériques en fonction de la distance, (b) Pression et nombre de Mach ( $M=(D-u)/c$ ) dans la zone d'adaptation des mailles.....	188
Figure 6. 3 □ Etapes de l'intégration du système différentiel modélisant les équations par le code EFAE par utilisation de la méthode FCT.....	189

Fig. 7.1 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M1-D0-1,0 ( $T_0 = 298 \text{ K}$ , $P_0 = 1 \text{ bar}$ ).....	202
Fig. 7.2 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M2-D0-1,0 ( $T_0 = 298 \text{ K}$ , $P_0 = 1 \text{ bar}$ ).....	202
Fig. 7.3 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M3-D0-1,0 ( $T_0 = 298 \text{ K}$ , $P_0 = 1 \text{ bar}$ ).....	203

Fig. 7.4 – Profils des fractions massiques des espèces gazeuses ; de la fraction de période d'induction ; de la concentration et du rayon des gouttelettes « mères », pour le mélange M2-D0-0,8 (298 K, 1 bar).....	204
Fig. 7.5 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) moyennes dans la section du tube en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M1-D0-0,9.....	206
Fig. 7.6 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) le long de la paroi $y = 0$ du tube en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M1-D0-0,9.....	206
Fig. 7.7 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange pauvre M1-D0-0,8.....	208
Fig. 7.8 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,0 stœchiométrique.....	208
Fig. 7.9 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,3.....	209
Fig. 7.10 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,4.....	209
Fig. 7.11 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,5.....	209
Fig. 7.12 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,6.....	209
Fig. 7.13 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-0,8.....	210
Fig. 7.14 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-0,9.....	210
Fig. 7.15 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,2.....	210
Fig. 7.16 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,4.....	210
Fig. 7.17 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,5.....	211
Fig. 7.18 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,7 pour les distances plus grandes que 2,6 m.....	211
Fig. 7.19 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D1-r, avec $r = 0,8$ (a), $r = 0,9$ (b), $r = 1,0$ (c), $r = 1,1$ (d) et $r = 1,2$ (e).....	212
Fig. 7.20 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D2-r, avec $r = 0,8$ (a), $r = 0,9$ (b) et $r = 1,0$ (c).....	213
Fig. 7.21 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-0,8.....	216
Fig. 7.22 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-0,9.....	216
Fig. 7.23 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,0.....	216
Fig. 7.24 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,1.....	216
Fig. 7.25 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,2.....	216
Fig. 7.26 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,3.....	216
Fig. 7.27 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D1-r, avec $r = 0,9$ (a), $r = 1,0$ (b) et $r = 1,2$ (c).....	217
Fig. 7.28 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D2-0,7.....	218
Fig. 7.29 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D2-0,8.....	218
Fig. 7.30 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D2-0,9.....	218
Fig. 7.31 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-0,8.....	220
Fig. 7.32 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-0,9.....	220

Fig. 7.33 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,0.....	220
Fig. 7.34 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,1.....	220
Fig. 7.35 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,2.....	221
Fig. 7.36 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,3.....	221
Fig. 7.37 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,4.....	221
Fig. 7.38 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,5.....	221
Fig. 7.39 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,7.....	221
Fig. 7.40 – Structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D1-0,8.....	222
Fig. 7.41 – Structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D1-0,9.....	222
Fig. 7.42 – Structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D1-1,0.....	222
Fig. 7.43 – Structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D1-1,2.....	222
Fig. 7.44 – Formation de la Structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D1-1,3.....	223
Fig. 7.45 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-0,7.....	223
Fig. 7.46 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-0,8.....	223
Fig. 7.47 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-0,9.....	223
Fig. 7.48 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-1,0.....	223
Fig. 7.49 – Structure cellulaire de la détonation pour un mélange M3-D0-0,9, avec une résolution numérique double de la résolution initiale $\Delta X = \Delta Y = 0,133$ mm.....	224
Fig. 7.50 – Structure cellulaire de la détonation pour un mélange M3-D0-1,0, pour un tube 5 fois plus large que le tube expérimental.....	225
Fig. 7.51 – Distributions des paramètres thermomécaniques à $t = 2,203$ ms, pour un mélange M2-D0-0,8.....	227
Fig. 7.52 – Distributions des paramètres thermomécaniques à $t = 2,180$ ms, pour un mélange M2-D0-1,0.....	229
Fig. 7.53 – Profils des paramètres thermomécaniques à $t = 2,180$ ms, pour un mélange M2-D0-1,3.....	230
Fig. 7.54 – Profils des paramètres thermomécaniques à $t = 2,203$ ms, pour un mélange M2-D2-0,8.....	232
Fig. 7.55 – Traces de pression maximale correspondant au régime hélicoïdal dans un tube carré ( $h = 53$ mm) pour le mélange M1-D0-0,8.....	233
Fig. 7.56 – Simulation tridimensionnelle de la détonation hélicoïdale dans un tube carré ( $h = 53$ mm) pour le mélange M1-D0-0,8.....	235

# Table des tableaux

Tableau 1. 1 – Relations approchées des états CJ et ZND dans le cas d'un gaz polytropique	17
Tableau 2. 1 – Largeur de la cellule de détonation $\lambda$ pour des mélanges hexane/O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub> en fonction de la dilution et de la pression initiale ; $T_0 = 295$ K (Austin et Shepherd, 2003)	40
Tableau 2. 2 – Largeur de la cellule de détonation $\lambda$ pour des mélanges JP-10/O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub> en fonction de la richesse et de la dilution, ( $T_0 = 353$ K, $P_0 = 1$ bar), (Austin et Shepherd, 2003)	41
Tableau 2. 3 – Effet de la structure moléculaire sur la taille des cellules de détonation pour les hydrocarbures C8 saturés dans l'air ( $T_0 = 100$ °C, $P_0 = 1$ atm, $r = 1$ ), (Tieszen et al., 1991)	42
Tableau 2. 4 – Principales propriétés physico-chimiques de carburants liquides (Kuchta, 1985 ; Chikos et al., 1995 et 2003 ; Vatani, 2007)	47
Tableau 2. 5 – Propriétés cinétiques de carburants liquides (Westbrook et Dryer, 1981 ; Voronin et Zhdan, 1984 ; Babushok et Dakdancha, 1994 ; Seshadri et al., 2008 ; Franzelli et al., 2010)	48
Tableau 2. 6 – Caractéristiques de détonation de mélanges de certains carburants liquides avec l'air (à la stœchiométrie)	49
Tableau 2. 7 – Nomenclature des mélanges biphasiques utilisés	50
Tableau 2. 8 (a) – Principales propriétés physico-chimiques et thermodynamiques des carburants (Kuchta, 1985 ; Chikos et al., 1995 et 2003 ; Vatani, 2007) (b) – Propriétés cinétiques des carburants (Westbrook et Dryer, 1981 ; Voronin et Zhdan, 1984 ; Babushok et Dakdancha, 1994 ; Seshadri et al., 2008)	52
Tableau 3. 1 – Distances inter-capteurs	71
Tableau 3. 2 – Pureté des gaz utilisés	73
Tableau 3. 3 – Principales propriétés physico-chimiques des carburants liquides utilisés	73
Tableau 4. 1 – Configuration d'analyse PDI	83
Tableau 4. 2 – Récapitulatif des résultats de mesures granulométriques à deux distances X de la buse d'atomisation	85
Tableau 4. 3 – Valeurs de $D_0$ et $D_{32}$ en fonction du débit d'air	85
Tableau 5.1 – Conditions opératoires des essais effectués	100
Tableau 5.2 – Principales propriétés physico-chimiques de l'isooctane	100
Tableau 5.3 – Principales propriétés physico-chimiques du n-heptane	125
Tableau 5.4 – Principales propriétés physico-chimiques du n-octane	138
Tableau 5.5 – Principales propriétés physico-chimiques du n-décane	152
Tableau 5.6 – Principales propriétés physico-chimiques du n-dodécane	159

Tableau 5.7 – Principales propriétés physico-chimiques du nitrométhane.....	164
Tableau 6.1 – Paramètres cinétiques de combustion des hydrocarbures utilisés (Westbrook et Dryer, 1981).....	182
Tableau 6.2 □ Types d’erreurs rencontrées avec la méthode des différences finies (Oran et Boris, 2001).....	185
Tableau 7.0 – Paramètres thermodynamiques des espèces gazeuses.....	194
Tableau 7.1 (a) – Paramètres de l’état CJ pour le mélange M1-D0-r.....	195
Tableau 7.1 (b) – Paramètres de l’état CJ pour les mélanges M1-D1-r et M1-D2-r.....	196
Tableau 7.2 (a) – Paramètres de l’état CJ pour le mélange M2-D0-r.....	196
Tableau 7.2 (b) – Paramètres de l’état CJ pour les mélanges M2-D1-r et M2-D2-r.....	197
Tableau 7.3 (a) – Paramètres de l’état CJ pour le mélange M3-D0-r.....	197
Tableau 7.3 (b) – Paramètres de l’état CJ pour les mélanges M3-D1-r et M3-D2-r.....	198
Tableau 7.4 (a) – Paramètres cinétiques pour la phase de production de vapeur.....	199
Tableau 7.4 (b) – Valeurs du facteur pré-exponentiel pour la phase de combustion après ajustement.....	199
Tableau 7.5 – Paramètres d’entrée relatifs au maillage et à l’énergie d’amorçage $E_i$ , dans le cas des calculs 1D.....	200
Tableau 7.6 – Paramètres de simulations bidimensionnelles.....	205
Tableau 7.7 – Paramètres de simulations bidimensionnelles.....	214
Tableau 7.8 – Paramètres de simulations bidimensionnelles.....	219

# Nomenclature

Symbole	Désignation	Unités SI
$A_c$	facteur pré-exponentiel des réactions chimiques gazeuses	$\left[ \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right]^{\nu-\sigma} \cdot \text{s}^{-1}$
$a$	exposant lié à l'oxydant gazeux	
$B$	nombre de transfert Spalding	
$b$	exposant lié au combustible gazeux	
$c$	célérité du son	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$C_D$	coefficient de traînée des gouttelettes	
$c_l$	capacité massique thermique du liquide	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$c_p$	capacité thermique massique à pression constante	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$c_v$	capacité thermique massique à volume constant	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$D$	célérité	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$D_{CJ}$	célérité de détonation idéale	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$D_{\text{exp}}$	célérité de détonation mesurée expérimentalement	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$D_{10}$	diamètre moyen des gouttelettes	$\text{m}$
$D_{32}$	diamètre de Sauter des gouttelettes	$\text{m}$
$d$	diamètre initial des gouttelettes	$\text{m}$
$E_{di}$	énergie totale des gouttelettes	$\text{J}$
$e_{di}$	énergie interne des gouttelettes ( $e = c_l T_l$ )	$\text{J}$
$E_{ac}$	énergie d'activation gouvernant la phase de combustion	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
$f$	taux d'échange d'impulsion entre phase gazeuse et phase liquide	
$h$	arête de la section carrée du tube à détonation	$\text{m}$
$h^*$	enthalpie de référence massique	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
$i$	nombre de désintégrations	
$k$	Facteur de proportionnalité ( $\lambda$ et $L_i$ )	
$L_i$	longueur d'induction	$\text{m}$
$L_c$	longueur de combustion	$\text{m}$
$J$	taux d'évaporation classique des gouttelettes	
$n$	Nombre de gouttelettes par unité de volume	$\text{m}^{-3}$
$N$	nombre de mailles	
$Nu$	nombre de Nusselt	
$P_0$	pression initiale de référence	$\text{Pa}$
$p$	pression	$\text{Pa}$
$P_{CJ}$	pression de détonation CJ idéale	$\text{Pa}$
$P_{\text{exp}}$	pression de détonation mesurée expérimentalement	$\text{Pa}$
$P_h$	pas de l'hélice de la détonation hélicoïdale	$\text{m}$
$Pr$	nombre de Prandtl	
$P_{\text{ZND}}$	pression de détonation ZND	$\text{Pa}$
$Oh$	nombre d'Ohnesorge	
$q$	taux d'échange de chaleur entre phase gazeuse et phase liquide	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
$L_v$	chaleur d'évaporation	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
$Q_r$	chaleur de réaction globale de combustion	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
$R$	constante des gaz parfaits	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$Re$	nombre de Reynolds	
$S$	taux de désintégration des gouttelettes	
$T$	température des gaz	$\text{K}$

$T_d$	température des gouttelettes	K
$t$	temps	s
$T_{eb}$	température d'évaporation	K
$\mathbf{u}$	vitesse matérielle des gaz	$\text{m.s}^{-1}$
$\mathbf{u}_d$	vitesse matérielle des gouttelettes	$\text{m.s}^{-1}$
$r$	richesse du mélange réactif	
$W_{m_{ox}}$	masse molaire de l'oxydant	$\text{kg.mol}^{-1}$
$W_{m_{vap}}$	masse molaire du combustible	$\text{kg.mol}^{-1}$
$X$	fraction massique	
$Y_{ind}$	fraction du délai d'inflammation dans la zone d'induction	
$Z_{arr}$	coefficient pré-exponentiel gouvernant la phase de combustion	$\text{s}^{-1}$
$Z_{ind}$	coefficient pré-exponentiel gouvernant la phase d'induction	$\text{s}^{-1}$
$\alpha$	Degré d'avancement de la réaction	
$\beta$	Rapport de dilution	
$\varepsilon$	émissivité	
$\varepsilon_a$	énergie d'activation gouvernant la phase d'induction	
$\gamma$	Rapport des capacités calorifiques	
$\Delta t$	pas de temps	s
$\Delta x$	taille de maille dans la direction x	m
$\Delta y$	taille de maille dans la direction y	m
$\Delta z$	taille de maille dans la direction z	m
$\Delta x_{adap}$	taille de maille adaptée dans la direction x	m
$\lambda$	taille de la cellule de détonation	m
$\lambda_g$	conductivité thermique des gaz	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$\nu_g$	viscosité cinématique des gaz	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
$\mu$	Viscosité dynamique des gaz	Pa.s
$\rho$	densité	$\text{kg.m}^{-3}$
$\sigma$	concentration des gouttelettes dans le mélange biphasique	$\text{kg.m}^{-3}$
$\tau_b$	temps de désintégration des gouttelettes	s
$\phi_{St}$	coefficient stœchiométrique	$(\text{m}^2.\text{s}^{-1})$
$\varphi_d$	fraction volumique des gouttelettes	
$\phi_b$	diamètre de la buse de l'atomiseur	m
$\Gamma_{vap}$	taux de combustion de vapeur	
$\sigma_B$	Constante de Boltzmann	

## Abréviations

CFL	Courant-Friedriechs-Lewy
CJ	Chapman-Jouguet
EFAE	Enhanced Fuel Air Exploision
FCT	Flux-Corrected Transport
LWC	Liquid Water Content
PDE	Moteur à Détonation Pulsée (Pulsed Detonation Engine)
PDI	Phase Doppler Interferometry
SMD	Diamètre de Sauter Moyen (Sauter Mean Diameter)
TDD	Transition Déflagration Détonation
ZND	Zeldovich-Von Neumann-Döring

## Indices et Exposants

$()_0$	état initial
$()_{\text{adap}}$	nombre d'adaptations
$()_{\text{CJ}}$	Chapman-Jouguet
$()_{\text{exp}}$	Expérimental
$()_i$	nombre de désintégrations
$()_d$	Liquide
$()$	gaz
$()_{\text{ox}}$	oxydant
$()_{\text{rp}}$	Produits de combustion
$()_{\text{vap}}$	vapeur combustible
$()_x$	axe des x
$()_y$	axe des y
$()_z$	axe des z
$()_{\text{ZND}}$	Zeldovich-von Neumann-Döring



# **INTRODUCTION**



L'étude de la détonation d'aérosols de combustibles liquides est un domaine d'intérêt relativement récent et remonte à un peu plus d'un demi-siècle. La sécurité d'utilisation de carburants liquides pour la propulsion aéronautique et spatiale requerrait de mieux connaître le risque de détonation dans le cas d'éclatement des réservoirs et de dispersion du carburant sous forme pulvérisée. Le développement de l'industrie chimique et pétrolière a posé de nombreux problèmes de sécurité industrielle liés au stockage, au transport et aux procédés de fabrication mettant en jeu des réactifs chimiques liquides. Des accidents marquants sont venus illustrer la nécessité de mieux connaître la détonabilité des brouillards de combustibles liquides, tels que l'explosion de l'usine chimique de Flixborough en 1974, où 45 tonnes de cyclohexane chaud et sous pression, se sont vaporisés à la suite de la rupture d'une conduite, faisant des dégâts sévères dans un rayon d'environ 2 km ; ou l'explosion en 1996 du réservoir central du Boeing 747 de la TWA 800 dont l'origine est la formation d'un mélange explosif hétérogène air/kérosène à l'intérieur de ce réservoir, amenant la destruction de la partie centrale de l'appareil.

Par ailleurs, ce type de milieu réactif a suscité aussi l'intérêt pour la mise au point d'armes à effets de souffle, dont le principe était basé sur la réalisation de nuages de grandes dimensions par dispersion dans l'air, sous forme de brouillards, de combustibles liquides. Les premières expérimentations sont intervenues à la fin des années 1960, et les premières versions d'armes désignées sous le nom de FAE (Fuel-Air Explosives) apparurent vers le milieu des années 1970. Les systèmes développés actuellement sous l'appellation d'explosifs thermobariques (ou explosifs à effet de souffle augmenté) s'appuient sur le même concept : un matériau combustible est dispersé dans l'air, au moment de l'explosion initiale de la munition, afin de créer un brouillard (poussière ou aérosols liquides). Ce brouillard de combustible est mis en détonation et engendre une onde de souffle qui génère de grandes surpressions, ainsi qu'une boule de feu. Dans ce type d'armes, les niveaux de surpression peuvent atteindre 2 fois la surpression créée par des armes conventionnelles.

L'utilisation de carburants liquides sous forme d'aérosols injectés dans la chambre de combustion de propulseurs fonctionnant en régime de détonation est une perspective plus récente liée au développement de « moteurs à détonation » : des investigations sur ce type de moteurs ont déjà été effectuées depuis les années 1940, mais c'est vers la fin des années 1990 que les premiers moteurs utilisant ce principe de fonctionnement ont fait l'objet de développements dans les secteurs aéronautique et spatial, connus sous le nom de moteur à détonation pulsée (en anglais : Pulsed Detonation Engine, PDE). Ainsi, il est plus que jamais

nécessaire de développer des recherches orientées vers la compréhension des mécanismes d'initiation et de propagation des détonations dans des systèmes biphasiques constitués d'un aérosol de gouttelettes liquides dans une atmosphère gazeuse oxydante. Le besoin est d'autant plus grand que les connaissances sur la détonation des mélanges hétérogènes gaz-aérosols de gouttelettes liquides sont en nombre beaucoup plus limité que celles concernant les détonations gazeuses homogènes. Les raisons tiennent, d'une part, à la complexité de la modélisation de la détonation dans ce type de milieu, et, d'autre part, aux difficultés de réalisation d'expériences dans des aérosols de caractéristiques bien contrôlées (granulométrie, concentration, répartition) et reproductibles.

Ainsi, l'objectif de la présente thèse est de contribuer à la compréhension des processus physiques et chimiques qui entrent en jeu dans les détonations hétérogènes d'aérosols de gouttelettes liquides d'hydrocarbure en atmosphère gazeuse oxydante. Ces travaux font suite aux premiers travaux de modélisation numérique entrepris sur ce sujet par Briand (2009) dans sa thèse au Laboratoire de Combustion et de Détonique. Plus récemment, lors d'un travail de thèse mené en parallèle avec la présente étude, Mar (2012) s'est intéressé à l'influence de la granulométrie de l'aérosol et aux mécanismes de désintégration sous choc des gouttelettes de liquide. Pour notre part, nous nous intéressons ici aux aspects cinétiques liés aux propriétés physico-chimiques des carburants liquides et de l'atmosphère oxydante gazeuse. Nous apporterons une attention particulière à la mise en évidence de la structure cellulaire de détonation, qui permet de caractériser la sensibilité d'un mélange à la détonation. Dans les cas des aérosols de liquides dans l'air, il n'existe pratiquement pas de résultats expérimentaux sur le sujet. Nous avons mis au point une méthodologie expérimentale, en nous appuyant sur les moyens développés antérieurement au Laboratoire (tubes à détonation verticaux ; techniques de génération des suspensions de particules et d'aérosols de gouttelettes,...). Parallèlement, nous avons enrichi le modèle développé par Mar (2012) sur la fragmentation mécanique des gouttelettes, en prenant en compte les effets de la richesse des mélanges, et utilisé le code de calcul des détonations dans les milieux homogènes et hétérogènes développé au Laboratoire (code EFAE, Khasainov (1996)) pour effectuer des simulations numériques.

Le mémoire est structuré en sept chapitres :

- Le chapitre 1 rappelle succinctement les notions générales sur les détonations en phase gazeuse, et les principales connaissances sur les détonations en milieu hétérogène gaz/gouttelettes liquides.

- Le chapitre 2 est consacré à l'examen des paramètres physico-chimiques influençant les détonations dans les mélanges hétérogène gaz/gouttelettes liquides.
- Le chapitre 3 présente le dispositif expérimental et les techniques de mesure.
- Le chapitre 4 traite des essais préliminaires effectués pour le choix de la méthode d'initiation, et des conditions d'établissement d'un régime de propagation d'une détonation autonome stationnaire.
- Le chapitre 5 est consacré à la présentation des résultats expérimentaux.
- Le chapitre 6 présente le modèle numérique utilisé pour les simulations.
- Le chapitre 7 est consacré à la présentation des résultats de simulations numériques.

Le mémoire se termine par un bref chapitre de conclusions, qui fournit une synthèse des résultats obtenus et suggère quelques perspectives.



# **Chapitre 1**

## **Détonations dans les mélanges biphasiques gaz/gouttelettes liquides**



## 1.1 Rappels sur les détonations en phase gazeuse

La première observation des détonations en phase gazeuse remonte à la période des années 1870-1883 quand, en 1881, Berthelot et Vieille, puis Mallard et Le Chatelier découvrent un mode de combustion se propageant à des vitesses de 1,5 à 2,5 km/s (Roy et al., 2004). Ils décrivent une onde explosive se propageant à une vitesse supersonique et évoquent ainsi pour la première fois le mot « Détonation ».

Quelques années plus tard, Chapman (1899) et Jouguet (1905) énoncent les éléments de la théorie de la détonation qui stipule que l'onde de détonation considérée plane, stationnaire, autonome et de célérité constante est assimilée à une surface de discontinuité infiniment mince transformant instantanément le mélange réactif (milieu des gaz frais) en gaz brûlés à l'équilibre thermodynamique noté état final CJ « Chapman-Jouguet ».

Zeldovich (1940), von Neumann (1942) et Döring (1943) ont proposé indépendamment un modèle de détonation plus réaliste en considérant que l'onde de détonation est constituée d'une onde de choc et d'une zone de réaction chimique d'épaisseur finie.

### 1.1.1 Le modèle de détonation de Chapman Jouguet (CJ)

#### 1.1.1.1 Hypothèses

- ✓ L'onde de détonation est plane, monodimensionnelle, autonome et stationnaire se propageant à une vitesse constante  $D$ ,
- ✓ L'onde de détonation est assimilée à une simple discontinuité hydrodynamique,
- ✓ Les grandeurs thermodynamiques, telles que la température  $T$ , la pression  $P$ , la masse volumique  $\rho$  et la vitesse matérielle  $u$  varient instantanément, au travers de la discontinuité, entre l'état 0 définissant les gaz frais et l'état 1 définissant les gaz brûlés à l'équilibre thermodynamique : la compression par l'onde de choc et la réaction chimique ont lieu instantanément et l'état d'équilibre est immédiatement atteint après la discontinuité. La détonation est ainsi perçue comme une discontinuité totalement réactive, notée  $\Sigma$ ,
- ✓ L'écoulement est adiabatique, sans pertes d'énergie pariétale,

- ✓ Les phénomènes diffusifs (viscosité, diffusion de matière et de chaleur, ...etc.) sont considérés négligeables,
- ✓ Les gaz sont supposés parfaits.

### 1.1.1.2 Mise en équations

Soient  $p_1, \rho_1, u_1$  et  $E_1$  la pression, la masse volumique, la vitesse matérielle et l'énergie interne du milieu après la discontinuité réactive ;  $p_0, \rho_0, u_0$  et  $E_0$  les mêmes grandeurs avant la discontinuité réactive. Soit  $D$  la vitesse de l'onde.

Si l'on se place dans un repère lié au front de détonation  $\Sigma$ , celui-ci apparaît immobile et l'on voit la matière y entrer avec la vitesse relative  $w_0 = D - u_0$  et en sortir avec la vitesse relative  $w_1 = D - u_1$ .

La représentation schématique (figure 1.1) d'une telle situation physique se traduit par :

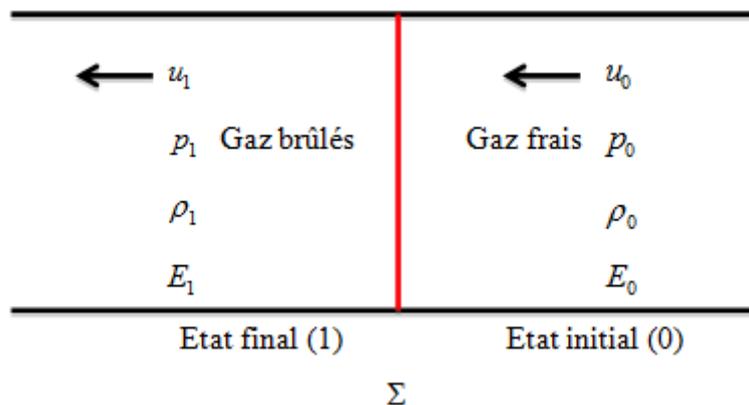


Fig. 1. 1 – Représentation schématique d'une onde de détonation stationnaire selon la théorie de Chapman Jouguet se propageant dans les gaz frais, dans le référentiel lié à l'onde.

Les équations conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale établies pour une onde de détonation dans le référentiel lié avec l'onde:

- Conservation de la masse :

$$\dot{m} = \rho_0 w_0 = \rho_1 w_1 \quad (1.1)$$

- Conservation de la quantité de mouvement :

$$p_0 + \rho_0 w_0^2 = p_1 + w_1^2 \quad (1.2)$$

- Conservation de l'énergie :

$$E_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{w_0^2}{2} = E_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{w_1^2}{2} \quad (1.3)$$

La combinaison des équations (1.1) et (1.2), avec  $v = \frac{1}{\rho}$  ( $v$  étant le volume spécifique), permet d'obtenir :

$$m^2 = \frac{w_0^2}{v_0^2} = -\frac{p_1 - p_0}{v_1 - v_0} \quad (1.4)$$

ou encore 
$$\frac{p_1 - p_0}{1/\rho_1 - 1/\rho_0} = -\rho_0^2 D^2 \quad (1.5)$$

L'équation (1.4) est connue sous le nom de droite de Rayleigh-Michelson dans le plan  $(p, v)$ .

En éliminant les vitesses  $D$  et  $u$  entre les trois équations précédentes (1.1 à 1.3), et en introduisant l'enthalpie spécifique  $h$  :

$$h = E + p/\rho \quad (1.6)$$

on aboutit à la relation classique de l'adiabatique de Crussard dans le plan  $(p, v)$  :

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

En introduisant la chaleur de réaction  $Q_r = -\Delta_r h^* = h_0^* - h_1^*$  (où  $h^*$  est l'enthalpie de référence à la température  $T^*$ ), et l'enthalpie sensible  $\hat{h}$  telle que :  $\hat{h} = h - h^*$ , il vient :

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

ou, en prenant  $\gamma = \text{cst}$ , 
$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \left( \frac{p_1}{\rho_1} - \frac{p_0}{\rho_0} \right) - Q_r = \frac{1}{2}(p_1 - p_0) \left( \frac{1}{\rho_0} + \frac{1}{\rho_1} \right) \quad (1.9)$$

On trace dans un repère  $(p, 1/\rho)$  l'adiabatique de Crussard (C) et la droite de Rayleigh-Michelson (RM) (figure 1.2).

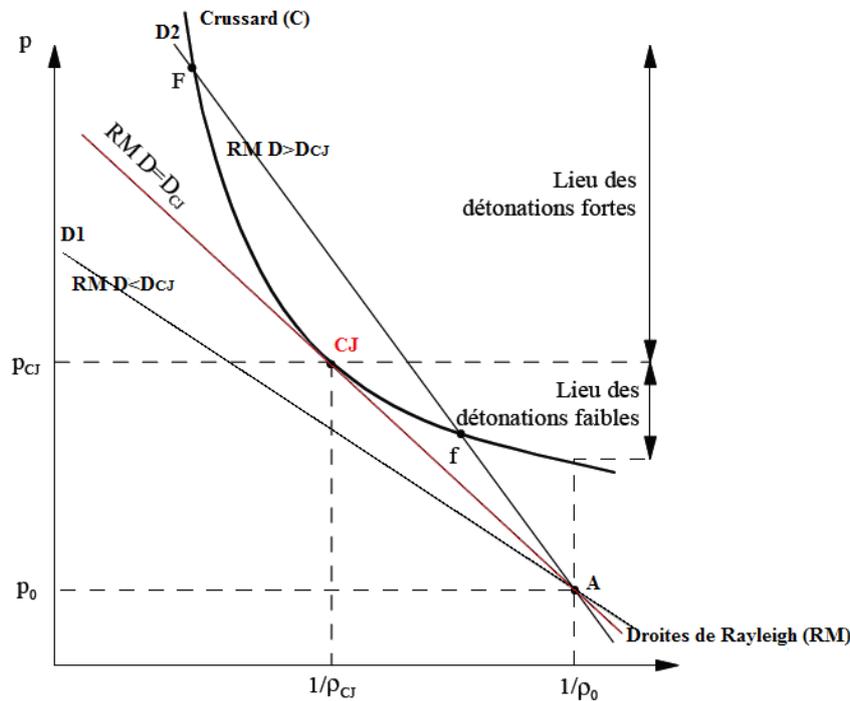


Fig. 1. 2 – Représentation schématique des positions de la droite de Rayleigh-Michelson (RM) par rapport à l'adiabatique de Crussard (C) selon la célérité  $D$  de l'onde de détonation.

L'intersection de la courbe de Crussard avec la droite de Rayleigh-Michelson issue de l'état initial (point A) donne les caractéristiques thermodynamiques de l'état final de l'onde de détonation.

Il découle du diagramme précédent que trois cas de figures sont alors possibles :

- pour  $D < D_{CJ}$ , la droite de Rayleigh-Michelson et l'adiabatique de Crussard n'ont pas de point d'intersection et aucune solution n'est alors possible,
- pour une valeur particulière de  $D$  appelée  $D_{CJ}$ , le problème a une solution unique,
- pour  $D > D_{CJ}$ , deux solutions sont possibles notées F (détonation forte) et f (détonation faible) respectivement :

- si la pression finale  $p > p_{CJ}$ , on se trouve sur la branche des détonations fortes de la courbe de Crussard (représentée par le point F),
- inversement, si  $p < p_{CJ}$ , on se trouve sur la branche des détonations faibles de la courbe de Crussard (représentée par le point f).

Dans la réalité, seul le cas où  $p > p_{CJ}$  est observé (branche des détonations fortes : point F) mais ces dernières ne sont pas autonomes. Ce régime évolue naturellement vers l'état stable CJ. Par contre, les solutions situées sur la branche des détonations faibles n'ont jamais été observées expérimentalement.

Au point CJ, la vitesse relative du gaz par rapport au front de détonation est égale à la célérité locale du son :

$$w_{CJ} = a_{CJ} \quad (1.10)$$

L'état final (CJ) ne dépend que des propriétés intrinsèques du mélange réactif ( $\gamma$  et  $Q$ ) et des conditions initiales. Le système d'équations précédent (1.1 à 1.3) s'écrit :

$$|w_0| = D - u_0 = v_0 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \quad (1.11)$$

$$|w_0| - |w_1| = u_1 - u_0 = \sqrt{(p_1 - p_0)(v_0 + v_1)} \quad (1.12)$$

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

La solution des équations (1.11 à 1.13), pour le cas des détonations, fournit (Stanyukovich, 1960) :

$$\frac{D - u_0}{a_0} = \sqrt{\frac{\gamma_1 - 1}{2} \left[ (\gamma_1 + 1) \frac{Q}{a_0^2} + \frac{\gamma_0 + \gamma_1}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right]} + \sqrt{\frac{\gamma_1 + 1}{2} \left[ (\gamma_1 - 1) \frac{Q}{a_0^2} - \frac{\gamma_0 - \gamma_1}{\gamma_0(\gamma_0 - 1)} \right]} \quad (1.14)$$

Dans le cas des ondes fortes,  $(D/a_0)^2 \gg 1$  et  $\gamma_0 = \gamma_1$ , on obtient :

$$D - u_0 = \sqrt{2(\gamma_1^2 - 1)Q} \quad (1.15)$$

Cependant, ce modèle décrit uniquement le passage de l'état initial des gaz frais à l'état final des gaz brûlés qui satisfait l'équilibre thermodynamique et chimique (état CJ). Cette théorie ne donne aucune information sur l'évolution du système entre l'état initial et l'état final.

### 1.1.2 Le modèle de Zeldovich-von Neumann-Döring

Dès 1900, Vieille avait proposé un mécanisme de propagation de la détonation constitué d'un choc précurseur suivi, après un certain délai, d'une zone de réaction chimique :

*" Un premier système d'interprétation consiste à se cinder, pour ainsi dire, le phénomène de détonation en deux parties ; la réaction est considérée comme produite par une élévation de température préalable due au phénomène purement physique de compression adiabatique du milieu considéré comme inerte. Le phénomène chimique est, dans cette hypothèse, consécutif à la compression et peut même comporter un certain retard par rapport au passage de l'onde mécanique ; il n'intervient pas, en tout cas, pour modifier la constitution du milieu dans lequel se propage l'onde mécanique et son rôle se borne à entretenir la valeur élevée de la condensation propagée par l'onde. " (Vieille, 1900).*

Le modèle établi indépendamment par Zeldovich, von Neumann et Döring s'appuie sur la même idée et décrit l'évolution du système réactif entre l'état initial (gaz non choqué) jusqu'à l'état final (point CJ). Le modèle ZND permet ainsi d'associer la cinétique chimique au processus thermodynamique du modèle CJ.

### Description du modèle :

La figure 1.3 est une représentation schématique de l'onde de détonation selon le modèle ZND. Ce dernier est décrit comme la propagation d'une onde de choc dans un milieu réactif. Au passage de cette onde de choc, le milieu réactif est porté quasi-instantanément dans un état choqué appelé état ZND (correspondant au pic de von Neumann) qui implique une augmentation brutale de la pression et de la température des gaz frais (on obtient les caractéristiques ZND :  $P_{ZND}$  et  $T_{ZND}$ ), provoquant après une période d'induction l'auto-inflammation du milieu réactif. Ce pic correspond à l'intersection de la droite de Rayleigh-Michelson avec la courbe d'Hugoniot (figure 1.4) (représentation des états pouvant être obtenus à partir de l'état initial A lors d'une compression par choc). Cette dernière étant obtenue à partir de l'équation de Crussard (1.8) dans laquelle  $Q = 0$ , le choc étant inerte.

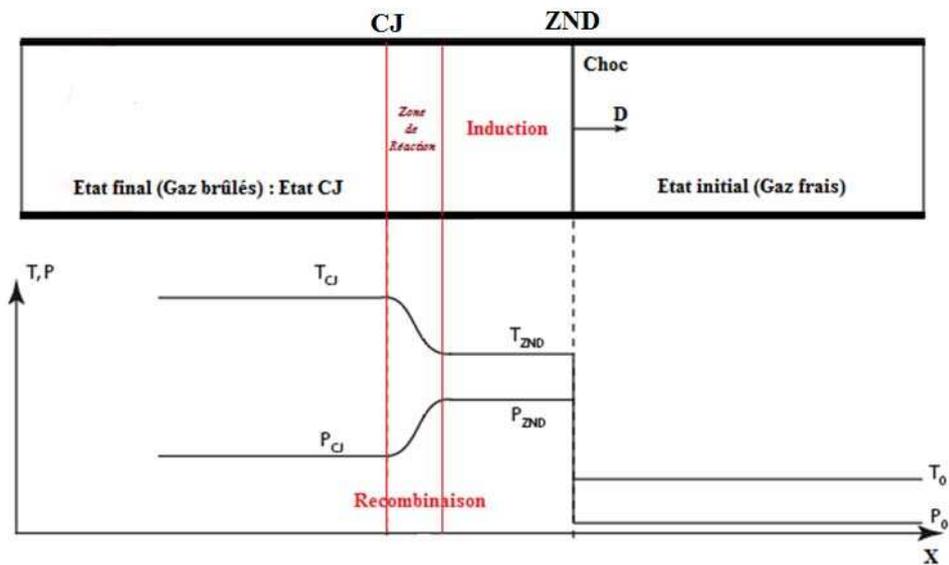


Fig. 1. 3 – Représentation schématique de l'onde de détonation selon le modèle ZND

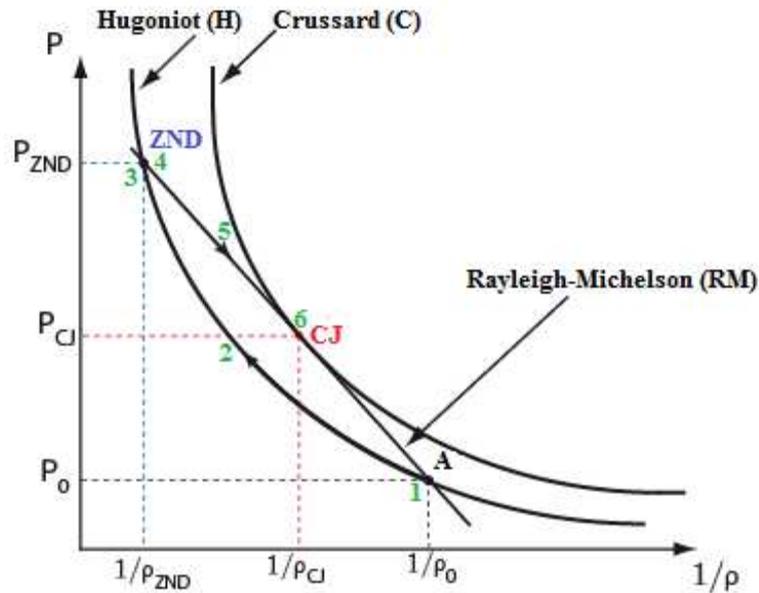


Fig. 1. 4 – Représentation schématique de l’adiabatique d’Hugoniot (H) et de Crussard (C) passage de l’état choqué (ZND) à l’état final (CJ)

#### Hypothèses du modèle ZND :

- L’écoulement est monodimensionnel, plan et stationnaire,
- La zone de réaction a une épaisseur finie
- La réaction chimique est supposée irréversible : l’avancement de la réaction est nul au front de choc précurseur et égal à l’unité au plan CJ,
- Toutes les variables thermodynamiques autres que la composition chimique sont à chaque instant à l’équilibre thermodynamique local,
- Le choc précurseur est considéré comme une discontinuité impliquant que les phénomènes de transport soient négligés.

#### Relations approchées des états CJ et ZND :

Dans le cas d’un gaz polytropique avec  $\gamma$  constant, on présente sur le tableau 1.1 les relations approchées, dans le cas des chocs forts ( $D^2 \gg a_0^2$  et  $u_0 = 0$ ), pour la détermination des caractéristiques principales de l’état CJ et de l’état ZND.

Propriétés de l'état CJ	Propriétés de l'état ZND
$D_{CJ} = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q}$	$p_{ZND} \approx 2p_{CJ}$
$p_{CJ} = \rho_0 \frac{D_{CJ}^2}{\gamma + 1}$	$\frac{\rho_{ZND}}{\rho_0} \approx \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}$
$\frac{\rho_{CJ}}{\rho_0} = \frac{\gamma + 1}{\gamma}$	$\frac{T_{ZND}}{T_{CJ}} \approx \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma}$
$\frac{T_{CJ}}{T_0} = \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1}\right)^2 \frac{D_{CJ}^2}{c_0^2}$	$u_{ZND} \approx 2u_{CJ}$
$u_{CJ} = \frac{D_{CJ}}{\gamma + 1}$	$a_{ZND} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \sqrt{\frac{2\gamma}{\gamma - 1}} D_{CJ}$
$a_{CJ} = \frac{\gamma}{\gamma + 1} D_{CJ}$	$M_{ZND} = \frac{ D - u_{ZND} }{a_{ZND}} = \left(\frac{\gamma - 1}{2\gamma}\right)^{1/2}$

Tableau 1. 1 – Relations approchées des états CJ et ZND dans le cas d'un gaz polytropique

La détermination des profils de variation des paramètres thermo-physiques ( $P, T, \rho, w$ ) dans la zone de réaction nécessite l'utilisation d'un modèle de cinétique chimique. Généralement, il se met sous la forme d'une loi d'Arrhenius représentant une réaction chimique irréversible de taux de réaction :

$$\frac{d\alpha}{dt} = Z\rho^n(1-\alpha)^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (1.16)$$

où  $\alpha$  est le degré d'avancement de la réaction,  $Z$  est le facteur pré-exponentiel,  $n$  l'ordre de la réaction et  $E_a$  l'énergie d'activation.

### 1.1.3 Structure tridimensionnelle du front de détonation

#### 1.1.3.1 La structure cellulaire « détonation multi-tête »

Les modèles de CJ et ZND présentent la détonation comme la propagation d'une onde plane et donc monodimensionnelle. En réalité, cette onde possède une structure réelle beaucoup plus complexe que celle décrite par les deux théories précédentes.

Un certain nombre d'observations expérimentales de la structure de l'onde de détonation ont mis en évidence le caractère localement instationnaire de l'onde de détonation.

A ce titre, Campbell et Woodhead (1927) ont été les premiers à mettre en évidence le caractère non plan de la détonation.

En 1959, Denisov et Troshin ont également observé, par la méthode de traces de suie, de fortes discontinuités au niveau du front de détonation, des discontinuités qui ont des formes tantôt concave, tantôt convexe par rapport aux gaz frais.

En réalité, la détonation est un phénomène intrinsèquement instable et la structure réelle de l'onde de détonation est tridimensionnelle. Sa célérité de propagation n'est stationnaire qu'en moyenne et s'accompagne d'un mouvement cyclique du front de détonation (Denisov et Troshin, 1962; Shchelkin et Troshin, 1965; Strehlow et al., 1967) induisant des motifs périodiques appelés « Cellules de détonation » (figure 1.5).

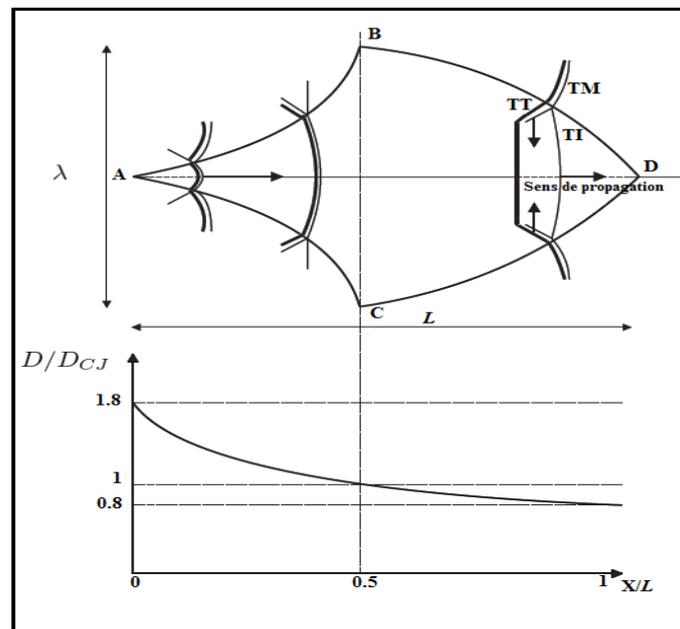


Fig. 1. 5 – Schéma d'une cellule de détonation et de l'évolution de la célérité de l'onde de détonation le long de l'axe de la cellule (Takai et al., 1974 ; Dormal et al., 1979)

Il a été montré que la taille caractéristique de cette structure était une signature de la longueur cinétique caractéristique des réactions, en particulier de la longueur d'induction (voir annexe 1). On trouvera en annexe 1 les détails concernant l'influence des paramètres sur la taille et la régularité de la structure cellulaire.

Sur la base des travaux sur la structure cellulaire, des critères basés sur la taille des cellules de détonation ont été établis concernant les conditions critiques de propagation et les conditions

critiques d'initiation des détonations. Toutefois, des travaux récents (Virost, 2009) ont montré que les processus de libération de l'énergie dans l'onde de détonation étaient plus complexes que les modèles classiques retenus jusqu'à présent et qu'en conséquence, les corrélations classiques basées sur la dimension de la structure cellulaire devaient être revisitées.

### 1.1.3.2 Détonations hélicoïdales

Longtemps présentées comme une caractéristique particulière de certains cas de détonations, nous savons désormais que la détonation hélicoïdale est un régime caractéristique des détonations proches des limites de propagation.

De nombreux auteurs ont étudié le régime de propagation hélicoïdal, dans diverses conditions opératoires, aussi bien de manière expérimentale que numérique (Campbell et Woodhead, 1927; Manson, 1946; Dove et Wagner, 1962; Schott, 1965; Tsuboi et al., 2007).

Campbell et Woodhead (1927) furent les premiers à observer à l'aide d'enregistrements chronostrioscopiques la trace d'une seule tête lumineuse sinusoïdale dont on sait aujourd'hui qu'elle correspond à une détonation hélicoïdale.

Ce régime est caractérisé par l'existence d'un seul point triple animé d'un mouvement de rotation autour de l'axe longitudinal du tube (analogie avec l'hélice). La célérité "moyenne" est constante mais un peu inférieure à la célérité Chapman-Jouguet (CJ). Ce régime est obtenu dans le cas où la structure cellulaire de détonation se réduit à une cellule dont la largeur est du même ordre de grandeur que la taille du confinement.

Un exemple d'enregistrement est représenté sur la figure 1.6. La structure de la détonation hélicoïdale est caractérisée par :

- le pas  $P$ , représentant la distance axiale entre deux motifs consécutifs des enregistrements,
- l'épaisseur de bande  $e$ ,
- l'angle  $\alpha$ , qui mesure l'inclinaison des bandes par rapport à l'axe du tube.

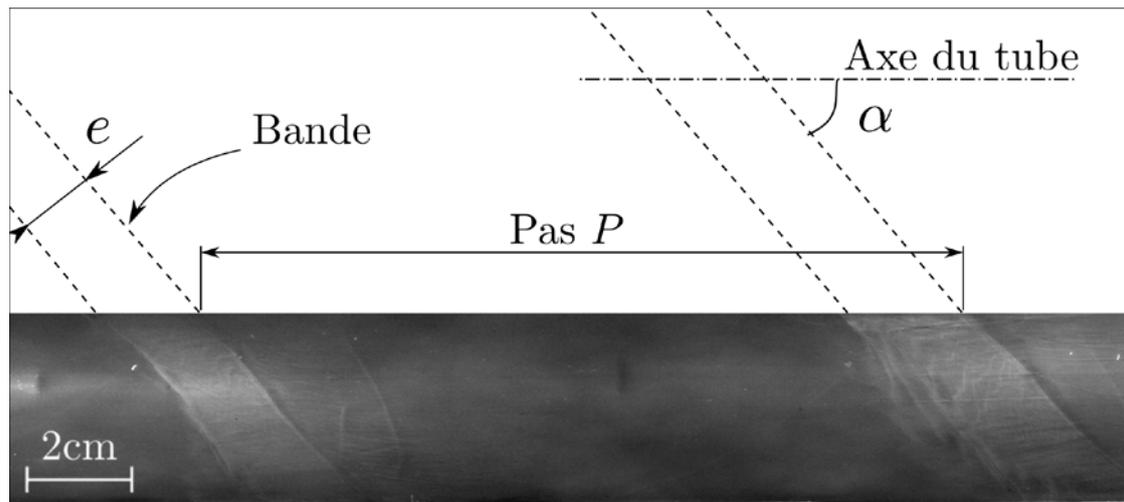


Fig. 1. 6 – Exemple de traces dans le cas d’une détonation hélicoïdale (Virot, 2009)

L’angle  $\alpha$  entre l’axe du tube et les lignes de courant vaut approximativement  $45^\circ$ .

Fay (1952) a établi la relation  $P = \pi d$  reliant le pas au diamètre du tube.

## 1.2 Détonations en milieu hétérogène gaz/gouttelettes Liquides

### 1.2.1 Introduction

Les détonations, en milieu gazeux homogène, ont fait l’objet de nombreux travaux et d’études durant plus d’un siècle, tandis que les détonations dans les systèmes biphasiques ont débuté au milieu du siècle précédent avec l’observation de détonations ou quasi-détonations d’aérosols liquides dans une atmosphère gazeuse oxydante par Burgoyne et al. (1954). Ils ont étudié l’effet du diamètre des gouttelettes sur les propriétés de combustion d’un liquide en suspension dans l’air. Selon eux, en dessous de  $10 \mu\text{m}$  la suspension se comportait comme de la vapeur, mais au delà de  $40 \mu\text{m}$  les gouttelettes liquides brûlaient individuellement.

## 1.2.2 Synthèse des principaux travaux antérieurs

A la suite des travaux de Burgoyne, Weber (1962) et Cramer (1963) ont étudié la détonation dans un tube vertical de gouttelettes de DECH (diéthylcyclohexane) en suspension dans de l'oxygène pur. Ils ont observé des régimes de propagation similaires à ceux d'une détonation. Et d'après Cramer (1963), la détonation ne pouvait être entretenue que pour une richesse élevée et si le fuel liquide se désintérait en gouttelettes liquides dont le diamètre est plus petit que 10  $\mu\text{m}$ .

En effet, le DECH étant un carburant ayant une faible pression de vapeur saturante, il est donc peu volatil; ce qui induit une difficulté pour son évaporation en vue de la détonation, dans les conditions standard de température et de pression (298 K et 1 bar).

Les premiers modèles théoriques ont été proposés par Williams (1961), puis par Borisov et al. (1970).

Les travaux expérimentaux ont été poursuivis principalement par Dabora et al. (1969) sur l'initiation et la propagation de la détonation dans des aérosols de diéthylcyclohexane (DECH)/oxygène. Trois granulométries de gouttelettes liquides ont été utilisées 290, 940 et 2600  $\mu\text{m}$ . Ils ont observé que pour ces trois tailles de gouttelettes liquides, avec l'oxygène, la détonation a lieu. Par contre, dans le cas d'un mélange biphasique DECH/air avec les mêmes granulométries, la détonation ne se produit pas.

En comparant les célérités de propagation de la détonation de mélanges DECH/O<sub>2</sub>, pour des richesses situées entre 0,2 et 1 (mélange pauvre) avec celles des valeurs idéales CJ, ils ont observé que les célérités mesurées sont inférieures de 2 à 10 % pour le cas de gouttelettes liquides d'un diamètre 290 et 940  $\mu\text{m}$ , et de 30 à 35 % pour les gouttelettes de 2600  $\mu\text{m}$  de diamètre. Selon eux, ces déficits sont causés par les pertes pariétales liées à la longueur de la zone de réaction.

Ces travaux indiquent l'existence d'une dépendance entre les déficits en célérité de détonation et les tailles de gouttelettes liquides et d'autre part que la détonation pour le cas du DECH ne peut se produire qu'avec un oxydant non dilué.

D'autres travaux sur l'initiation et la détonation de mélanges biphasiques ont été également effectués. On peut citer, entre autres, les travaux de Bar-Or et al. (1981), de Benedick et al. (1989), de l'équipe de Dabora (1991) ainsi qu'Alekseev et al. (1996).

### **1.2.3 Déficits de célérité**

Gubin et Sichel (1977) ont suggéré que le déficit en célérité de détonation n'était pas dû aux pertes de chaleur et de frottement dans la zone de réaction mais dû principalement à la combustion incomplète du carburant entre le choc précurseur et le plan CJ. Ils ont supposé que la partie de carburant arrachée par le passage à très grande vitesse de l'écoulement gazeux se vaporise d'une façon instantanée et brûle après le temps d'induction chimique du carburant vaporisé ; c'est uniquement cette partie du carburant arrachée (stripped) qui contribue de façon effective à la production de la chaleur dégagée entre le choc et le plan CJ. La partie de carburant non arrachée (unstripped portion), qui reste sous forme liquide au sein de la gouttelette, brûlerait derrière le plan CJ et ne contribuerait pas à renforcer le front de détonation incident et par conséquent serait sans incidence sur la valeur de la célérité de détonation. Nicholls et al. (1980) ont mesuré un déficit de célérité de 15 à 20 % pour des mélanges biphasiques gouttelettes de kérosène-air. Eidelmann et Sichel (1981) ont mené une étude numérique confirmant ce résultat.

### **1.2.4 Influence du confinement**

#### **1.2.4.1 Diamètre du tube à détonation et limites de détonabilité**

Bowen et al. (1971) ont étudié la propagation des détonations dans des mélanges d'aérosols de décane (avec une taille de gouttelettes d'environ 2  $\mu\text{m}$ ) et d'oxygène gazeux (à pression initiale de 1 atm), dans des tubes de quatre diamètres différents (0,49 ; 0,82 ; 1,49 ; 2,22 cm).

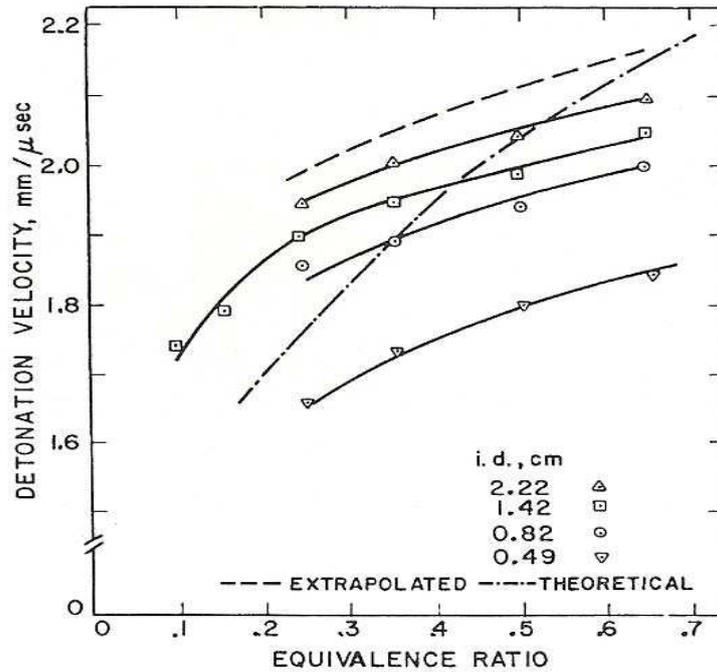


Fig. 1. 7 – Célérités de détonation expérimentales pour un aérosol de décane dans de l'oxygène, en fonction de la richesse et du diamètre du tube (Bowen et al., 1971).

Sur la figure 1.7, on voit qu'ils ont mis en évidence que la limite inférieure de détonabilité se situe autour de la richesse 0,2 (éventuellement moins dans l'un de leurs tubes).

Ce résultat est en accord avec celui établi par Fraser (1959) qui trouva que la limite pauvre de détonabilité pour un mélange gazeux octane/oxygène était à une richesse de 0,21 avec une célérité de détonation de 1660 m/s. A l'inverse, la limite riche de détonabilité dans les travaux de Bowen et al. (1971) n'a pu être déterminée. Fraser (1959) trouva que cette limite, toujours pour le cas de l'octane, était à une richesse de 2,34 avec une célérité de 2540 m/s.

L'effet du diamètre du tube sur la célérité de détonation de mélanges biphasiques gaz/gouttelettes liquides a été étudié expérimentalement par Bowen et al. (1971) puis par Frolov et al. (2001, 2003). Ils ont observé que la célérité de détonation diminuait avec le diamètre du tube. Pour deux tubes de diamètres 50,8 et 27 mm, Frolov et al. ont observé, pour la détonation de mélanges biphasiques hexane/air et heptane/air, un déficit en célérité de 100 à 200 m/s pour le plus petit diamètre (pour une pression initiale de 1 bar). Pour le n-décane/O<sub>2</sub>, avec une richesse de 0,65, Bowen et al. ont mesuré une célérité de détonation 2100 m/s pour

un diamètre du tube de 22,2 mm, 2050 m/s pour un diamètre de 14,2 mm, et respectivement 2000 et 1850 m/s pour les plus petits diamètres 8,2 et 4,9 mm.

Des simulations numériques effectuées par Borisov et al. (1991) ainsi que par Gladilin et al. (1991) confirment l'influence du diamètre du tube sur la célérité de détonation.

#### **1.2.4.2 Effet des pertes pariétales**

D'après Ragland et al. (1968), la longueur de la zone de réaction dans le cas des détonations diphasiques est plus grande que dans le cas des détonations en phase gazeuse, ce qui se traduit par un déficit important de la célérité de détonation dû aux pertes de chaleur et de frottement (pertes pariétales). En effet, les auteurs ont effectué des expériences avec des gouttelettes de 2600  $\mu\text{m}$  dans de l'oxygène pur. Selon les auteurs, les pertes de chaleur pariétales sont importantes et consomment environ 20 % de la chaleur de réaction, ce qui justifierait en partie le déficit de célérité de 32 %, comparativement au cas du mélange gazeux homogène équivalent.

#### **1.2.5 Influence de la taille des gouttelettes**

Comme il a été rappelé ci-dessus (cf. § 1.2.2), des travaux expérimentaux ont mis en évidence l'influence de la taille des gouttelettes sur la détonabilité et les caractéristiques de détonation des aérosols de carburants liquides. Ce paramètre joue un rôle déterminant sur la vitesse et le taux de vaporisation des gouttelettes, dont va dépendre la possibilité de formation d'une détonation.

Un phénomène important entre en ligne de compte, c'est celui de l'interaction de l'onde de choc incidente avec les gouttelettes. Les processus de désintégration mécanique peuvent conduire à la fragmentation des gouttelettes « mères » en gouttelettes « filles » plus fines et, ainsi, à un accroissement du taux de vaporisation des gouttelettes.

L'influence de la fragmentation des gouttelettes sur la détonabilité des aérosols de carburants a fait l'objet d'une étude menée en parallèle avec la notre et dont les résultats sont rassemblés dans la thèse de Mar (2012).

## **1.2.6 Influence des propriétés physico-chimiques des constituants du mélange**

L'examen des travaux antérieurs et des études que nous avons réalisés pour caractériser l'influence des propriétés physico-chimiques des constituants du mélange et orienter le choix des carburants qui seront utilisés dans l'étude expérimentale font l'objet du chapitre 2, spécialement consacré à ces questions.

## **1.2.7 Structure cellulaire des détonations hétérogènes**

Les preuves expérimentales de l'existence de la structure cellulaire de détonation dans les milieux hétérogènes gaz/gouttelettes liquides sont en nombre très restreint notamment pour les expériences réalisées dans les conditions standards de température et de pression ( $T = 293 \text{ K}$  et  $1 \text{ bar}$ ).

Quelques études expérimentales ont été effectuées soit dans des aérosols très volatils, soit après préchauffage du mélange, ou encore à des pressions initiales très basses. Dans toutes ces situations, le carburant était vaporisé dans des proportions très importantes avant l'initiation de la détonation. Ces travaux sont exposés dans le chapitre 2.

Pour des mélanges purement hétérogènes (faible taux de vapeur à l'instant initial), quelques résultats ont été obtenus pour des mélanges avec de l'oxygène pur. Ainsi, Papavassiliou et al. (1993) ont étudié la détonation dans un tube vertical des aérosols de décane de diamètre  $5 \mu\text{m}$  dans de l'oxygène pur (à température et pression ambiantes). Ils ont observé l'amorçage de la détonation dans des mélanges décane/oxygène et une propagation stationnaire et autonome de la détonation même pour les mélanges hétérogènes à la température ambiante. Ils ont trouvé que les célérités mesurées sont inférieures de 10 % aux célérités théoriques CJ des mélanges gazeux équivalents. Pour les mélanges très pauvres ( $r < 0,6$ ), le déficit en célérité est très important. Ils ont observé une structure cellulaire similaire à celle observée en phase gazeuse. Dans un certain nombre d'expériences, les gouttelettes de carburant ont été vaporisées par chauffage préalable du tube.

La comparaison de la taille de la cellule de détonation pour les mêmes mélanges, d'une part, en phase condensée hétérogène et, d'autre part, en phase vapeur homogène

indique que les processus physiques intervenant dans la détonation des aérosols sont responsables de l'augmentation de la taille de la cellule de détonation.

En outre, les mesures de la taille de cellule de détonation sont en bon accord avec les résultats de longueurs d'induction calculés avec un modèle de cinétique chimique.

Papavassiliou et al. n'ont pas réussi à faire détoner les mélanges hétérogènes décane-air.

Il ressort de cet examen succinct des connaissances actuelles que la compréhension des détonations gaz/gouttelettes liquides est beaucoup moins avancée que celle des détonations en phase gazeuse homogène. Les études antérieures, expérimentales ou numériques, indiquent que la détonation n'a été observée que dans le cas de gouttelettes suffisamment fines et une pré-évaporation importante. Cependant, les travaux récents de Mar (2012) ont montré que l'on pouvait observer des détonations d'aérosols dans l'air dans les conditions standards de température et de pression (1 bar, 293 K) à condition que les gouttes initiales soient suffisamment petites. Pour avancer dans la compréhension des mécanismes impliqués dans la détonation d'aérosols de gouttelettes liquides (initiation, régimes de propagation, structure de la détonation, effet de la vaporisation des gouttelettes), il est nécessaire d'examiner plus en détail l'influence des autres paramètres, en particulier les propriétés physico-chimiques qui interviennent pour modifier la cinétique des réactions produisant la libération d'énergie.

## **Chapitre 2**

### **Paramètres physico-chimiques influençant les détonations dans les mélanges hétérogènes Gaz/Gouttelettes Liquides**



Dans une étude récente, Mar (2012) a examiné en détail l'influence de la granulométrie des gouttelettes liquides et de la désintégration mécanique de celles-ci sur la détonabilité et les régimes de propagation d'une détonation dans les mélanges hétérogènes de liquides dispersés sous forme d'aérosol dans une atmosphère gazeuse oxydante.

Le but du présent chapitre est d'examiner les autres paramètres physico-chimiques qui interviennent dans le processus de vaporisation des gouttelettes et de libération d'énergie entretenant la propagation de la détonation, afin de choisir la composition des mélanges qui seront étudiés dans le cadre de cette thèse.

## 2.1 Schématisation d'une détonation se propageant dans un aérosol de gouttelettes liquides

Le schéma de la structure d'une détonation hétérogène (modèle ZND) se propageant dans un aérosol de gouttelettes liquides en suspension dans un oxydant gazeux peut être décrit schématiquement comme suit (figure 2.1) :

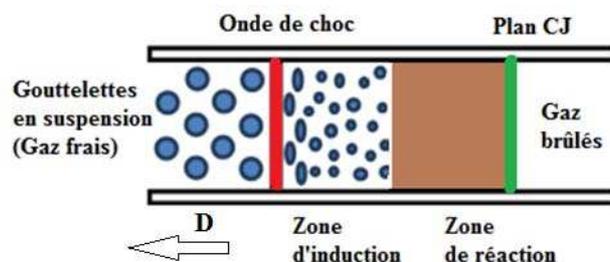


Fig. 2. 1 – Schéma de la structure d'une détonation hétérogène

- le choc incident chauffe et comprime la phase gazeuse du milieu hétérogène de la même façon que pour une détonation gazeuse. En revanche, l'action de l'onde de détonation sur la phase dispersée est retardée, de par l'inertie et la densité des gouttes (Dabora, 1979). La vitesse des gouttelettes au niveau du front de détonation est considérée nulle, ce qui entraîne une grande différence entre les vitesses matérielles des gaz et des gouttelettes dans l'écoulement derrière le front.

- l'écoulement convectif à grande vitesse généré par le passage de l'onde de choc entraîne la déformation et la désintégration des gouttelettes constituant la phase dispersée en plus petites gouttelettes.

- les fines gouttelettes, mélangées à la phase gazeuse chauffée et comprimée, s'évaporent pour finalement s'enflammer. La combustion du mélange dans la zone de réaction assure la propagation de la détonation.

Dans cet écoulement à l'arrière du front de détonation où existent des déséquilibres importants des paramètres thermomécaniques (vitesse, pression, densité, température) entre les deux phases, l'énergie nécessaire à la propagation d'une onde de détonation est directement contrôlée par la vitesse et le taux de vaporisation du carburant liquide. Mar (2012) a étudié l'influence de la taille des gouttelettes sur le processus de vaporisation du carburant. Mais d'autres paramètres physico-chimiques interviennent sur le processus de vaporisation et sur la réactivité du mélange. Leur examen fait l'objet de la suite de ce chapitre.

## **2.2 Rappels sur les aspects de cinétique chimique de détonation**

Dans le modèle de Zeldovich, von Neumann et Döring, la détonation est décrite comme une onde d'épaisseur finie composée d'une onde de choc plane qui chauffe les gaz frais en les comprimant, suivie d'une zone de réaction chimique. Lorsque la détonation est formée, l'ensemble onde de choc-zone de réaction se propage à la même célérité  $D_{CJ}$  comme résultat du couplage entre le choc incident et la zone de libération d'énergie.

### **2.2.1 Délai et longueur d'induction chimiques**

Dans le modèle ZND, le profil de température et de sa dérivée temporelle, peuvent être représentés comme indiqué sur la figure 2.2.

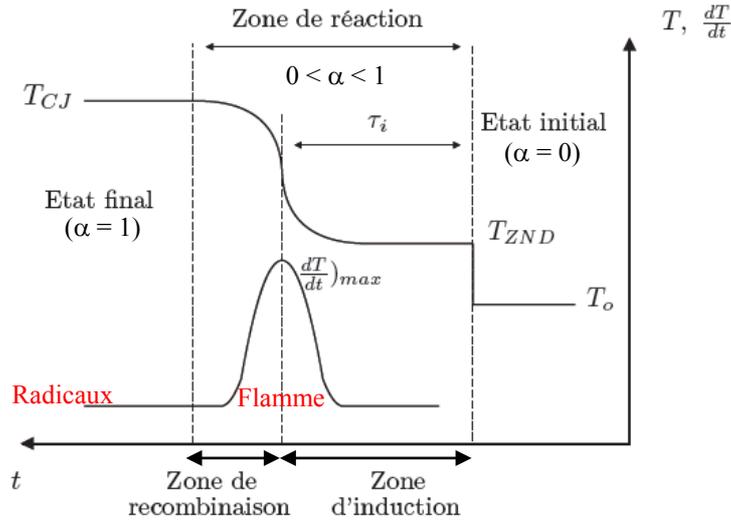


Fig. 2. 2 – Représentation schématique du profil de température et de sa dérivée temporelle dans l'onde de détonation

On définit le délai d'induction chimique  $\tau_i$  comme le temps précédant la libération de l'énergie chimique de la réaction. Ce délai d'induction  $\tau_i$  peut être caractérisé par le temps nécessaire pour qu'une augmentation significative de la température soit observée, marquant l'accélération des réactions chimiques. Ceci se traduit par une augmentation très forte de la pente de la courbe de température en fonction du temps.

L'état où la vitesse d'augmentation de la température  $\frac{dT}{dt}$  est maximale (point d'inflexion du profil temporel de température), situé dans la zone de recombinaison des réactions chimiques, correspond au taux maximal de libération d'énergie.

Le taux d'avancement de la réaction est quasi nul pendant le délai d'induction chimique où seule la concentration des radicaux varie. A ce délai d'induction  $\tau_i$  correspond une longueur d'induction  $L_i$  :

$$L_i = \int_0^{\tau_i} w \cdot dt \quad (2.1)$$

où  $w$  : vitesse matérielle de l'écoulement derrière le choc.

Les délais et longueurs d'induction peuvent être déterminés expérimentalement dans des tubes à choc pour établir des lois globales de cinétique chimique. Mais les conditions expérimentales correspondent à des nombres de Mach nettement plus bas que ceux rencontrés

dans une détonation. Ils peuvent aussi être évalués numériquement à partir de modèles de cinétique chimique détaillés CHEMKIN (Kee et al., 1989 et 1993) ou CANTERA (Goodwin, 2002).

## 2.2.2 Corrélation taille des cellules $\lambda$ et longueur d'induction $L_i$

Shchelkin et Troshin (1963, 1965) furent les premiers à proposer que les dimensions des cellules de détonation (cf. § 1.4.1) peuvent être corrélées avec l'épaisseur de la zone de réaction chimique. L'épaisseur de la zone de réaction peut être assimilée à la longueur d'induction chimique  $L_i$ . En effet, Strehlow et Engel (1969) ont montré que la longueur caractéristique de la zone de réaction est la longueur qui comprend la distance d'induction  $L_i$  et une zone de libération d'énergie, qui correspond à la distance de recombinaison  $l_r$ . En général, pour les détonations dans les mélanges gazeux, le temps de la zone de recombinaison est très petit devant celui de la zone d'induction. Par conséquent, la longueur d'induction  $L_i$  est prise comme longueur caractéristique de la zone de réaction. Dans le régime stationnaire et autonome de détonation, il existe une proportionnalité entre la taille de la cellule  $\lambda$  et la longueur d'induction chimique  $L_i$  :  $\lambda_{CJ} = kL_{i,ZND}$ ,  $k$  étant une constante caractéristique du mélange considéré qui dépend de la nature du combustible, de celle du comburant, de la richesse, de la dilution du mélange réactif et des conditions initiales ( $P_0$ ,  $T_0$ ).

La prédiction de la taille de la cellule de détonation à partir du calcul de la longueur de la zone de réaction reste pour l'instant impossible : le coefficient  $k$  doit être déterminé expérimentalement.

Un examen plus détaillé de la structure cellulaire, de ses caractéristiques et de sa régularité, ainsi que de l'influence des paramètres qui font varier les dimensions de la cellule élémentaire peut être trouvé en Annexe 1.

## 2.3 Résultats antérieurs sur la détonation d'aérosols de carburants liquides

Comme il a été mentionné au chapitre 1, les paramètres affectant la détonabilité et les caractéristiques de détonation des mélanges hétérogènes gaz/gouttelettes liquides sont nombreux. On peut citer, entre autres, la taille des gouttelettes liquides et l'uniformité de l'aérosol, les dimensions du confinement et l'effet des pertes pariétales, les caractéristiques des carburants (volatilité, poids moléculaire, additifs), la richesse du mélange, la nature de l'oxydant et sa dilution par un inerte, et les conditions initiales de température et de pression. Nous examinerons plus particulièrement ici les travaux antérieurs concernant l'influence de l'état initial des gouttelettes et de la dilution du mélange.

### 2.3.1 Influence de la volatilité

Bull et al. (1981) ont mis en évidence que pour le cas d'un combustible très volatil avec une pression de vapeur saturante élevée, tel le n-hexane ( $n\text{-C}_6\text{H}_{14}$ ), la détonation (cas de détonations non confinées : détonations sphériques) peut être initiée par l'utilisation d'un explosif solide. Ils ont à cet effet utilisé 25 g de tétryl. L'hexane détone alors dans les limites de concentrations comparables à celles des détonations de mélanges hydrocarbures/air en phase gazeuse.

La facilité relative avec laquelle l'hexane détone indique qu'une quantité suffisante de carburant existe déjà sous forme vapeur, et donc qu'un mélange hybride constitué de gouttelettes liquides et de vapeur existe au moment de l'initiation, dans des proportions qui dépendent de la température initiale. Dans le cas d'un combustible peu volatil, avec une pression de vapeur saturante faible, tels le n-décane ( $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ ) et le n-dodécane ( $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ ), pour des tailles de gouttelettes inférieures à 100  $\mu\text{m}$  aucune détonation n'a été observée même avec une quantité de tétryl, allant jusqu'à 500 g.

Bull et al. (1981) ont, de plus, comparé des mélanges d'hexane et d'air avec des mélanges hexane/dodécane. Il apparaît que les détonations enregistrées sont dues uniquement à l'hexane, le dodécane participant peu ou pas du tout à la combustion (Figures 2.3 et 2.4).

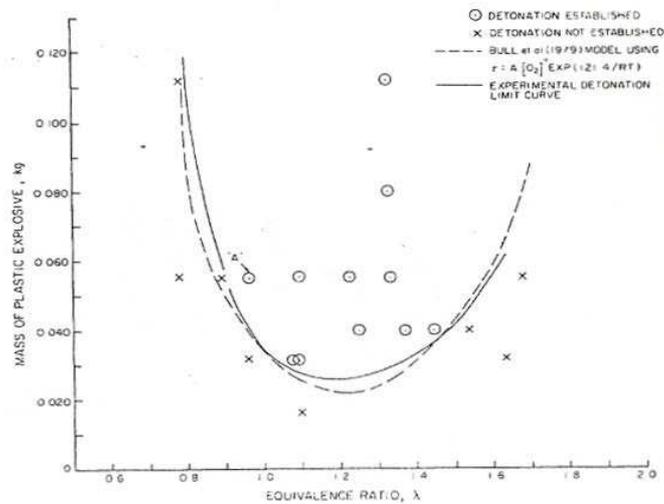


Fig. 2. 3 – Energie d’initiation d’un aérosol Hexane/air en fonction de la richesse (Bull et al., 1981)

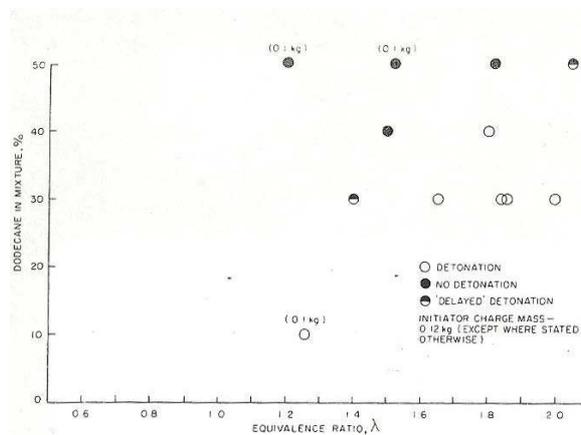


Fig. 2. 4 – Energie d’initiation de la détonation de mélanges d’hexane et de dodécane en fonction de la proportion de dodécane (Bull et al., 1981)

Ces résultats rejoignent les travaux de Lin et al. (1984) qui arrivent à la conclusion que pour initier le n-décane, il faut augmenter sa pression de vapeur saturante par chauffage du tube de détonation.

Bar-Or et al. (1981) ont comparé les détonations de mélanges d’hydrocarbures/oxygène pur avec des pressions de vapeur saturante basse et élevée tels le décane et l’heptane. Les résultats montrent que pour le décane, les détonations se propagent à des célérités très inférieures à la célérité théorique CJ, en raison probablement de zones de réaction longues dues à sa faible volatilité.

Dans le cas de l'heptane, de volatilité élevée, la célérité de détonation est proche de  $D_{CJ}$  et le déficit de célérité est beaucoup plus faible que pour le décane (pour une même taille de gouttelettes, autour de 400  $\mu\text{m}$ ).

Benedick et al. (1989) ont également comparé les caractéristiques de propagation des détonations pour deux combustibles ayant des pressions de vapeur saturantes très différentes à température ambiante : l'hexane et le décane. Pour l'hexane, ils observent que la détonation ne peut avoir lieu qu'après un certain délai d'attente après la dispersion, de sorte qu'une partie des gouttelettes liquides ait pu s'évaporer. Ceci rejoint les résultats de Bull et al. (1981) qui indiquaient que la détonation existe lorsqu'un mélange hybride de gouttelettes liquides et de vapeur est formé avec l'air. Pour ce qui est du décane, la détonation n'a pas pu être initiée dans leur cas : le décane demeure sous la forme d'aérosol liquide pour de longues périodes après la dispersion.

D'autre part, des tests en tube de détonation chauffé (100 °C) conduisent à des détonabilités comparables pour l'hexane et le décane en phase gazeuse. Les tailles de cellules de détonation à la stœchiométrie pour les deux mélanges hexane/air et décane/air à 100 °C sont d'environ 5-6 cm, très proches de celles du mélange propane/air et de la plupart des alcanes (Figure 2.5).

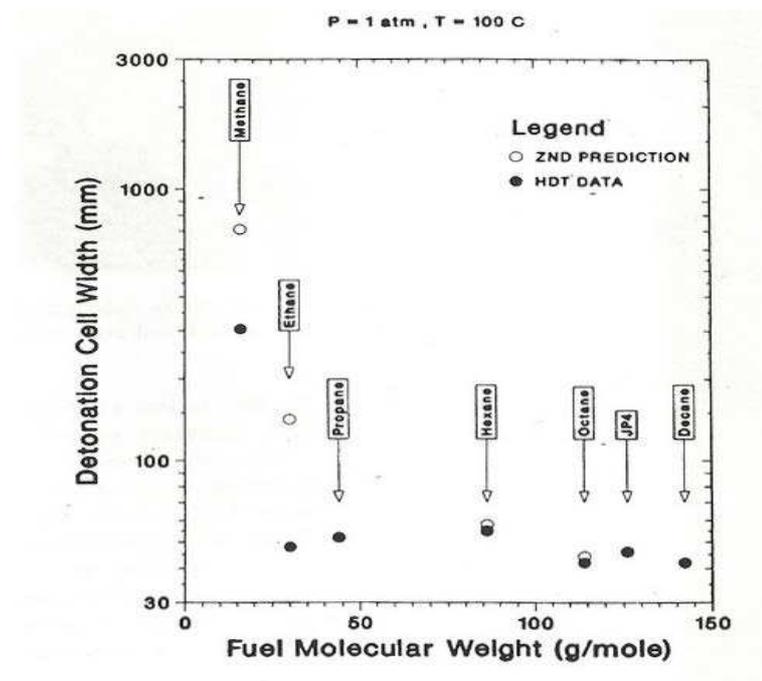


Fig. 2. 5 – Largeur  $\lambda$  de la cellule de détonation à la stœchiométrie pour divers alcanes en fonction du poids moléculaire (Benedick et al., 1989)

### 2.3.2 Influence de la dilution de la phase oxydante

Beeson et al. (1991) ont abordé la détonabilité de l'hexane et du JP-4 dans un oxydant gazeux à différentes dilutions ( $\beta$  étant le rapport de dilution, de 0 pour l'oxygène pur à 3,76 pour l'air). Les expériences se sont déroulées dans un tube de détonation chauffant à une température initiale permettant de maintenir le carburant en phase vapeur. Les mesures de célérité de détonation pour les deux hydrocarbures sont représentées sur la figure 2.6 en fonction de la dilution, pour deux richesses 1 et 1,5, et comparées aux valeurs théoriques CJ correspondantes.

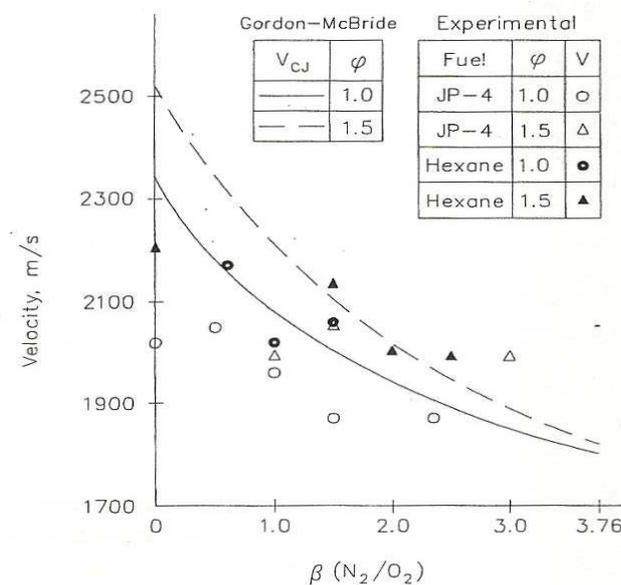


Fig. 2. 6 – Célérités de détonation des mélanges hexane et JP-4 dans un oxydant gazeux ( $N_2/O_2$ ) en fonction de la dilution, et pour deux richesses différentes (Beeson et al., 1991)

Ils concluent que les célérités mesurées semblent être en bon accord avec les valeurs théoriques CJ, avec cependant un déficit qui ne dépasse pas 10 % pour la plupart des cas.

Cependant, pour les mélanges hautement dilués en azote ( $\beta = 3$ ), ils constatent un léger dépassement de la célérité de détonation par rapport à la valeur théorique. Ceci est dû au fait que le tube de détonation utilisé n'est pas assez long ( $l = 1,75$  m). Compte tenu de l'énergie d'initiation utilisée, la détonation n'a pas pu encore relaxer vers le régime autonome. Ils ont ainsi mesuré la taille des cellules de détonation d'hexane et de JP-4 en phase gazeuse, en fonction de la dilution, aux mêmes richesses (1 et 1,5). Les résultats sont montrés sur les figures 2.7 (a) et 2.7 (b).

Il en ressort que la détonabilité des deux mélanges est à peu près la même, ce qui indique que la présence d'hydrocarbures en additifs dans le JP4 n'a pas d'influence significative sur la longueur d'induction.

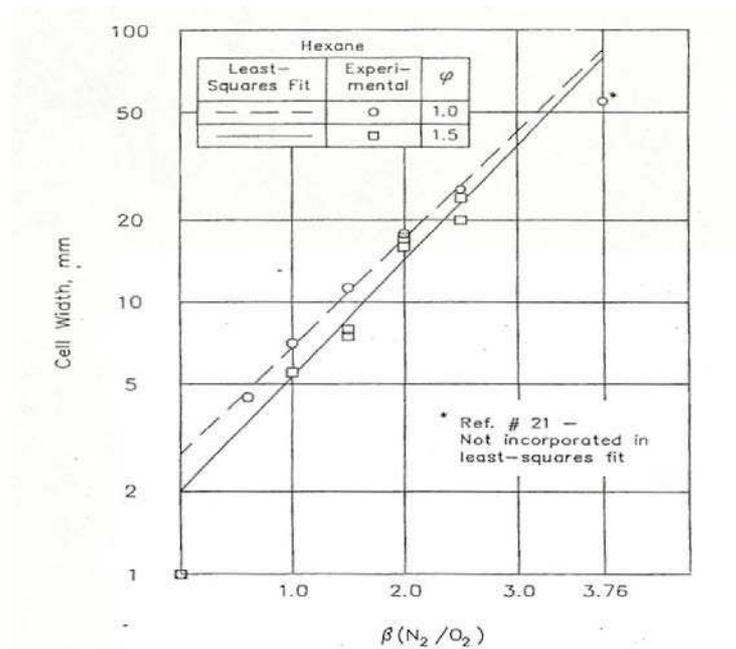


Fig. 2.7 (a) – Cas de l'hexane

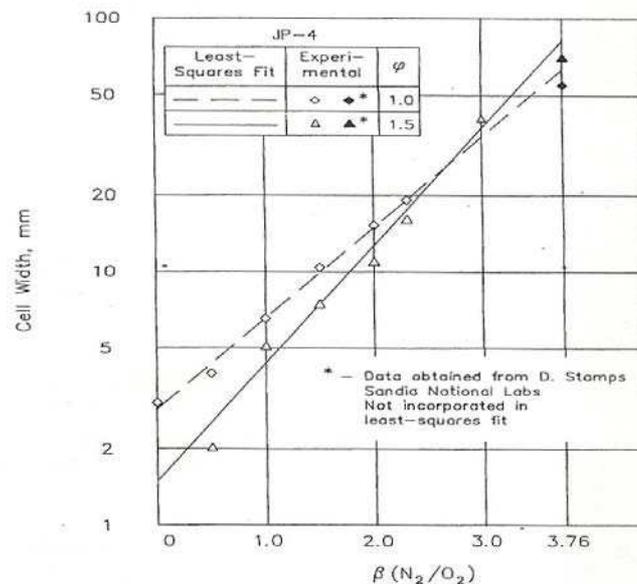


Fig. 2.7 (b) – Cas du JP-4

Fig. 2. 7 – Largeur  $\lambda$  de cellules de détonation de l'hexane (a) et du JP4 (b) en fonction de la dilution, et pour deux richesses différentes (Beeson et al ., 1991)

Papavassiliou et al. (1991, 1993) ont étudié la détonation d'un brouillard constitué de gouttelettes liquides de décane, de 5  $\mu\text{m}$  de diamètre, dans un mélange oxygène/azote à différentes dilutions (rapport de dilution variant de 0 à 2). Les conditions initiales de pression et de température étaient  $P_0 = 1 \text{ bar}$  et, soit  $T_0 = 25 \text{ }^\circ\text{C}$  pour les expériences en tube à température ambiante (où le mélange est en phase hétérogène), soit  $T_0 = 100 \text{ }^\circ\text{C}$  pour les expériences avec un tube chauffant (où le mélange est en phase gazeuse homogène).

Ils ont observé que la célérité de détonation du mélange hétérogène constitué de gouttelettes liquides diminue avec l'augmentation du rapport de dilution.

Ils ont également constaté que la taille de la cellule de détonation diminue avec l'augmentation de la température initiale, quel que soit le rapport de dilution. Par exemple, pour un mélange décane/( $\text{O}_2 + \text{N}_2$ ) stœchiométrique, la taille de cellule est deux fois plus petite lorsqu'on augmente la température initiale de  $25 \text{ }^\circ\text{C}$  à  $100 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Austin et Shepherd (2003) ont étudié la détonabilité des mélanges JP-10/air et hexane/air à la stœchiométrie et pour différentes dilutions. Compte tenu des pressions de vapeur saturantes très éloignées caractérisant ces deux fuels à température ambiante, l'initiation de la détonation du mélange JP-10/air n'est possible qu'à partir d'une température de 353 K. Ils ont montré que la taille des cellules de détonation pour ces deux mélanges était très proche, pour les détonations en phase gazeuse (Figures 2.8 et 2.9).

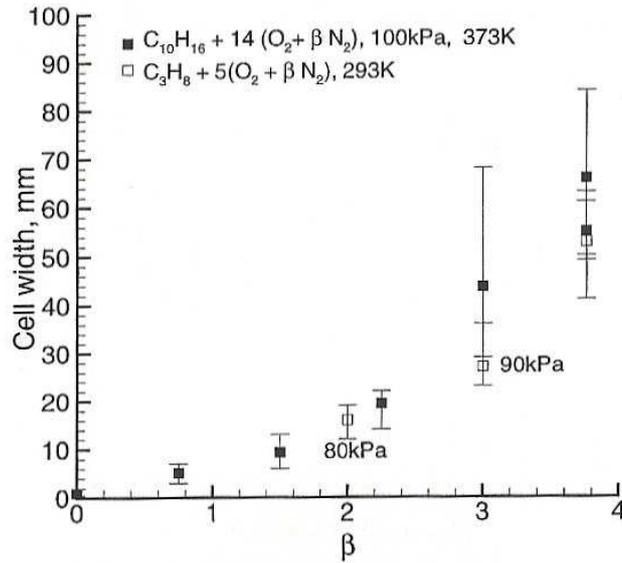


Fig. 2. 8 – Largeur  $\lambda$  des cellules de détonation pour un mélange JP10/O<sub>2</sub> en fonction de la dilution,  $P_0 = 100$  kPa (sauf pour les cas  $\beta = 2$  et 3),  $T_0 = 373$  K. Comparaison avec le propane à température ambiante (Austin et Shepherd, 2003)

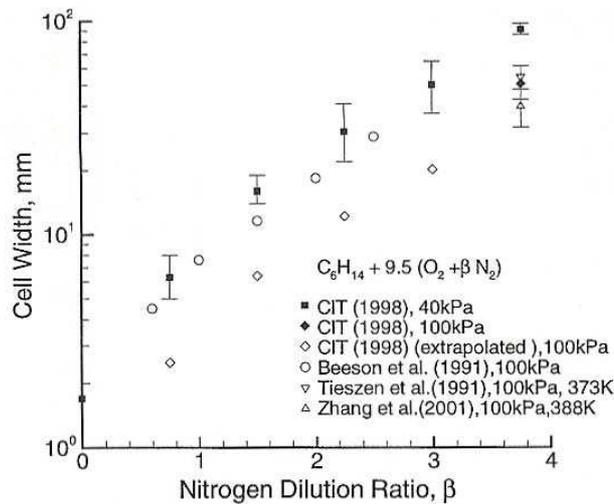


Fig. 2. 9 – Taille de cellules de détonation pour des mélanges Hexane/O<sub>2</sub> en fonction de la dilution (Austin et Shepherd, 2003)

Par ailleurs, Austin et Shepherd ont étudié les variations de la taille de cellule de détonation pour le cas de mélanges biphasiques hexane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> (Température initiale de 295 K) en fonction, d'une part de la dilution à pression initiale donnée (40 kPa), d'autre part de la pression initiale à dilution fixe. Les résultats sont rassemblés dans le tableau 2.1.

Mélange biphasique	P <sub>0</sub> (kPa)	Taille de cellule moyenne (mm)	Taille de cellule maximale (mm)	Taille de cellule minimale (mm)
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5O <sub>2</sub>	40	1,7	2	1
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +0,75N <sub>2</sub> )	40	6,3	8	5
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +1,5N <sub>2</sub> )	40	16,0	19	14
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +2,25N <sub>2</sub> )	40	30,4	41	22
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +3,0N <sub>2</sub> )	40	50,5	65	37
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +3,76N <sub>2</sub> )	40	91,7	98	87
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +0,75N <sub>2</sub> )	55	6,1	8	4
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +1,5N <sub>2</sub> )	70	8,3	10	6
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +2,25N <sub>2</sub> )	80	19,7	24	15
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +3,0N <sub>2</sub> )	90	23,7	32	20
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> +9,5(O <sub>2</sub> +3,76N <sub>2</sub> )	100	51,1	62	43

Tableau 2. 1 – Largeur de la cellule de détonation  $\lambda$  pour des mélanges hexane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> en fonction de la dilution et de la pression initiale ; T<sub>0</sub> = 295 K (Austin et Shepherd, 2003)

On constate que la largeur de cellule de détonation augmente avec l'augmentation du rapport de dilution  $\beta = N_2/O_2$  et avec la diminution de la pression initiale (pour une température initiale de 295 K).

De la même manière, Austin et Shepherd ont étudié les variations de la taille de cellule de détonation pour les mélanges JP-10/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> (Température initiale de 353 K et pression initiale de 1 bar) en fonction de la richesse et de la dilution. Les résultats sont rassemblés dans le tableau 2.2.

Mélange biphasique	P <sub>0</sub> (kPa)	Taille de cellule moyenne (mm)	Taille de cellule maximale (mm)	Taille de cellule minimale (mm)
0,7C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	138,5	240	52
0,8C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	65,9	72	52
0,9C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	52,9	60	44
1,0C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	54,9	61	39
1,1C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	56,0	71	41
1,2C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	48,9	71	33
1,3C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	41,9	49	36
1,4C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14Air	100	74,1	99	40
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14(O <sub>2</sub> +0,75N <sub>2</sub> )	100	5,1	7	3
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14(O <sub>2</sub> +1,5N <sub>2</sub> )	100	9,3	13	5
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14(O <sub>2</sub> +2,25N <sub>2</sub> )	100	19,4	22	14
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> +14(O <sub>2</sub> +3,0N <sub>2</sub> )	100	43,6	68	29

Tableau 2. 2 – Largeur de la cellule de détonation  $\lambda$  pour des mélanges JP-10/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> en fonction de la richesse et de la dilution, (T<sub>0</sub> = 353 K, P<sub>0</sub> = 1 bar), (Austin et Shepherd, 2003)

On constate que la largeur de cellule de détonation passe par un minimum autour de la richesse de 1,3. D'autre part, l'augmentation du rapport de dilution  $\beta = N_2/O_2$  entraîne une augmentation de la largeur de cellule.

### 2.3.3 Incorporation d'additifs

Lu et al. (1979) ont montré que la détonabilité de mélanges de gouttelettes liquides d'heptane/air augmente, soit en diminuant la taille des gouttelettes liquides, soit en incorporant des additifs tels le « Propylnitrate » et le « Butylnitrite », qui modifient les propriétés physiques (telle la viscosité) et les propriétés chimiques (tel le délai d'induction) du carburant. Ces additifs agissent sur la production de radicaux libres O, NO<sub>2</sub> et NO. La quantité de radicaux produite augmente et permet ainsi d'atteindre plus rapidement la concentration critique pour qu'il y ait auto-inflammation. Ainsi, l'ajout de ces additifs favorise la diminution du délai d'induction.

### 2.3.4 Influence du poids et de la structure moléculaires

Tieszen et al. (1991) ainsi que Stamps et al. (2006) ont étudié expérimentalement la détonabilité de plusieurs mélanges d'hydrocarbures/air à la stœchiométrie et ont tout particulièrement mis l'accent sur l'effet du poids moléculaire (caractérisé par le nombre d'atomes de carbone présents dans la molécule d'hydrocarbure), de la structure moléculaire et du degré de saturation (hydrocarbures saturés ou non).

Leurs expériences ont été effectuées dans une gamme de températures initiales entre 25 et 100 °C, et à la pression initiale 1 bar.

Ils ont constaté que les hydrocarbures ayant un poids moléculaire élevé tel le décane et, à un degré moindre, l'octane ont des pressions de vapeur saturante très basses à la température ambiante, ce qui rend leur détonabilité difficile, voire impossible pour le cas du décane. Pour les faire détoner, les expériences doivent être effectuées avec des tubes chauffés jusqu'à 100 °C.

La structure moléculaire affecte elle aussi la détonabilité. Pour le cas des alcanes à 8 atomes de carbones, l'hydrocarbure cyclique tel le « cyclooctane » possède une sensibilité plus élevée que l'alcane à chaîne linéaire « n-octane » et donc sa détonabilité augmente, lequel est plus sensible que l'alcane à chaîne ramifiée « 2,2,4-triméthylpentane ou Isooctane » (tableau 2.3).

Réactif	Structure	Largeur de la cellule de détonation (mm)	Longueur d'induction ZND (mm)
Isooctane	Chaîne ramifiée	56	2,5
n-Octane	Chaîne linéaire	42	1,47
Cyclooctane	Cyclique (cyclane)	29	/

Tableau 2. 3 – Effet de la structure moléculaire sur la taille des cellules de détonation pour les hydrocarbures C8 saturés dans l'air ( $T_0 = 100$  °C,  $P_0 = 1$  atm,  $r = 1$ ), (Tieszen et al., 1991)

De leur côté, Stamps et al. (2006) ont observé que le rapport de la taille de cellule de détonation entre le n-hexane et le cyclohexane d'une part, et celui entre le n-octane et le cyclooctane d'autre part étaient de 1,3 et 1,4 respectivement.

L'effet de l'insaturation de liaisons (pour les hydrocarbures saturés ou non) sur la taille des cellules de détonation est représenté sur la figure 2.10 pour les alcanes, les alcènes et les alcynes correspondant à un nombre de carbone C2 et C8, à  $T_0 = 100\text{ °C}$  et  $P_0 = 1\text{ atm}$ .

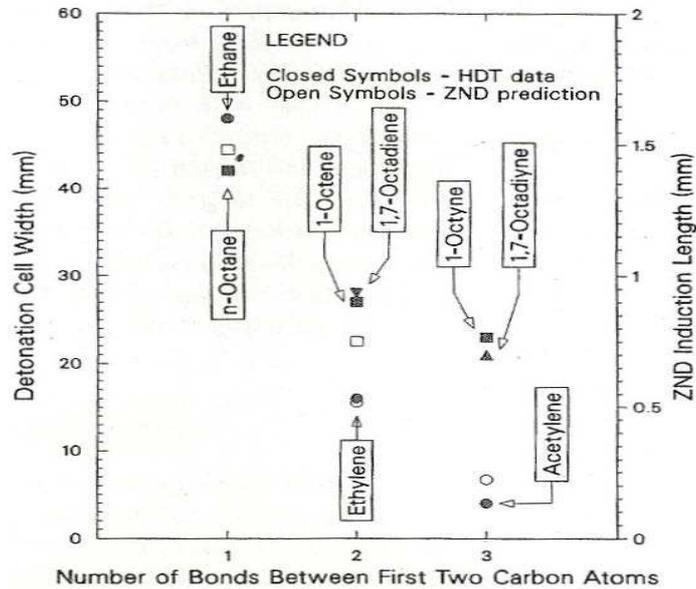


Fig. 2. 10 – Effet d'insaturation de liaisons sur la taille des cellules de détonation ( $r = 1$ ,  $T = 100\text{ °C}$  et  $P = 1\text{ atm}$ ), (Tieszen et al., 1991)

Ils ont observé que les alcènes et les alcynes insaturés sont plus sensibles à la détonation et ont une plus petite taille des cellules de détonation que les alcanes saturés. Cependant, le degré de sensibilité diminue avec l'augmentation du poids moléculaire de l'hydrocarbure. D'autre part, il a été constaté que la polyinsaturation n'affecte pas la détonabilité. En effet, la taille des cellules de détonation pour le 1,7-octadiene polyinsaturé est pratiquement la même que celle du 1-octene monoinsaturé.

### 2.3.5 Cas des mélanges hybrides

Comme mentionné précédemment, les hydrocarbures liquides possédant des molécules lourdes (cas  $C_6$  à  $C_{12}$  et notamment  $C_{10}$  et  $C_{12}$ ) ont une détonabilité plus faible que les hydrocarbures gazeux ( $C_1$  à  $C_5$ ).

Afin de favoriser l'initiation de la détonation, on doit opérer à des températures initiales plus élevées (plus de  $100\text{ °C}$ ) dans un tube chauffant pour porter le carburant en phase vapeur, où il est susceptible de détoner. Mais Austin et Shepherd (2003) ont procédé aussi à des

expériences avec des mélanges hybrides en incorporant un carburant gazeux tel l'hydrogène ( $H_2$ ), l'acétylène ( $C_2H_2$ ), l'éthylène ( $C_2H_4$ ) ou le monoxyde de carbone (CO) dans le mélange biphasique gaz/gouttelettes liquides d'hexane. Ils ont constaté que l'addition de ces gaz avait un effet sensibilisant : la taille de cellule de détonation est réduite d'une façon significative, ce qui correspond à une augmentation de la détonabilité du mélange. Les expériences ont été effectuées à la stœchiométrie, à une température initiale de 295 K et une pression initiale de 1 bar. Les variations de la taille de cellule de détonation en fonction de la fraction massique du carburant gazeux ajouté, sont représentées sur les figures 2.11 (a), 2.11 (b) et 2.11 (c).

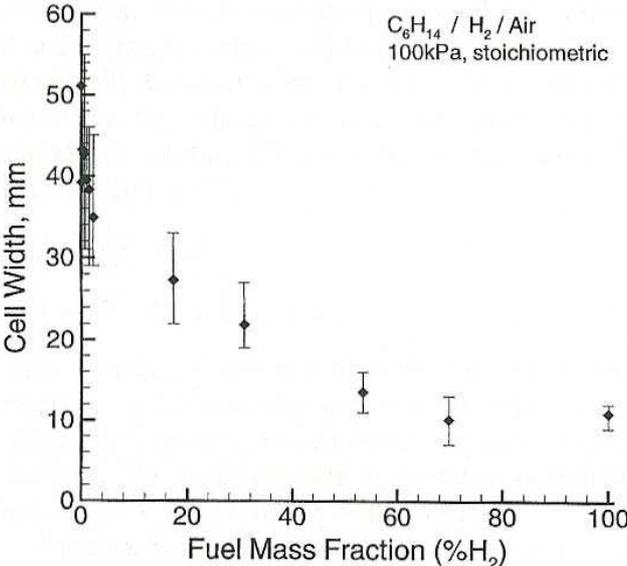


Fig. 2.11 (a):  $H_2$

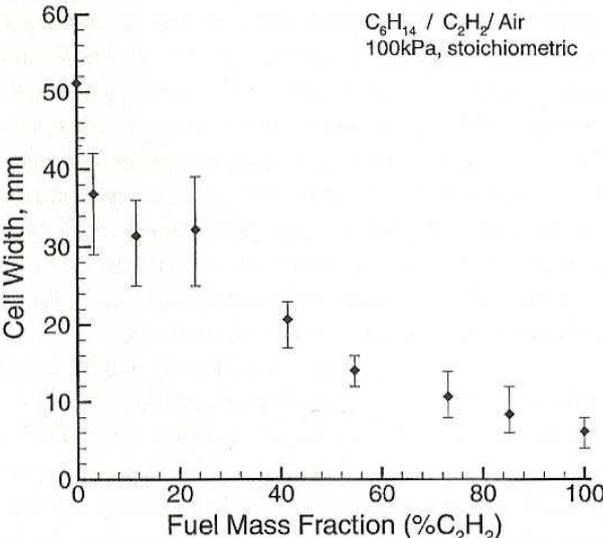


Fig. 2.11 (b):  $C_2H_2$

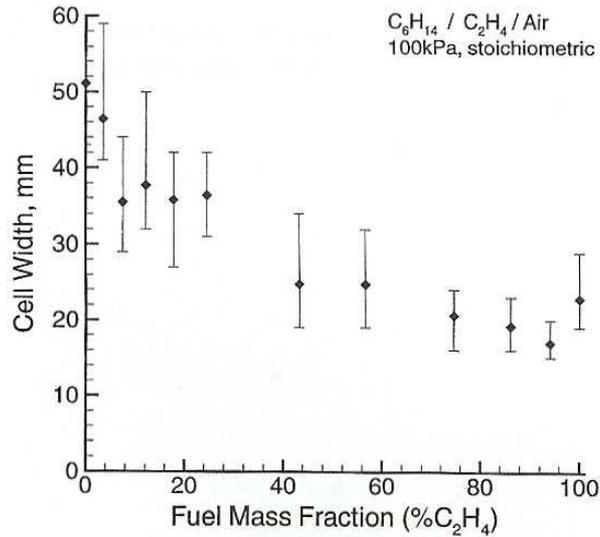


Fig. 2.11 (c): C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>

Fig. 2. 11 – Variation de la largeur des cellules de détonation pour des mélanges hybrides Hexane/carburant gazeux /air (carburant gazeux : (a) H<sub>2</sub>, (b) C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> ou (c) C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), (Austin et Shepherd, 2003)

## 2.4 Propriétés des mélanges combustibles et comburants

### 2.4.1 Base de données

Dans le but de sélectionner les carburants liquides qui serviront de base à notre étude expérimentale, nous avons collecté dans la littérature (Perry et Green, 1997 ; Kuchta, 1985 ; Chikos et al., 1995 et 2003 ; Vatani et al., 2007 ; ainsi que les fiches signalétiques des hydrocarbures « MSDS : Material Safety Data Sheet ») et comparé les principales caractéristiques physico-chimiques et thermodynamiques ainsi que les paramètres cinétiques et les caractéristiques de la détonation avec l'air à la stœchiométrie, d'un certain nombre de combustibles liquides : des alcanes et un certain nombre de carburants liquides utilisés en propulsion.

Les principaux paramètres examinés sont les suivants :

- propriétés physico-chimiques et thermodynamiques : densité  $\rho_d$ , température d'ébullition  $T_{eb}$ , pression de vapeur saturante  $P_s$ , chaleur latente de vaporisation  $L_v$ , enthalpie de formation  $\Delta H_f$ , chaleur massique  $C_m$ , la conductivité thermique  $\lambda_g$ , viscosité dynamique  $\mu$ , et coefficient de tension superficielle  $v_s$  (tableau 2.4).
- propriétés cinétiques : énergie d'activation et facteur pré-exponentiel (phase d'induction et phase de combustion), (tableau 2.5).
- caractéristiques de la détonation Chapman-Jouguet déterminées par TDS : célérité, pression, masse moléculaire et le coefficient  $\gamma$  au point CJ (des mélanges avec l'air à la stœchiométrie) déterminées avec le code TDS, (tableau 2.6).

Carburant liquide	Formule brute	Densité kg/m <sup>3</sup>	T.ebullition K	P.V.Satur. kPa à20C	Chal.Lat.Vap. kJ/kg à25C	Enth.Form. kcal/mole	Chal.mass. J/kg.K	Conductiv.Therm. W/m.K à20C	Visco.Dyn. 10E6.Pa.s	Coef_Tens_Superf. 10E3.N/m
nHexane	C6H14	660	341.7	20.13	337.0	-40.00	2259	0.1220	320	18.40
nHeptane	C7H16	684	371.0	4.60	321.0	-44.90	2220	0.1260	409	20.50
nOctane	C8H18	703	399.0	1.33	306.0	-49.80	2100	0.1320	562	21.80
Isooctane	C8H18	690	372.0	5.10	307.9	-53.50	2070	0.0985	500	20.39
nNonane	C9H20	700	423.8	0.42	363.7	-54.80	2220	0.1303	711	24.20
JP10	C10H16	936	455-466	0.28	361.1	-31.99	1749	0.1050	915	/
DECH	C10H20	804	446	<0.133	271.4	-66.29	1874	/	1740	27.00
nDecane	C10H22	726	447	0.17	278.2	-59.60	2000	0.1323	920	23.37
JP8	C11H21	775-840	438-538	0.24	460.0	-59.96	/	/	1717"a"	/
Kerosene	C12H24	820	477	0.10	207.0	-91.84	2000	0.1500	2480	25.95
JP5	C12H22	788-834	455-530	0.24	/	-58.98	/	/	4390"b"	/
Dodecane	C12H26	749	489.0	0.04	261.0	-84.23	2210	0.1335	1340	24.94
Ethanol	C2H6O	789	352.0	5.80	855.0	-66.27	2840	0.1700	1194	22.00
Nitromethane	CH3NO2	1137	374.0	3.70	564.0	-27.03	1738	0.2063	651	36.82

Tableau 2. 4 – Principales propriétés physico-chimiques de carburants liquides (Perry et Green, 1997 ; Kuchta, 1985 ; Chikos et al., 1995 et 2003 ; Vatani, 2007).

Carburant liquide	Phase Induction		Phase Combustion	
	Energie d'activation (Cal/mole)	Facteur pré-exponentiel (s <sup>-1</sup> )	Energie d'activation (Cal/mole)	Facteur pré-exponentiel (mole.cm <sup>-3</sup> ) <sup>1-b-a</sup> .s <sup>-1</sup>
nHexane	45000	3,81.10 <sup>12</sup>	30000	5,7.10 <sup>8</sup>
nHeptane	36200	1,3.10 <sup>11</sup>	30000	5,1.10 <sup>8</sup>
nOctane	38750	1,66.10 <sup>11</sup>	30000	4,6.10 <sup>8</sup>
Isooctane	43000	1,2.10 <sup>12</sup>	30000	3,68.10 <sup>8</sup>
nNonane	/	/	30000	4,2.10 <sup>8</sup>
JP10	51660	4,63.10 <sup>13</sup>	/	/
DECH	/	/	/	/
nDécane	30400	3,08.10 <sup>9</sup>	30000	3,8.10 <sup>8</sup>
JP8	58820	6,08.10 <sup>14</sup>	/	/
Kérosène	45000	2,80.10 <sup>12</sup>	41500	8,0.10 <sup>8</sup>
JP5	/	/	/	/
nDodécane	30200	2,68.10 <sup>9</sup>	30000	3,0.10 <sup>8</sup>
Ethanol	/	/	30000	1,5.10 <sup>9</sup>
Nitrométhane	33500	/	36400	1,84.10 <sup>13</sup>

Tableau 2. 5 – Propriétés cinétiques de carburants liquides (Westbrook et Dryer, 1981 ; Voronin et Zhdan, 1984 ; Babushok et Dakdancha, 1994 ; Seshadri et al., 2008 ; Franzelli et al., 2010)

<b>Carburant liquide</b>	<b>D<sub>CJ</sub> (m/s )</b>	<b>P<sub>CJ</sub> (bars)</b>	<b>Wm<sub>CJ</sub> (kg/kmole)</b>	<b>γ<sub>CJ</sub></b>
<b>nHexane</b>	1797	18,8	27,871	1,165
<b>nHeptane</b>	1797	18,9	27,902	1,165
<b>nOctane</b>	1796	18,9	27,925	1,165
<b>Isooctane</b>	1795	18,9	27,931	1,165
<b>nNonane</b>	1796	18,9	27,944	1,165
<b>JP10</b>	1784	18,8	28,412	1,164
<b>DECH</b>	1787	18,8	28,121	1,165
<b>nDécane</b>	1796	18,9	27,958	1,165
<b>JP8</b>	1788	18,8	28,177	1,165
<b>Kérosène</b>	1783	18,6	28,136	1,166
<b>JP5</b>	1787	18,8	28,232	1,165
<b>nDodécane</b>	1791	18,9	27,998	1,166
<b>Ethanol</b>	1776	18,3	27,582	1,166
<b>Nitrométhane</b>	1934	26,1	26,728	1,144

Tableau 2. 6 – Caractéristiques de détonation de mélanges de certains carburants liquides avec l'air (à la stœchiométrie)

## 2.4.2 Sélection des mélanges réactifs étudiés

Notre objectif étant d'obtenir des résultats nouveaux permettant d'approfondir la compréhension des mécanismes fondamentaux d'initiation et de propagation des détonations dans les aérosols de carburants liquides, nous avons sélectionné, en nous basant sur les résultats antérieurs examinés au § 2.3, cinq alcanes possédant des degrés de volatilité différents : le n-heptane ( $C_7H_{16}$ ), le n-octane ( $C_8H_{18}$ ), l'isooctane ( $C_8H_{18}$ ), le n-décane ( $C_{10}H_{22}$ ) et le n-dodécane ( $C_{12}H_{26}$ ).

Par ailleurs, un sixième carburant, de type monergol, a également été étudié, de la famille des dérivés nitrés : le nitrométhane ( $CH_3NO_2$ ).

Dans la suite de ce travail, ces six carburants seront dénommés pour des raisons de simplification :

M1 : isooctane

M2 : n-heptane

M3 : n-octane

M4 : n-décane

M5 : n-dodécane

NM : nitrométhane

Les mélanges réactifs seront choisis en prenant l'oxygène gazeux comme oxydant. On fera varier la richesse du mélange, la dilution de l'oxydant par un gaz inerte et la nature du gaz inerte diluant (Azote ou Argon). L'ensemble des mélanges étudiés est rassemblé dans le tableau 2.7.

	Isooctane	Heptane	Octane	Décane	Dodécane	Nitrométhane
$O_2+3.76N_2$	M1-D0-r	M2-D0-r	M3-D0-r	M4-D0-r	M5-D0-r	NM-D0-r
$O_2+2N_2$	M1-D1-r	M2-D1-r	M3-D1-r	M4-D1-r	M5-D1-r	
$O_2+N_2$	M1-D2-r	M2-D2-r	M3-D2-r	M4-D2-r	M5-D2-r	
$O_2+3.76Ar$	M1-D3-r					NM-D3-r
$O_2+2Ar$	M1-D4-r					

Tableau 2. 7 – Nomenclature des mélanges biphasiques utilisés

Dans ce tableau, chaque mélange réactif est identifié par la nature du carburant, la dilution de l'oxydant et la richesse du mélange.

A titre d'exemple, « M1-D1-1,2 » correspond au mélange biphasique isooctane/(O<sub>2</sub>+2N<sub>2</sub>) à la richesse 1,2.

#### **2.4.2.1 Principales propriétés physico-chimiques et thermodynamiques**

Pour les six carburants sélectionnés, nous avons rassemblé les principales propriétés physico-chimiques et thermodynamiques dans le tableau 2.8 (a), et les propriétés cinétiques dans le tableau 2.8 (b).

On remarquera, en particulier, la diminution très nette de la pression de vapeur saturante à 20 °C lorsque le poids moléculaire croit de C7 à C12.

Carburants	Formule	$\rho_{TMD}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	T <sub>eb</sub> (K)	P.V.S. (kPa à 20°C)	L <sub>v</sub> (kJ/kg)	Enth. Form. (kcal/mole)	Chal. mass. (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	Visco. Dyn. 10E <sup>6</sup> .Pa.s	Coef. Tens. Superf. 10E <sup>3</sup> .N/m
Isooctane(M1)	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	690	372	5.1	307.9	-53.5	2070	500	20.39
nHeptane (M2)	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	684	371	4.6	321	-44.9	2220	409	20.50
nOctane (M3)	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	703	399	1.33	306	-49.8	2100	562	21.80
nDecane (M4)	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	726	447	0.17	278.2	-59.6	2000	920	23.37
nDodecane (M5)	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	749	489	0.04	261	-84.23	2210	1340	24.94
Nitromethane NM	CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	1137	374	3.7	564	-27.03	1738	651	36.82

(a)

Mélanges	Phase Induction		Phase Combustion	
	Energie d'activation (Cal/mole)	Facteur pré-exponentiel (s <sup>-1</sup> )	Energie d'activation (Cal/mole)	Facteur pré-exponentiel (mole.cm <sup>-3</sup> ) <sup>1-b-a</sup> .s <sup>-1</sup>
M1	43000	1,2.10 <sup>12</sup>	30000	3,68.10 <sup>8</sup>
M2	36200	1,3.10 <sup>11</sup>	30000	5,1.10 <sup>8</sup>
M3	38750	1,66.10 <sup>11</sup>	30000	4,6.10 <sup>8</sup>
M4	30400	3,08.10 <sup>9</sup>	30000	3,8.10 <sup>8</sup>
M5	30200	2,68.10 <sup>9</sup>	30000	3,0.10 <sup>8</sup>

(b)

Tableau 2. 8 (a) – Principales propriétés physico-chimiques et thermodynamiques des carburants (Kuchta, 1985 ; Chikos et al., 1995 et 2003 ; Vatani, 2007) (b) – Propriétés cinétiques des carburants (Westbrook et Dryer, 1981 ; Voronin et Zhdan, 1984 ; Babushok et Dakdancha, 1994 ; Seshadri et al., 2008)

### 2.4.2.2 Caractéristiques de détonation des mélanges réactifs

Pour l'ensemble des mélanges mentionnés dans le tableau 2.7, nous avons calculé les caractéristiques de détonation CJ, pour une plage de richesse entre 0,5 et 3, en utilisant le code thermochimique TDS (Victorov, 2001).

Il s'agit des caractéristiques de détonation CJ des mélanges biphasiques constitués de carburants liquides et d'un gaz oxydant.

Les résultats sont réunis dans l'annexe 2 sous forme de tableaux qui contiennent les principaux paramètres caractéristiques de détonation.

## 2.5 Estimation des longueurs d'induction chimiques

Comme il a été rappelé au § 2.2.2, il existe une corrélation entre la taille des cellules de détonation  $\lambda$  et la longueur d'induction chimique  $L_i$ , selon un facteur de proportionnalité  $k$  liant ces deux paramètres par la relation  $\lambda = kL_i$ .

Ce coefficient  $k$  dépend de la nature du combustible, du diluant, de la richesse et des conditions initiales  $P_0$  et  $T_0$ .

Rappelons que  $\lambda$  est une grandeur caractéristique de la structure tridimensionnelle instationnaire de l'onde de détonation, alors que  $L_i$  est une grandeur monodimensionnelle du modèle ZND qui ne tient pas compte de la structure multidimensionnelle de l'onde.

### 2.5.1 Modèles numériques

Nous avons cherché à estimer la valeur de la longueur d'induction pour certains de nos mélanges, en vue de pouvoir évaluer a priori la détonabilité de ces mélanges et de comparer ultérieurement les valeurs de  $L_i$  avec les mesures expérimentales de la cellule de détonation afin d'en déduire la valeur du facteur  $k$ .

Pour cette étude, nous avons utilisé le code de calcul STANJAN (Reynolds, 1986) et le module intégrateur ZND du package cinétique CHEMKIN II (Kee et al., 1993). On peut obtenir ainsi les caractéristiques de détonation CJ, et à partir de l'état ZND, l'évolution des paramètres du mélange réactif (P, T,  $\rho$ , ...etc.) en arrière du choc dans la zone de réaction. On peut ainsi déterminer le temps d'induction  $\tau_i$  et la longueur d'induction correspondante  $L_i$ .

Pour ces calculs, il est nécessaire d'introduire un modèle de cinétique chimique détaillée.

Nous avons disposé de deux bibliothèques de mécanismes de cinétique chimique :

- la bibliothèque de CHEMKIN II (Kee et al., 1993) contenant deux schémas cinétiques :

- le 1<sup>er</sup> mécanisme de réaction détaillé implique 298 espèces et 2352 réactions, et est conçu pour le mécanisme d'inflammation des mélanges d'isooctane, à différentes richesses et dilutions.
- le second schéma cinétique implique quant à lui 175 espèces et 1318 réactions. Il inclut tous les alcanes saturés (nombre d'atomes de carbone > 6). Mais, il comprend des réactions faisant intervenir plus de trois composés. Or, la version de notre programme ne peut fonctionner que pour deux composés.

- la bibliothèque CANTERA (Goodwin, 2002) : qui découle de la conversion du second schéma cinétique du fichier CHEMKIN en format « CANTERA CTI ».

Ainsi, les calculs de longueurs d'induction sont effectués avec les bibliothèques CHEMKIN (pour le cas de l'isooctane) et CANTERA (pour les cas de l'heptane et l'octane).

Pour ce qui est du décane et du dodécane, les résultats de calculs de longueurs d'induction, déterminées par le logiciel CANTERA, seront utilisés à titre de comparaison avec les autres carburants, plus volatils, en fonction de la richesse et de la dilution.

## 2.5.2 Résultats des calculs

Les résultats de nos calculs sont rassemblés sur les figures 2.12 à 2.17 où on montre l'évolution de la longueur d'induction en fonction de la richesse et de la dilution pour différents carburants, dans les conditions initiales standard de température et de pression.

Les courbes sont en forme de « U » notamment pour la dilution D0, avec une valeur minimale de la longueur d'induction autour de la richesse de 1,2, correspondant au point où la réactivité est maximale.

En comparant les figures 2.12 et 2.13, on constate que la longueur d'induction du décane est inférieure à celle de l'isooctane. Ceci conduit à penser que la volatilité des carburants est mal prise en compte par ces schémas cinétiques.

Une autre explication, pourrait tenir à la structure moléculaire du carburant.

En comparant les résultats de la figure 2.15 concernant l'octane à ceux des figures 2.12 et 2.13 (isooctane et décane), on peut se référer aux travaux de Westbrook (1986) qui suggèrent que la production, à température élevée, de radicaux d'atomes d'hydrogène issus de la chaîne carbonée linéaire d'octane ou de décane a tendance à accélérer le processus d'allumage, tandis que la production de radicaux méthyle  $-CH_3$ , issu de la chaîne ramifiée de l'isooctane (ou 2,2,4-triméthylpentane) retarde la vitesse globale d'inflammation. Ceci se traduirait par une augmentation de la vitesse de réaction et un temps (et donc une longueur) d'induction plus court dans le cas de l'octane (et donc pour le décane).

De plus, pour le cas du décane, on a effectué des calculs de longueur d'induction en utilisant les deux schémas cinétiques, celui de Chemkin et celui de Cantera. On constate que les résultats obtenus ne sont pas similaires. Les valeurs correspondants aux calculs faisant appel au 1<sup>er</sup> schéma cinétique sont environ le double de celles du second schéma. Un examen comparatif des schémas cinétiques contenus dans les bibliothèques s'avère nécessaire. Toutefois, on peut retenir l'effet significatif du rapport de dilution  $\beta$  sur les longueurs d'induction. En effet, pour le même schéma cinétique (on se base sur le schéma cinétique Cantera), on constate que pour un carburant donné :

- en passant d'une dilution D0 à D1, les longueurs d'induction diminuent, d'un rapport 5 dans les mélanges pauvres et d'un rapport 3 pour une richesse supérieure ou égale à 1.

- en passant d'une dilution D0 à D2, les longueurs d'induction diminuent, d'un rapport 10 dans les mélanges pauvres et d'un rapport 7 pour une richesse supérieure ou égale à 1.

D'autre part, en passant d'un carburant plus volatil et de faible poids moléculaire à un carburant moins volatil et de poids moléculaire plus élevé, (cas de l'octane, du décane et du dodécane), et pour la dilution D0, on constate une augmentation de la longueur d'induction,

significative (autour de 20 %) pour les mélanges pauvres mais moins marquée pour les richesses supérieures ou égale à 1.

L'effet du rapport de dilution sur les paramètres cinétiques est donc prépondérant, alors que la volatilité et le poids moléculaire du carburant liquide semblent avoir un effet moins significatif.

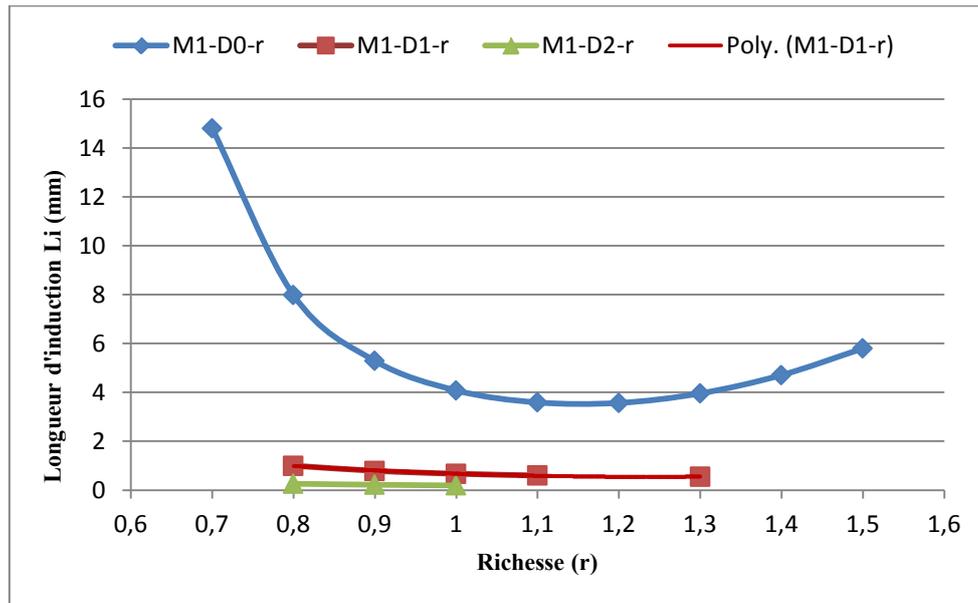


Fig. 2. 12 – Evolution de la longueur d'induction en fonction de la richesse des mélanges d'isooctane et d'oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (1<sup>er</sup> schéma cinétique Chemkin II).

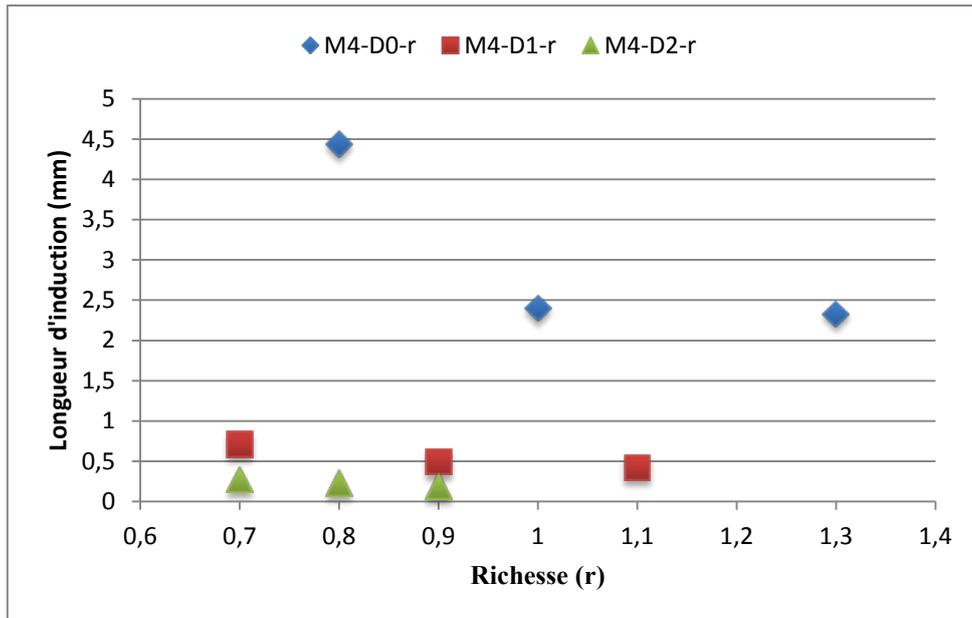


Fig. 2. 13 – Evolution de la longueur d'induction en fonction de la richesse de mélanges de décane et d'oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (1<sup>er</sup> schéma cinétique Chemkin II).

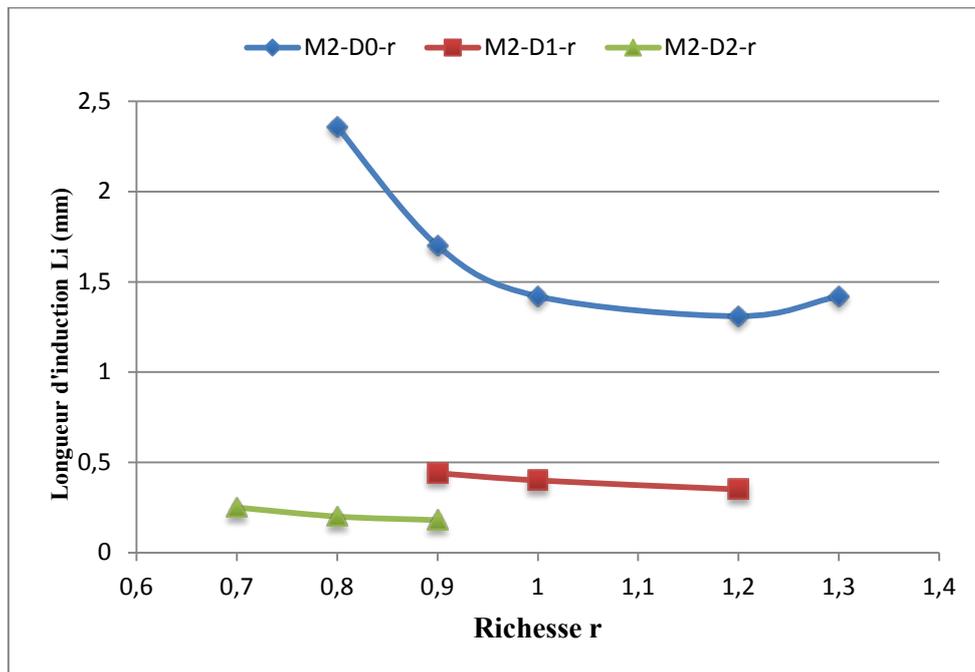


Fig. 2. 14 – Evolution de la longueur d'induction en fonction de la richesse de mélanges d'heptane et d'oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique de Cantera).

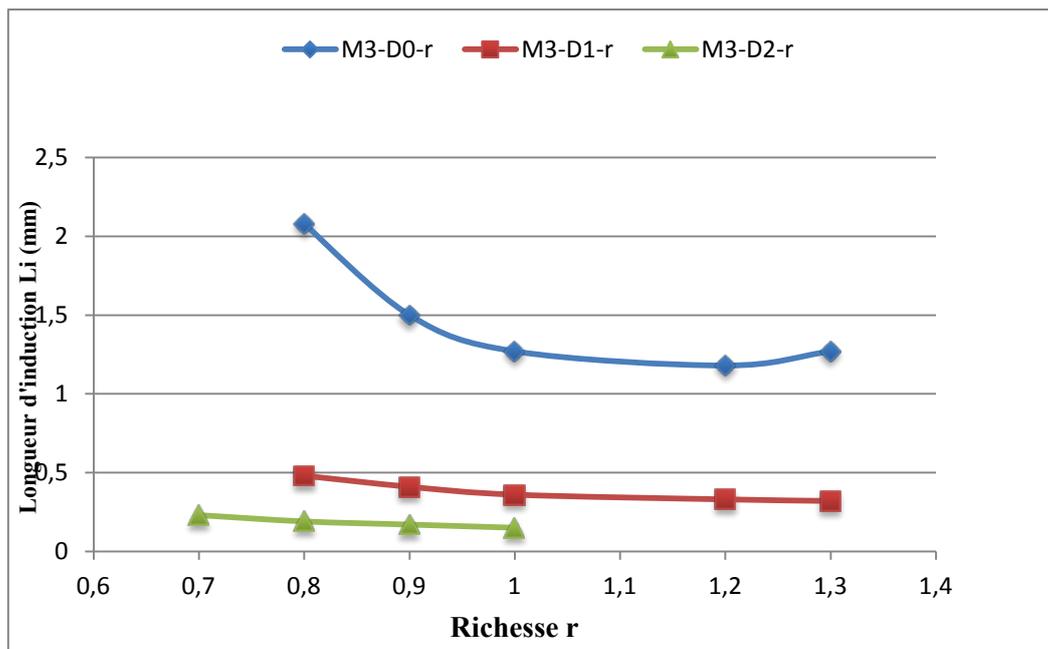


Fig. 2. 15 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges d’octane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique de Cantera).

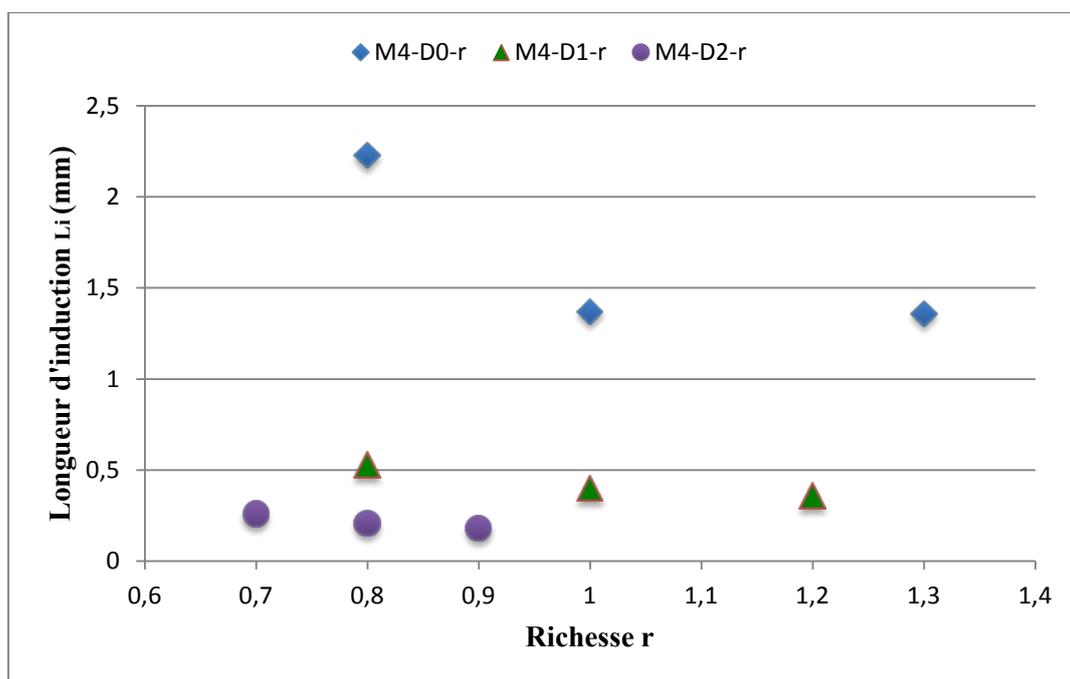


Fig. 2. 16 – Evolution de la longueur d’induction en fonction de la richesse de mélanges de décane et d’oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique de Cantera).

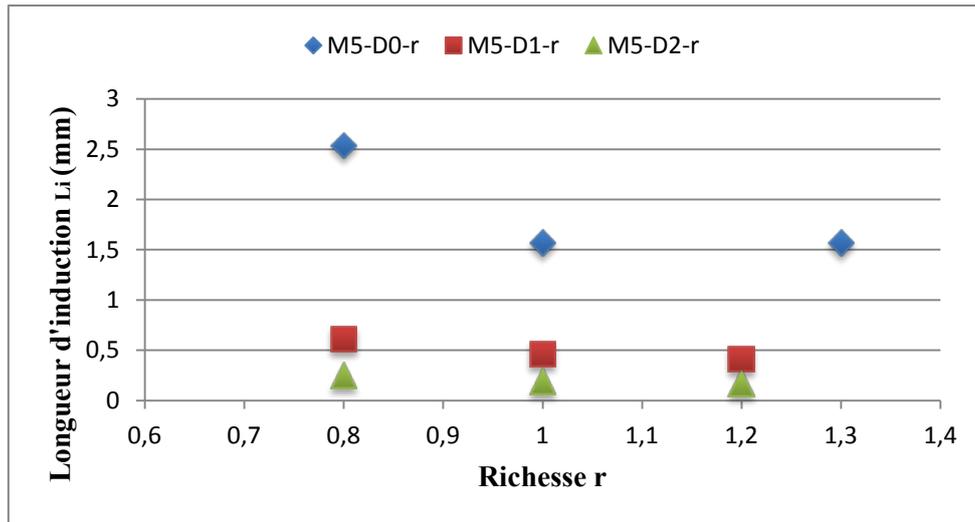


Fig. 2. 17 – Evolution de la longueur d'induction en fonction de la richesse de mélanges de dodécane et d'oxygène à différentes dilutions (D0, D1 et D2), à T et P ambiantes (schéma cinétique Cantera).

## 2.6 Conclusions

De l'examen des connaissances antérieures sur la détonabilité des aérosols de carburants liquides, il ressort que les paramètres physico-chimiques qui influencent principalement leur détonabilité sont la volatilité du carburant et la dilution de l'oxydant gazeux. Ceci nous a amené à choisir six carburants différents de volatilités décroissantes et cinq dilutions différentes de l'oxydant gazeux. Les mélanges réactifs préparés à partir de ces composants font l'objet de l'étude expérimentale qui suit.



## **Chapitre 3**

### **Montage expérimental**



### 3.1 Introduction

Ce chapitre est donc consacré à la présentation de l'ensemble du dispositif expérimental destiné à la réalisation des essais de détonation biphasique gaz-gouttelettes liquides. Afin de pouvoir acquérir de nouvelles connaissances sur les détonations hétérogènes gouttelettes liquides / gaz et sur leurs caractéristiques, le montage expérimental a été conçu pour permettre de générer des aérosols de carburants, de caractéristiques contrôlées sur toute la longueur du tube, et d'enregistrer les caractéristiques de la structure cellulaire (taille et régularité).

### 3.2 Le tube à détonation

Le tube à détonation vertical (cf. Figure 3.1) est constitué dans sa partie principale de tronçons de section carré 53 x 53mm. Il est composé du bas en haut :

- d'un dispositif de génération de l'aérosol,
- d'une électrovanne à boule, à commande électropneumatique, permettant la fermeture du tube à détonation,
- d'un tube à choc auxiliaire pour l'initiation de la détonation du mélange (cf. § 3.3),
- de six tronçons de section carrée (de côté  $h = 53 \text{ mm}$ ) instrumentés, le tronçon terminal permettant l'enregistrement de la structure cellulaire de détonation,
- d'une électrovanne à boule similaire à celle du bas du tube permettant la fermeture du tube à sa partie supérieure (la distance entre ces deux électrovannes est de 4,036m),
- d'un tube d'évacuation vers l'extérieur de la pièce.

Le tube à détonation est instrumenté sur toute la longueur (cf. § 3.5.2) et l'ensemble des opérations expérimentales est piloté par un dispositif de commande et de sécurité géré numériquement (cf. § 3.7.1).

Des photographies des parties principales du tube (tube à choc d'amorçage et chambre d'enregistrement de la structure cellulaire) sont reproduites sur les figures 3.1(a) et 3.1(b).

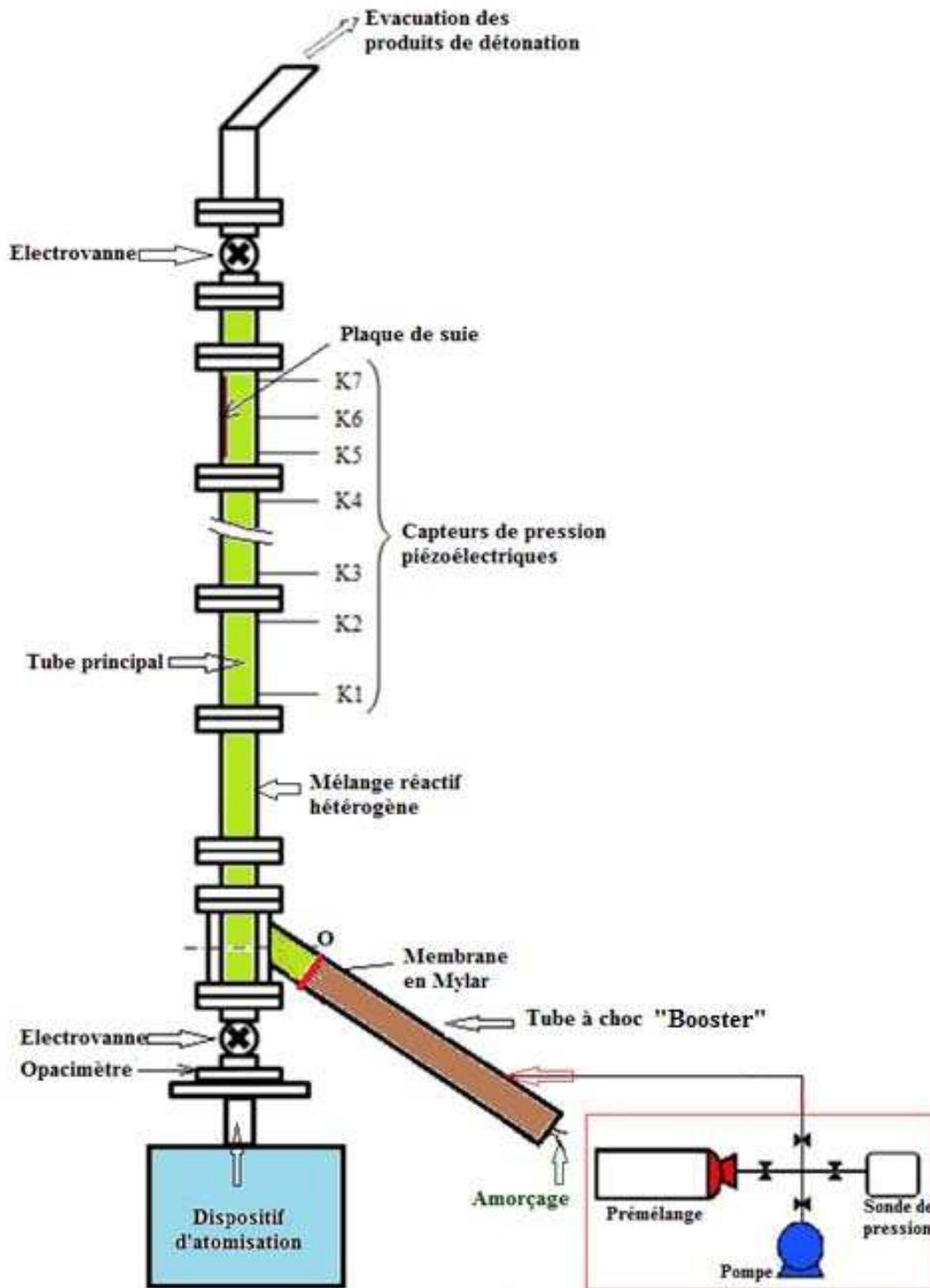


Fig. 3. 1 – Schéma du dispositif expérimental



Fig. 3. 1(a) – Tube à choc auxiliaire et partie inférieure du tube principal



Fig. 3. 1(b) – Chambre d'enregistrement de la structure

### 3.3 Dispositif d'amorçage (tube à choc)

Dans notre cas, il n'était pas possible d'utiliser un dispositif à spirale de Schelkine pour amorcer la détonation, comme cela se fait dans les détonations gazeuses afin d'obtenir une longueur de prédétonation la plus courte possible. En effet, cette manière d'amorcer la détonation impose des perturbations importantes à l'écoulement de l'aérosol de gouttelettes dans la première partie du tube à détonation et conduirait à des dépôts importants de gouttelettes sur les parois du tube.

Nous avons donc choisi d'amorcer le mélange hétérogène par une onde de choc générée par la détonation d'un mélange contenu dans un tube à choc auxiliaire (dit tube de "prédétonation" ou booster) débouchant dans le tube principal, au dessus de la vanne inférieure de fermeture du tube (la distance entre le point de raccordement et la vanne supérieure de fermeture du tube est de 3,9 m). Ce tube à choc (cf. figure 3.1) est de section circulaire (diamètre 69 mm) de longueur 1,7m (volume 6 litres). Il est muni à ses deux extrémités de deux brides permettant d'une part de le connecter au tube à détonation principal par l'intermédiaire d'une membrane en mylar intercalée entre deux joints toriques, et, d'autre part, de fermer l'extrémité opposée par un couvercle muni du système d'allumage par inflammateur électrique. Ce tube à choc

est connecté à une croix de distribution comportant 4 vannes pour la connection à une pompe à vide, à une jauge de pression (MKS PR 4000) et à un réservoir de mélange, ce qui permet de faire le vide dans le tube, puis de le remplir avec un prémélange réactif, préparé au préalable par la méthode des pressions partielles et stocké dans un réservoir sous pression. Le prémélange utilisé pour notre étude était un mélange éthylène - oxygène stoechiométrique, généralement sous 2 bars de pression initiale (voir chapitre 4).

## **3.4 Le générateur d'aérosols**

### **3.4.1 Introduction**

L'une des principales difficultés rencontrées pour la présente étude expérimentale était de pouvoir remplir de manière uniforme le tube à détonation sur toute sa longueur avec un aérosol de caractéristiques contrôlées et reproductibles. Cependant, l'utilisation de méthodes traditionnelles de génération d'un aérosol par injecteur mécanique, ne nous permet pas de satisfaire cette condition, du fait que l'aérosol se désintègre de manière non contrôlée en une série aléatoire de ligaments et de gouttelettes de toutes tailles, et que l'atomisation du liquide nécessite des vitesses très élevées entre les différents fluides. Cette technique produit donc un écoulement très turbulent lors du remplissage du tube, avec l'inconvénient de favoriser les dépôts de gouttelettes aux parois. C'est pourquoi, nous avons donc choisi de générer les aérosols en utilisant la technique des atomiseurs ultrasoniques.

### **3.4.2 Principe de fonctionnement**

Le principe de fonctionnement des atomiseurs ultrasoniques que nous avons utilisés, est celui qui a été décrit par Lacas *et al.* (1994). Il est basé sur l'excitation en surface d'un film liquide pour générer sa désintégration (cf. Figure 3.2). Pour cela, on crée des instabilités hydrodynamiques (instabilités de Faraday) à la surface de ce film liquide en le soumettant à des fréquences ultrasoniques. Dès que l'accélération est supérieure à l'accélération critique

$a_{cr}$ , le comportement des ondes de surface devient instable de longueur d'onde  $\lambda$ , et l'on a rupture de la masse liquide en un aérosol constitué de fines gouttelettes liquides (figure 3.2).

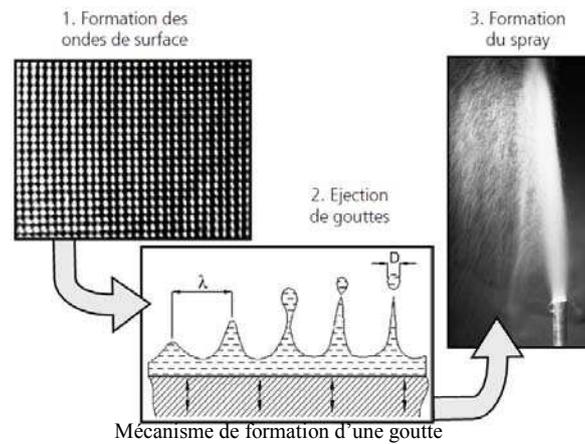


Fig. 3. 2 – Mécanisme de formation d'un aérosol par atomisation ultrasonique. - Etapes de formation (Dobre, 2003)

La taille des gouttes ainsi formées dépend de la longueur d'onde  $\lambda$  des ondes de surface et, par conséquent, de la fréquence d'oscillation. Cette dernière pour un fluide donné, est déterminée en fonction des propriétés du liquide (masse volumique, tension de surface et viscosité) et de la fréquence de résonance de l'atomiseur (caractéristiques mécaniques).

Le diamètre des gouttes est relié à ces paramètres par la relation :

$$D_{10} = 0,73 \left( \frac{\sigma}{\rho f_R^2} \right)^{1/3} \quad (3.1)$$

Où  $D_{10}$  est le diamètre moyen des gouttelettes,  $f_R$  la fréquence de résonance,  $\sigma$  la tension de surface et  $\rho$  est la densité du liquide à atomiser.

L'ensemble des gouttelettes forme au dessus du film liquide un aérosol de vitesse pratiquement nulle.

L'excitation du film liquide est obtenue grâce à un système mécanique composé de deux céramiques piézoélectriques enserrées entre deux masses métalliques choisies de telle sorte que la vibration des céramiques mette en résonance le système mécanique. Pour cela, il est nécessaire de choisir les matériaux et la dimension des masses métalliques de manière à accorder les impédances acoustiques. Nous avons suivi, pour cela, la méthode décrite par

Lacas et *al.* (1994). L'exemple proposé ci-après correspond au choix d'une masse en duralumin, et l'autre en acier.

La fréquence d'excitation des céramiques  $f_R$  est liée aux longueurs  $L_1$  et  $L_2$  correspondant respectivement aux parties duralumin et acier de l'atomiseur, mais aussi à l'épaisseur des céramiques  $L_c$  (Figure 3.3).

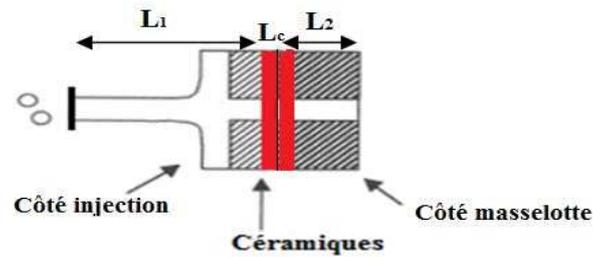


Fig. 3.3 – Schéma global de l'injecteur

Pour une fréquence désirée, et connaissant l'épaisseur des deux céramiques  $L_c$ , les longueurs caractéristiques  $L_1$  et  $L_2$  sont déterminées à partir de la relation suivante :

$$L_m = \left( \frac{a_m}{2\pi \cdot f_R} \right) \arctan \left[ \left( \frac{\rho_c a_c S_c}{\rho_m a_m S_m} \right) \cot an \left( \frac{2\pi \cdot f_R L_c}{a_c} \right) \right] \quad m = [1,2] \quad (3.2)$$

Les indices  $c$  et  $m$  désignent respectivement la céramique, la partie duralumin ( $m=1$ ) et la partie en acier de l'atomiseur ( $m=2$ ).  $L_c$  désigne l'épaisseur des céramiques,  $f_R$  étant la fréquence de résonance du système,  $\rho$  la densité,  $S$  la section du matériau considéré et  $a$  est la vitesse du son dans le matériau considéré.

### 3.4.3. Description de l'Atomiseur

L'atomiseur conçu sur ce principe a été réalisé à l'institut Pprime. Le schéma de principe est montré sur la figure 3.4 et des photographies de détail sur la figure 3.5.

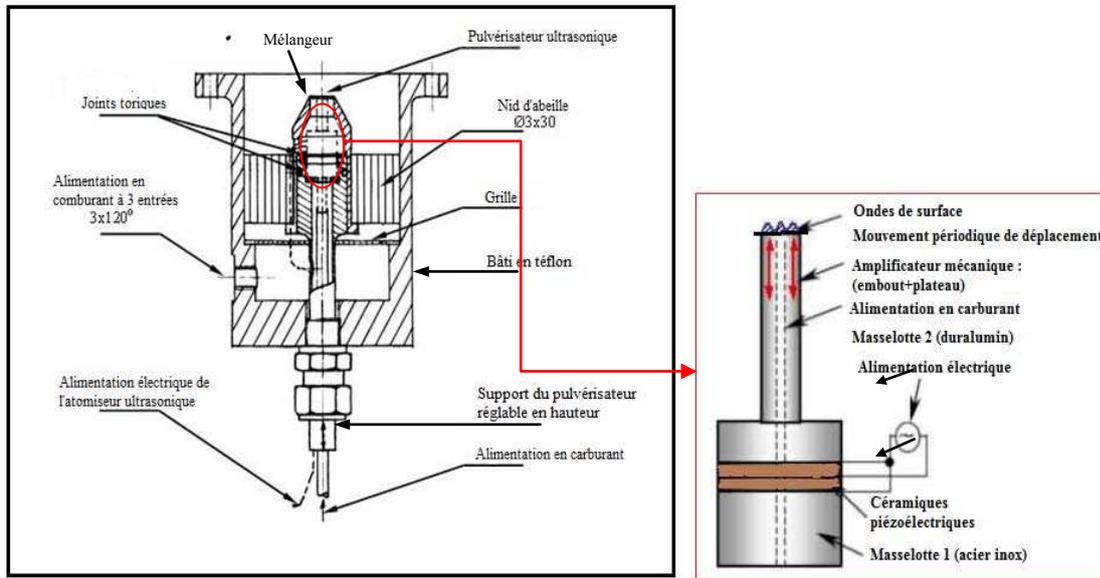


Fig. 3. 4 – Schéma de l'atomiseur ultrasonique



Figure 3.5 (a)

Figure 3.5 (b)

Fig. 3. 5 – Photographies (a) de l'atomiseur ultrasonique et (b) de son montage dans le mélangeur

L'atomiseur est monté sur l'axe central d'un boîtier mélangeur (Figures 3.4 et 3.5(b)). Celui-ci est alimenté à sa partie inférieure par un gaz porteur. L'écoulement de gaz traverse

un nid d'abeilles destiné à homogénéiser l'écoulement autour de l'atomiseur (longueur 35 mm pour des mailles de 3 mm). Dans la partie supérieure du boîtier, l'écoulement rencontre l'aérosol produit par l'atomiseur et l'entraîne verticalement vers le tube à détonation. Les débits de gaz sont réglés de sorte que le milieu biphasique ainsi créé soit transporté en écoulement laminaire.

La taille moyenne des gouttelettes obtenues avec cet atomiseur est de 30  $\mu\text{m}$  (voir chapitre 4).

## **3.5 Dispositifs de mesure**

### **3.5.1 Remplissage du tube avec l'aérosol**

Il est essentiel de s'assurer du bon fonctionnement de l'atomiseur et du remplissage correct du tube à détonation. Pour ce faire, nous avons eu recours à un système optique dit « opacimètre » afin de détecter le passage des gouttelettes à l'intérieur du tube à détonation. Le système est composé d'un émetteur (diode laser), placé sur l'une des parois du tube, et d'une photodiode réceptrice placée sur la paroi opposée à l'émetteur (Figure 3.6).



Fig. 3. 6 – Opacimètre

Le principe de fonctionnement de ce système, basé sur la théorie de Mie, consiste à mesurer l'atténuation du faisceau lumineux transmis à travers les gouttelettes : plus la concentration des gouttelettes est élevée, plus l'atténuation du faisceau est forte. Ce système permet de suivre l'évolution relative de la densité de l'aérosol au cours du remplissage.

En revanche, il ne permet pas de mesurer la concentration en gouttelettes liquides.

### 3.5.2 Mesure de la célérité et de la pression de détonation

Le tube est équipé de capteurs de pression piézoélectriques Kistler 603B dont le temps de réponse est de  $1\mu s$ . Ces capteurs sont positionnés en sept points  $K_n$ ,  $n = [1,7]$  représentés sur la Figure 3.1 (répartis le long du tube à 135 cm, 185cm, 209,1 cm, 259,1 cm, 282,1 cm, 295,6 cm, 312,6 cm à partir de point d'initiation). Ces capteurs sont reliés à des amplificateurs de charges Kistler Type 5011. Le Tableau 3.1 donne les distances entre capteurs.

Capteurs	O/K1	K1/K2	K2/K3	K3/K4	K4/K5	K5/K6	K6/K7
Distances (cm)	135	50	24,1	50	23	13,5	17

Tableau 3. 1 – Distances inter-capteurs

Chaque capteur est inséré dans un support en téflon (pour filtrer les vibrations acoustiques se propageant dans les parois du tube) et est maintenu par une entretoise et une vis de serrage. Le support est ensuite monté sur la paroi du tube principal. Une couche de graisse protectrice en silicone recouvre la partie sensible métallique du capteur, pour éviter des problèmes de dérive des signaux qui peuvent être provoqués par les sollicitations thermiques.

Les signaux délivrés par les amplificateurs de charge sont enregistrés sur une unité centrale "Graphtec Hard Disk Logger GL1100" à 8 voies ayant une vitesse d'échantillonnage maximum de 25 ns (dans nos expériences, on enregistre jusqu'à  $70 \cdot 10^3$  points), piloté par un ordinateur. On peut ainsi enregistrer de manière synchronisée, à partir de l'instant d'allumage, l'ensemble des signaux de pression en provenance des 7 capteurs.

A partir des temps de passage du pied du front de discontinuité incident, on peut déduire la célérité moyenne de la détonation entre deux capteurs. Le signal de pression permet de déterminer la pression au front et son évolution dans l'écoulement arrière.

### **3.5.3 Enregistrement de la structure cellulaire de détonation**

L'enregistrement de structures tridimensionnelles liées à l'existence d'un régime de détonation se fait par l'intermédiaire de plaques rectangulaires (42 cm x 5,3 cm) dont l'une des faces, polie "miroir", est enduite d'un dépôt de suie (noir de carbone), afin de mettre en évidence une éventuelle structure cellulaire de détonation par la méthode des traces de Mach. En effet, lorsque la détonation passe sur cette surface, les points triples caractéristiques de la structure de la détonation inscrivent la trace de leur trajectoire en arrachant des particules de suie de la plaque (en raison des niveaux de pression et de température très élevés existant aux points triples). Ainsi, on obtient un enregistrement bidimensionnel de la structure tridimensionnelle de la détonation, dont on peut étudier la forme, la taille caractéristique et la régularité.

## 3.6 Réalisation des mélanges

### 3.6.1 Prémélanges gazeux

Les pré-mélanges gazeux (ceux destinés au booster, à base d'éthylène et d'oxygène, et ceux utilisés comme gaz porteur pour le mélange biphasique : O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> et Argon) sont préparés à température ambiante par la méthode des pressions partielles et stockés dans des bouteilles en acier d'une capacité de 50 litres au moyen d'une installation spécialement conçue pour ces opérations.

Ces bouteilles reposent horizontalement sur un dispositif permettant une rotation rapide sur leur axe avant chaque expérience, ce qui permet d'homogénéiser les mélanges réactifs gazeux qu'elles contiennent et réduire ainsi le risque de stratification.

Pour des raisons de sécurité, la pression maximale de ces mélanges gazeux ainsi préparés est limitée à 4 bars. La pureté de l'ensemble des gaz fourni par l'Air Liquide est supérieure à 99,8 % (tableau 3.2).

Gaz	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	Ar	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
Pureté (%)	> 99,999	> 99,999	> 99,999	> 99,975	> 99,8

Tableau 3. 2 – Pureté des gaz utilisés

### 3.6.2 Carburants liquides

Les carburants liquides utilisés sont tous issus de la famille chimique des alcanes saturés (C<sub>n</sub>H<sub>2n+2</sub>). Les puretés de ces carburants sont indiquées dans le tableau 3.3 :

Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire	Densité (kg/m <sup>3</sup> )	Pureté (%)	Référence (Fournisseur)
n-Heptane	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	100	684	≥ 99,7	VWR
n-Octane	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	114	703	≥ 99,0	MERCK
Isooctane	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	114	690	≥ 99,5	VWR
n-Décane	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	142	726	≥ 94,0	MERCK
n-Dodécane	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	170	749	100	VWR

Tableau 3. 3 – Principales propriétés physico-chimiques des carburants liquides utilisés

### 3.6.3 Mélanges biphasiques

La réalisation du mélange biphasique est produite dans le tube par balayage à partir des composants introduits à la base du tube dans le boîtier mélangeur de l'atomiseur (cf. fig. 3.4). Les débits de gaz et de liquide sont contrôlés par des rotamètres.

- pour le gaz porteur : « Brooks, Monture : GT 1024 ; Flotteur : 8-RS-14 ».

- pour le carburant liquide : « Brooks, Monture : 1355 I 8800 V D1 ; Tube : R2-15-D ; Flotteur : acier inoxydable 18-8 Mo de densité 8,04 ».

Le dispositif de réglage correspondant est représenté sur la figure 3.7.



Fig. 3. 7 – Débitmètres de gaz et de carburant liquide

La richesse du mélange est déterminée par le réglage des débits de gaz et de liquide à partir de la relation :

$$\dot{Q}_{oxydant} = \dot{Q}_{liquide} \frac{\phi_{St}}{r} \quad (3.3)$$

$\dot{Q}_{oxydant}$  et  $\dot{Q}_{liquide}$  étant les débits en oxydant et en liquide, en l/h.

$r$  est la richesse du mélange réactif et  $\phi_{sr}$  son coefficient stœchiométrique calculé à partir de la réaction de combustion du mélange considéré.

A partir de ces calculs, on a établi les courbes d'étalonnage des carburants liquides considérés. Ce qui permet d'en déduire les débits en oxydant et liquide correspondants.

**Remarque :**

Pour certains mélanges réactifs, on était limité à des valeurs de richesses ( $r = 1,3$  pour la dilution D1, et  $r = 0,9$  à  $1$  pour la dilution D2) en raison de la plage de débits disponibles avec le débitmètre de gaz.

## **3.7 Système de commande et protocole d'essai**

### **3.7.1 Système de commande**

L'ensemble des opérations de remplissage du tube à détonation, d'isolement du tube par fermeture des électrovannes, d'arrêt des débits des fluides et de mise à feu est commandé et contrôlé par un système automatisé géré par un logiciel géré par ordinateur. Ce logiciel intègre aussi la gestion de tous les dispositifs de sécurité permettant d'éviter tous les risques d'incidents, d'erreurs de manipulation, de pannes ou de dysfonctionnements. Le tableau de bord de l'écran de commande et de contrôle, tel qu'il apparaît à l'écran de l'ordinateur est reproduit sur la Figure 3.8.

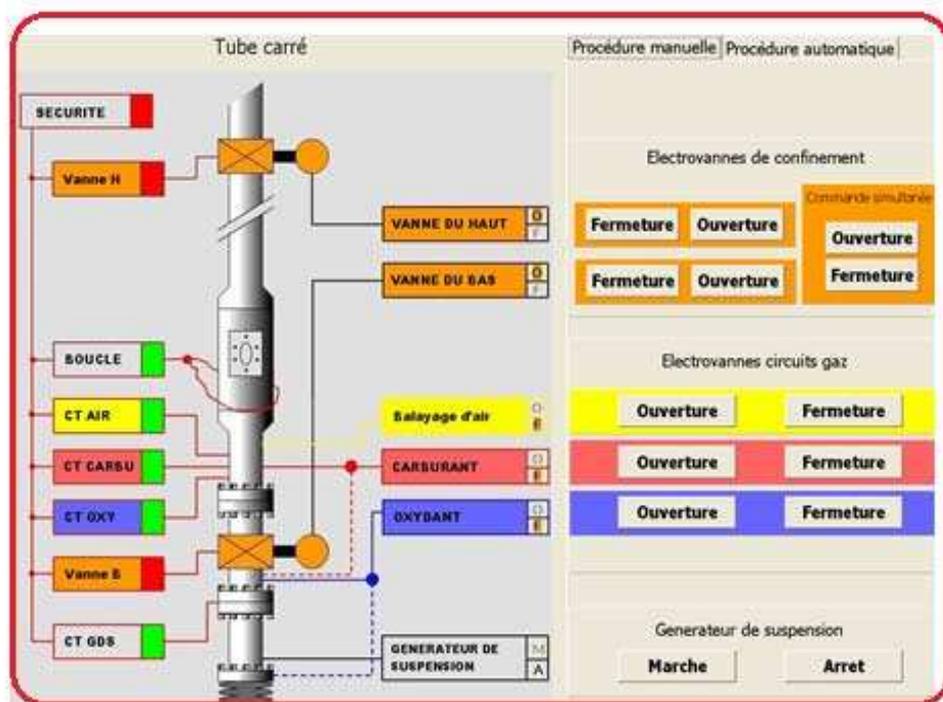


Fig. 3. 8 – Système de commande et de sécurité

### 3.7.2 Protocole d'essai

Pour des raisons de sécurité, l'ensemble du tube à détonation est tout d'abord mis sous vide afin de localiser des éventuelles fuites (pression résiduelle...).

Les procédures d'essais expérimentales décrites ci-après sont identiques pour l'ensemble des tirs :

### **Phase préparatoire :**

Avant de démarrage des expériences, il est nécessaire de procéder aux opérations et vérifications suivantes :

- Mise sous tension de l'ensemble des appareils de contrôle,
- Enfumage des plaques de suie (hors salle d'expérience), et fixation de ces plaques sur leur support,
- Mise en route du logiciel de commande de la procédure, des systèmes d'acquisition de données, des électrovannes, du boîtier d'alimentation électrique de l'injecteur,
- Test de fonctionnement de l'enregistreur "Graphtec",
- Mise en place de la membrane en mylar entre tube principal et tube auxiliaire (tube à choc),
- Mise en place du système d'initiation par inflammateur,
- Verrouillage de la boucle de sécurité.

### **Phase de remplissage du tube :**

La phase de remplissage s'effectue une fois les diverses opérations de la phase préparatoire effectuées.

- Faire le vide dans le tube de pré-détonation,
- Remplissage du prémélange  $C_2H_4 / O_2$ , dans le tube de pré-détonation sous 2 bars,
- Lancement de la procédure automatique : vannes haute et basse ouvertes, ouverture des circuits d'alimentation en carburant, en oxydant et du générateur d'aérosols,
- Branchement des conducteurs électriques du dispositif de mise à feu,
- Réglage des débitmètres carburant et oxydant selon la richesse désirée,
- Mise en marche de l'atomiseur, et accouplement à la partie inférieure du tube principal,
- Remplissage du tube principal par balayage des différents composants : aérosol de carburants et air.

### **Phase de tir :**

- Mise sous tension électrique de commande de mise à feu,
- Activation des amplificateurs de charge,
- Fermeture simultanée des vannes d'alimentation en carburant et en air et des électrovannes de fermeture du tube; retrait de l'atomiseur,

- Initiation du tir (activation de la touche départ du "Graphtec"),
- Mise à feu.

**Après le tir :**

- Sauvegarde des données à partir du "Graphtec",
- Mise en position "stand-by" des amplificateurs de charge,
- Ouverture de la vanne haute (vanne basse fermée), et mise en route du balayage d'air et sa connexion au tube de pré-détonation (évacuation des gaz brûlés),
- Arrêt du balayage d'air,
- Dégager le support de l'atomiseur du tube principal,
- Ouverture de la vanne basse
- Nettoyage et remise en état du tube,
- Exploitation des données.

**Remarque :**

La réalisation et le montage de l'ensemble des pièces constituant le montage expérimental ainsi que la mise au point des atomiseurs et du dispositif de commande ont nécessité un travail important durant presque deux ans. Le dispositif expérimental dédié à cette étude est conçu de manière à tenir en compte des contraintes spécifiques et des risques liés à la préparation et la conduite d'expériences sur des milieux biphasiques, ce qui conduit à un dispositif expérimental beaucoup plus complexe et délicat à mettre en œuvre que celui d'un tube à détonation classique pour les expériences sur les mélanges gazeux homogènes.

## **Chapitre 4**

# **Essais préliminaires et calibration du dispositif expérimental**



## **4.1 Introduction**

Dans ce chapitre, nous exposons les travaux préliminaires que nous avons effectués en vue de caractériser le mélange biphasique et les conditions d'établissement d'une détonation dans le montage expérimental. Nous examinons successivement :

- La caractérisation granulométrique de l'aérosol,
- L'initiation de la détonation par choc,
- Les conditions de propagation d'un régime de détonation autonome stationnaire.

## **4.2 Caractérisation granulométrique de l'aérosol**

### **4.2.1 Principe de mesure par PDI (Phase Doppler Interferometry)**

Le principe de la mesure PDI repose sur l'utilisation de la cohérence de deux faisceaux laser produit par un émetteur, pour créer un réseau de franges d'interférence dans un volume et analyser les signaux résultant du passage des gouttelettes au sein de ce réseau des franges, appelées « bouffées Doppler ».

Connaissant le déphasage issu du traitement des signaux, on détermine le diamètre de la particule. Le schéma descriptif de l'Interférométrie à Phase Doppler est représenté sur la figure 4.1.

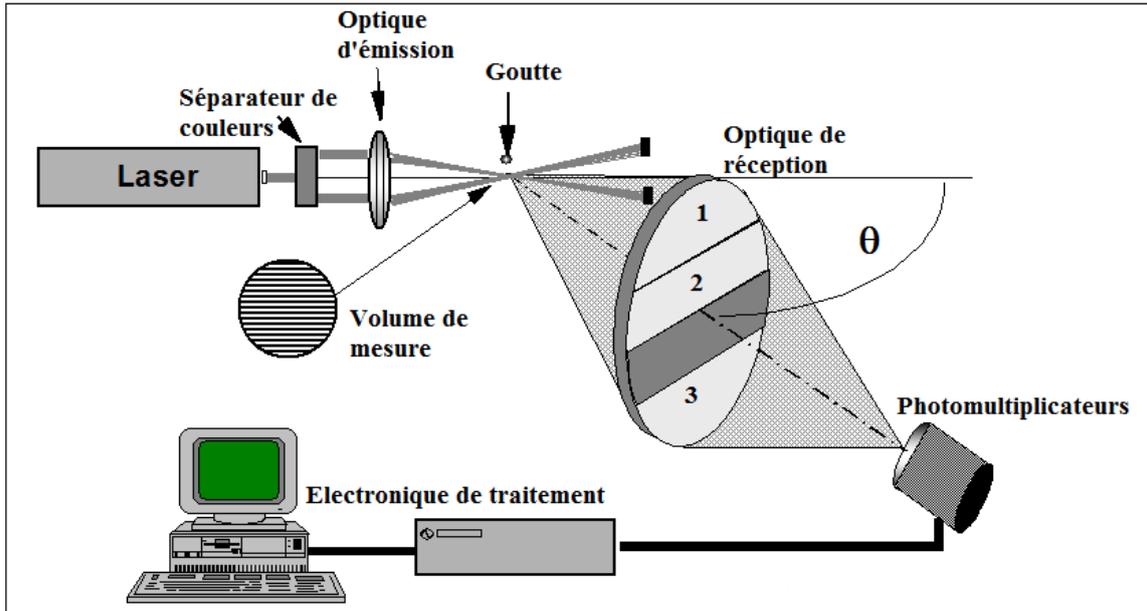


Fig. 4. 1 – Schéma descriptif de l'Interférométrie à Phase Doppler « PDI »

Une description détaillée de la méthode utilisée peut être trouvée dans la thèse de Mar (2012).

#### 4.2.2 Montage de mesure

Le montage expérimental utilisé pour les mesures de granulométrie est photographié sur la Figure 4.2. Il comporte :

- le générateur d'aérosols (atomiseur ultrasonique),
- un tube transparent cylindrique en Plexiglas, de diamètre 53 mm, fixé à la sortie de l'atomiseur,
- un bâti d'assemblage,
- l'émetteur de faisceaux lasers (bleu et vert),
- le récepteur fixé sur un bâti
- le système d'alimentation en oxydant et en carburant (cf. chapitre 3),
- le système d'acquisition et d'exploitation de données.

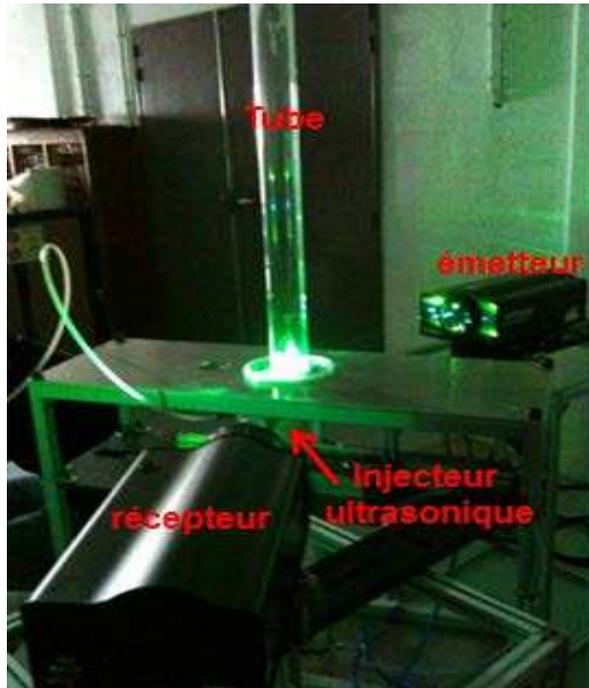


Fig. 4. 2 – Photographie du dispositif de granulométrie PDI

Les mesures de granulométries ont été effectuées dans la configuration suivante (tableau 4.1) :

Nombre d'échantillons par mesure	5000 points par fichier d'acquisition
Gain	500 à 600 volts
Ouverture de la fente	250 $\mu\text{m}$
Data Rate (*)	Un bon Data Rate doit se situer $\approx 800$ Hz
Lentilles [Emetteur/Récepteur]	500 mm/500 mm
Seuil électronique « minimum threshold »	200 mV (**)

Tableau 4. 1 – Configuration d'analyse PDI

(\*) : variable selon la mesure. Un data rate élevé favorise l'acquisition et traduit une meilleure dynamique du signal.

(\*\*) : Il existe toujours un bruit inhérent aux divers appareils électroniques. Pour éviter que ce bruit ne vienne se superposer et perturber ainsi le signal dû aux gouttelettes liquides, le logiciel d'acquisition permet de fixer un seuil minimum « minimum threshold ». Il est généralement compris entre 100 et 300 mV.

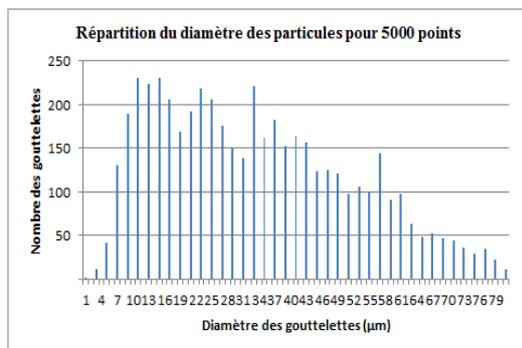
### 4.2.3 Résultats

#### Remarque préliminaire:

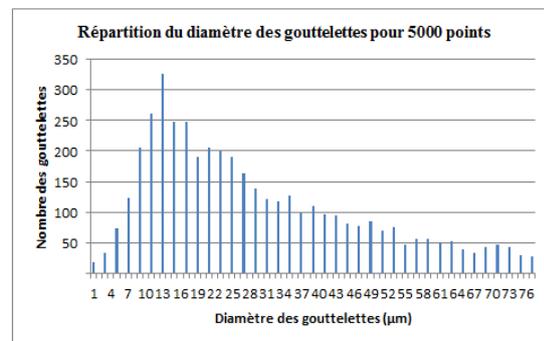
Pour l'ensemble de nos mesures, le paramètre  $X$  (distance de mesure par rapport à l'orifice de sortie de l'atomiseur) prendra deux valeurs 4,5 cm et 18,5 cm (deux positions différentes, l'une proche du nez de l'atomiseur, l'autre à une distance plus éloignée).

On présente, sur la figure 4.3, la distribution granulométrique d'un aérosol d'isooctane (a) et de décane (b) dans un écoulement d'air et caractérisés dans les mêmes conditions opératoires, à savoir :

- débit du carburant = 0,26 l/h,
- débit d'air = 3,4 m<sup>3</sup>/h (correspondant à une vitesse d'entraînement de  $U_{\text{air}} = 0,34$  m/s),
- $X = 18,5$  cm de l'orifice (distance de mesure par rapport à l'orifice de sortie de l'atomiseur),
- $\phi_b = 1$  mm (diamètre de la buse de l'atomiseur) soit  $X/\phi_b = 185$ .



(a) : Isooctane/air



(b) : Décane/air

Fig. 4. 3 – Distribution granulométrique d'un aérosol dans un écoulement d'air ( $X/\phi_b = 185$ ,  $U_{\text{air}} = 0,34$  m/s).

Les profils obtenus sont proches d'un profil gaussien, centré sur l'axe mais pas strictement monodisperse. La distribution granulométrique correspondante au décane est centrée sur une valeur moyenne de  $D_{10} \approx 34 \mu\text{m}$  avec un écart-type de  $24 \mu\text{m}$ . La distribution

de l'isooctane est quant à elle légèrement plus faible avec un diamètre moyen enregistré  $D_{10} \approx 29 \mu\text{m}$  et un écart-type de  $19 \mu\text{m}$ .

Pour ce qui est du diamètre de Sauter  $D_{32}$  (Diamètre Moyen de Sauter ou SMD), il est plus élevé pour le décane ( $D_{32} = 67 \mu\text{m}$ ), que pour l'isooctane ( $D_{32} = 52 \mu\text{m}$ ).

Les résultats des mesures pour l'isooctane et le décane à deux distances  $X$  de la buse sont rassemblés sur le tableau 4.2.

	Isooctane/air		Décane/air	
X (cm)	4,5	18,5	4,5	18,5
$Q_{\text{fuel}}$ (l/h)	0,26			
$Q_{\text{air}}$ ( $\text{m}^3/\text{h}$ )	4,1	3,4	4,1	3,4
$D_{10}$ ( $\mu\text{m}$ )	35,6	29,3	36,3	34,1
$D_{32}$ ( $\mu\text{m}$ )	73,9	51,6	57,6	66,7
$\sigma_T$ ( $\mu\text{m}$ )	26,1	19,2	20,7	23,9

Tableau 4. 2 – Récapitulatif des résultats de mesures granulométriques à deux distances  $X$  de la buse d'atomisation

#### 4.2.4 Influence du débit d'air sur la taille des gouttelettes

Pour une même distance d'observation  $X = 18,5 \text{ cm}$ , on a fait varier le débit d'air (et donc la vitesse d'entraînement). Les résultats sont rassemblés dans le tableau 4.3 et sur la figure 4.4.

	Isooctane				Octane					Décane		
X (cm)	18,5				18,5					18,5		
$Q_{\text{fuel}}$ (l/h)	0,26				0,26					0,26		
$Q_{\text{air}}$ ( $\text{m}^3/\text{h}$ )	2,1	2,8	3,4	4,1	2,1	2,8	4,1	4,7	5,5	2,8	3,4	4,1
$U_{\text{air}}$ (m/s)	0,20	0,28	0,34	0,40	0,20	0,28	0,40	0,46	0,54	0,28	0,34	0,40
$D_{10}$ ( $\mu\text{m}$ )	29,3	30,5	29,3	30,0	28,1	27,1	29,1	28,1	28,0	29,8	34,1	30,7
$D_{32}$ ( $\mu\text{m}$ )	47,2	48,0	51,6	60,9	71,5	59,7	52,4	47,6	46,5	52,0	66,7	42,0
$\sigma_T$ ( $\mu\text{m}$ )	17,2	17,2	19,2	23,2	24,2	20,5	19,6	17,3	16,6	18,6	23,9	14,7

Tableau 4. 3 – Valeurs de  $D_{10}$  et  $D_{32}$  en fonction du débit d'air

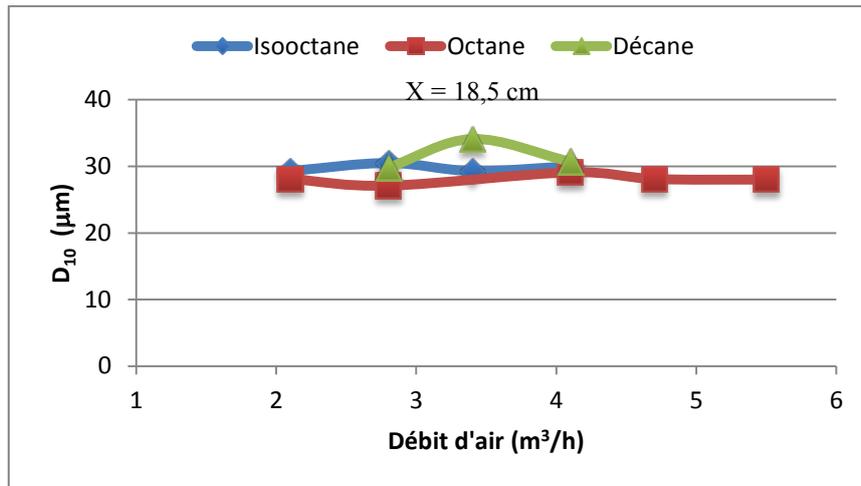


Fig. 4. 4 – Effet du débit d'air sur le diamètre moyen  $D_{10}$  des gouttelettes

Pour les trois carburants, la taille moyenne  $D_{10}$  des gouttelettes liquides se situe autour de 30  $\mu\text{m}$ . De très légères fluctuations sont cependant constatées mais le diamètre moyen des gouttelettes semble peu dépendant du débit d'air. En conséquence, la taille des gouttelettes liquides à une abscisse donnée est pratiquement la même, quelle que soit la richesse du mélange biphasique (que l'on fait varier en changeant le débit de gaz).

#### 4.2.5 Effet de la distance X sur la taille des gouttelettes liquides

Par ailleurs, on a examiné l'effet de la distance X par rapport à l'orifice de la buse de l'atomiseur sur la taille des gouttelettes liquides ( $D_{10}$  et  $D_{32}$ ). A cet effet, on a opéré à deux distances différentes. L'une proche de l'atomiseur ( $X = 4,5 \text{ cm}$ ), l'autre à une distance plus éloignée ( $X = 18,5 \text{ cm}$ ). Sur la figure 4.5, on présente les résultats obtenus pour le diamètre moyen  $D_{10}$ , et sur la figure 4.6 ceux pour  $D_{32}$ , dans le cas de l'isooctane.

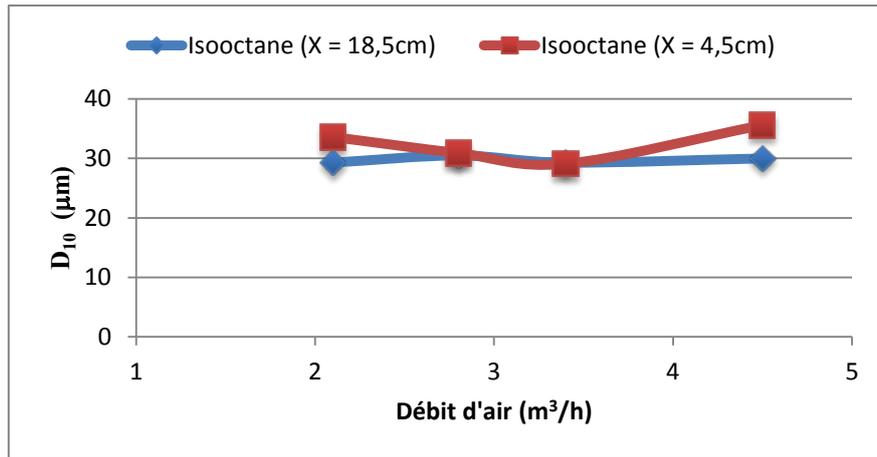


Fig. 4. 5 – Effet de la distance X par rapport à l’orifice de la buse sur le diamètre moyen  $D_{10}$  des gouttelettes

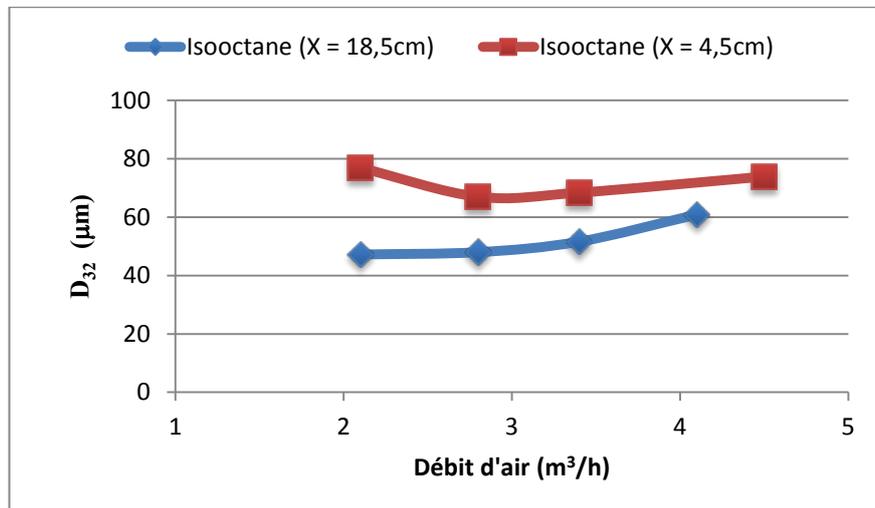


Fig. 4. 6 – Effet de la distance X par rapport à l’orifice de la buse sur le diamètre de Sauter  $D_{32}$  des gouttelettes

On constate que le diamètre moyen  $D_{10}$  est pratiquement le même dans les deux cas, quoique légèrement inférieur pour  $X = 18,5$  cm. Pour le diamètre de Sauter  $D_{32}$  on constate une diminution quand on passe de  $X = 4,5$  cm à  $X = 18,5$  cm.

Des résultats similaires ont été obtenus avec l’octane et le décane.

## **4.2.6 Conclusions**

Compte tenu des résultats des mesures de granulométrie, on considérera pour la suite de la présente étude que l'atomiseur ultrasonique délivre pour tous les carburants testés des gouttelettes de taille moyenne 30  $\mu\text{m}$ .

## **4.3 Initiation de la détonation par choc**

### **4.3.1 Choix de la méthode d'initiation**

La méthode la plus souvent utilisée pour initier une détonation dans un tube consiste à allumer le mélange avec une source d'énergie faible et de favoriser l'accélération de la flamme pour favoriser le mécanisme de transition déflagration-détonation (TDD). La distance de formation de la détonation est minimisée par interposition d'une spirale de Schelkin sur le parcours de la flamme. Malheureusement, cette technique ne peut être utilisée dans le cadre de la présente étude car elle favoriserait inévitablement le dépôt des gouttelettes aux parois lors du remplissage du tube, conduisant à une dégradation des caractéristiques du milieu réactif incompatible avec l'objectif de faire des expériences reproductibles.

Par ailleurs, la longueur limitée du tube (environ 4,036 m, cf. Chap3) impose d'initier la détonation sur une distance la plus courte possible. C'est pourquoi, nous avons utilisé le dispositif d'initiation par tube à choc (cf. § 3.3), qui permet d'observer la propagation de la détonation sur une distance de 3,9 m. Par la suite, pour des raisons de simplification de l'exposé, nous désignerons ce dispositif sous le nom de « booster ».

### **4.3.2 Caractéristiques du choc généré par le booster**

Ainsi qu'il a été exposé au chapitre 3 (cf. § 3.3), le tube de prédétonation (booster) est rempli d'un mélange gazeux détonant dont l'initiation est provoquée par un inducteur électrique. En fin de propagation, la détonation provoque la destruction de la membrane de séparation en Mylar et génère la propagation d'une onde choc dans le tube principal.

Nous avons tout d'abord étudié les caractéristiques de l'onde de choc produite par le booster lors de sa propagation dans le tube à détonation principal, en l'absence de mélange réactif. Les conditions initiales dans le booster sont les suivantes :

- prémélanges  $C_2H_4/O_2$  stœchiométriques sous 1 bar de pression initiale,
- prémélanges  $C_2H_4/O_2$  stœchiométriques sous 2 bars de pression initiale,
- prémélanges  $H_2/O_2$  stœchiométriques sous 2 bars de pression initiale, avec différents temps de repos  $t_{repos}$  du prémélange dans le booster, afin d'étudier les éventuels problèmes de stratification.

Sur la Figure 4.7, nous avons tracé les célérités moyennes de choc en fonction de la distance de propagation. On peut voir que, quelle que soit la pression initiale et la nature du prémélange dans le booster, l'onde de choc ralentit lors de sa propagation le long du tube à détonation. Lorsqu'on utilise des prémélanges  $H_2/O_2$  dans le booster, on constate qu'il n'y a pas de différences significatives sur l'évolution de la célérité du choc dans le tube en fonction de temps de séjour dans le booster avant allumage. Il n'y a donc pas de problèmes engendrés par la stratification du prémélange.

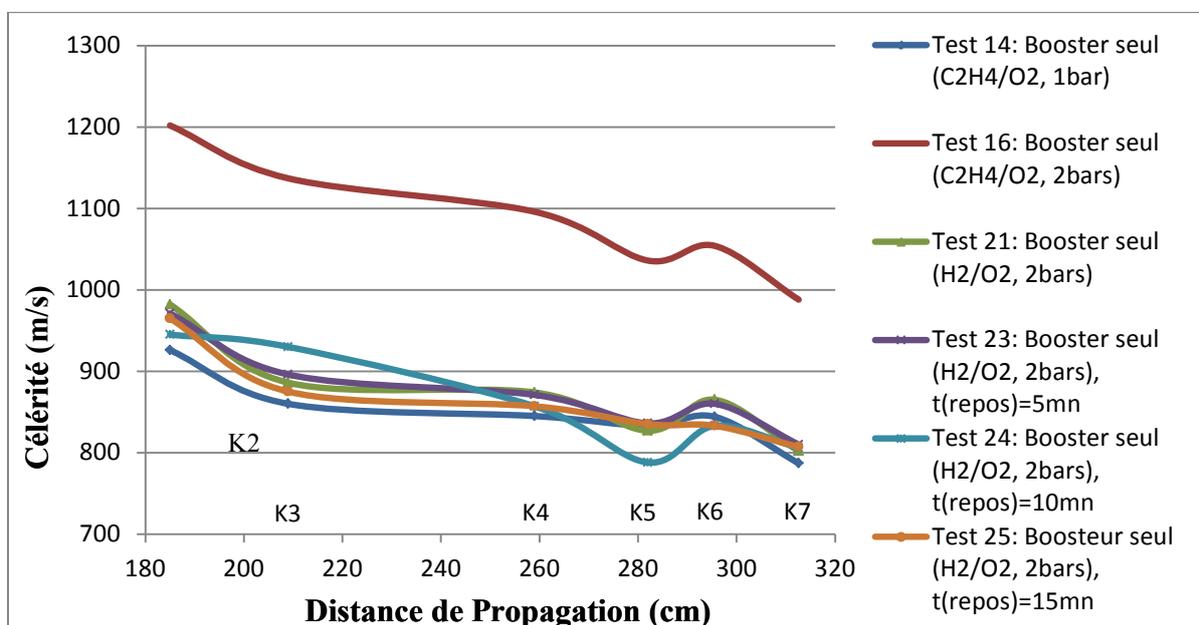


Fig. 4. 7 – Evolution de la célérité du choc généré dans le tube à détonation en fonction de la distance, dans le cas du booster seul contenant différents mélanges  $C_2H_4/O_2$  et  $H_2/O_2$  à  $r=1$

### Remarque à propos de l'évolution de la célérité de propagation du choc :

On peut remarquer sur la figure 4.7 une cassure dans la courbe de célérité entre les capteurs K4 et K5. Ce phénomène est observé lors de toutes les expériences et sera observé ensuite pour les célérités des ondes de détonation. La raison en est due, selon nous, au problème suivant : entre K4 et K5, se situe un très léger changement dans la section droite du tube à détonation. Avant ce changement, le tube carré a une forme arrondie dans les angles. Au delà, la chambre dans laquelle sont positionnées les plaques de suie (pour l'enregistrement des traces de Mach) présente des coins de forme aigüe (voir figure 4.8).

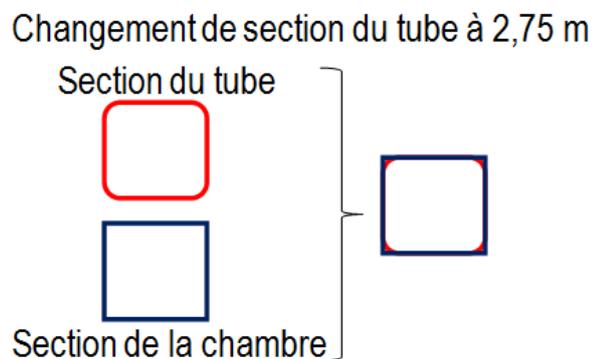


Fig. 4. 8 – Modification de la section du tube lors de l'entrée dans la chambre d'enregistrement

Cette légère modification dans le changement de section s'accompagne d'une faible augmentation de la section frontale : celle ci pourrait être la cause de la décélération supplémentaire de l'onde de choc qui serait provoquée par une légère détente de l'écoulement lors du changement de section. On peut remarquer qu'en tout état de cause ce phénomène n'a pas d'incidence sur le processus global d'atténuation du choc lors de sa propagation jusqu'à l'extrémité du tube.

Sur la figure 4.7, on observe aussi que même sous une pression initiale de 2 bars, les prémélanges  $H_2/O_2$  produisent une onde de choc dont la célérité est comparable à celle du prémélange  $C_2H_4/O_2$  sous seulement 1 bar de pression initiale. En revanche, avec un prémélange  $C_2H_4/O_2$  sous 2 bars de pression initiale, la célérité de choc produite est supérieure d'environ 200 m/s à celle de tous les autres prémélanges testés, pendant toute sa propagation dans le tube à détonation principal. En conséquence, le front de choc a une

amplitude plus élevée, ce qui est une situation a priori plus favorable à la transition choc-détonation pour l'initiation de la détonation. Dans nos expériences, c'est cette configuration qui sera utilisée pour les essais d'initiation de la détonation dans les mélanges biphasiques (sauf exceptions, qui seront signalées).

## **4.4 Conditions de propagation d'un régime de détonation autonome stationnaire**

Pour préciser les conditions d'établissement d'un régime de détonation autonome stationnaire dans le tube à détonation, nous avons procédé à une étude préliminaire en étudiant la propagation d'une détonation dans un mélange H<sub>2</sub>/air stœchiométrique.

### **4.4.1 Initiation de la détonation dans un mélange H<sub>2</sub>/air stœchiométrique par le processus de TDD**

Dans un premier temps, nous avons étudié la formation de la détonation dans un prémélange H<sub>2</sub>/air stœchiométrique introduit au préalable dans le tube à détonation et initié par une flamme (produite par un inflammateur électrique accélérée par une spirale de Schelkin).

#### **4.4.1.1 Célérité de détonation**

Sur la figure 4.9, on observe, dès le capteur K3, une évolution de la célérité de détonation vers un régime autonome et stationnaire ; les fluctuations de célérité restent inférieures à 5 %. La célérité moyenne mesurée dans nos expériences est de 1976 m/s (figure 4.9). Cette valeur est proche de celle trouvée par Matignon et al. (2000) dans les mêmes conditions opératoires.

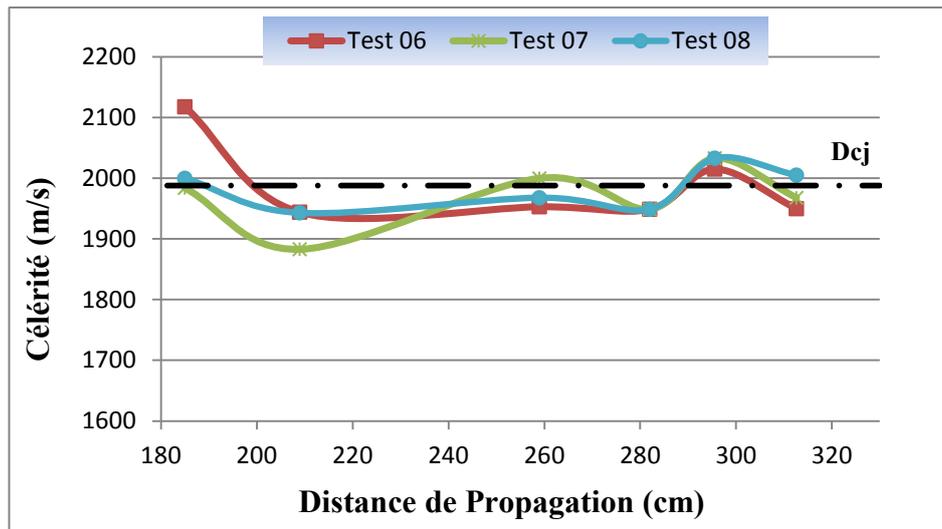


Fig. 4. 9 – Evolution de la célérité de détonation en fonction de la distance, pour les mélanges  $H_2$ /air stœchiométriques (initiation par inflammateur électrique et spirale de Schelkin)

La célérité de détonation idéale  $D_{CJ}$  obtenue avec le code thermochimique TDS (Victorov, 2001) est de 1988 m/s. Le déficit enregistré est donc de 0,6 %, ce qui représente un faible déficit par rapport à la valeur théorique CJ.

#### 4.4.1.2 Pression de détonation

La détermination de la pression de détonation sur les enregistrements expérimentaux de pression est une opération difficile. Généralement, la détermination graphique de la pression de détonation est obtenue par l'intersection du front de choc avec la droite reproduisant l'évolution moyenne du signal après le pic de pression (voir figure 4.10).

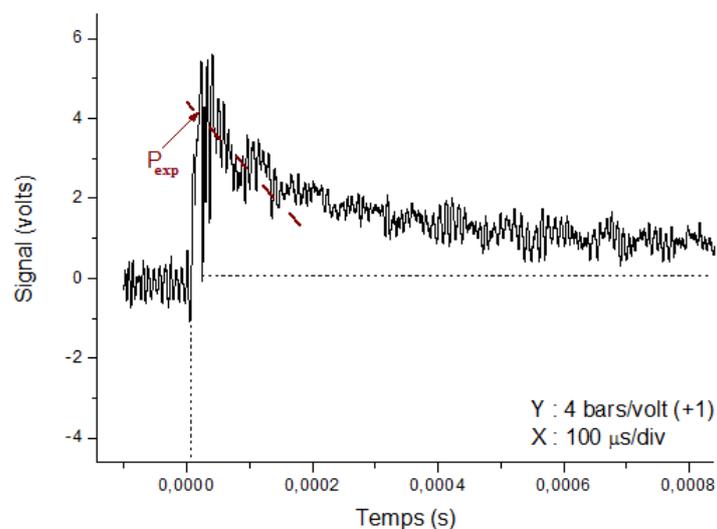


Fig. 4. 10 – Principe de détermination de la valeur expérimentale  $P_{exp}$  de la pression de détonation

Cependant, la détermination graphique de cette valeur présente de grandes difficultés car la distance immédiatement en aval du front de détonation comporte une plage plus ou moins importante où existent des fluctuations de la pression. La lecture d'une valeur de pression qui correspondrait à la pression de détonation au point CJ en fin de zone de réaction est donc difficile. Par ailleurs, dans le cas idéal d'une détonation CJ formée dès le point d'allumage en fond de tube, les produits de détonation se détendent en suivant la solution autosemblable de Taylor-Zeldovich. Mais dans les conditions expérimentales de nos expériences, la détente des produits en arrière du front de détonation est plus importante que celle prévue par la théorie de Taylor-Zeldovich.

D'autre part, en fonction de la taille de la cellule de détonation par rapport à la surface active du capteur (dont le diamètre est égal à 5 mm), l'identification des points correspondants aux pressions ZND et CJ est entachée d'incertitude. Si la taille de la cellule est plus petite que la surface active du capteur, la lecture des deux pressions caractéristiques sera possible, l'onde aura à priori tendance à être plane. En revanche, dans le cas où la taille de la cellule est grande, la position relative du capteur de pression par rapport à la trajectoire du point triple (qui laisse sa trace sous forme de la cellule de détonation) joue un rôle déterminant sur l'amplitude des pressions enregistrées au point de mesure. Un exemple de détermination de la pression expérimentale de détonation  $P_{exp}$  est indiqué sur la figure 4.11.

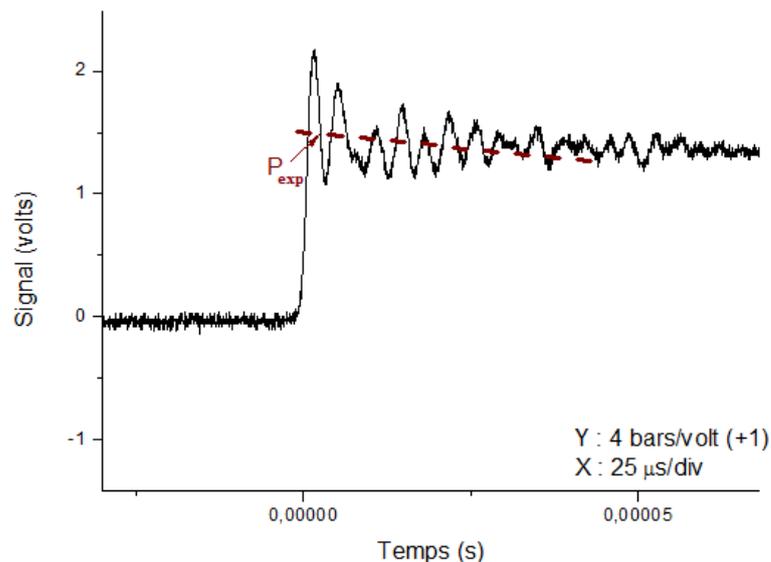


Fig. 4. 11 – Exemple de détermination de la pression de détonation expérimentale  $P_{exp}$

Dans le cas du mélange H<sub>2</sub>/air stœchiométrique, un exemple de profil de pression enregistré est montré sur la figure 4.12. On constate qu'avec la méthodologie décrite ci-dessus, la pression expérimentale P<sub>exp</sub> est de 15,4 bars, alors que la pression théorique P<sub>CJ</sub> est de 15,8 bars.

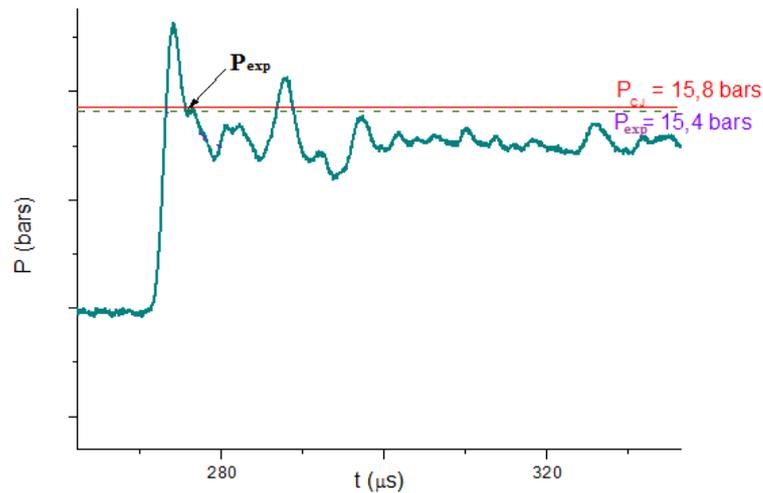


Fig. 4. 12 – Profil de pression du mélange gazeux H<sub>2</sub>/air stœchiométrique

#### 4.4.1.3 Structure cellulaire

Pour la caractérisation des structures cellulaires enregistrées, nous avons procédé à l'examen qualitatif du réseau de cellules et déterminé la largeur de cellule considérée comme représentative de cette structure. Pour le mélange gazeux H<sub>2</sub>/air, stœchiométrique, on observe (cf. fig. 4.13) une structure assez régulière dont la taille moyenne de cellule est d'environ  $\lambda \approx 10$  mm. Ces constatations sont en accord avec celles obtenues dans les travaux antérieurs (Matignon, 2000).

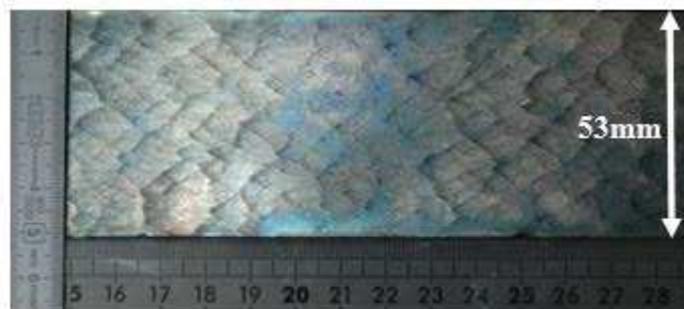


Fig. 4. 13– Enregistrement de la structure cellulaire de détonation dans le mélange stœchiométrique H<sub>2</sub>/Air

#### 4.4.2 Initiation de la détonation par l'onde de choc produite par le tube à détonation auxiliaire

Nous avons, dans un deuxième temps, étudié la formation de la détonation dans le prémélange H<sub>2</sub>/air stœchiométriques par l'onde de choc issue du tube à détonation auxiliaire décrit au chapitre 3 (cf. § 3.3).

Sur la Figure 4.14 sont reportées les célérités moyennes de détonation en fonction de la distance de propagation. On constate que dans tous les cas, la détonation est formée dès le capteur K2. On observe des fluctuations de célérité. Compte-tenu de la position des capteurs (cf. § 3.5.2, tableau 3.1), l'incertitude sur la détermination de la célérité moyenne est maximale dans la zone K5-K6 (les deux capteurs sont séparés par la distance la plus courte : 13,5 cm) et est d'environ 4%. On observe que l'amplitude des fluctuations est du même ordre de grandeur. Le régime de propagation est donc bien stationnaire en moyenne.

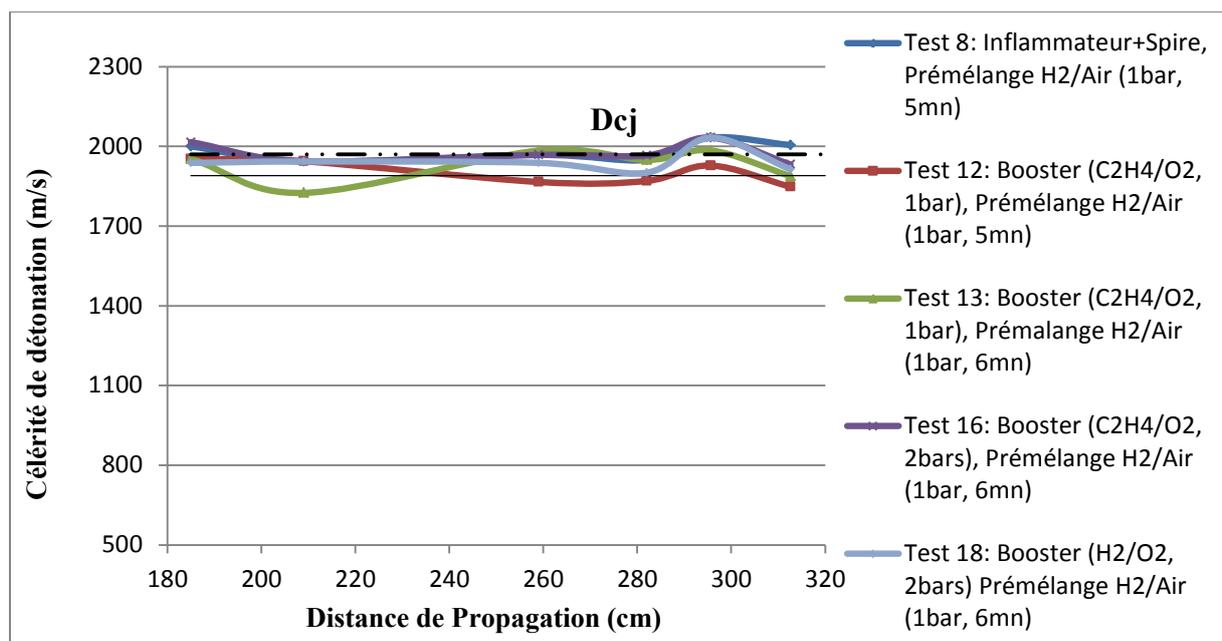


Fig. 4. 14 – Evolution de la célérité de détonation en fonction de la distance, dans le cas du tube principal contenant un prémélange H<sub>2</sub>/Air, pour différentes conditions d'amorçage de la détonation

On constate aussi que l'évolution de la célérité moyenne obtenue avec le choc produit par la détonation du prémélange C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> à 2 bars de pression initiale dans le booster, est celle qui est la plus proche de celle de la détonation produite par amorçage par le mécanisme de TDD examiné au paragraphe 4.4.1.1. La célérité moyenne de détonation du prémélange

H<sub>2</sub>/Air enregistrée dans ce cas ( $D_{\text{exp}} \approx 1976$  m/s) est en bon accord avec les résultats de la littérature, de même que la taille des cellules de détonation ( $\lambda \approx 10$  mm). Cela nous conduit à choisir cette configuration pour l'étude de l'initiation de la détonation dans les mélanges diphasiques qui sera exposée au chapitre 5.

### 4.4.3 Conclusions

Les résultats obtenus lors des expériences d'initiation de la détonation dans des mélanges stœchiométriques H<sub>2</sub>/Air, dans notre montage expérimental, ont montré que :

- avec un amorçage par le mécanisme de TDD, le régime de détonation est obtenu dès le capteur K2 situé à 1,85 m du bas du tube. Ensuite, la détonation peut être considérée comme autonome et stationnaire dans la partie terminale du tube (sur une distance d'environ 1,40 m)
- pour une initiation par choc à partir d'un tube à détonation auxiliaire (booster), la détonation du mélange H<sub>2</sub>/Air contenu dans le tube principal présente des caractéristiques très similaires, lorsque l'on utilise dans le booster un mélange C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> sous 2 bars de pression initiale. C'est cette configuration qui sera utilisée pour les expériences du chapitre 5.

## **Chapitre 5**

**Etude expérimentale de l'influence de la nature  
du carburant et de la composition de  
l'atmosphère gazeuse sur la détonation  
d'aérosols de carburants liquides**



## 5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons les résultats des expériences que nous avons effectuées en vue d'apporter des résultats nouveaux permettant d'approfondir la compréhension des mécanismes de propagation de la détonation dans les mélanges biphasiques d'aérosols de gouttelettes liquides dans une atmosphère gazeuse oxydante. Outre les mesures classiques relatives aux caractéristiques de la détonation (célérité et pression), nous avons cherché à mettre en évidence la structure tridimensionnelle cellulaire enregistrée pour ce type de détonation, puis de la comparer avec la structure observée dans le cas des mélanges homogènes gazeux.

Nos expériences ont été effectuées avec des aérosols ayant tous la même granulométrie de 30  $\mu\text{m}$ . L'influence de la taille des gouttelettes sur la détonation des aérosols de carburants liquides a fait l'objet d'une étude spécifique dont les résultats sont exposés dans la thèse de Mar (2012). Pour notre part, nous nous sommes intéressés à l'influence de :

- la nature du carburant : les carburants sélectionnés ont soit une volatilité élevée, soit une volatilité intermédiaire, soit sont très peu volatils (voir chapitre 2, § 2.3.1),
- la richesse du mélange,
- la dilution de la phase oxydante gazeuse par un gaz inerte,
- la nature du gaz inerte.

Les différents mélanges étudiés sont identifiés par la dénomination présentée au chapitre 2 (§ 2.4.2). Leurs caractéristiques théoriques de détonation ont été calculées par le code thermochimique TDS (Victorov, 2001), (cf. chapitre 2, § 2.4.2.2 et annexe 2).

Pour l'ensemble des expériences effectuées en tube à détonation, les conditions opératoires correspondantes sont présentées dans le tableau 5.1 (cf. chapitre 3) :

Dispositif d'atomisation	Dispositif d'amorçage			Conditions initiales de tir	
	Taille des gouttelettes liquides ( $\mu\text{m}$ )	Prémélange gazeux	Pression d'initiation (bars)	Inflammeur	Température (K)
30	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> à richesse 1	2	Electrique	293	1
Dimensions de la plaque de suie (Longueur x largeur), cm			(42 x 5,3)		

Tableau 5.1 – Conditions opératoires des essais effectués

## 5.2 Détonation dans les aérosols d'isooctane « M1 »

L'isooctane est un carburant liquide de la famille chimique des alcanes saturés (C<sub>n</sub>H<sub>2n+2</sub>) à chaîne ramifiée à huit carbones C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>.

Ses principales propriétés physico-chimiques sont regroupées dans le tableau 5.2 :

Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire g/mole	Densité (kg/m <sup>3</sup> )	Température d'ébullition (K)	Pression de vapeur saturante à 20 °C (kPa)
Isooctane	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	114	690	372	5,10

Tableau 5.2 – Principales propriétés physico-chimiques de l'isooctane

## 5.2.1 Mélanges iso-octane-air « M1-D0 »

Cette partie de l'étude expérimentale a été effectuée conjointement avec M. Mar (2012) qui a étudié l'influence de la taille de gouttes alors que nous avons étudié les effets de richesse et la nature des phases oxydante (dilution) et condensée (volatilité et poids moléculaire).

### 5.2.1.1 Mélange stœchiométrique iso-octane-air « M1-D0-1,0 »

#### Formation de la détonation

Sur la figure 5.1, on a représenté les profils de pression enregistrés sur les capteurs K1, K2, K3, K4, K5, K6 et K7 ainsi que le diagramme de marche correspondant lors de la propagation de la détonation du mélange réactif « M1-D0-1,0 ».

On constate que le régime de détonation est atteint, dès le capteur K1, et que la célérité moyenne du choc reste constante tout le long du tube. Les profils de pression présentent des fluctuations juste derrière le front incident.

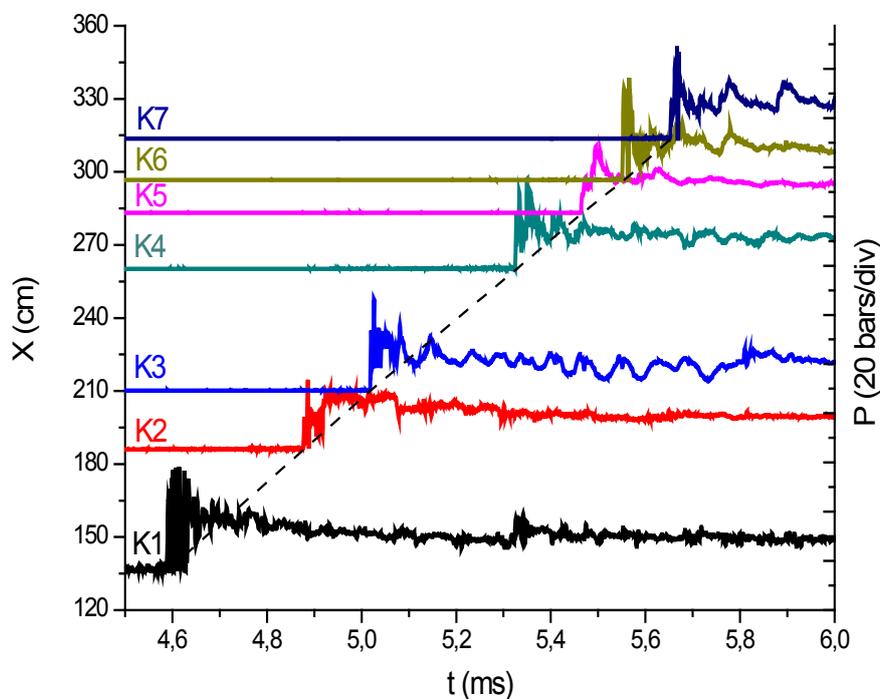


Fig. 5. 1 – Profils de pression et diagramme de marche enregistrés sur les capteurs K1, K2, K3, K4, K5, K6 et K7 de la détonation du mélange stœchiométrique « M1-D0-1,0 »

## Remarques :

1 - Sur cette première série d'expériences, on peut s'interroger sur l'origine des fluctuations de célérité et de pression observées au cours de la propagation. Il convient de remarquer que, du fait du mode de fabrication du mélange biphasique et de remplissage du tube à détonation, on ne peut exclure l'existence de gradients de concentration en gouttelettes, aussi bien longitudinaux que radiaux. En effet, les instabilités de fonctionnement des atomiseurs peuvent entraîner des non-uniformités de concentration dans le tube au cours de son remplissage. En dépit du contrôle de la concentration en gouttelettes, par l'opacimètre situé dans le bas du tube au-dessus de l'atomiseur (cf. chapitre 3), on n'a pas la garantie d'une uniformité de composition du mélange le long du tube, de qualité équivalente à celle qui existe pour les expériences de détonation dans les prémélanges gazeux.

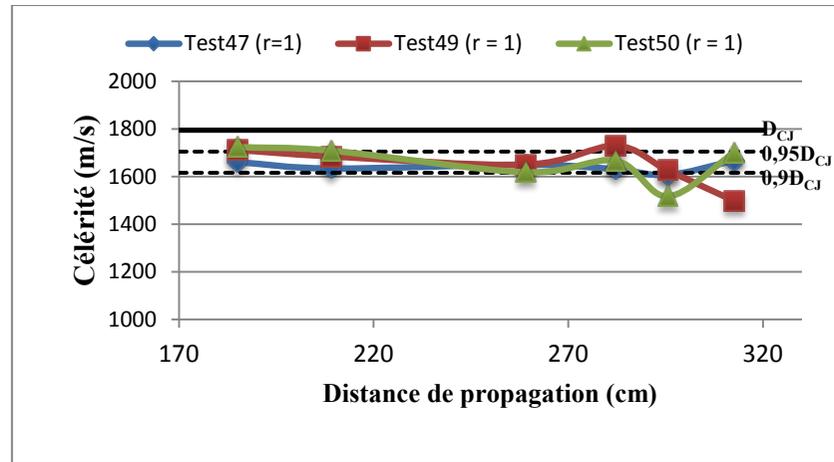
Cette remarque a une portée générale, valable pour toutes les expériences qui seront effectuées dans les mélanges hétérogènes considérés dans ce travail. Il convient de garder à l'esprit ce problème, intrinsèque à la méthodologie expérimentale, lors de l'interprétation des résultats expérimentaux.

2 – une autre cause probable des instabilités est due au nombre limité de cellules de détonations (une demi à une cellule dans la section du canal) qu'on a observé dans la plupart des expériences. Nous reviendrons sur ce problème dans la suite du chapitre.

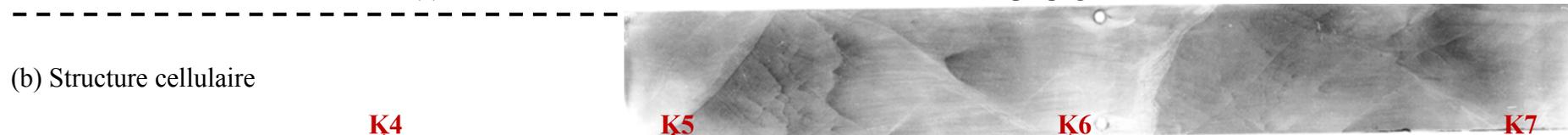
## Caractéristiques de détonation

Sur la Figure 5.2, qui correspond au mélange stœchiométrique M1-D0-1,0, on observe que la célérité moyenne de propagation  $D_{\text{exp}}$  est telle que  $0,90D_{\text{CJ}} < D_{\text{exp}} < 0,95D_{\text{CJ}}$ . Les enregistrements de plaques de suie montrent l'existence d'une structure de type "demi-cellule". Cette structure est assez reproductible. La taille de la cellule complète que l'on peut déduire par extrapolation est  $\lambda \approx 106 \pm 10$  mm. On peut observer aussi au début de ces demi-cellules des sous structures constitués de petites cellules, mais pas systématiquement.

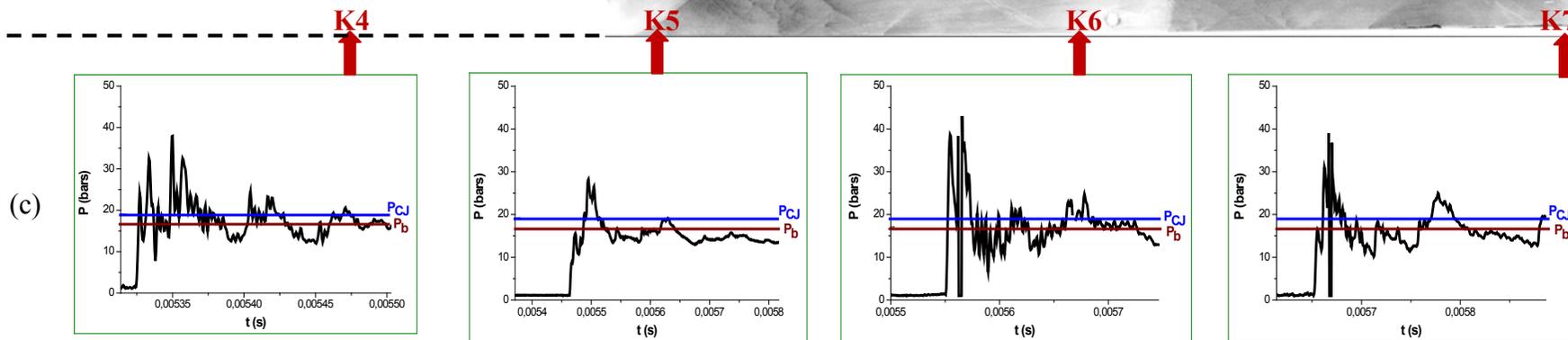
Les enregistrements de pression de la Figure 5.2 indiquent que la pression moyenne  $P_{\text{exp}}$  juste derrière le front est comprise entre  $0,90P_{\text{CJ}} < P_{\text{exp}} < 0,95P_{\text{CJ}}$ , à partir de K5, avec d'importantes fluctuations, qui peuvent être induites par les collisions périodiques des points triples avec les parois du tube. L'ensemble de ces observations indique que le régime observé est celui d'une détonation proche du régime limite de propagation.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 2 – Mélange M1-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

### 5.2.1.2 Influence de la richesse

#### Mélanges très pauvres : $r < 0,7$

Dans ces mélanges, l'onde de choc provenant du booster s'atténue au cours de sa propagation dans le tube, la célérité passant de 1250 m/s en K2 à 1000 m/s en K7 (cf. Figure 5.3). Aucune structure cellulaire n'est enregistrée sur les plaques de suie. Il n'y a pas de détonation.

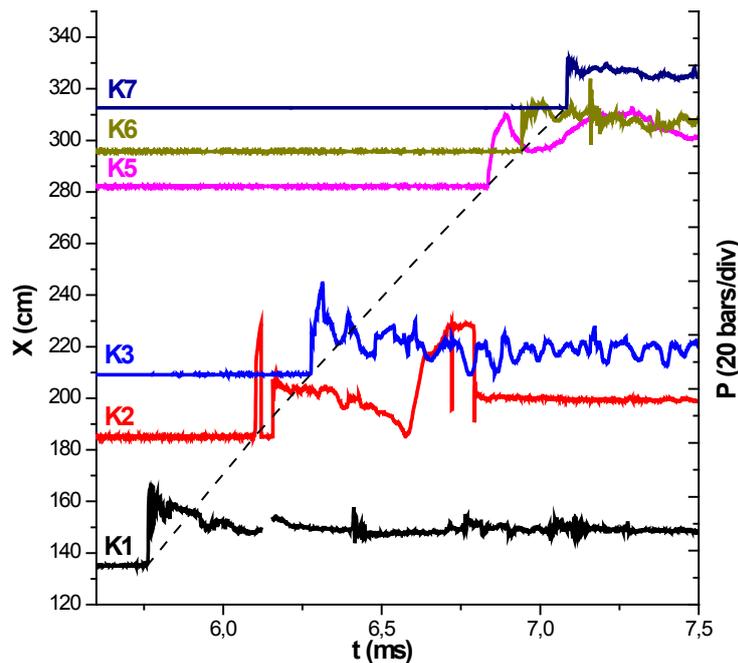


Fig. 5. 3 – Profils de pression et diagramme de marche enregistrés sur les capteurs K1, K2, K3, K4, K5, K6 et K7 de la détonation du mélange stœchiométrique « M1-D0-0,6 »

Les différentes expériences que nous avons effectuées, nous ont conduit à la conclusion que dans la configuration de notre montage, la limite inférieure de détonabilité des mélanges M1-D0 était autour de la richesse  $r = 0,7$ .

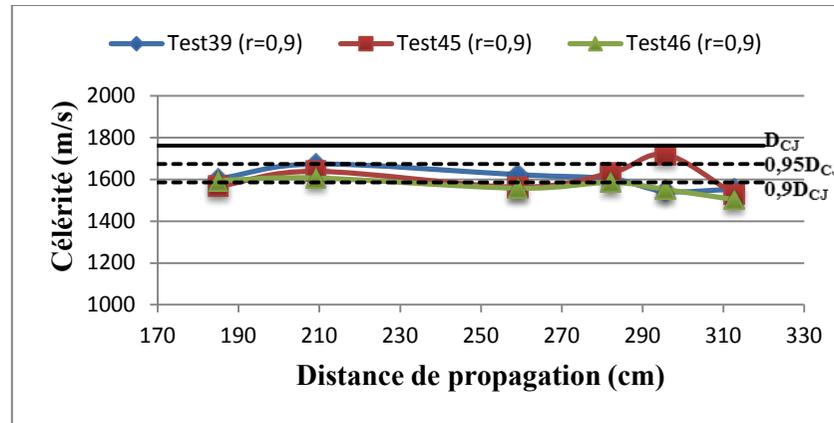
### Mélanges pauvres : $0,7 \leq r \leq 0,9$

Sur la Figure 5.4, nous avons rassemblé les résultats des expériences effectuées dans le mélange M1-D0-0,9 :

- la célérité devient quasi-constante après K3 et la valeur moyenne de la célérité s'établit à environ  $D_{\text{exp}} \approx 0,9D_{\text{CJ}}$ .
- la valeur de  $P_{\text{exp}}$  est difficile à déterminer. Comme cela a déjà été mentionné dans le paragraphe 4.4.1.2, l'interprétation des fluctuations des signaux de pression est difficile car, aux instabilités dues à la dynamique propre du front de détonation, viennent s'ajouter les effets dus à l'hétérogénéité du milieu et à l'existence de gradients composition. Il n'est malheureusement pas possible de déterminer l'influence propre à chacun de ces effets sur la forme des signaux de pression. On observe en K5, K6 et K7, dans l'écoulement derrière le front incident, des sauts de pression importants et de niveaux très supérieurs à  $P_{\text{CJ}}$ . Ces évolutions sont à mettre en relation avec l'observation du régime de détonation hélicoïdale (voir ci-dessous).
- Sur les plaques de suie, on observe les traces caractéristiques d'un régime de propagation hélicoïdal, qui se traduisent par des bandes inclinées. Le pas de l'hélice enregistré sur les plaques est évalué à  $P_h \approx 192$  mm, ce qui correspond à 90% du périmètre du tube (section carrée 53 mm x 53 mm). On peut aussi le formuler suivant la corrélation  $P_h \approx 4.h$  (où  $h$  est la section du tube). L'angle d'inclinaison des bandes par rapport à la direction de propagation est  $\alpha \approx 40-50^\circ$ . Ces constatations témoignent bien de l'existence d'un régime hélicoïdal, et sont en accord avec la forme des signaux de pression enregistrés au front en K5 – K7.

On observe aussi, en divers endroits entre les bandes, des structures de type cellulaire de tailles diverses, le plus souvent de l'ordre de 10 mm. Nous pensons qu'elles pourraient être attribuées à l'existence de poches d'isooctane présent sous forme vapeur. La présence de zones où une partie de l'isooctane est vaporisée est hautement probable, compte tenu de la faible valeur de la température d'évaporation de l'isooctane à pression ambiante  $T_{\text{vap}} = 99$  °C.

Les résultats des expériences obtenues avec les mélanges M1-D0-0,7 et les mélanges M1-D0-0,8 sont très similaires à ceux des mélanges M1-D0-0,9 (cf. Annexe 3).



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

(b) Structure cellulaire

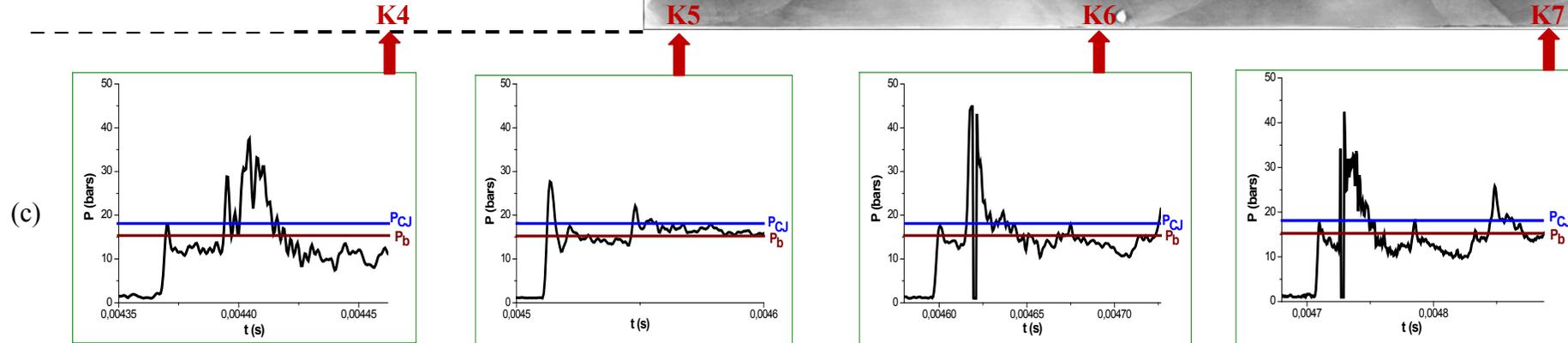
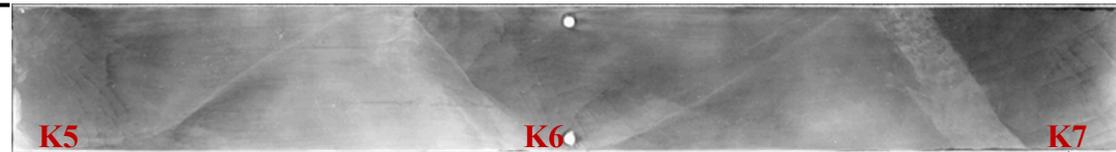


Fig. 5. 4 – Mélange M1-D0-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

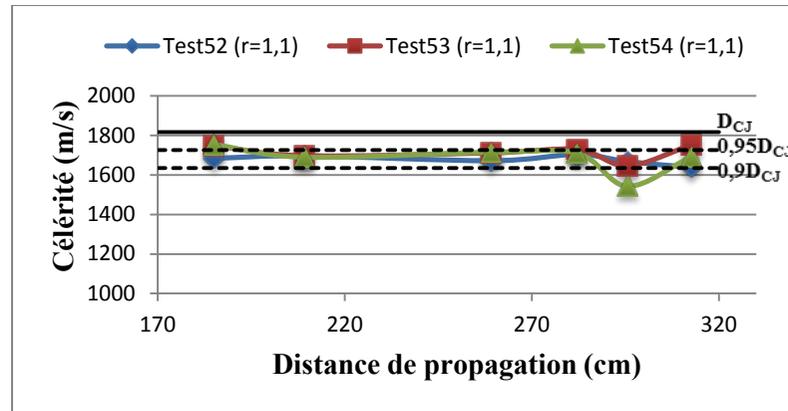
### **Mélanges stœchiométriques ou légèrement riches : $1 \leq r \leq 1,1$**

Sur la figure 5.5 sont reportés les résultats des expériences effectuées dans le mélange « M1-D0-1,1 ». On retrouve des résultats très similaires à ceux observés dans le mélange « M1-D0-1,0 », en particulier la structure de type demi-cellule. Ces observations indiquent que le régime de détonation observé dans ces mélanges est un régime de transition entre la détonation hélicoïdale et la détonation à structure cellulaire complète.

### **Mélanges riches : $r \geq 1,2$**

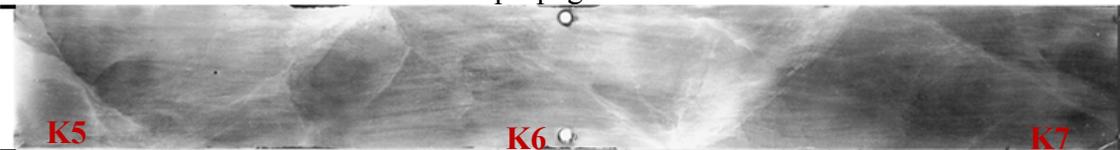
Les caractéristiques des détonations de mélanges M1-D0 riches sont illustrées sur quelques exemples montrés sur les Figures 5.6 (M1-D0-1,3), 5.7 (M1-D0-1,4) et 5.8 (M1-D0-1,7) et en annexe 3 où sont représentés les résultats des expériences relatives aux mélanges « M1-D0-1,2 », « M1-D0-1,5 » et « M1-D0-1,6 ».

Comme le montrent les Figures 5.6 à 5.8, la détonation de ces mélanges présente une structure franchement cellulaire avec des cellules complètes, contrairement au cas précédent. On constate que le déficit de la célérité moyenne de détonation tend à être de plus en plus faible par rapport à la valeur théorique  $D_{CJ}$ . Il est de l'ordre de 6% pour le mélange M1-D0-1,3, mais est d'à peine 2% pour le mélange M1-D0-1,4. La taille de la structure cellulaire diminue lorsque la richesse augmente et passe par un minimum pour la richesse 1,4, avant d'augmenter de nouveau.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

(b) Structure cellulaire



(c)

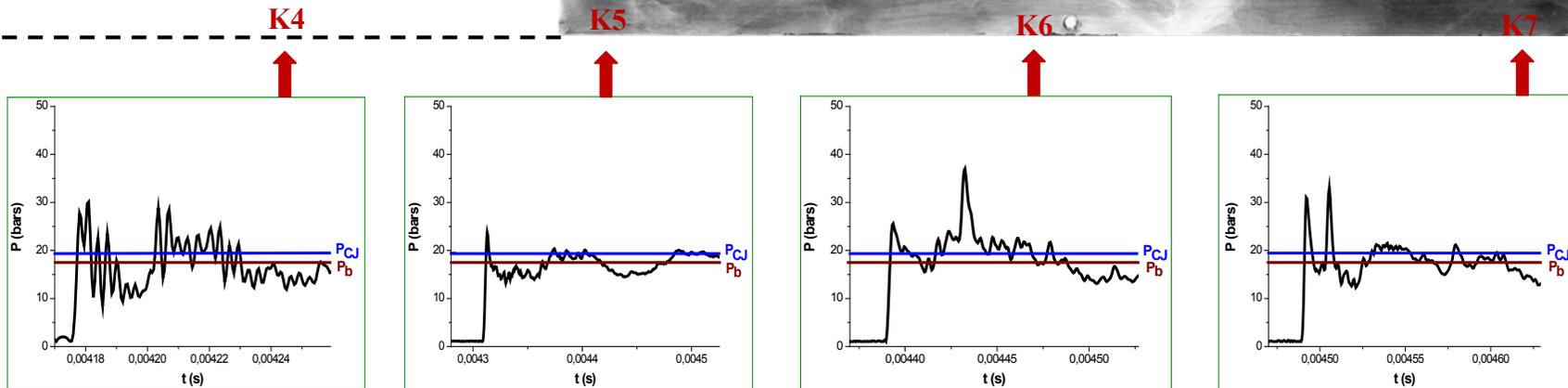
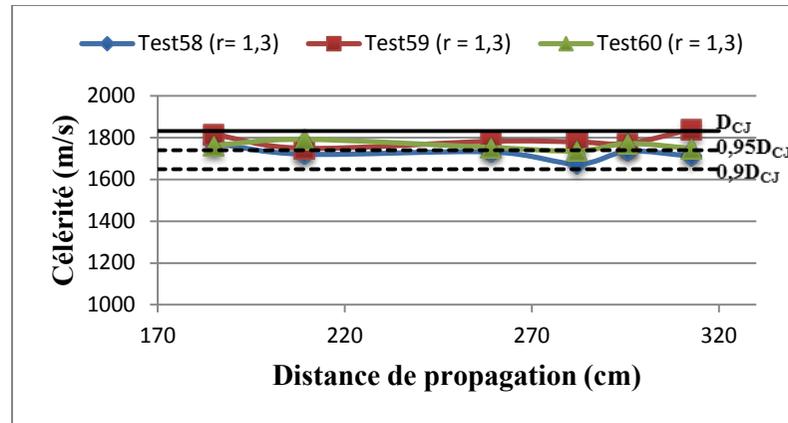


Fig. 5. 5 – Mélange M1-D0-1,1 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

(b) Structure cellulaire

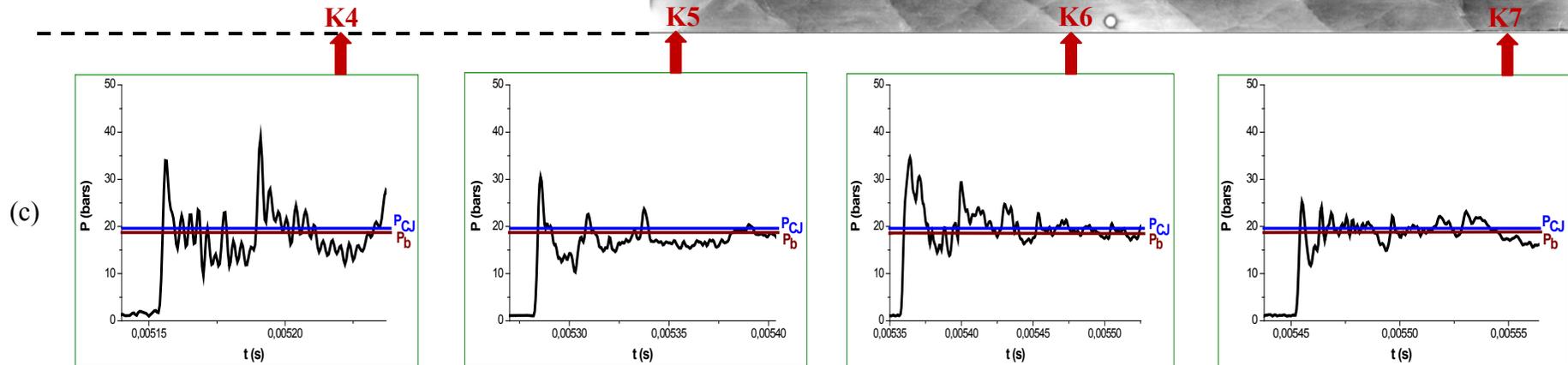
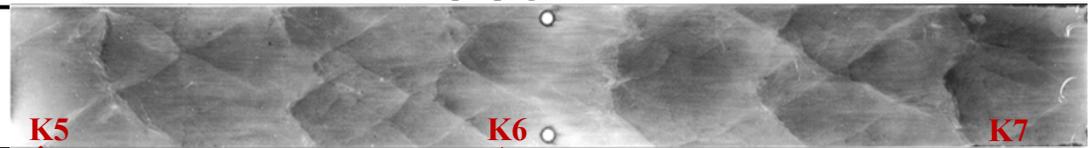
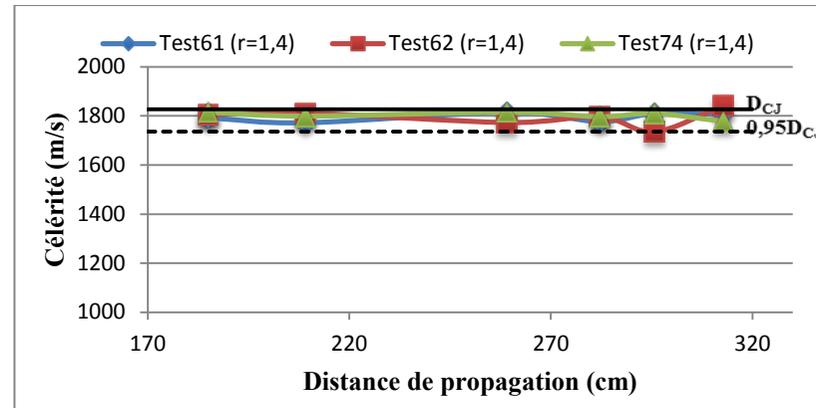


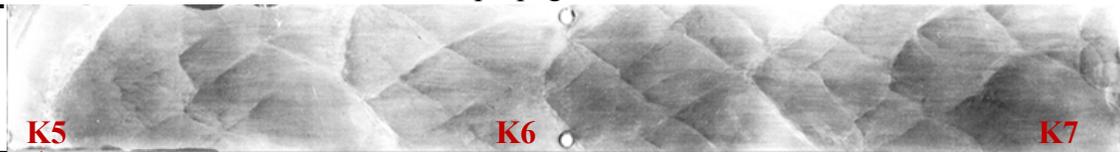
Fig. 5. 6 – Mélange M1-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

(b) Structure cellulaire



(c)

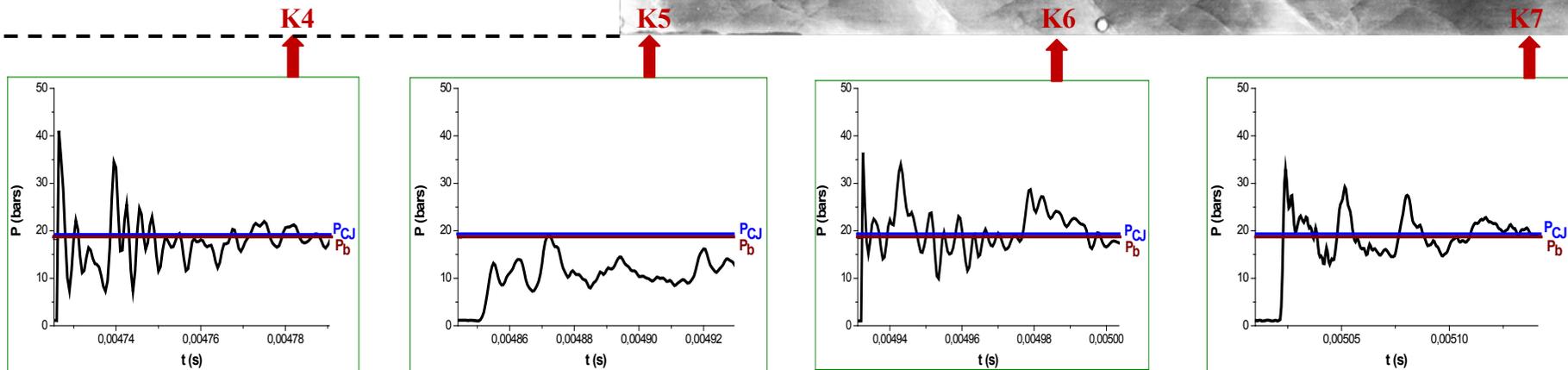
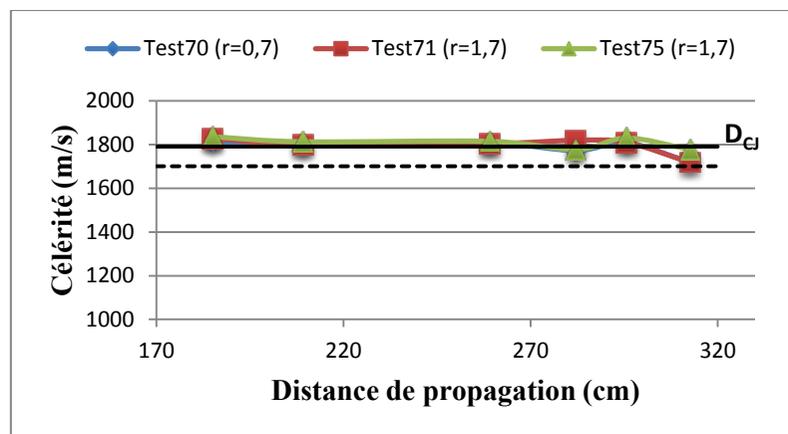


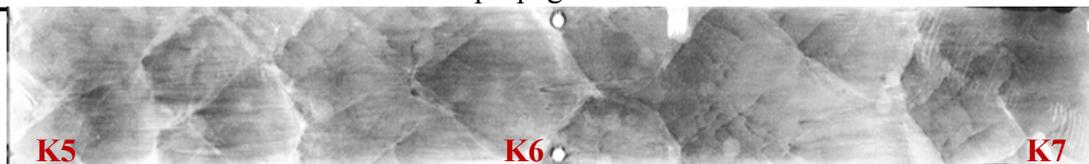
Fig. 5. 7 – Mélange M1-D0-1,4 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

(b) Structure cellulaire



(c)

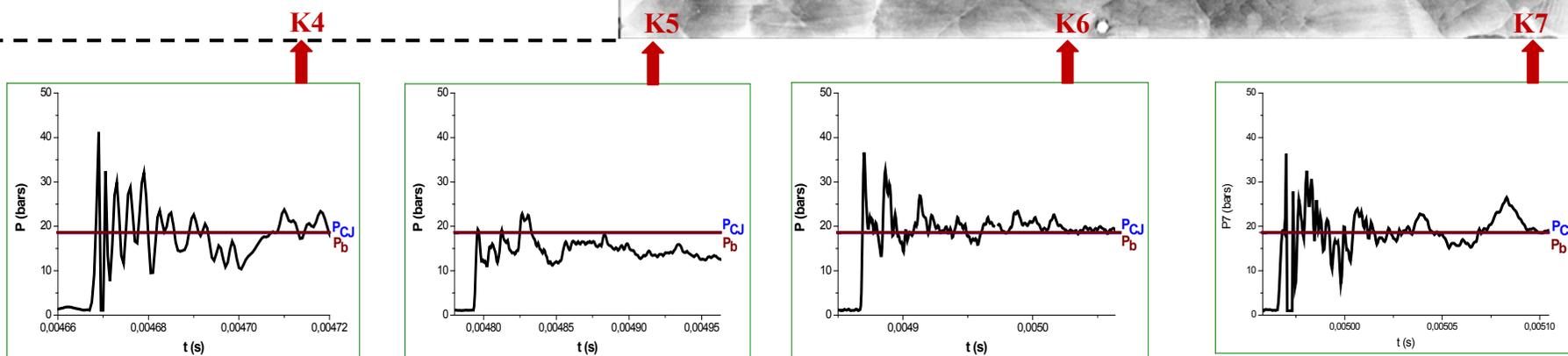


Fig. 5. 8 – Mélange M1-D0-1,7 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

### 5.2.1.3 Synthèse des résultats pour les mélanges M1-D0 en fonction de la richesse

#### Célérité moyenne de détonation

L'évolution de la célérité moyenne de détonation déterminée expérimentalement  $D_{exp}$  en fonction de la richesse des mélanges M1-D0 est montrée sur la Figure 5.9. On peut voir qu'aux faibles richesses, l'écart entre  $D_{exp}$  et  $D_{CJ}$  est de l'ordre de 8% et même de 10% (près de la limite inférieure de détonabilité). Cet écart diminue lorsque la richesse augmente (6% à la stœchiométrie) pour devenir quasiment nul pour des richesses de l'ordre 1,6 et 1,7 où la célérité moyenne est maximale et devient quasiment constante. On peut voir aussi que pour les mélanges de richesse plus élevée ( $r \geq 2$ ) la valeur  $D_{exp}$  déduite des expériences devient supérieure à la valeur théorique  $D_{CJ}$ . Il ne nous semble pas que l'on puisse expliquer cette "anomalie" par la dispersion des résultats expérimentaux ou l'incertitude sur la composition des mélanges. On peut rapprocher cette observation de celles effectuées antérieurement par divers auteurs (Bull et *al* (1981), Frolov (2005)) et qui tendaient à conclure que la limite supérieure de détonabilité dans les mélanges diphasiques ne pouvait être observée que pour des mélanges de richesses très élevées, voire même n'existait pas (Frolov, 2005).

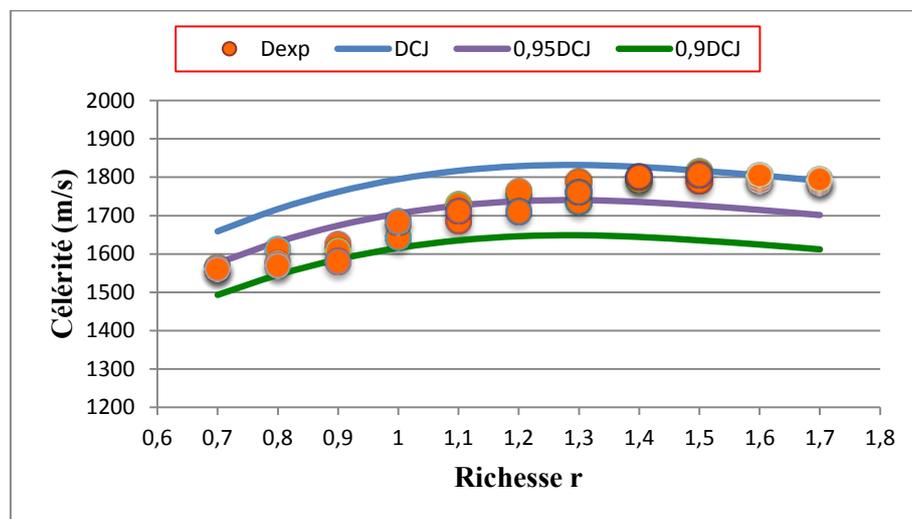


Fig. 5. 9 – Variations de la célérité moyenne de détonation mesurée  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/air « M1-D0 »

#### Pression moyenne de détonation

Les pressions moyennes de détonation enregistrées juste à l'arrière du front incident en fonction de la richesse sont représentées sur la figure 5.10 et comparées aux valeurs théoriques CJ.

On constate une évolution similaire à celle de la célérité moyenne de détonation.

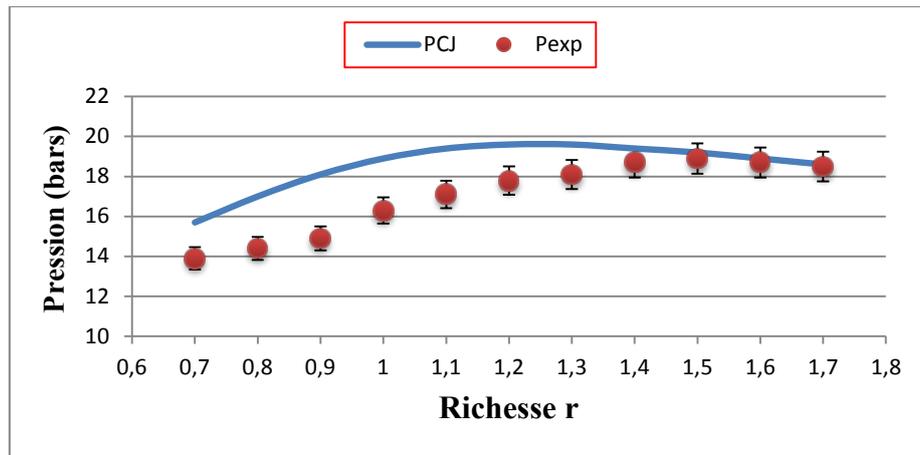


Fig. 5. 10 – Variations de la pression moyenne de détonation mesurée  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif iso-octane/air « M1-D0 »

### Structure cellulaire

Les enregistrements de la structure cellulaire de détonation effectués pour des richesses supérieures à  $r = 1,4$  confirment les observations faites au paragraphe 5.2.1.2 pour les mélanges riches (M1-D0-1,2 à M1-D0-1,7). La taille moyenne de la cellule après une décroissance continue ( $\lambda \approx 40$  mm pour les mélanges M1-D0-1,4), croit de nouveau lorsqu'on augmente la richesse pour atteindre la valeur  $\lambda \approx 62$  mm pour  $r = 2$  (mélange M1-D0-2), en passant par  $\lambda \approx 58$  mm à  $r = 1,7$  (mélange M1-D0-1,7), comme le montre la Figure 5.11.

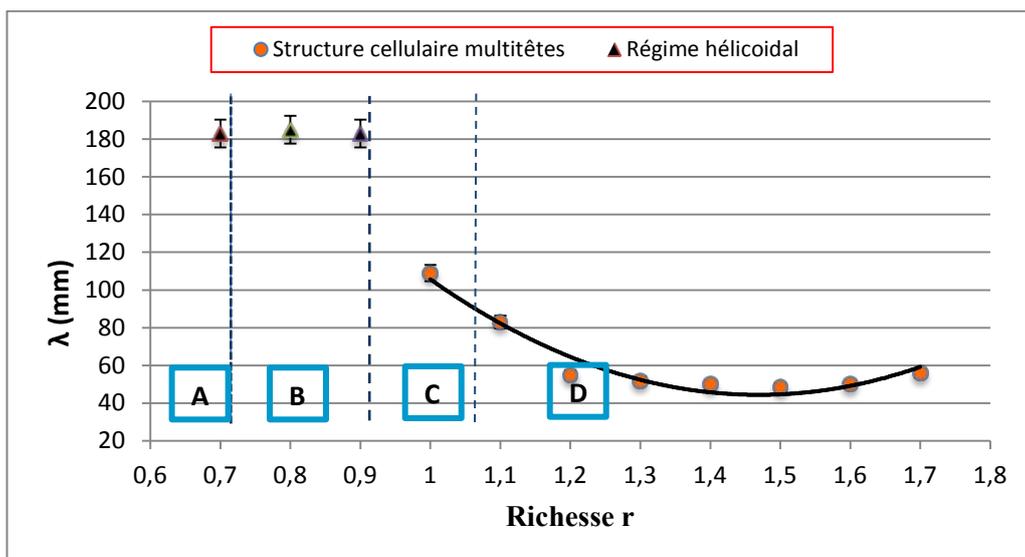


Fig. 5. 11 – Variations de la taille  $\lambda$  des cellules de détonation en fonction de la richesse des mélanges réactifs iso-octane/air (293 K, 1 bar) « M1-D0 »

- zone A  $\rightarrow r < 0,7$  : en dehors du domaine de détonabilité,
- zone B  $\rightarrow 0,7 \leq r \leq 0,9$  : régime de détonation hélicoïdale,
- zone C  $\rightarrow 0,9 < r < 1,1$  : régime de transition de la détonation hélicoïdale à la détonation cellulaire,
- zone D  $\rightarrow r \geq 1,1$  : régime de détonation à structure cellulaire.

### 5.2.2 Influence de la dilution : Isooctane/(O<sub>2</sub> + βN<sub>2</sub>)

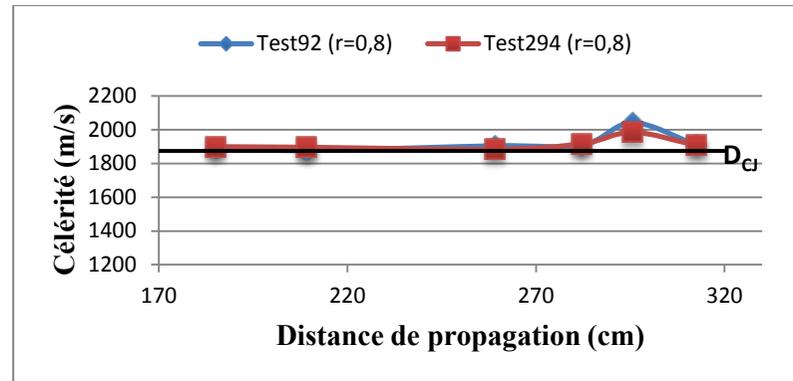
Nous avons effectué des expériences en faisant varier le rapport de dilution  $\beta = N_2/O_2$  du mélange oxydant gazeux. Deux rapports de dilutions autres que celui de l'air ( $\beta = 3,76$ , mélanges M1-D0) ont été testés (voir tableau 2.5) :

- $\beta = 2$  correspondant aux mélanges M1-D1,
- $\beta = 1$  correspondant aux mélanges M1-D2.

#### Dilution $\beta = 2$ :

Un exemple de résultats est montré sur la figure 5.12 qui correspond au mélange M1-D1-0,8. Les résultats obtenus pour les richesses autres que 0,8 (jusqu'à  $r = 1,2$ ) sont rassemblés en annexe 3.

On constate que le régime de détonation est quasi-stationnaire dès le capteur K3 et que la détonation semble plus stable que dans le cas de l'air. Il n'y a pratiquement pas de déficit de célérité. La structure cellulaire est plus régulière et la taille des cellules diminue avec l'augmentation de la richesse.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

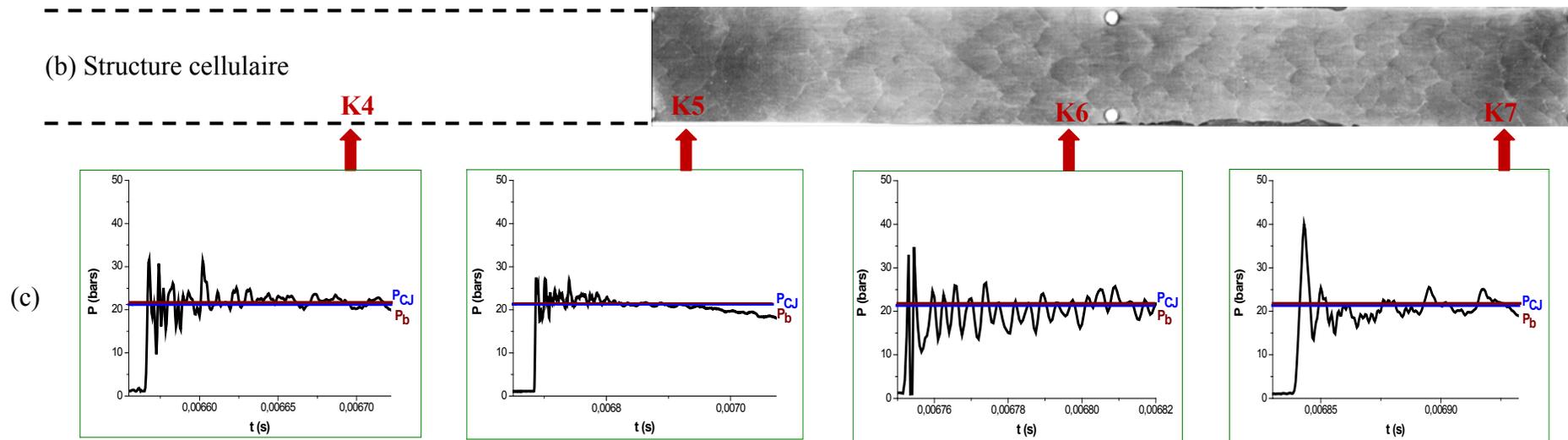


Fig. 5. 12 – Mélange M1-D1-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

Les variations de la célérité de détonation, de la pression et de la structure cellulaire sont représentées sur les figures 5.13, 5.14 et 5.15 respectivement.

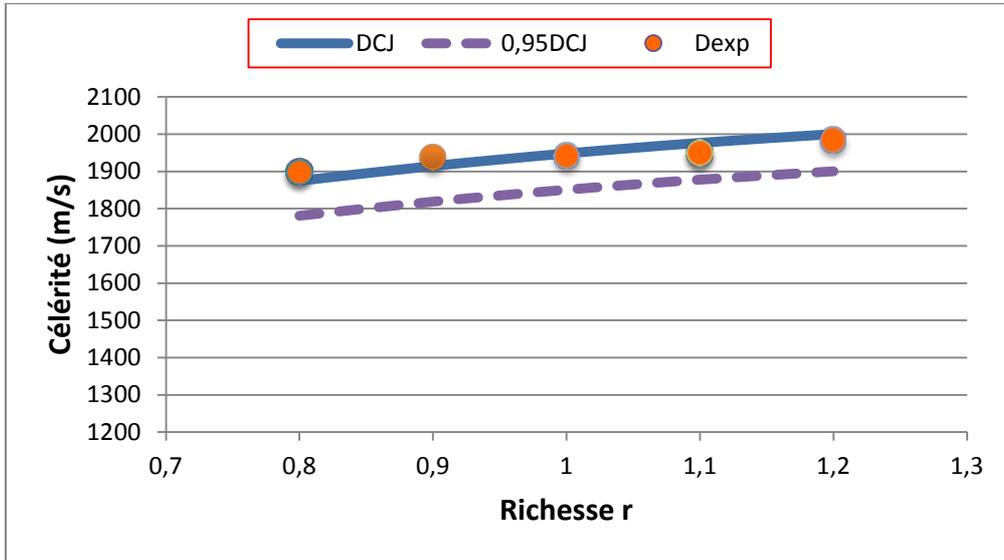


Fig. 5. 13 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/ $(O_2+2N_2)$ , « M1-D1 »

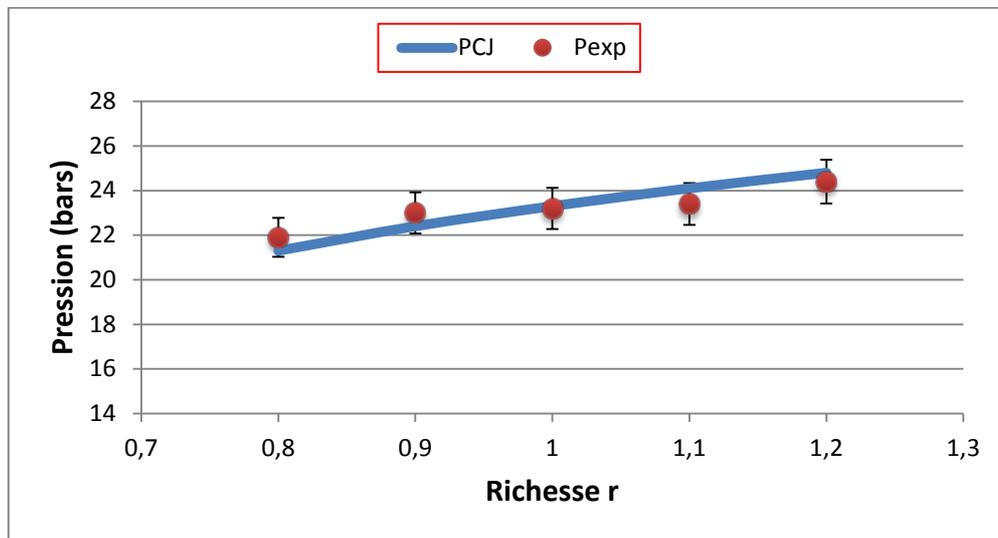


Fig. 5. 14 – Variations de la pression moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/ $(O_2+2N_2)$ , « M1-D1 »

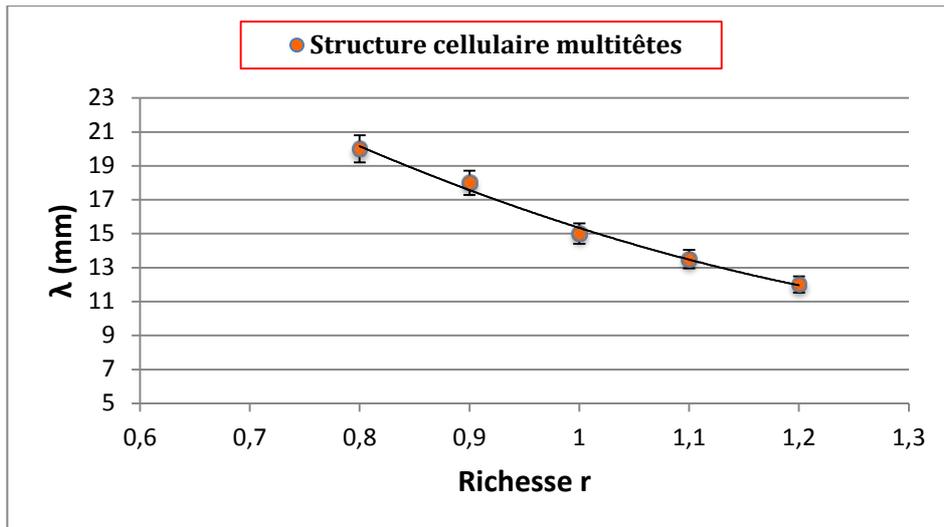


Fig. 5. 15 – Variations de la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/(O<sub>2</sub>+2N<sub>2</sub>), « M1-D1 »

Dans le cas de la dilution  $\beta = 2$ , seule la structure cellulaire multitête est observée (pas de régime à demi-cellule ni de détonation hélicoïdale).

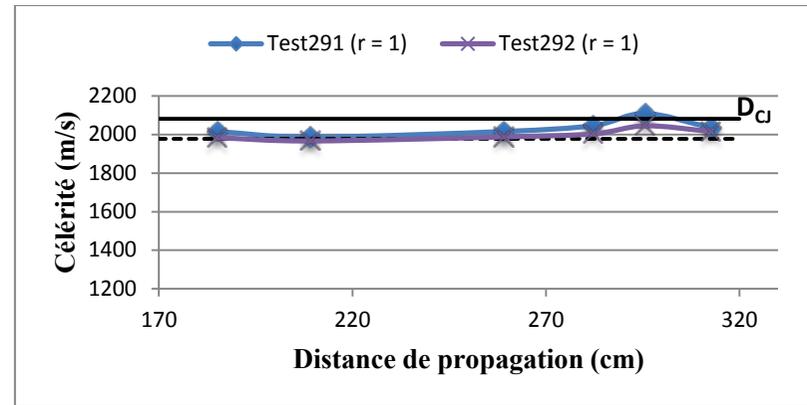
Par ailleurs, dans le cas d'une dilution D0, on a vu plus haut que la limite inférieure de détonabilité était entre les richesses 0,6 et 0,7. Le test réalisé à  $r = 0,6$  mais à la dilution  $\beta = 2$  montre que la détonation peut se propager - voir la figure 5.16 - où l'on observe clairement la présence de cellules sur la plaque de suie avec une taille moyenne  $\lambda = 35 \pm 15$  mm. Donc, la limite inférieure de détonabilité diminue (la richesse seuil diminue) quand le rapport de dilution  $\beta$  diminue.



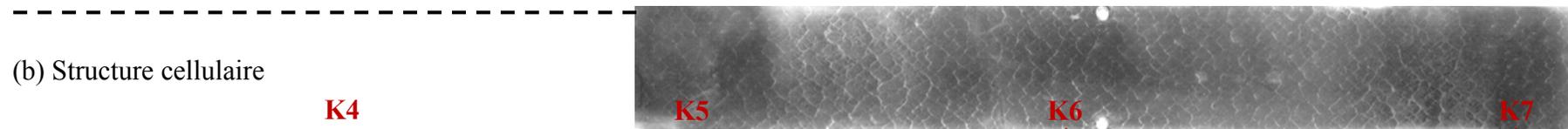
Fig. 5. 16 – Structure cellulaire multitêtes du mélange isooctane/(O<sub>2</sub>+2N<sub>2</sub>) à richesse 0,6

### Dilution $\beta = 1$ :

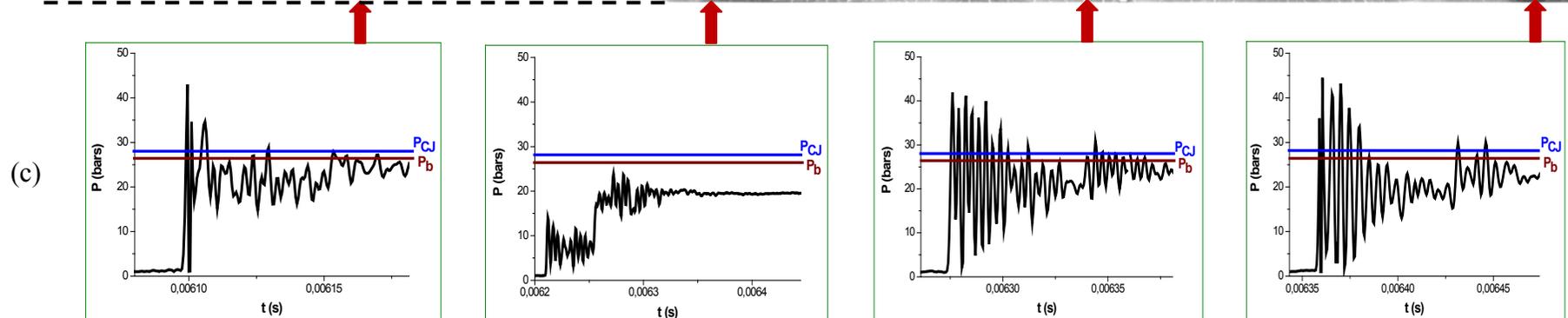
Les résultats sont très similaires à ceux obtenus avec la dilution  $\beta = 2$ . Un exemple de résultats est montré sur la figure 5.17 dans le cas du mélange stœchiométrique M1-D2-1,0. Comme on pouvait s'y attendre, la taille des cellules est plus petite que pour les mélanges de dilution  $\beta = 2$ .



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 17 – Mélange M1-D2-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

Les variations de la célérité de détonation, de la pression et de la structure cellulaire sont représentées sur les figures 5.18, 5.19 et 5.20 respectivement.

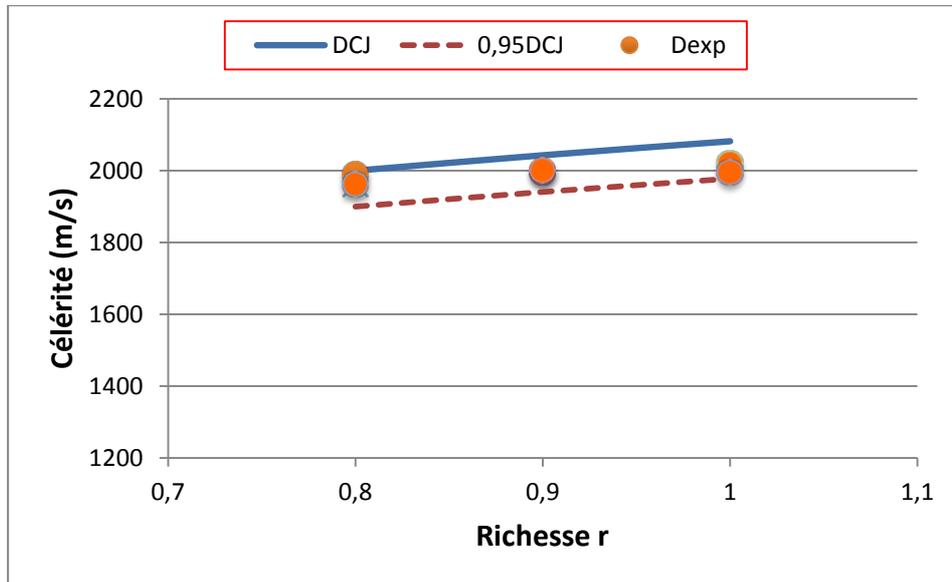


Fig. 5. 18 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif iso-octane/( $O_2+N_2$ ), « M1-D2 »

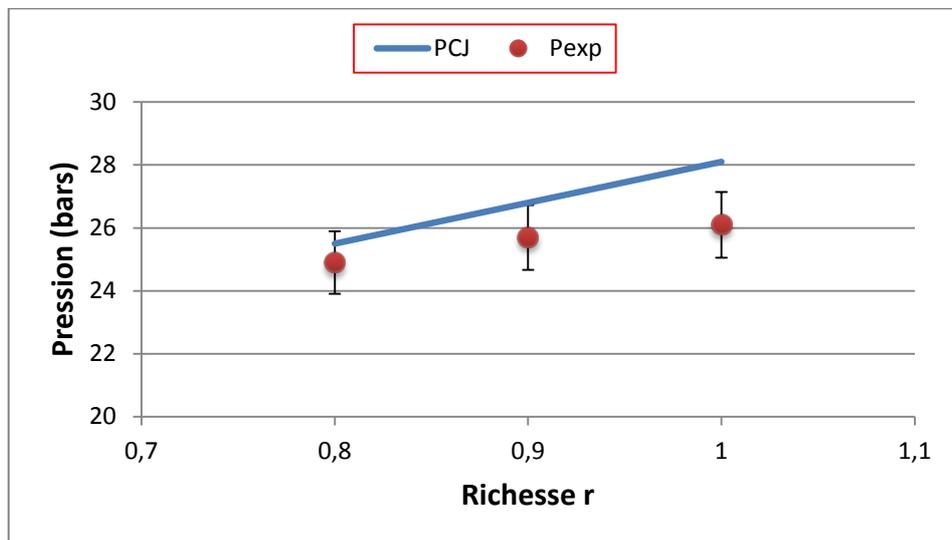


Fig. 5. 19 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif iso-octane/( $O_2+N_2$ ), « M1-D2 »

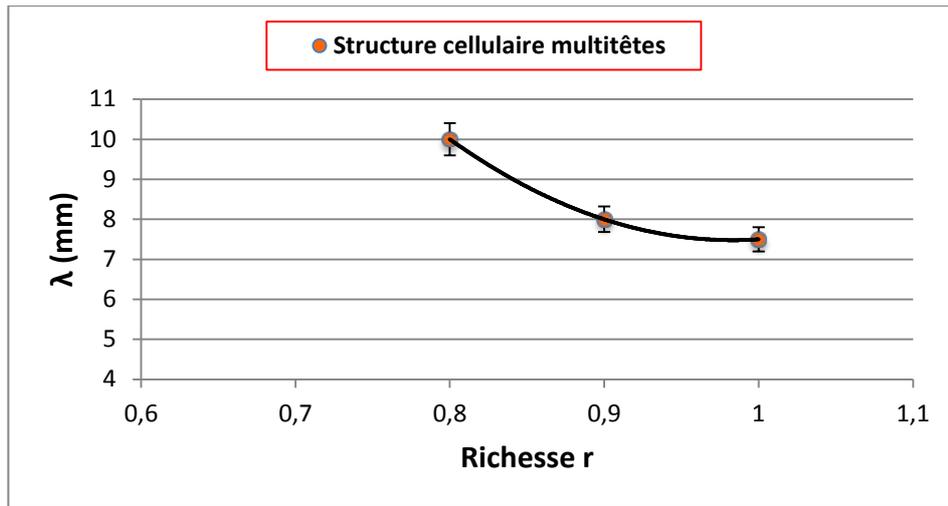


Fig. 5. 20 – Variations de la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/(O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>), « M1-D2 »

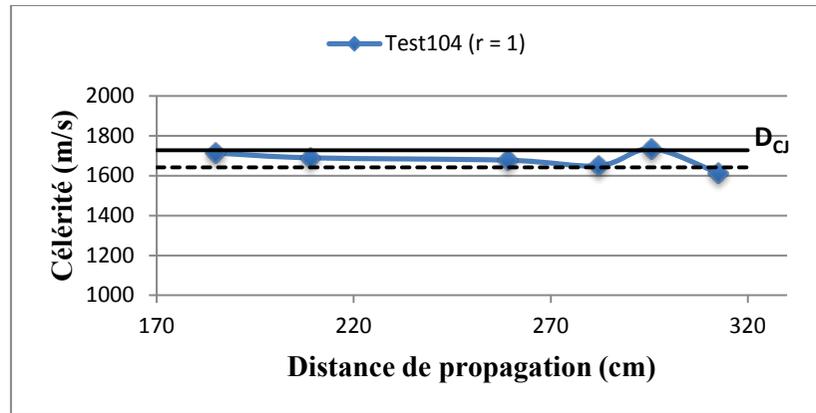
### 5.2.3 Influence de la nature du diluant

Nous avons effectué quelques expériences en remplaçant l'azote par de l'Argon (gaz monoatomique) dans le mélange gazeux oxydant.

Les résultats obtenus dans le cas de mélanges stœchiométriques « M1-D3-1,0 » (pour un rapport de dilution  $\beta = 3,76$ ) et « M1-D4-1,0 » (pour un rapport de dilution  $\beta = 2$ ) sont rassemblés dans les figures 5.21 et 5.22.

On observe que pour le mélange « M1-D4-1,0 » des variations de la célérité de détonation le long du tube sont beaucoup plus petites que dans les cas précédents. Les déficits par rapport à la célérité idéale CJ sont de 2 % pour la dilution  $\beta = 3,76$  et 1,3 % pour la dilution  $\beta = 2$ . La pression moyenne de détonation expérimentale  $P_{\text{exp}}$  présente un déficit de 4 % par rapport à la valeur CJ pour le mélange « M1-D3-1,0 » et autour de 2,3 % pour le mélange « M1-D4-1,0 ».

La structure cellulaire est très régulière, ce qui est en accord avec les données existantes pour les mélanges avec l'argon. La taille de la cellule élémentaire est d'environ 2 mm pour la dilution D4 et 5 mm pour la dilution D3.



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

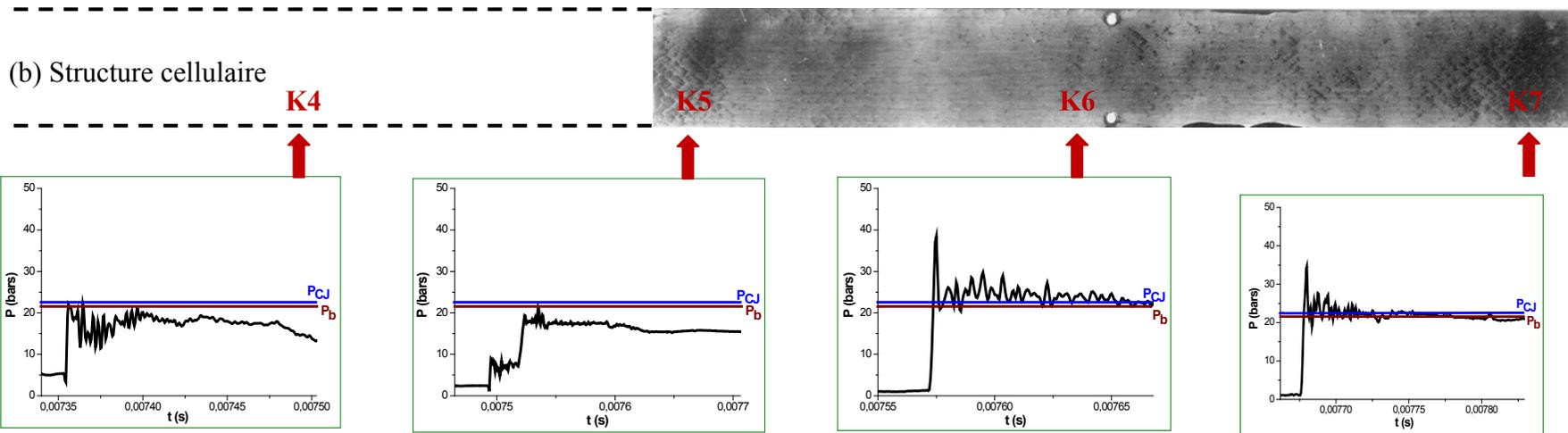
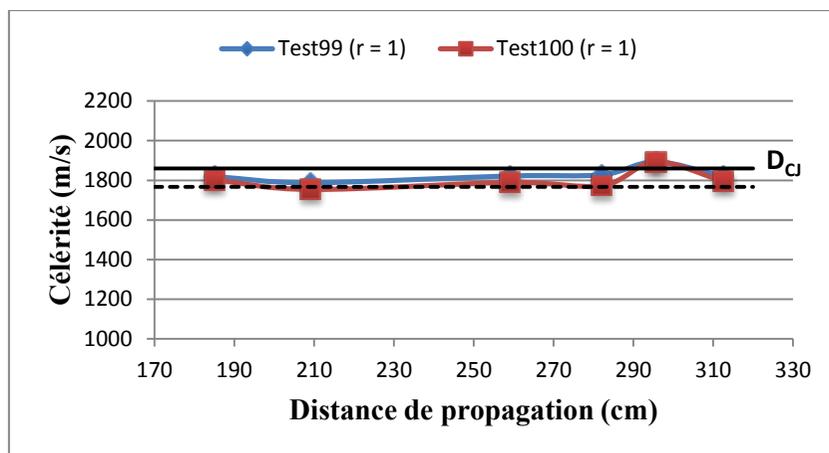


Fig. 5. 21– Mélange M1-D3-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

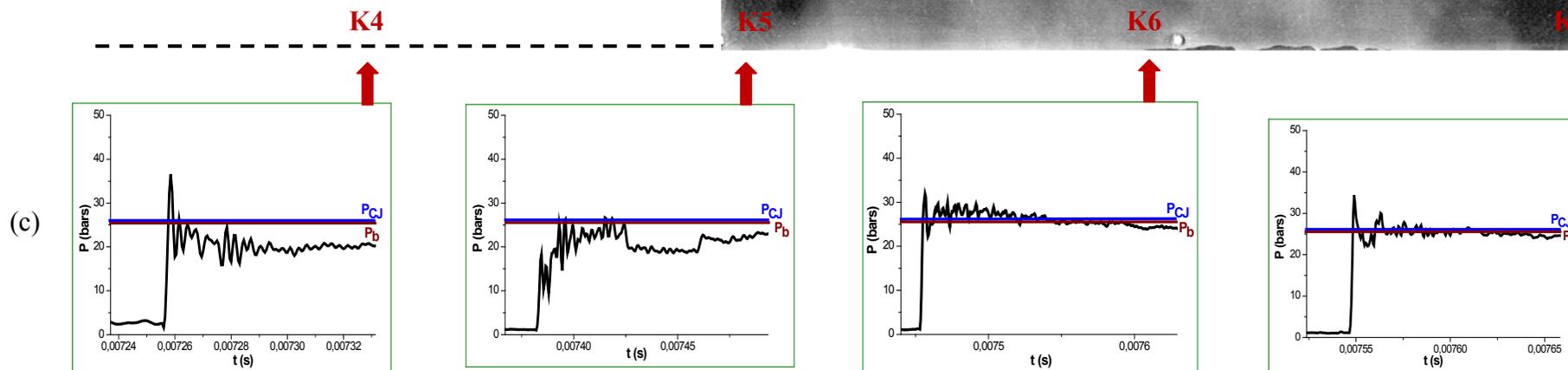
(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 22 – Mélange M1-D4-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

## 5.2.4 Synthèse des résultats dans les mélanges avec l'isooctane (M1)

Sur les figures 5.23, 5.24 et 5.25, nous avons représenté l'ensemble des résultats obtenus dans les mélanges réactifs  $C_8H_{18}/(O_2 + \beta N_2)$ , avec  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ .

On constate, en particulier, que la taille des cellules diminue considérablement lorsqu'on passe d'une valeur de  $\beta$  de 3,76 à 2, pour la même richesse. Lorsqu'on passe de  $\beta$  de 2 à 1, la taille de la cellule diminue encore de 50 %.

Ainsi, plus la dilution est importante, plus les déficits en célérité (et donc en pression) augmentent car la longueur d'induction (et donc la longueur de la zone de réaction) augmente. Comme pour les mélanges gazeux, la détonabilité d'un mélange réactif augmente quand le rapport de dilution  $\beta$  diminue.

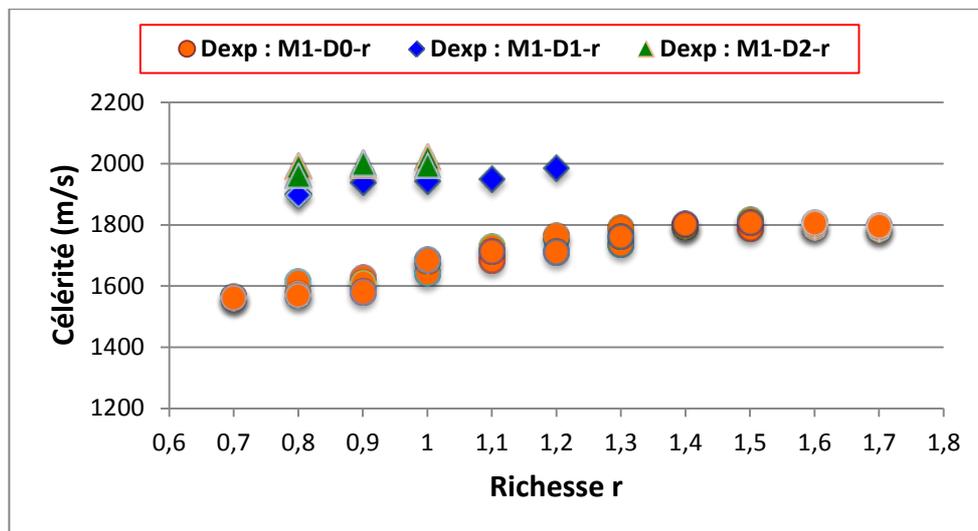


Fig. 5. 23 – Célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/ $(O_2 + \beta N_2)$ , pour  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$  « M1 »

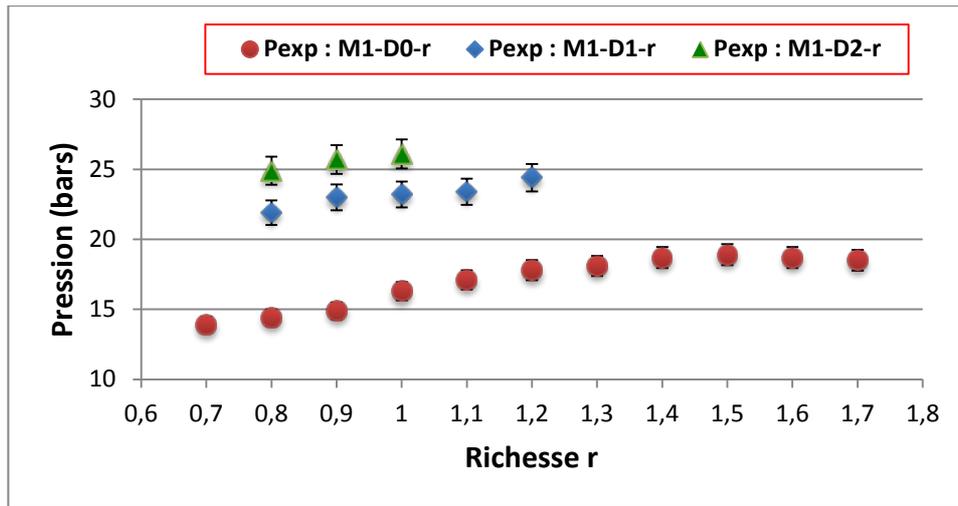


Fig. 5. 24 – Pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/ $(O_2+\beta N_2)$ , pour  $\beta = 3,76$  ; 2 et 1 « M1 »

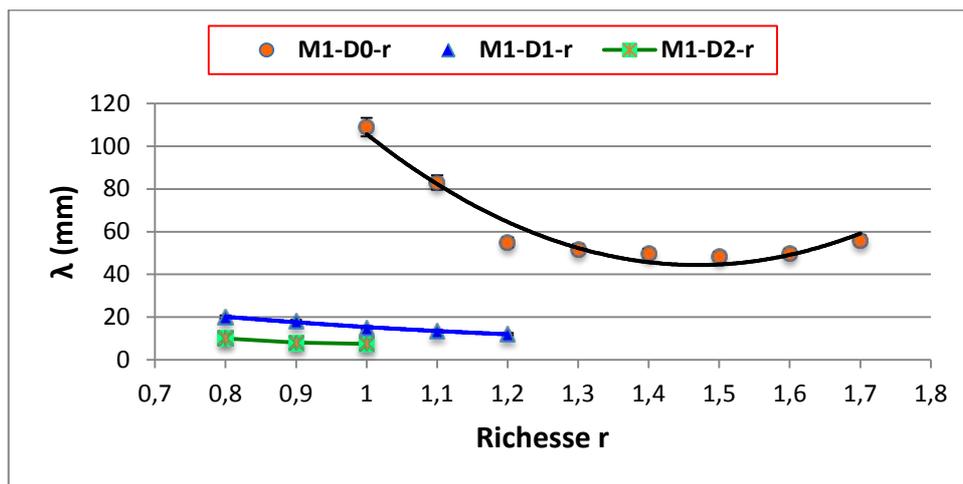


Fig. 5. 25 – Taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif isooctane/ $(O_2+\beta N_2)$ , pour  $\beta = 3,76$  ; 2 et 1 « M1 »

**Remarque :** Les plages de richesse explorées sont différentes en fonction de la dilution  $\beta$ . Ceci vient du fait que les gammes de débit qu'il était possible d'atteindre avec les rotamètres utilisés ne nous permettaient pas de couvrir les mêmes plages de richesse pour toutes les dilutions. Dans le cadre de ce travail, il ne nous a pas été possible de changer les rotamètres.

### 5.3 Détonations dans les aérosols d'heptane (Mélanges M2)

Le mélange réactif considéré est constitué d'un carburant liquide de la famille des alcanes saturés ( $C_nH_{2n+2}$ ) à chaîne linéaire à sept carbones  $C_7H_{16}$  et d'un oxydant gazeux ( $O_2 + \beta N_2$ ),  $\beta$  étant le rapport de dilution.

Les principales propriétés physico-chimiques du n-heptane sont regroupées dans le tableau 5.3 :

Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire	Densité ( $kg/m^3$ )	Température d'ébullition (K)	Pression de vapeur saturante à 20 °C (kPa)
n-Heptane	$C_7H_{16}$	100	684	371	4,60

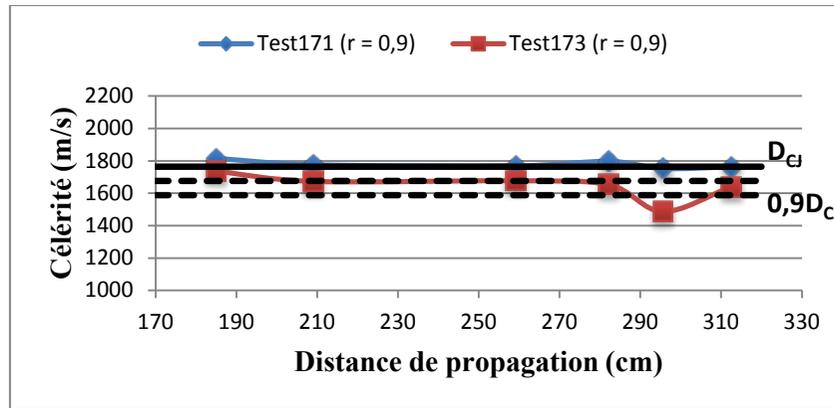
Tableau 5.3 – Principales propriétés physico-chimiques du n-heptane

#### 5.3.1 Détonations des mélanges Heptane-air (M2-D0)

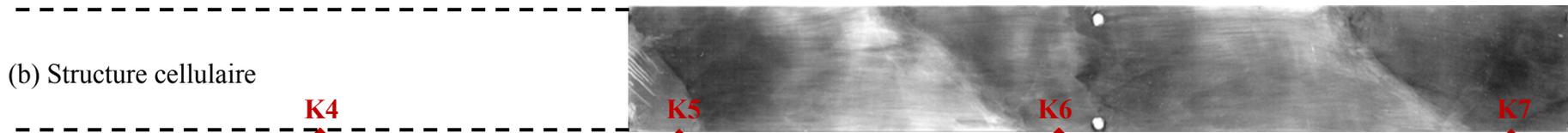
Quelques résultats typiques de nos expériences dans les mélanges heptane-air sont montrés sur les figures 5.26, 5.27 et 5.28, pour un mélange pauvre M2-D0-0,9, stœchiométrique M2-D0-1,0 et riche M2-D0-1,3, respectivement.

On retrouve des régimes de propagation et des caractéristiques très proches des observations faites pour les mélanges isooctane-air :

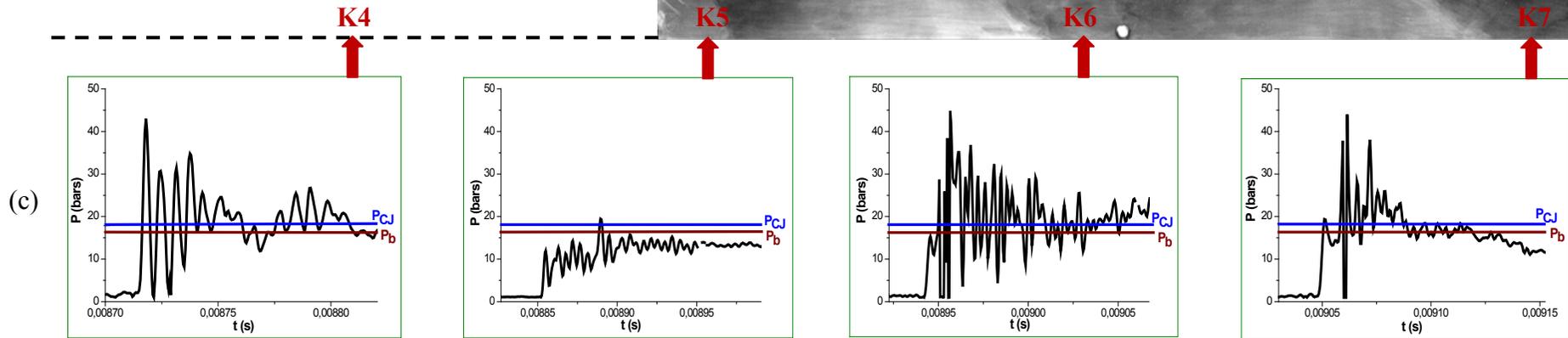
- une célérité moyenne quasi-constante avec un déficit en général inférieur à 5% par rapport à la célérité théorique CJ,
- pour les mélanges pauvres ( $r \leq 0,9$ ), on observe un régime de détonation de type hélicoïdal,
- pour les mélanges autour de la stœchiométrie, un régime avec une structure cellulaire très irrégulière comprenant la moitié d'une cellule ou une cellule complète sur la largeur du tube,
- pour les mélanges riches, un régime « normal » avec une structure cellulaire dont la taille diminue lorsque la richesse augmente.



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

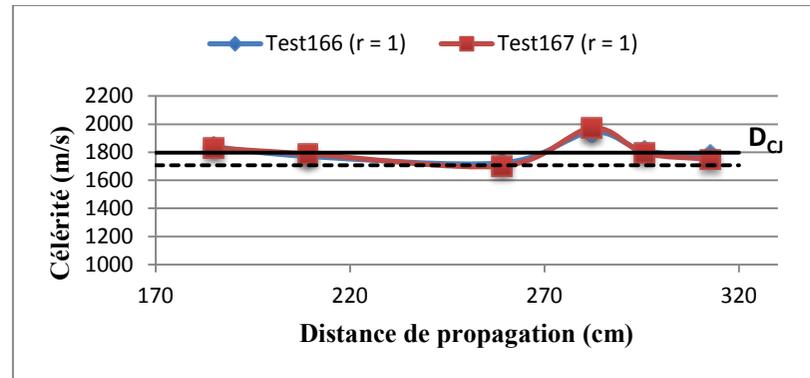


(b) Structure cellulaire



(c)

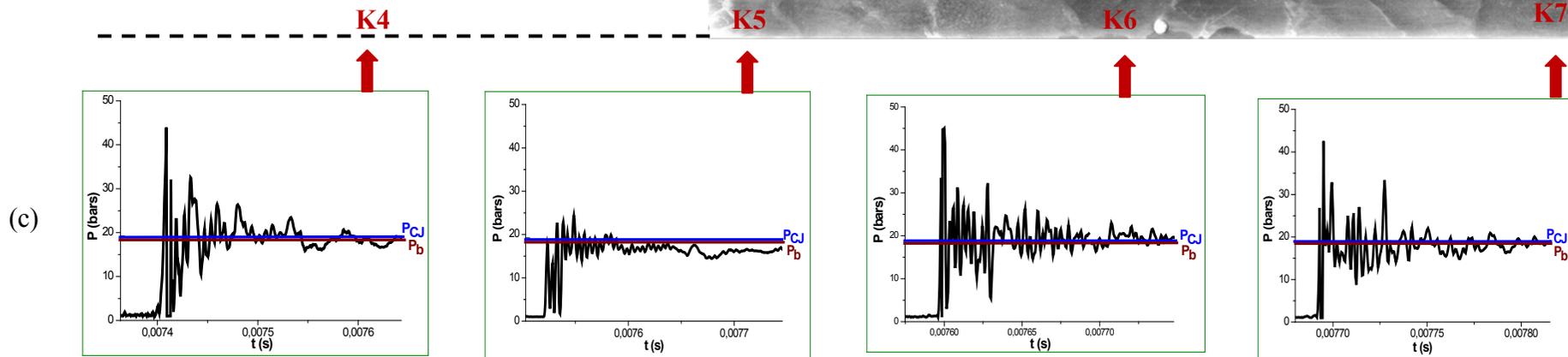
Fig. 5. 26 – Mélange M2-D0-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

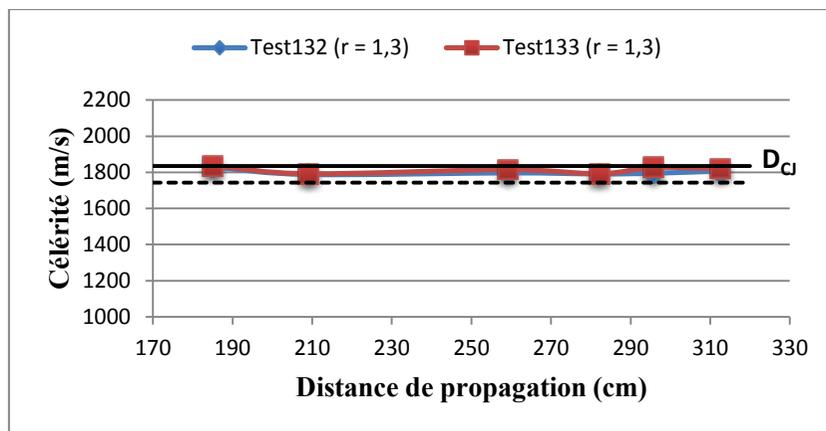


(b) Structure cellulaire



(c)

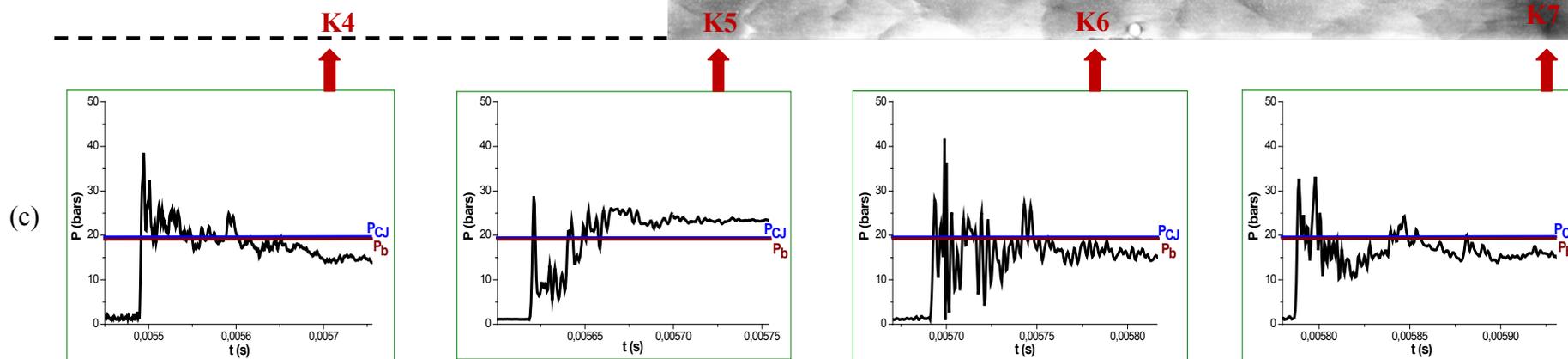
Fig. 5. 27 – Mélange M2-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 28 – Mélange M2-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

Les variations de la célérité de détonation moyenne  $D_{exp}$ , de la pression derrière le front de détonation  $P_{exp}$  et de la taille de la cellule de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse sont rassemblées sur les figures 5.29, 5.30 et 5.31.

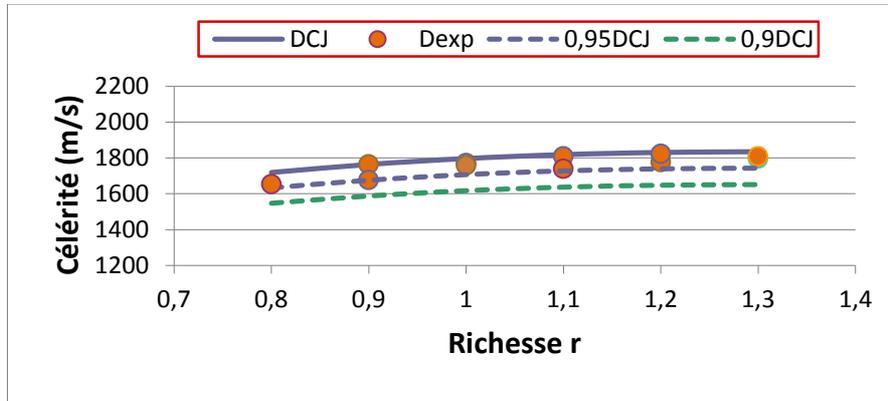


Fig. 5. 29 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/air, « M2-D0 »

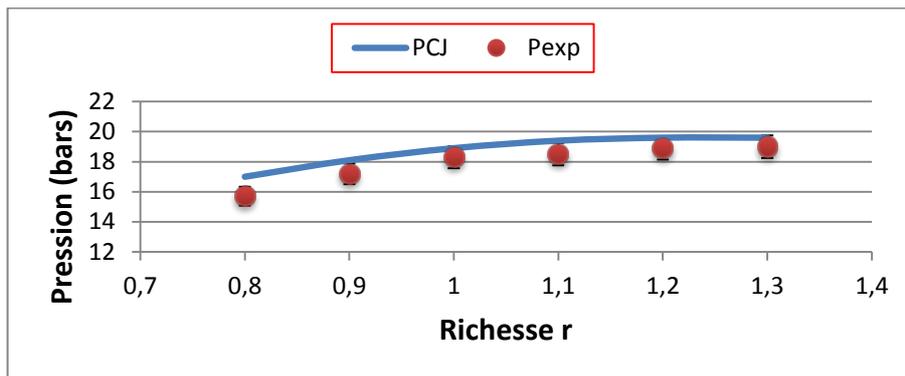


Fig. 5. 30 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/air, « M2-D0 »

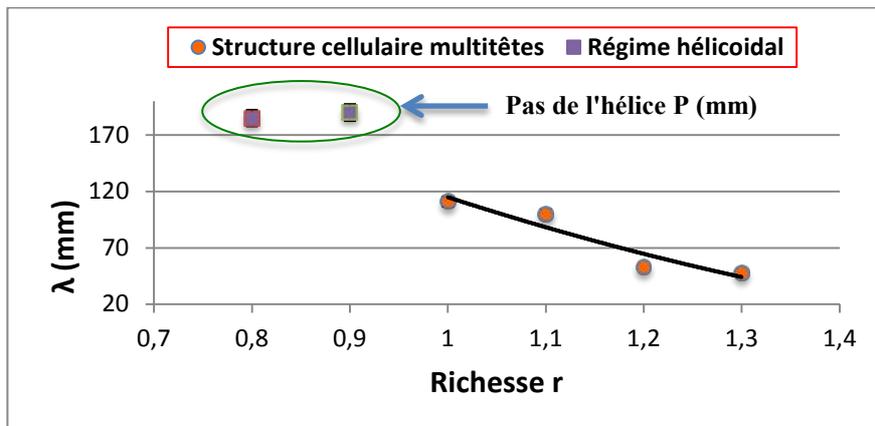


Fig. 5. 31 – Variations de la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/air, « M2-D0 »

On retrouve le même type de variations que pour les mélanges iso-octane-air. Cependant, dans le domaine de richesse exploré, nous n'avons pas observé le maximum des caractéristiques (célérité, pression) de détonation. Mais celui-ci semble se situer vers la richesse 1,3. De même, la taille de cellule décroît de manière monotone en fonction de la richesse. Ainsi, pour  $r = 1,3$ , la largeur de cellule  $\lambda$  est d'environ 45 mm.

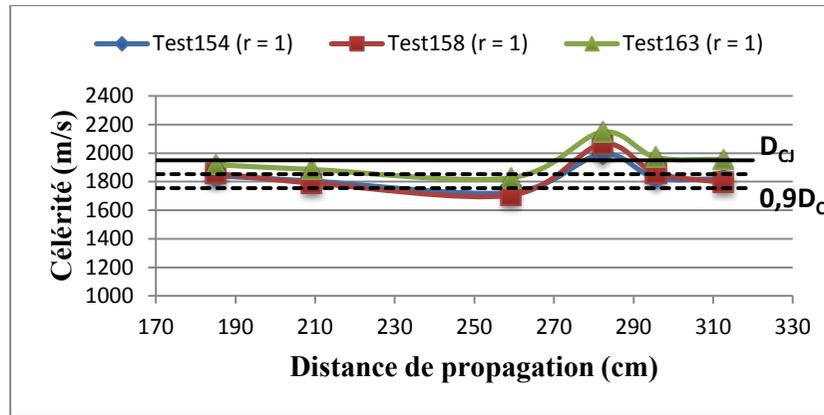
### **5.3.2 Influence de dilution**

Nous avons procédé à des expériences dans des mélanges dont la phase gazeuse oxydante avait un rapport de dilution, soit  $\beta = 2$  (M2-D1), soit  $\beta = 1$  (M2-D2).

#### **5.3.2.1 Dilution $\beta = 2$ (mélanges M2-D1)**

Un exemple de détonation dans un mélange stœchiométrique M2-D1-1,0 est montré sur la figure 5.32. Par rapport aux résultats pour  $\beta = 3,76$ , on constate une diminution très importante de la largeur  $\lambda$  de la cellule qui traduit une augmentation de la réactivité du mélange.

Pour ce type de mélange, on n'observe que le régime à structure multicellulaire.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

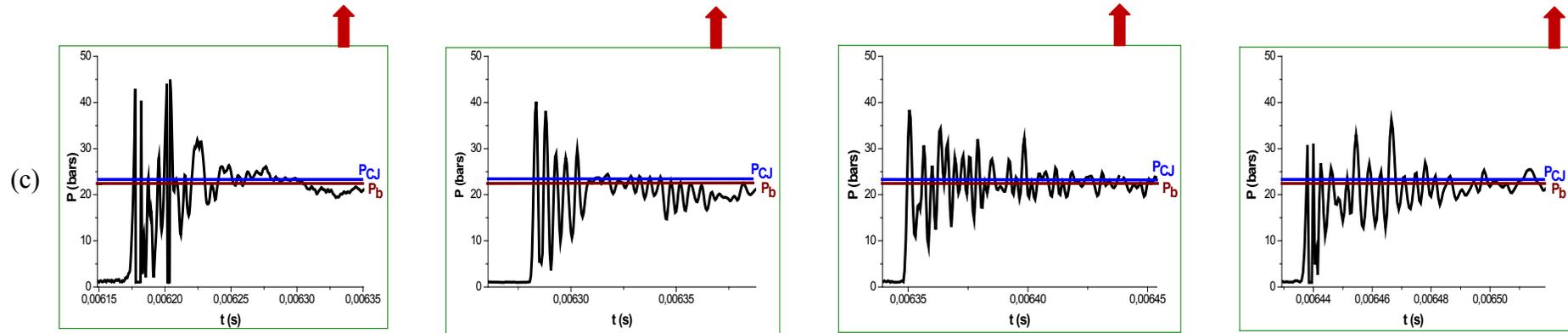
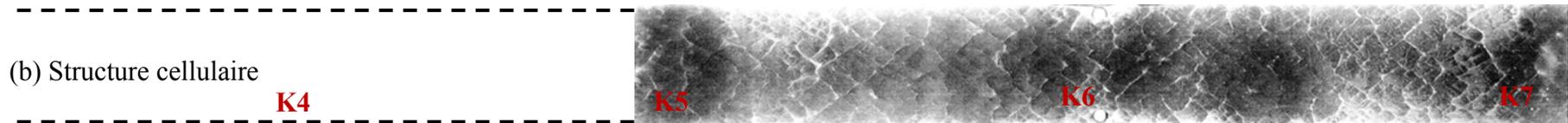


Fig. 5. 32 – Mélange M2-D1-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

Les variations de la célérité  $D_{exp}$  et de la pression de détonation  $P_{exp}$  ainsi que la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse sont rassemblées sur les figures 5.33, 5.34 et 5.35.

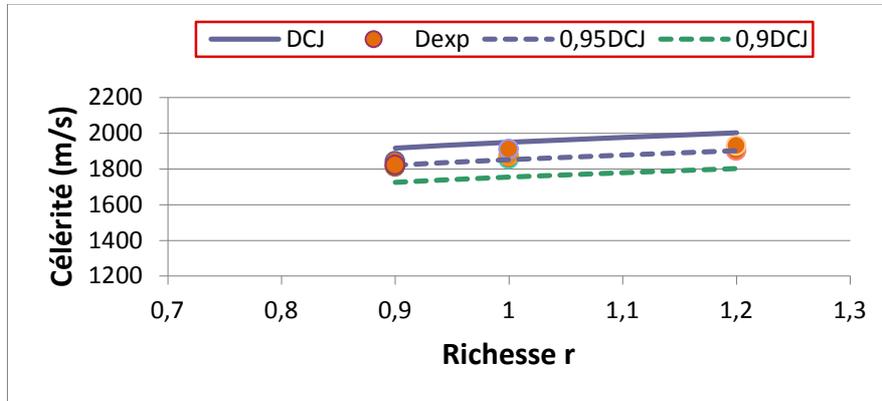


Fig. 5. 33 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/ $(O_2+2N_2)$ , « M2-D1 »

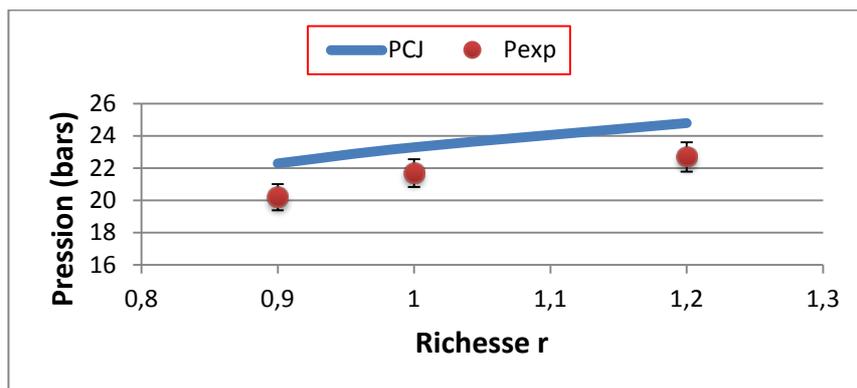


Fig. 5. 34 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/ $(O_2+2N_2)$ , « M2-D1 »

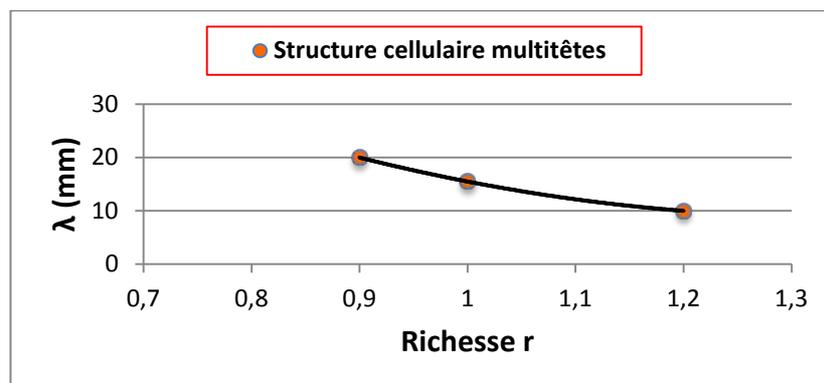
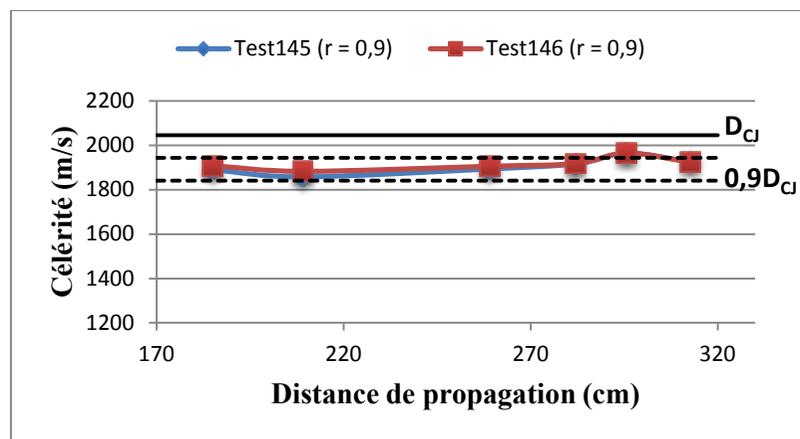


Fig. 5. 35 – Variations de la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/ $(O_2+2N_2)$ , « M2-D1 »

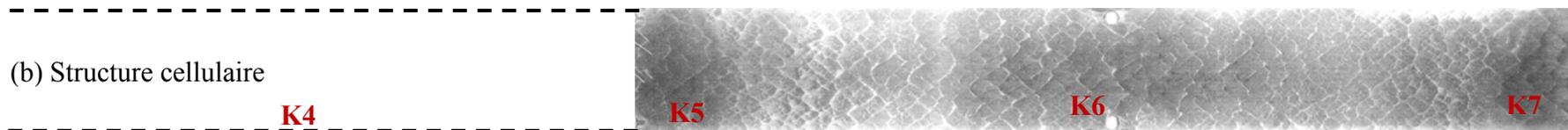
Avec la dilution  $\beta = 2$ , on n' observe que le régime de propagation à structure multicellulaire avec 3 à 4 cellules dans la largeur du tube à détonation.

### 5.3.2.2 Dilution $\beta = 1$ (mélanges M2-D2)

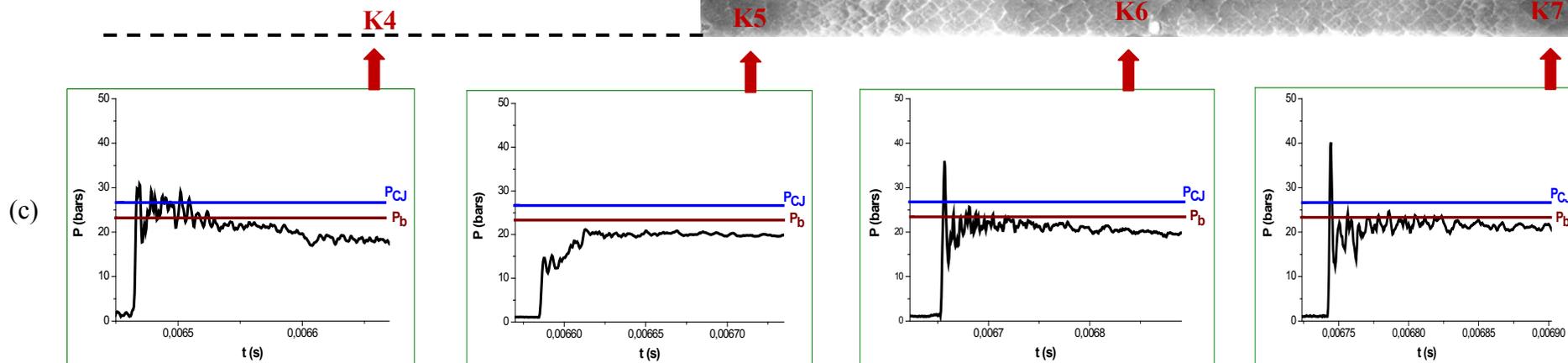
Un exemple de détonation dans un mélange pauvre M2-D2-0,9 est montré sur la figure 5.36. Les caractéristiques de la détonation sont très semblables à celles observées avec la dilution  $\beta = 2$ . Cependant, les fluctuations de célérité et de pression sont plus atténuées, ce qui traduit une détonation plus stable (ou un nombre de cellules plus important). Ceci est en accord avec la diminution de la largeur  $\lambda$  de la cellule de détonation.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 36 – Mélange M2-D2-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

Les variations de la célérité  $D_{exp}$  et de la pression de détonation  $P_{exp}$  ainsi que la taille de la cellule de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse sont rassemblées sur les figures 5.37, 5.38 et 5.39.

Pour la dilution  $\beta = 1$ , il n'a été possible que d'explorer les mélanges pauvres, en raison des limitations de débit imposées par notre dispositif expérimental (voir chapitre 3).

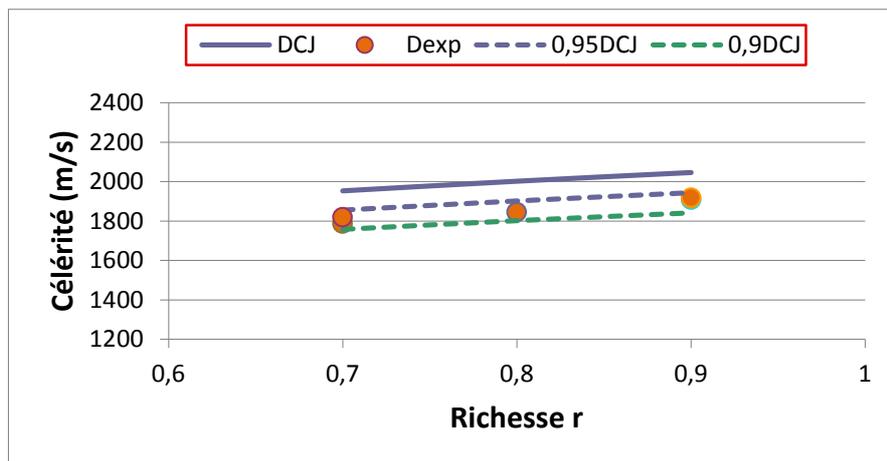


Fig. 5. 37 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>), « M2-D2 »

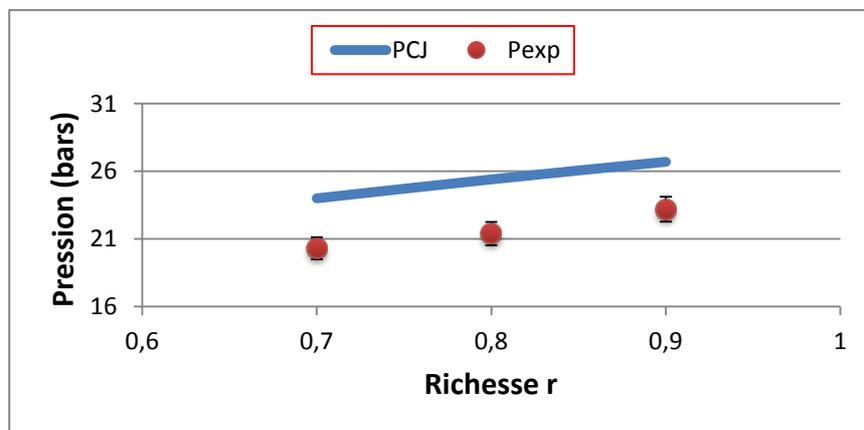


Fig. 5. 38 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du n-heptane/(O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>), « M2-D2 »

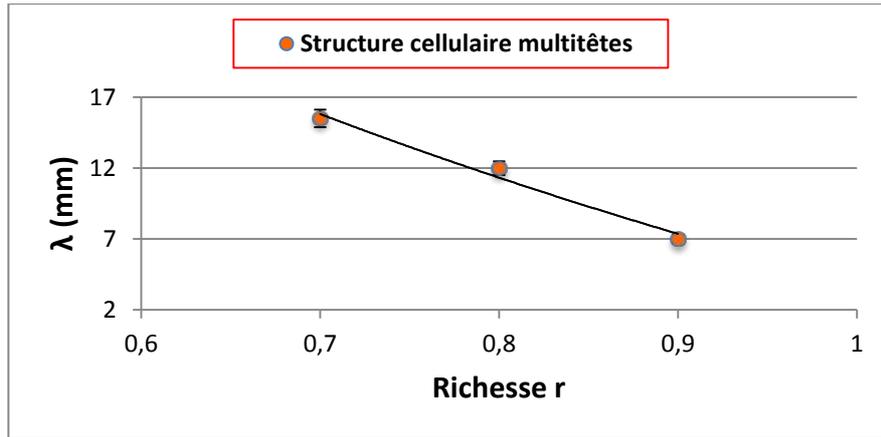


Fig. 5. 39 – Variations de la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>), « M2-D2 »

### 5.3.2.3 Synthèse des résultats pour les aérosols d'heptane (mélanges M2)

Les figures 5.40, 5.41 et 5.42 montrent l'ensemble des résultats correspondants au mélange réactif C<sub>7</sub>H<sub>16</sub>/(O<sub>2</sub> + βN<sub>2</sub>), avec β = 3,76 ; 2 et 1.

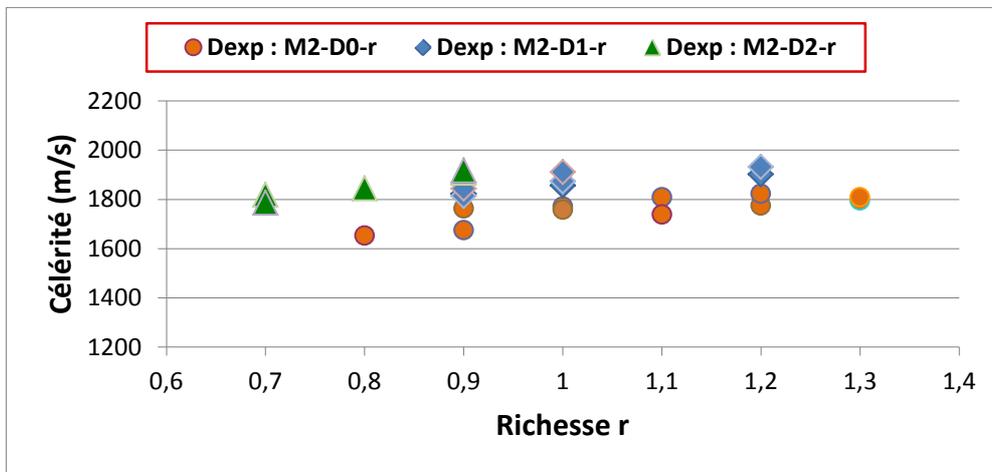


Fig. 5. 40 – Célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/(O<sub>2</sub>+βN<sub>2</sub>), pour β = 3,76 ; 2 et 1, « M2 »

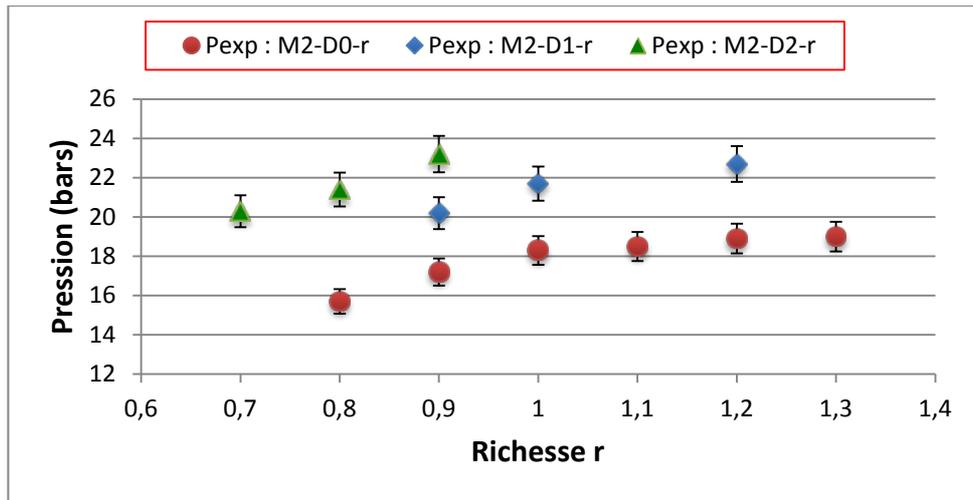


Fig. 5. 41 – Pression de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/( $O_2 + \beta N_2$ ), pour  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ , « M2 »

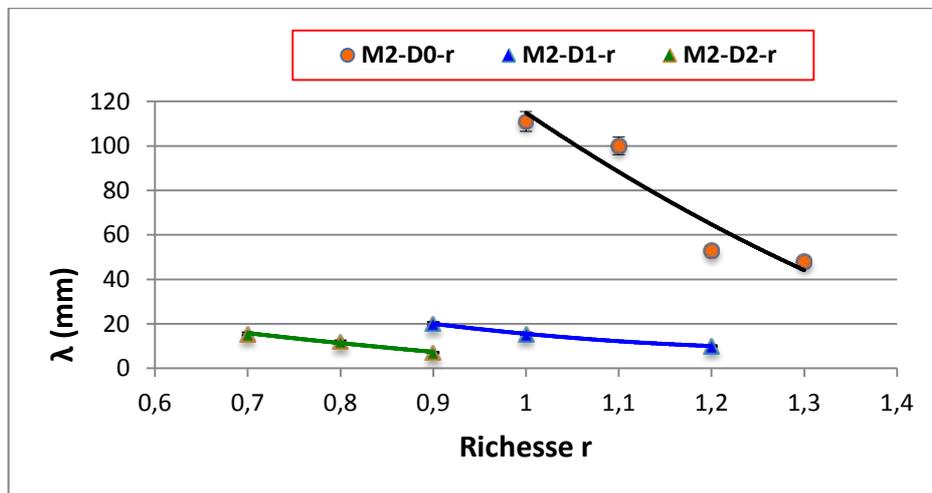


Fig. 5. 42 – Taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-heptane/( $O_2 + \beta N_2$ ), pour  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ , « M2 »

Globalement, on retrouve les mêmes constatations et conclusions relatives aux caractéristiques de détonation que pour le cas de l'isooctane. Ceci est logique vu que ces deux carburants sont volatils et présentent des températures d'ébullition et des pressions de vapeur saturante assez proches.

De la même manière que pour l'isooctane, trois régimes de détonation existent en fonction de la plage de richesse. Ainsi, pour les mélanges à base d'air (M2-D0), on retrouve le régime hélicoïdal pour  $0,8 \leq r \leq 0,9$ , une structure cellulaire avec une demi-cellule autour de la stœchiométrie et une structure cellulaire multitêtes avec une cellule et plus pour  $r > 1,1$ .

Toutefois le régime intermédiaire entre le régime hélicoïdal et le régime à structure cellulaire multitêtes est moins bien défini que dans le cas de l'isooctane.

Dans le cas de dilutions  $\beta = 2$  et  $\beta = 1$ , seul le régime de propagation à structure cellulaire multitêtes est observé.

## 5.4 Détonations dans les aérosols d'octane (Mélanges M3)

Le mélange réactif considéré est constitué d'un carburant liquide de la famille chimique des alcanes saturés ( $C_nH_{2n+2}$ ) à chaîne linéaire à huit carbones  $C_8H_{18}$  et d'un oxydant gazeux :  $O_2 + \beta N_2$  ( $\beta$  est le rapport de dilution).

Le n-octane et l'isooctane ont tous les deux la même formule brute mais une formule développée différente. En effet, le n-octane possède une structure en chaîne linéaire tandis que la structure de l'isooctane est ramifiée. En conséquence, certaines propriétés chimiques (température d'ébullition, pression de vapeur saturante, enthalpie de vaporisation...etc.) diffèrent entre les deux carburants.

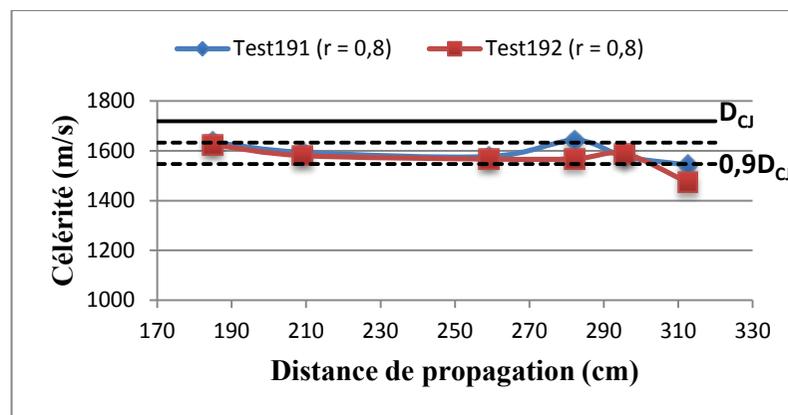
Les principales propriétés physico-chimiques du n-octane sont regroupées dans le tableau 5.4 :

Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire	Densité ( $kg/m^3$ )	Température d'ébullition (K)	Pression de vapeur saturante à 20 °C (kPa)
n-Octane	$C_8H_{18}$	114	703	399	1,33

Tableau 5.4 – Principales propriétés physico-chimiques du n-octane

### 5.4.1 Détonations des mélanges n-octane-air (M3-D0)

Des résultats typiques des expériences que nous avons effectuées dans les mélanges octane-air sont reproduits sur les figures 5.43, 5.44 et 5.45 pour un mélange pauvre M3-D0-0,8, stœchiométrique M3-D0-1,0 et riche M3-D0-1,5. Des résultats supplémentaires, pour d'autres richesses figurent en annexe 3.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

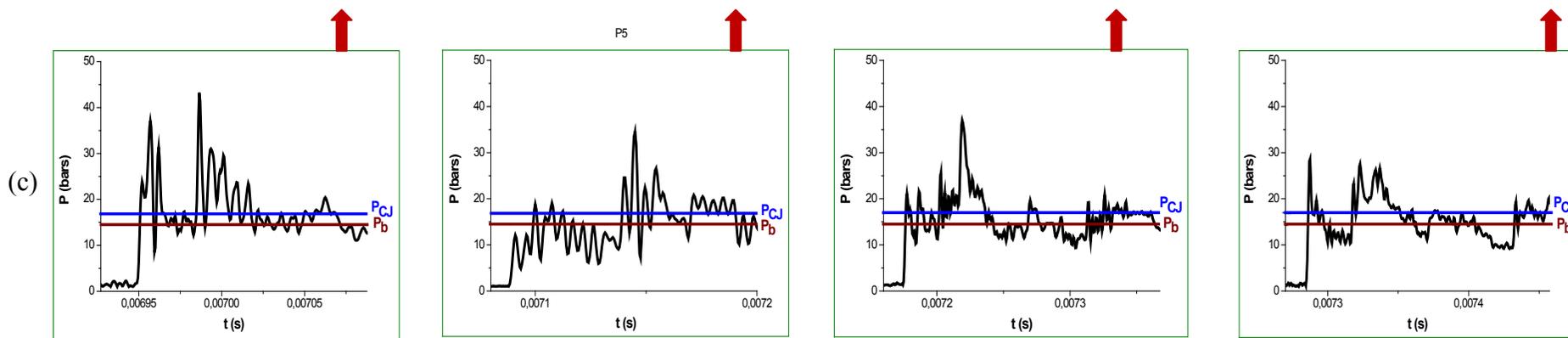
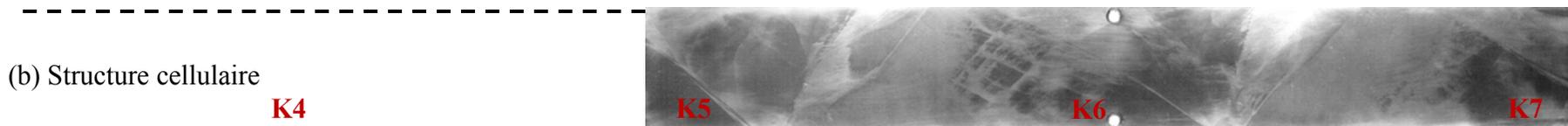
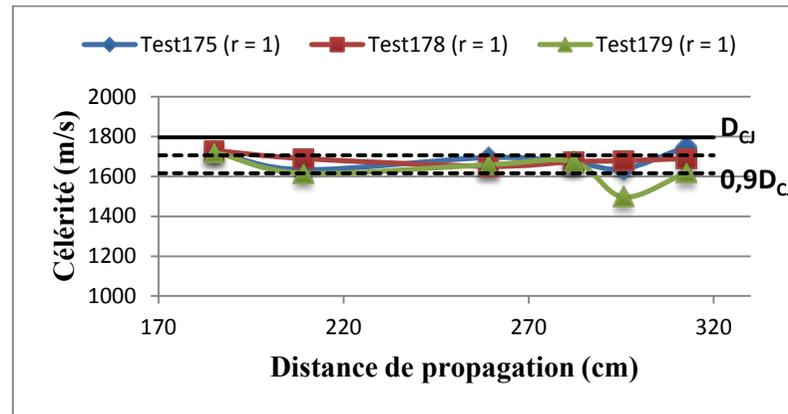


Fig. 5. 43 – Mélange M3-D0-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

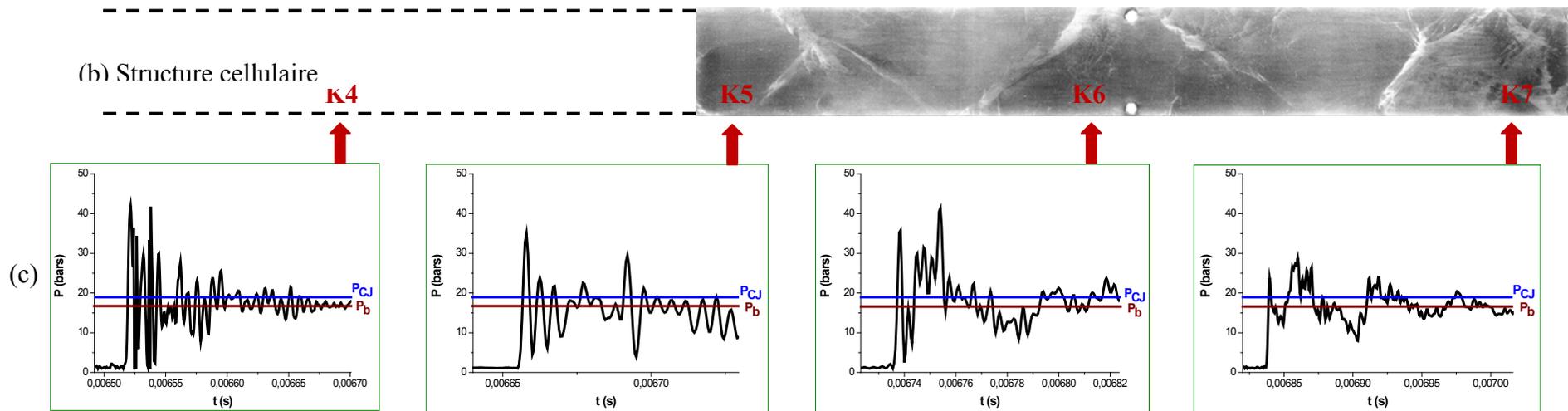
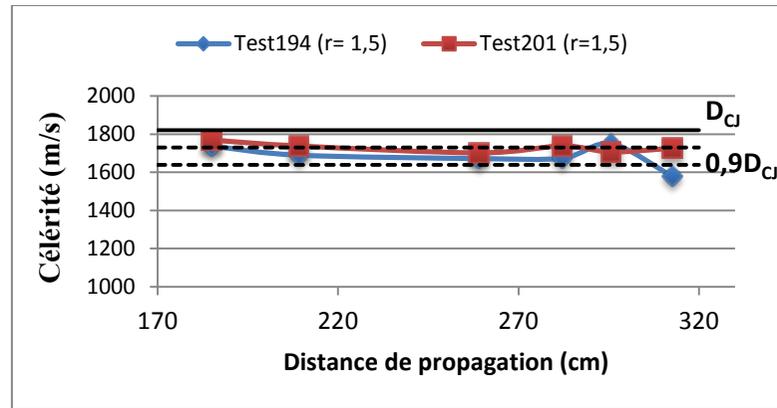
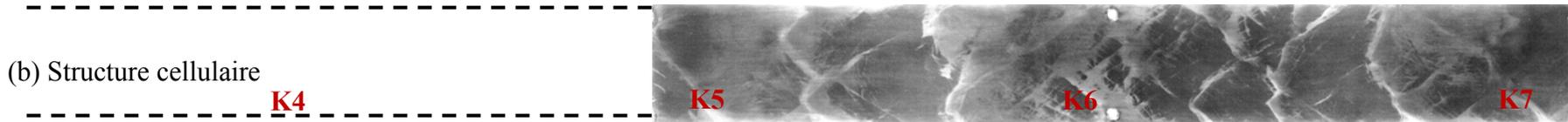


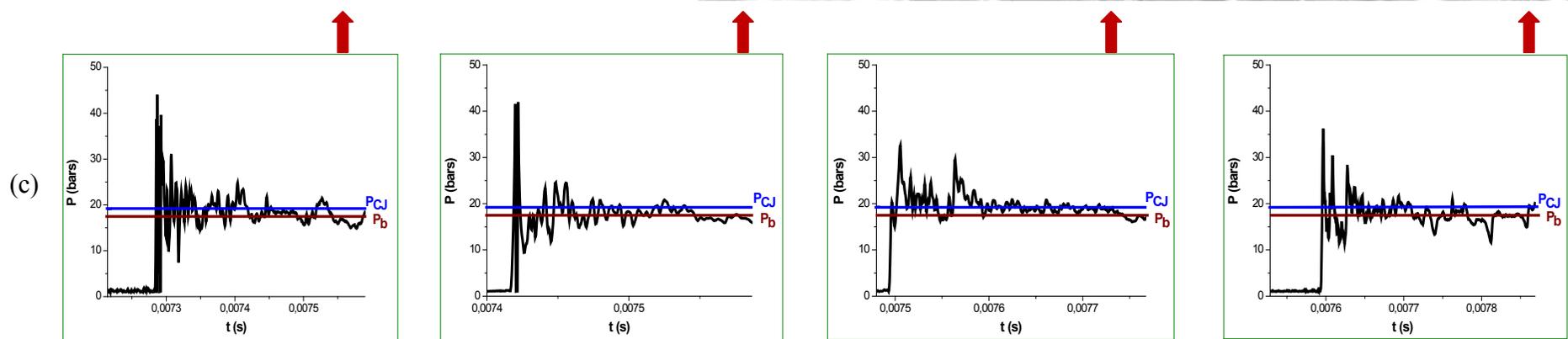
Fig. 5. 44 – Mélange M3-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 45 – Mélange M3-D0-1,5 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

Les régimes de propagation et les caractéristiques de détonation sont assez semblables aux observations faites pour les mélanges isooctane-air (M1-D0) et heptane-air (M2-D0), avec quelques différences :

- La célérité moyenne est quasi constante avec un déficit qui est inférieur à 10 % par rapport à la célérité CJ,
- Dans les mélanges pauvres, on n'a pas observé de véritable régime hélicoïdal, mais plutôt un régime à demi-cellule,
- Cette structure à une demi-cellule est très marquée dans le cas du mélange stœchiométrique,
- Pour les mélanges riches, on a un régime normal avec une structure multicellulaire mais très irrégulière.

Les variations de la célérité  $D_{exp}$  et de la pression de détonation  $P_{exp}$  ainsi que la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse sont rassemblées sur les figures 5.46, 5.47 et 5.48.

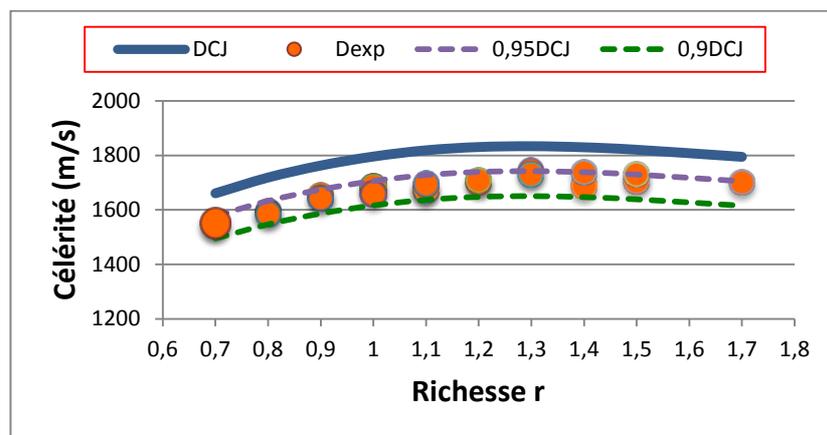


Fig. 5. 46 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/air, « M3-D0 »

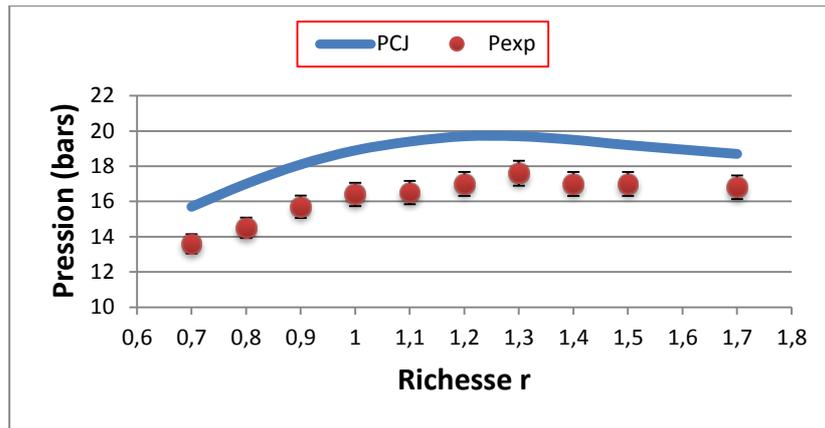


Fig. 5. 47 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/air, « M3-D0 »

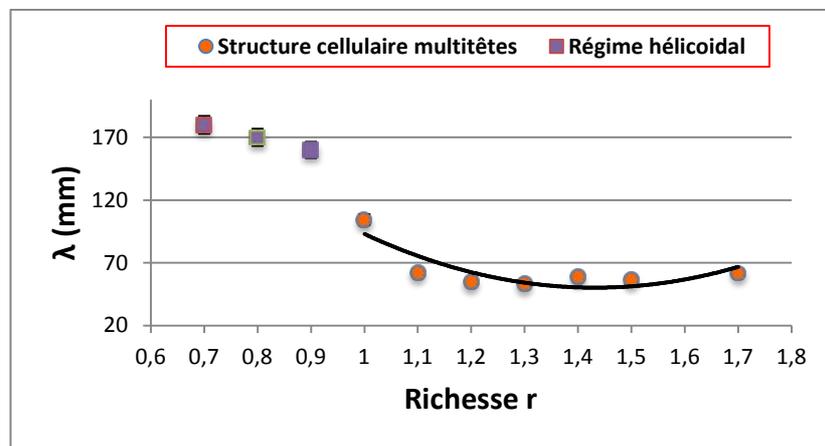


Fig. 5. 48 – Taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/air, « M3-D0 »

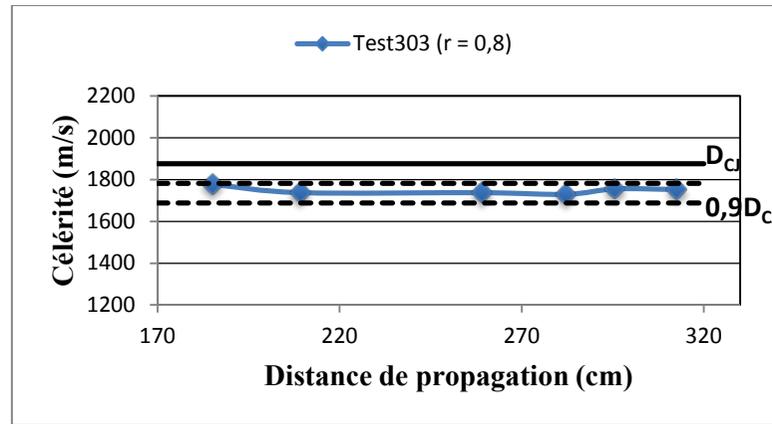
On retrouve les mêmes tendances que pour les mélanges isooctane-air et heptane-air. Le régime limite de détonation avec une demi-cellule existe sur un domaine de richesse plus étendu vers les mélanges pauvres. Nous n'avons pas exploré, dans le présent travail, le domaine de richesse correspondant à la limite inférieure de détonabilité.

## 5.4.2 Influence de la dilution

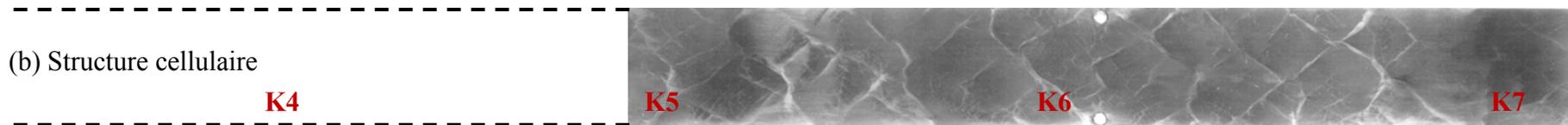
### 5.4.2.1 Dilution $\beta = 2$ (mélanges M3-D1)

Un exemple de détonation dans un mélange de richesse 0,8, M3-D1-0,8 est montré sur la figure 5.49. On observe une structure cellulaire plus régulière que dans les mélanges M3-D0. (les résultats supplémentaires, pour d'autres richesses, sont présentés en annexe 3).

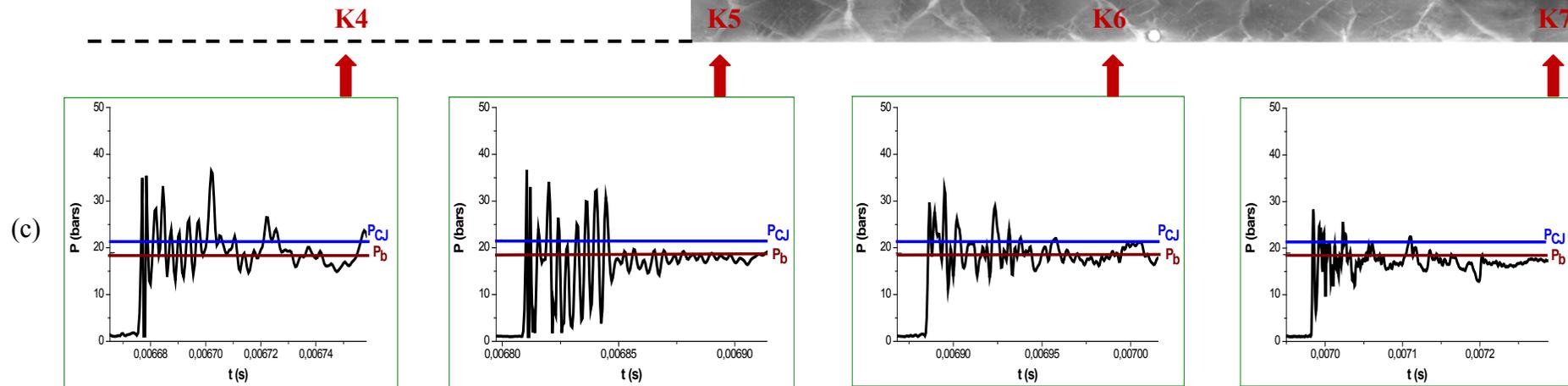
Les variations de la célérité et de la pression de détonation ainsi que la taille des cellules de détonation en fonction de la richesse sont rassemblées sur les figures 5.50, 5.51 et 5.52.



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 49 – Mélange M3-D1-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

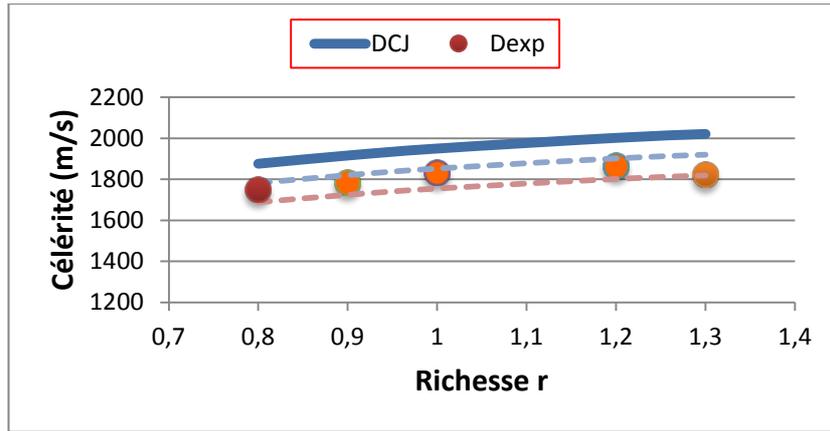


Fig. 5. 50 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/( $O_2+2N_2$ ), « M3-D1 »

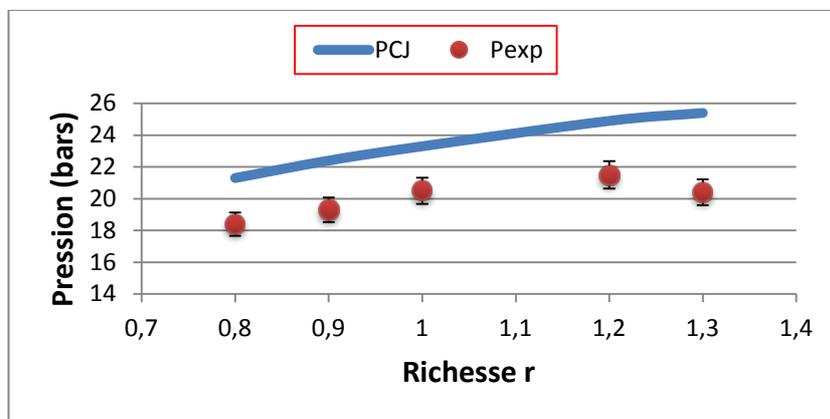


Fig. 5. 51 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/( $O_2+2N_2$ ), « M3-D1 »

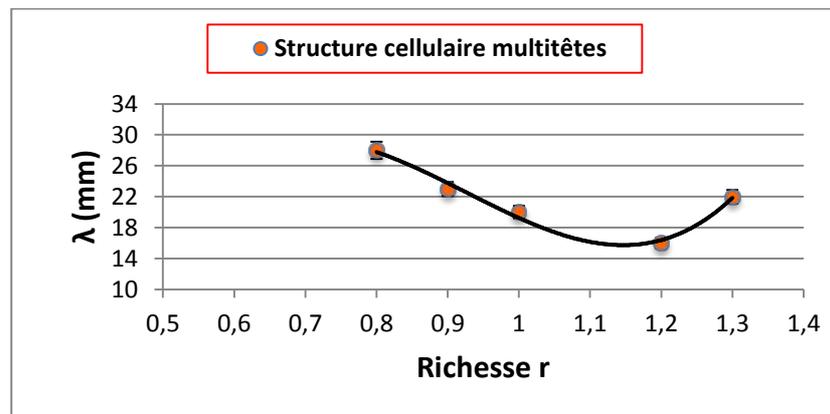
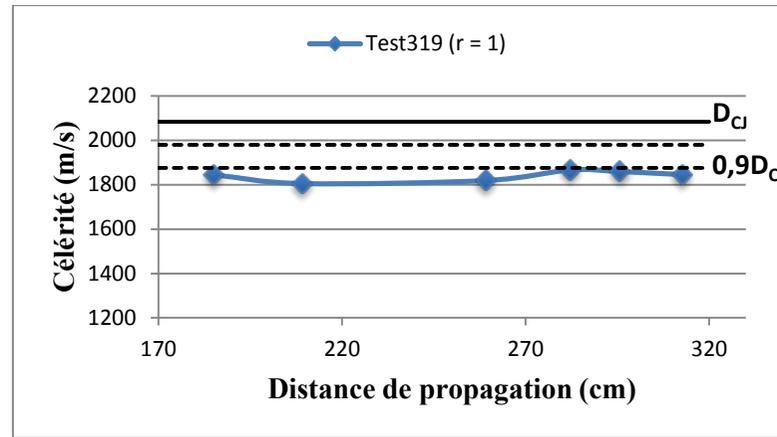


Fig. 5. 52 – Variations de la taille  $\lambda$  des cellules de détonation en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/( $O_2+2N_2$ ), « M3-D1 »

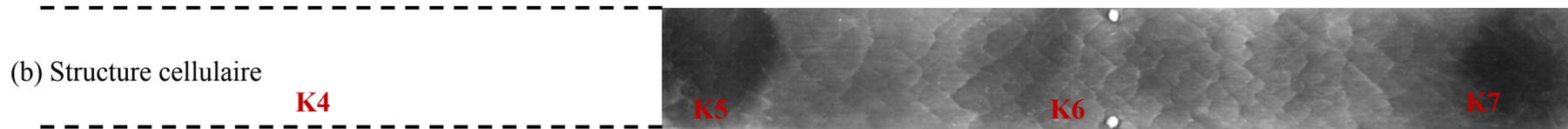
#### 5.4.2.2 Dilution $\beta = 1$ (mélanges M3-D2)

Un exemple de détonation dans un mélange stœchiométrique M3-D2-1,0 est montré sur la figure 5.53. La célérité moyenne est quasi constante durant la propagation de la détonation et présente un déficit de 10 % avec la valeur théorique CJ. La structure cellulaire est assez régulière et de taille moyenne plus faible que pour la dilution  $\beta = 2$ .

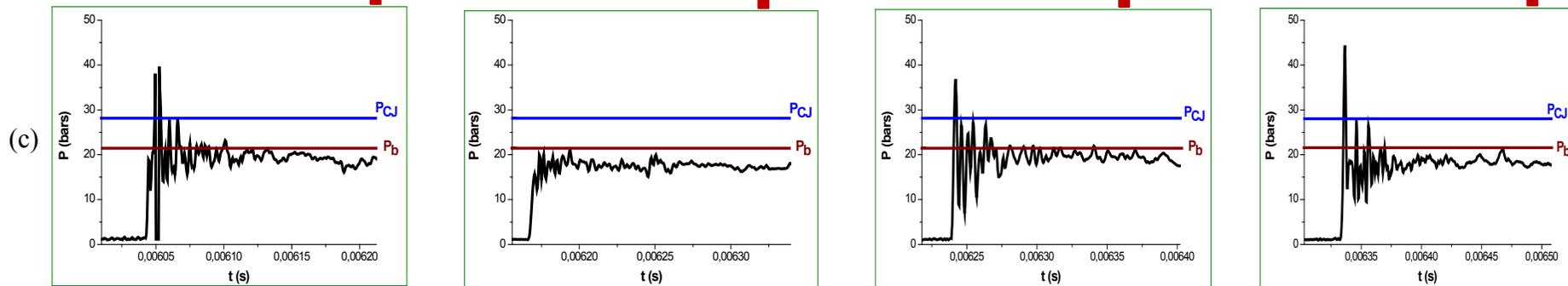
Les variations de la célérité  $D_{\text{exp}}$  et de la pression de détonation  $P_{\text{exp}}$  ainsi que la taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse sont rassemblées sur les figures 5.54, 5.55 et 5.56.



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(b) Structure cellulaire



(c)

Fig. 5. 53 – Mélange M3-D2-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

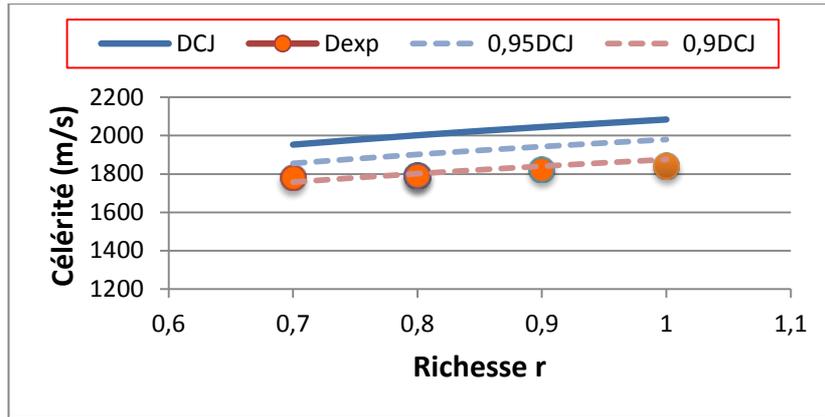


Fig. 5. 54 – Variations de la célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/( $O_2+N_2$ ), « M3-D2 »

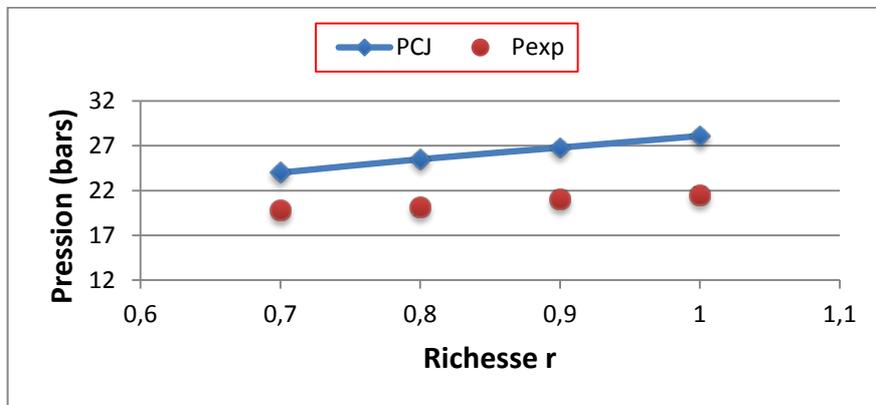


Fig. 5. 55 – Variations de la pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/( $O_2+N_2$ ), « M3-D2 »

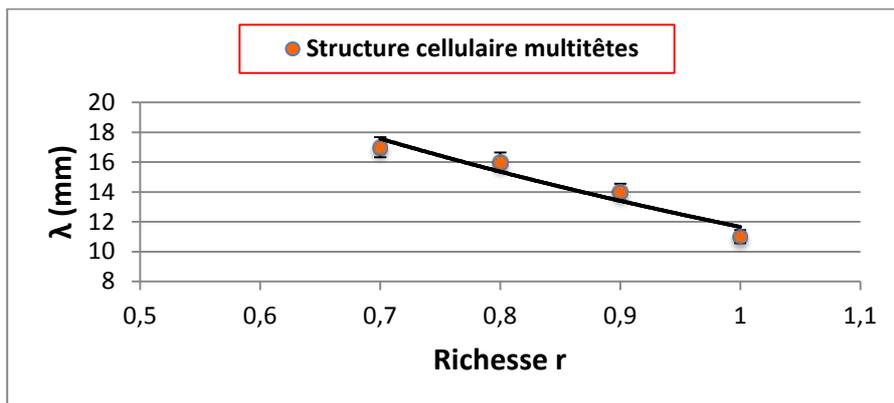


Fig. 5. 56 – Variations de la taille  $\lambda$  des cellules de détonation en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/( $O_2+N_2$ ), « M3-D2 »

### 5.4.2.3 Synthèse des résultats pour les aérosols d'octane (mélanges M3)

Sur les figures 5.57, 5.58 et 5.59 sont représentés l'ensemble des résultats correspondants au mélange réactif  $C_8H_{18}/(O_2 + \beta N_2)$ , avec  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ .

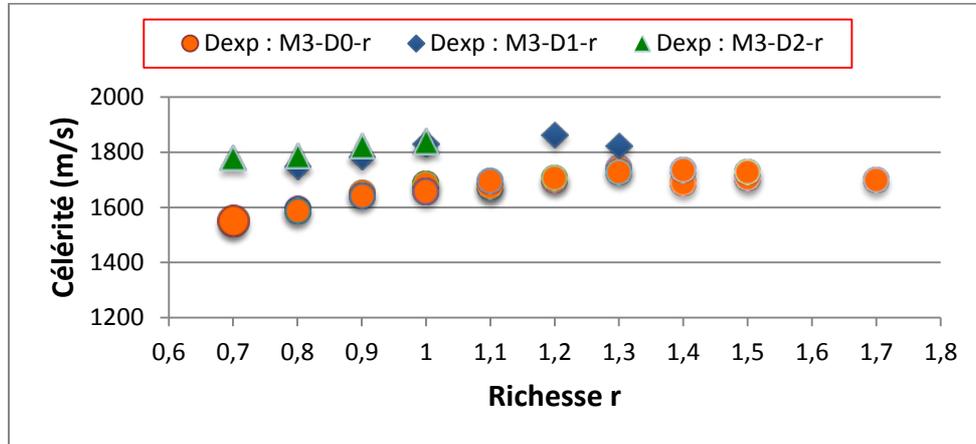


Fig. 5. 57 – Célérité moyenne de détonation  $D_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/ $(O_2 + \beta N_2)$ , pour  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ , « M3 »

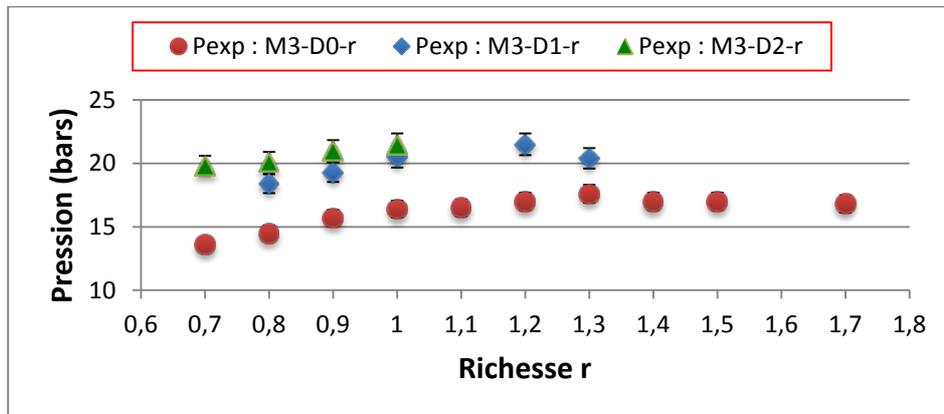


Fig. 5. 58 – Pression moyenne de détonation  $P_{exp}$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/ $(O_2 + \beta N_2)$ , pour  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ , « M3 »

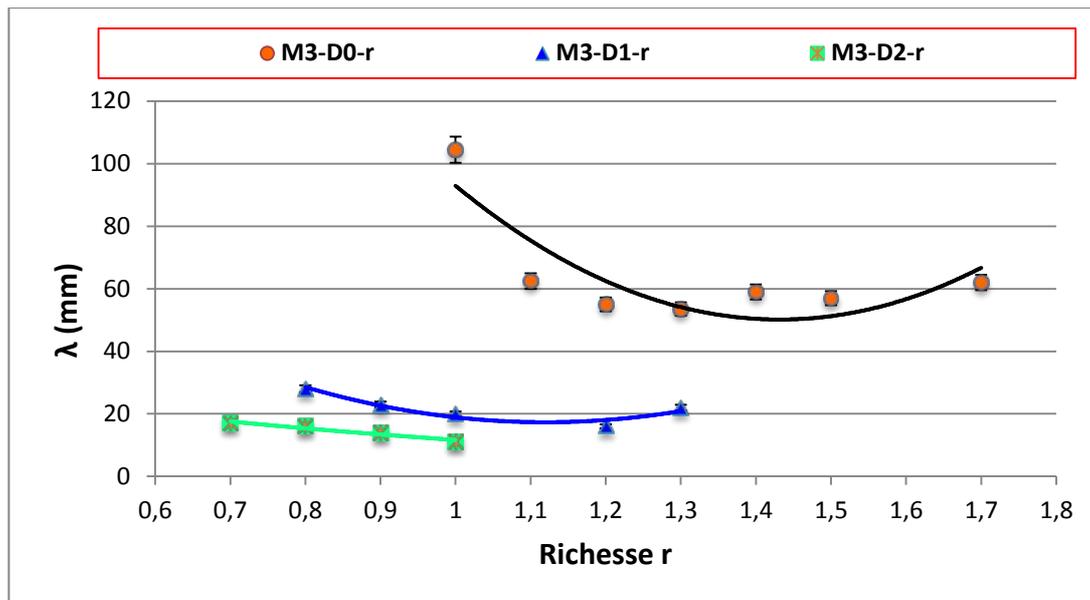


Fig. 5. 59 – Taille des cellules de détonation  $\lambda$  en fonction de la richesse du mélange réactif n-octane/ $(O_2 + \beta N_2)$ , pour  $\beta = 3,76 ; 2$  et  $1$ , « M3 »

On retrouve les mêmes tendances que celles observées dans le cas des mélanges M1 et M2, avec en particulier la diminution de la taille de cellule lorsqu'on diminue la dilution de l'oxydant. Toutefois, dans les mélanges pauvres, lorsqu'on s'approche de la limite inférieure de détonabilité, le régime hélicoïdal n'a pas été observé, mais seulement le régime de propagation avec une demi-cellule. Dans les mélanges riches avec l'air, on obtient au plus une cellule de détonation sur la plaque de suie. La taille de cellule correspondante est de 53 mm pour une richesse de 1,3.

#### 5.4.2.4 Comparaison entre les mélanges M1 et M3

Si on compare les résultats obtenus dans le cas de l'isooctane (mélanges M1) avec ceux de n-octane (mélanges M3), on constate que les célérités moyennes de détonation sont assez proches, avec un déficit de célérité par rapport à la valeur idéale CJ un peu plus importante dans le cas des mélanges M3 (en restant toutefois inférieur à 10 %).

En ce qui concerne la largeur des cellules, on observe sur la figure 5.60 qu'elle est légèrement plus élevée dans le cas du n-octane (M3).

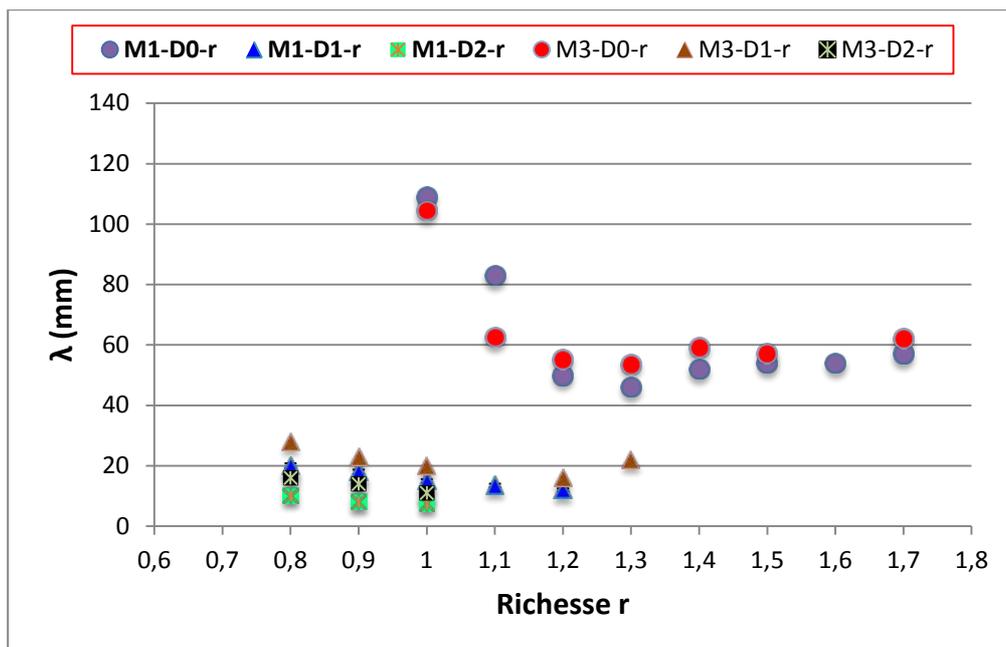


Fig. 5. 60 – Taille  $\lambda$  des cellules de détonation des mélanges M1 et M3 en fonction de la richesse, à différentes dilutions (293 K, 1 bar)

Ce résultat doit être selon nous mis en relation avec le fait que si M1 et M3 ont la même composition chimique, M1 a une volatilité plus élevée que M3, ce qui lui confère une plus grande détonabilité.

## 5.5 Détonations dans les aérosols de décane (M4)

Le mélange réactif considéré est constitué d'un carburant liquide de la famille chimique des alcanes saturés ( $C_nH_{2n+2}$ ) à chaîne linéaire à dix carbones :  $C_{10}H_{22}$ , et d'un oxydant gazeux ( $O_2 + \beta N_2$ ) où  $\beta$  est le rapport de dilution.

Les principales propriétés physico-chimiques du n-décane sont regroupées dans le tableau 5.5:

Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire	Densité ( $kg/m^3$ )	Température d'ébullition (K)	Pression de vapeur saturante à 20 °C (kPa)
n-Décane	$C_{10}H_{22}$	142	726	447	0,17

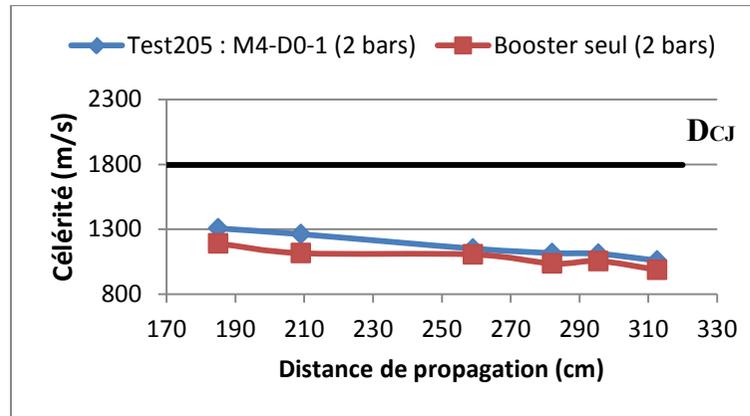
Tableau 5.5 – Principales propriétés physico-chimiques du n-décane

### 5.5.1 Mélanges décane-air (M4-D0)

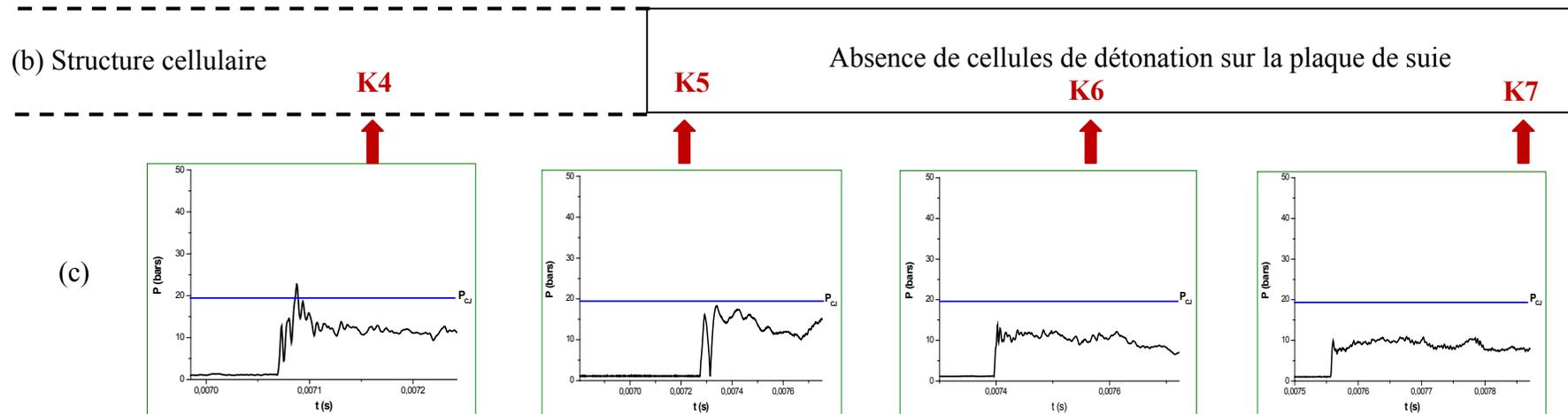
Des expériences ont été effectuées avec des mélanges décane-air pour trois richesses différentes (0,8 ; 1 et 1,3). Dans nos conditions expérimentales, l'initiation d'une détonation n'a jamais été obtenue. Un exemple est montré sur la figure 5.61, dans le cas du mélange stœchiométrique.

On constate que le choc incident décroît au fur et à mesure de sa propagation dans le tube et suit l'évolution du choc généré dans le cas du booster seul. Aucune structure cellulaire n'est enregistrée sur les plaques. On en déduit que le mélange réactif n'a pas été allumé.

De nouvelles tentatives ont été effectuées, en augmentant la pression initiale dans le booster de 2 bars à 3 bars et même à 3,3 bars. Malgré l'accroissement de la force du choc frontal, la détonation n'a pas été initiée. Toutefois, on peut voir sur la figure 5.62 qu'en fin de propagation, le front de choc a une amplitude d'environ 20 bars et est suivi d'une onde de compression de même amplitude à environ 100  $\mu$ s dans l'écoulement aval. On peut caractériser ce régime de propagation comme une onde de choc suivi d'une combustion retardée du mélange. Mais le couplage entre le front de choc et la zone de combustion ne se réalise pas, ce qui fait que la détonation n'est pas formée.

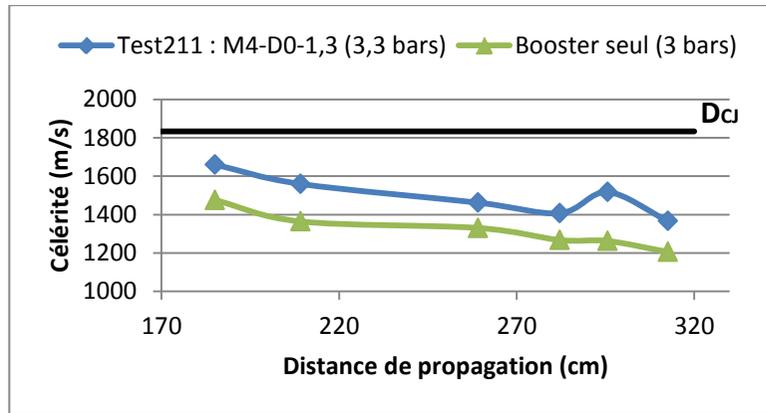


(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation



(c)

Fig. 5. 61 – Mélange M4-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

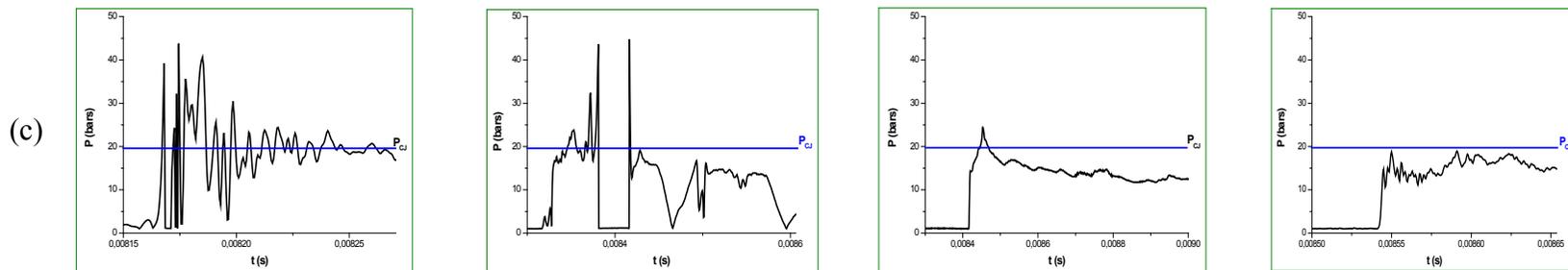
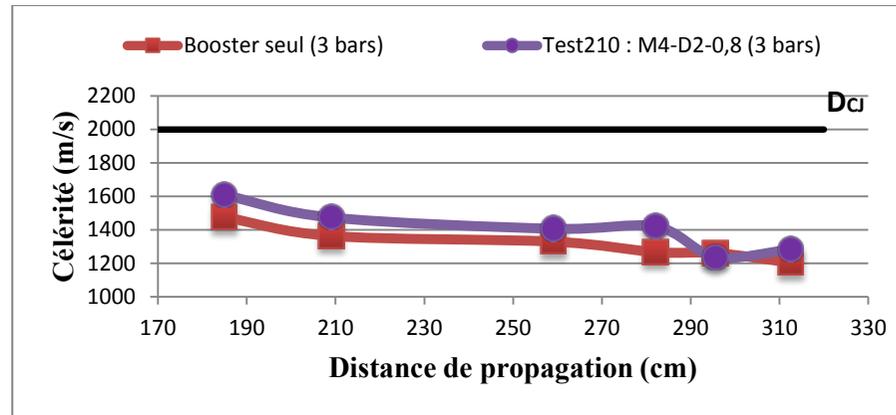


Fig. 5.62 – Mélange M4-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

### **5.5.2 Influence de la dilution $\beta$**

Nous avons procédé à quelques essais dans un mélange de dilution  $\beta = 1$ , M4-D2-0,8 avec initiation par un booster de pression initiale 3 bars.

Comme on peut le constater sur la figure 5.63, la détonation n'a pas été formée. Les observations sont qualitativement les mêmes que celles de la figure 5.62. On peut remarquer, toutefois, que la recompression des produits derrière le front de choc incident se produit plus près derrière de celui-ci.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

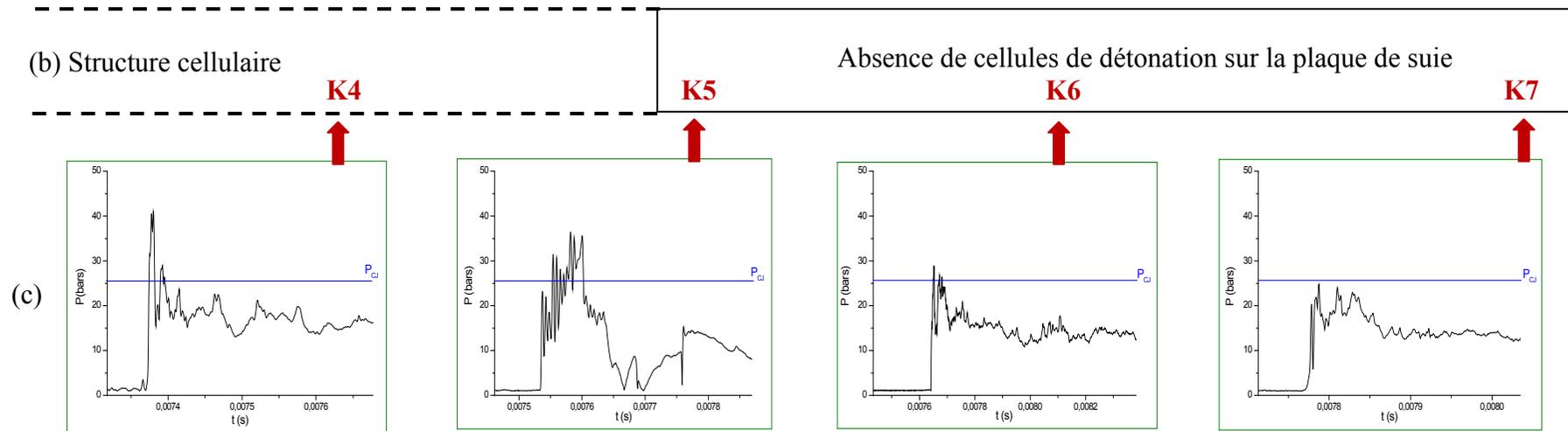


Fig. 5.63 – Mélange M4-D2-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

### 5.5.3 Conclusions

D'après les observations précédentes, la détonation du mélange M4-D2-0,8 n'a pu être obtenue en dépit du fait que la combustion du mélange était amorcée par l'onde de choc incidente. Toutefois, on peut s'interroger sur le fait qu'en diminuant encore la dilution, en augmentant la force du choc incident et en utilisant un tube de plus grande longueur pour augmenter la distance de propagation, on puisse former une détonation dans un aérosol de décane.

Or, dans son travail de thèse mené en parallèle avec la présente étude, Mar (2012) a montré que, dans des conditions expérimentales identiques aux nôtres, si on diminuait la taille initiale des gouttelettes de décane de 30  $\mu\text{m}$  (notre étude) à 8  $\mu\text{m}$  (étude de Mar), la détonation d'un aérosol de décane et d'air pouvait être initiée dans des domaines de richesse allant de 0,9 à 2,3. La structure cellulaire est observée : il s'agit de grosses cellules dont la largeur minimum est obtenue à une richesse d'environ 1,8 avec  $\lambda \approx 53$  mm. Ainsi, il apparaît qu'avec le décane dont la volatilité est très faible, la condition pour qu'une détonation puisse s'établir dans un aérosol à température ambiante est que la vaporisation du carburant se produise suffisamment rapidement sous l'effet du chauffage et de l'atomisation sous choc des gouttelettes de carburant. Il semble donc que ce soit le paramètre prépondérant, plutôt que le taux de dilution de l'oxydant. Cette conclusion est corroborée par les travaux antérieurs qui ont montré qu'il était possible de faire détoner des mélanges de décane et d'air après qu'ils aient été préchauffés à 100 °C de sorte que le décane soit entièrement vaporisé (Benedick et al., 1989, Tieszen et al., 1991).

## 5.6 Détonations dans les aérosols de Dodécane (M5)

Le mélange réactif considéré est constitué d'un carburant liquide de la famille chimique des alcanes saturés ( $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ ) à chaîne linéaire à douze carbones  $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$  et d'un oxydant gazeux ( $\text{O}_2 + \beta\text{N}_2$ ) où  $\beta$  est le rapport de dilution.

Les principales propriétés physico-chimiques du n-dodécane sont regroupées dans le tableau 5.6 :

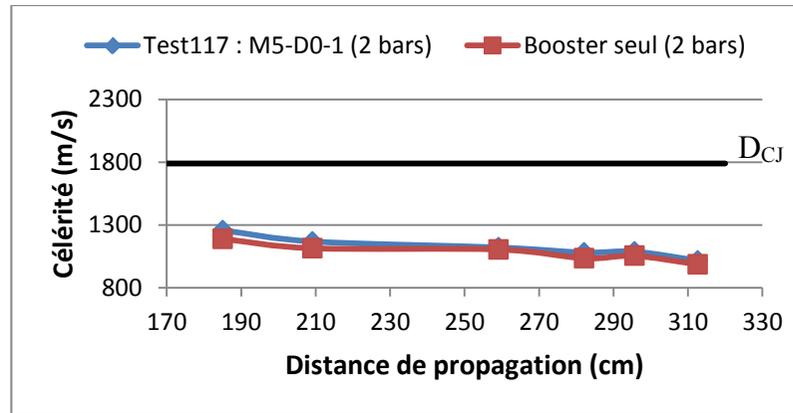
Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire	Densité (kg/m <sup>3</sup> )	Température d'ébullition (K)	Pression de vapeur saturante à 20 °C (kPa)
n-Dodécane	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	170	749	489	0,04

Tableau 5.6 – Principales propriétés physico-chimiques du n-dodécane

Donc, il s'agit d'un carburant encore moins volatil que le décane examiné au § 5.5.

### 5.6.1 Mélanges dodécane-air (M5-D0)

Des expériences ont été effectuées avec des mélanges dodécane-air (M5-D0) pour trois richesses différentes (0,8 ; 1 et 1,2). Comme pour le décane, l'initiation de la détonation n'a jamais été obtenue dans nos conditions expérimentales. Un exemple est montré sur la figure 5.64, dans le cas d'un mélange stœchiométrique. Les observations sont similaires à celles effectuées dans les mélanges M4-D0. De même, les tentatives faites dans le mélange M5-D0-1,2 (figure 5.65) en augmentant la pression initiale du mélange du booster jusqu'à 3,22 bars ont été sans succès.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

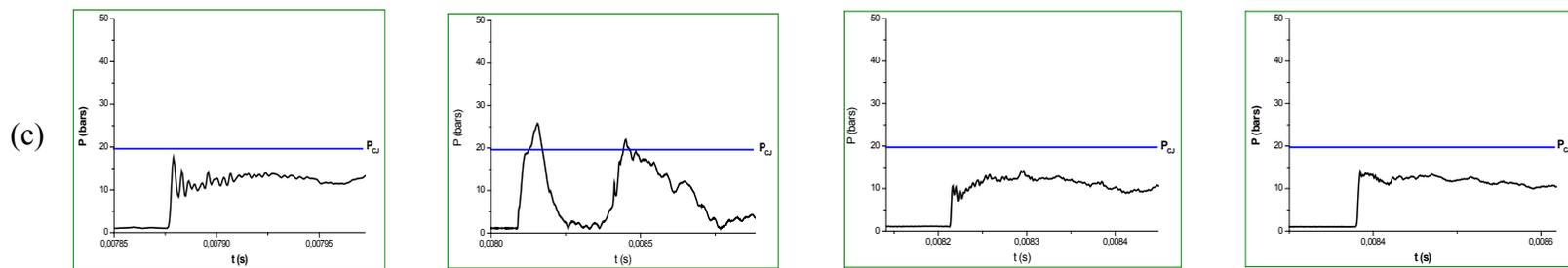
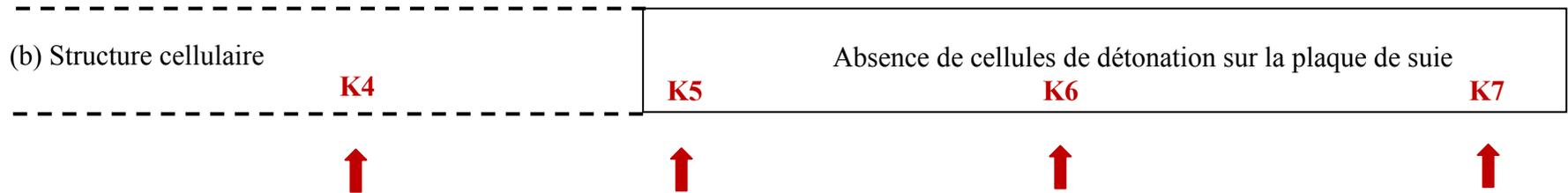
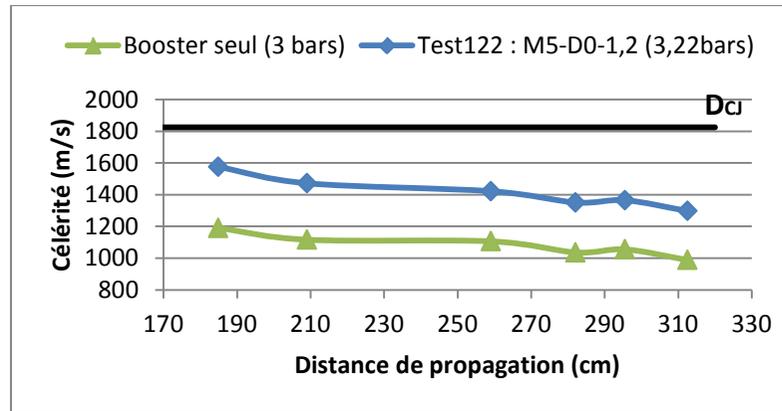


Fig. 5.64 – Mélange M5-D0-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

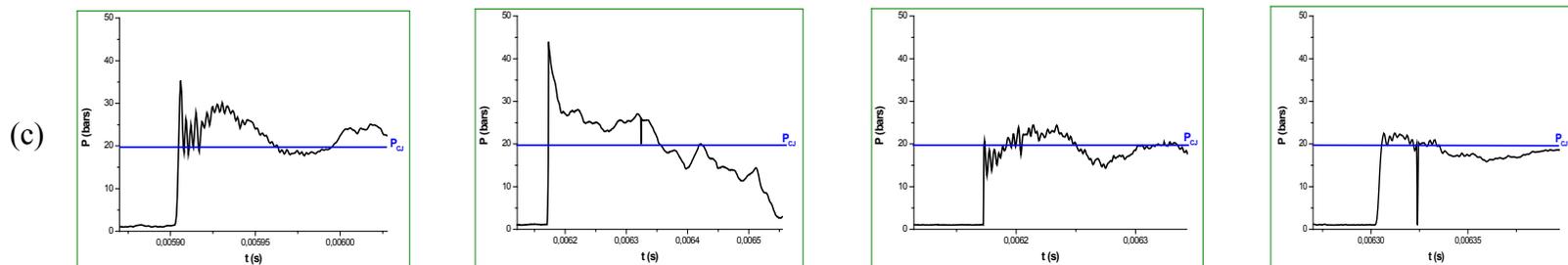
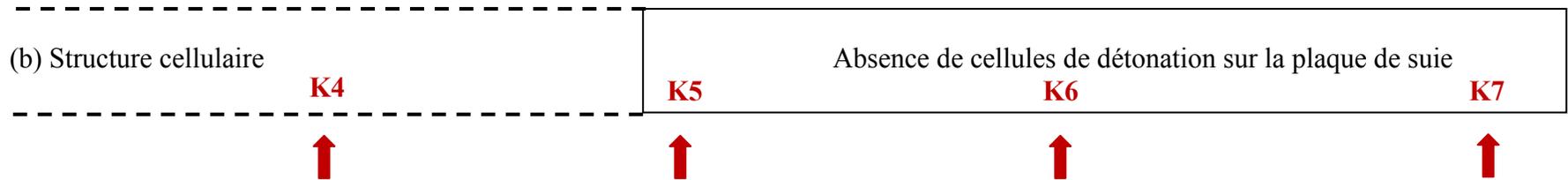
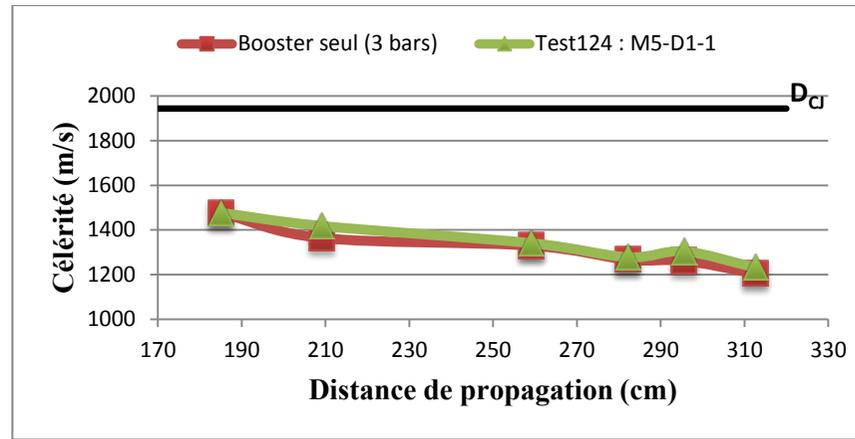


Fig. 5.65 – Mélange M5-D0-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

## 5.6.2 Influence de la dilution $\beta$

Comme pour les mélanges M4, nous avons procédé à des expériences dans les mélanges M5 en faisant varier la dilution du gaz oxydant,  $\beta = 3,76 ; 2 ; 1,5$  et 1. Un exemple est montré sur la figure 5.66, dans le cas d'un mélange stœchiométrique et pour une dilution  $\beta = 2$ , M5-D1-1,0.



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

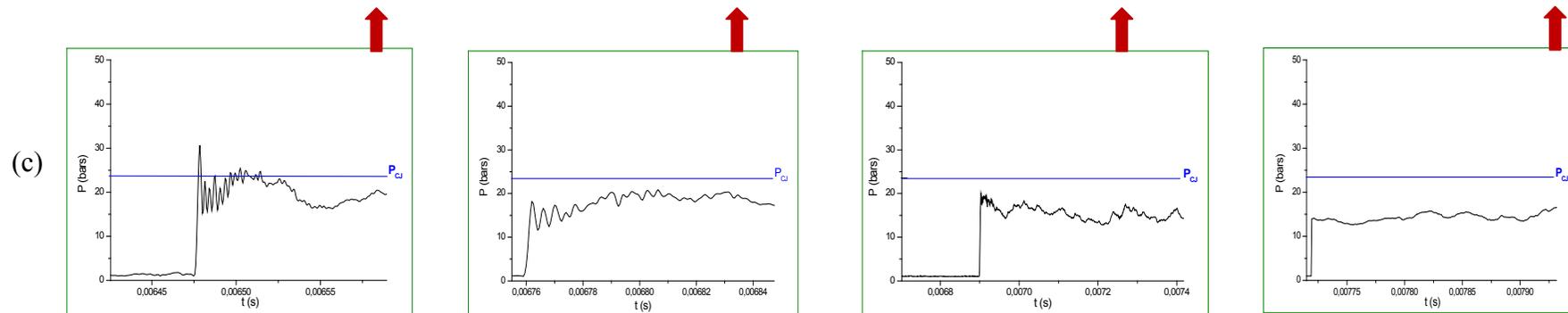
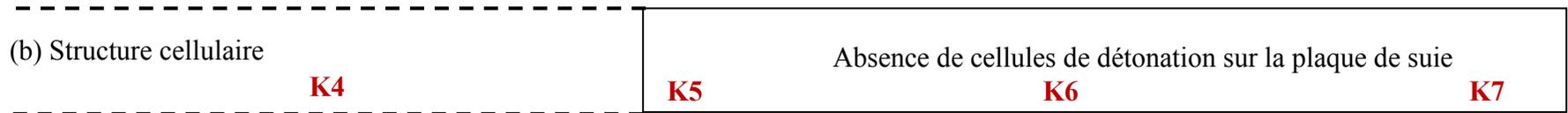


Fig. 5.66 – Mélange M5-D1-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

### 5.6.3 Conclusions

Les conclusions que l'on peut tirer des expériences dans les mélanges M5 avec le dodécane sont les mêmes que celles des mélanges M4 avec le décane. Ici encore, les travaux de Mar (2012) ont montré qu'on pouvait faire détoner des aérosols de dodécane et d'air, lorsqu'on diminue la taille des gouttelettes de 30  $\mu\text{m}$  à 8  $\mu\text{m}$ . Toutefois, lors de ses expériences avec le dodécane, il n'a observé que le régime de détonation hélicoïdal ou le régime de propagation à une demi-cellule. Ceci est cohérent avec le fait que le dodécane est encore moins volatil que le décane.

## 5.7 Détonations dans les aérosols de Nitrométhane (NM)

Le nitrométhane est un dérivé nitré ( $\text{CH}_3\text{NO}_2$ ) qui a la particularité d'être un monergol et contient donc des atomes d'oxygène. La richesse équivalente est de 1,73. Il est utilisé comme carburant moteur, seul ou en additif. Il sert aussi souvent comme explosif modèle pour l'étude des explosifs liquides.

Les principales propriétés physico-chimiques du nitrométhane sont regroupées dans le tableau 5.7:

Carburant liquide	Formule brute	Poids moléculaire	Densité ( $\text{kg/m}^3$ )	Température d'ébullition (K)	Pression de vapeur saturante à 20 °C (kPa)
Nitrométhane	$\text{CH}_3\text{NO}_2$	61	1137	374	3,70

Tableau 5.7 – Principales propriétés physico-chimiques du nitrométhane

### 5.7.1 Expériences avec des aérosols de granulométrie 30 $\mu\text{m}$

Dans nos conditions expérimentales, nous avons procédé à des essais d'initiation de la détonation dans des mélanges NM-D0 ; mais sans succès, même en augmentant la pression initiale du booster jusqu'à 3 bars. Un exemple est montré sur la figure 5.67.

Il faut cependant souligner que pour ces expériences nous n'avons pas pu opérer à des richesses globales (oxygène du nitrométhane + oxygène de l'air) supérieures à 0,25, en raison des limitations en débit de notre dispositif expérimental.

### **5.7.2 Expériences avec des aérosols de granulométrie 8 $\mu\text{m}$**

Nous avons procédé au même type d'expériences avec des aérosols de granulométrie 8  $\mu\text{m}$ . Pour cela, nous avons utilisé le générateur d'aérosols de Mar qui est décrit dans sa thèse (Mar 2012).

Sur la figure 5.68, nous avons rassemblé les résultats obtenus dans le cas du mélange NM-D0-0,25 avec des gouttelettes de 8  $\mu\text{m}$ . On constate qu'avec un allumage « standard » (pression initiale du booster de 2 bars) une détonation a été initiée. La célérité de détonation  $D_{\text{exp}}$  est quasi constante avec de très faibles fluctuations, et sa valeur moyenne, autour de 1463 m/s, est à peine inférieure (environ 0,2%) à la valeur théorique  $D_{\text{CJ}}$  (1466m/s, calculée par le code TDS à une richesse de 0,25).

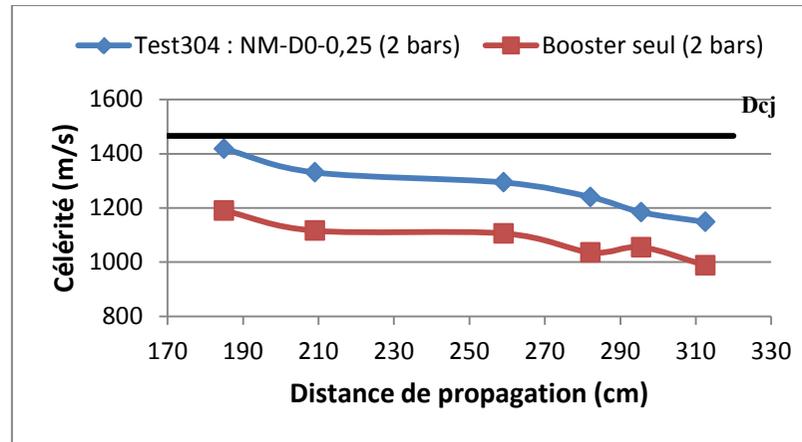
Le motif cellulaire de la structure de détonation est de forme remarquablement régulière et reproductible. Sa largeur caractéristique est  $\lambda \approx 53$  mm. Les cellules sont très nettes et bien structurées.

Les profils de pression indiquent de fortes fluctuations de la pression pour les capteurs K4 à K6, avec des fluctuations périodiques à l'arrière du front.

En conclusion, il apparaît qu'on peut faire détoner un aérosol de nitrométhane dans l'air, pourvu que sa granulométrie soit suffisamment petite.

### **5.7.3 Expériences dans des aérosols NM/azote**

Compte tenu de nos résultats sur l'initiation de la détonation dans un aérosol NM/air de très faible richesse ( $r = 0,25$ ), nous avons cherché à savoir s'il était possible, puisque le nitrométhane est un monergol, d'établir une détonation dans un aérosol dont la phase gazeuse était composée uniquement d'azote. Dans nos conditions expérimentales, nous n'avons pas pu initier une détonation, même en augmentant la pression initiale du prémélange dans le booster jusqu'à 3,5 bars.



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

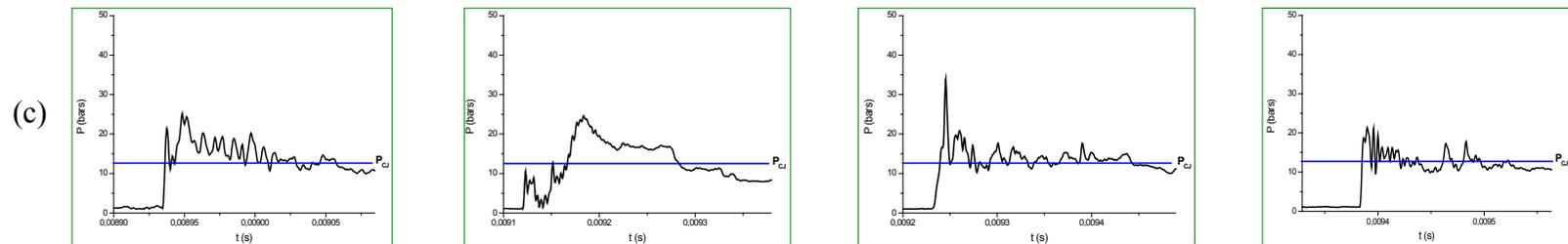
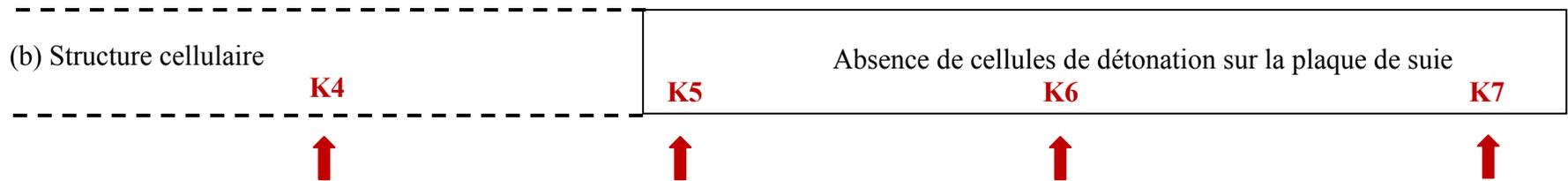
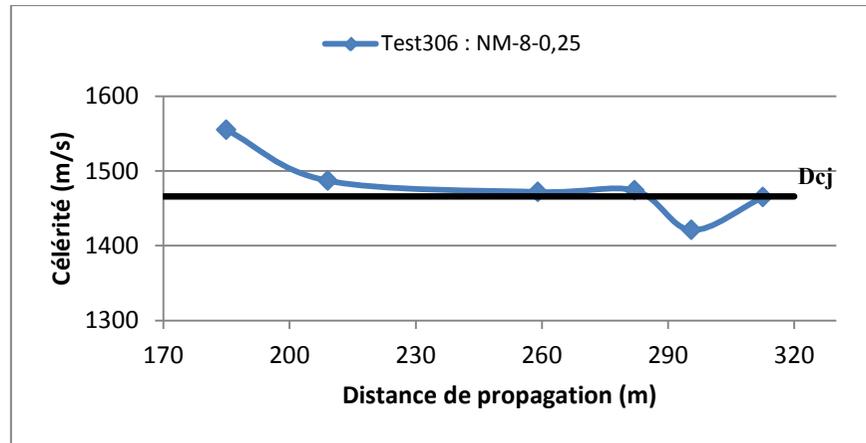


Fig. 5.67 – Mélange NM-D0-0,25 avec  $d_0 = 30 \mu\text{m}$  : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

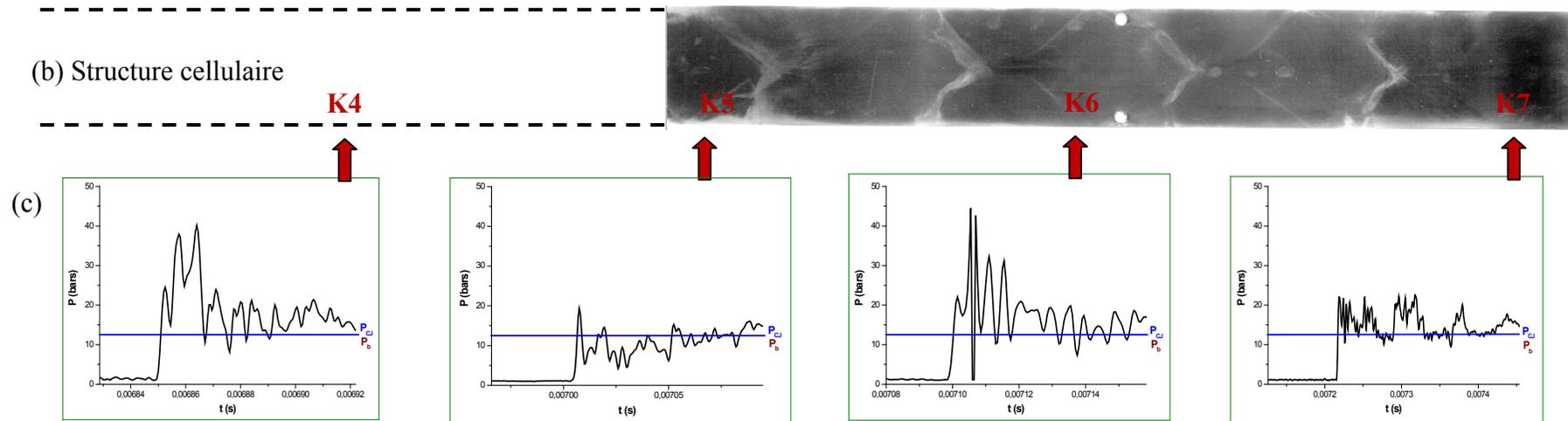


Fig. 5.68 – Mélange NM-D0-0,25 avec  $d_0 = 8 \mu\text{m}$  : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression

## 5.8 Conclusions sur l'étude expérimentale des détonations biphasiques d'aérosols de carburants liquides

Les résultats obtenus lors de nos expériences des détonations biphasiques d'aérosols de gouttelettes liquides réactives, dans les conditions standards de température et de pression, nous permettent d'établir les conclusions suivantes :

- L'amorçage de la détonation dans les mélanges biphasiques est possible, pour tous les carburants liquides étudiés, sans procéder au préalable à l'évaporation totale du carburant.
- Dans ces mélanges biphasiques, la structure tridimensionnelle de détonation a été mise en évidence chaque fois que la détonation a été observée.
- Pour les carburants très volatils, tels l'isooctane ou le n-heptane, la détonation est initiée pour des mélanges avec l'air. Lorsque la richesse augmente à partir de  $r = 0,7$ , on observe successivement un régime de propagation hélicoïdal, puis un régime marginal à demi-cellule, puis le régime de détonation multitête avec plusieurs cellules.

Lorsque l'on diminue la dilution  $\beta$  du mélange gazeux oxydant, seul le régime de détonation multitête est observé et la taille de cellule diminue.

Si on remplace l'azote par de l'argon comme diluant inerte, on observe le régime de détonation multitête avec une taille de cellule plus petite qu'avec l'azote. La régularité des cellules de détonation est également meilleure avec l'argon.

- Pour le n-octane, carburant à volatilité intermédiaire, les observations sont assez proches de celles de l'isooctane, mais la taille des cellules est légèrement plus importante, ce qui signifie une plus faible détonabilité.

Deux raisons peuvent expliquer cette différence : (i) la structure moléculaire différente : liaisons ramifiées dans le cas de l'isooctane et liaisons linéaires dans le cas du n-octane, (ii) la volatilité plus importante de l'isooctane (pression de vapeur saturante plus élevée).

- Pour les carburants à faible volatilité, tels le n-décane et le n-dodécane, il n'a pas été possible d'initier la détonation, quelle que soit la richesse, la dilution ou la force du choc d'initiation. Cependant, au cours de travaux parallèles aux nôtres, la mise en détonation de ces aérosols avec l'air a été obtenue pour des gouttelettes de granulométrie plus fine ( $8 \mu\text{m}$  au lieu de  $30 \mu\text{m}$ ).

- La limite inférieure de détonabilité a été observée pour les mélanges très volatils, et une dilution  $D0$  (air,  $\beta = 3,76$ ), entre les richesses  $r = 0,6$  et  $0,7$ . Cependant, cette limite de détonabilité a tendance à se déplacer vers des richesses plus faibles lorsque le rapport de dilution  $\beta$  diminue. En effet, pour la même richesse ( $r = 0,6$ ), la taille moyenne de la cellule de détonation est  $\lambda = 35 \pm 15$  mm pour un rapport de dilution  $\beta = 2$ .

La détonation devient plus stable avec l'augmentation de la richesse, et ses caractéristiques (célérité et pression) sont maximales pour des richesses comprises entre 1,3 et 1,7. La limite supérieure de détonabilité n'a jamais été observée.

- La dimension des structures cellulaires observées est plus grande que celles des mélanges d'hydrocarbures gazeux tels le propane, l'éthylène, ...etc. (excepté le méthane). La taille de cellules est plus grande que celles des cellules observées lors des rares expériences antérieures réalisées dans des tubes de détonation chauffants. De manière générale, il s'avère que les mélanges biphasiques sont plus difficiles à faire détoner que les mélanges homogènes gazeux.
- La détonation a pu être initiée dans un aérosol (de granulométrie  $8 \mu\text{m}$ ) de nitrométhane et d'air de richesse 0,25 dans des conditions standards de température et de pression. C'est un résultat tout à fait nouveau.

Tous ces résultats indiquent que la possibilité d'initier une détonation dans un milieu réactif hétérogène constitué d'un aérosol de carburant liquide dans une atmosphère gazeuse oxydante est fortement dépendante de la longueur d'induction chimique, que l'on peut faire varier avec la richesse, et la dilution du mélange et la nature du carburant. Toutefois, les conditions critiques d'obtention d'une longueur d'induction chimique permettant une libération suffisamment rapide de l'énergie conduisant au couplage choc-zone de combustion, caractéristique du régime de détonation, dépendent aussi de la granulométrie des gouttelettes.

Nous examinons dans les chapitres 6 et 7 ci-après par simulation numérique, les processus de formation de la détonation en nous intéressant plus particulièrement aux facteurs physico-chimiques qui conduisent à la réduction de la longueur d'induction.



## **Chapitre 6**

### **Modèle numérique pour les détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides**



Dans ce chapitre, nous exposons les principales caractéristiques du modèle numérique qui a été utilisé en vue d'effectuer les simulations numériques présentées au chapitre 7.

Ce modèle a été implanté dans le code de calcul EFAE (Enhanced Fuel Air Explosion), développé par B. Khasainov (1996, 2005).

## 6.1 Hypothèses

Le modèle numérique s'appuie sur les principales hypothèses suivantes :

- La modélisation des détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides repose sur la théorie des écoulements multiphasiques de Nigmatulin (1970) : modèle continu à phases séparées.
- Le milieu est un fluide non visqueux, sans conductivité thermique et diffusion, ce qui est une hypothèse raisonnable en raison de la vitesse d'écoulement élevée.
- Les gaz sont supposés parfaits.
- La détonation est décrite par le modèle ZND considérant une épaisseur finie de la zone de réaction.
- La taille moyenne des particules est suffisamment grande devant les distances de la dynamique moléculaire, mais petite devant les autres dimensions caractéristiques du problème.
- La fraction volumique des gouttes ainsi que les interactions inter-gouttes sont négligées.
- Les gouttelettes considérées sont de faible diamètre et leur température interne est supposée uniforme. L'intégralité de l'énergie apportée par le gaz sert au processus d'évaporation.
- Les gouttelettes sont sphériques, monodispersées, indéformables et incompressibles. Sous l'effet du choc incident, elles sont accélérées puis déformées par les forces aérodynamiques développées dans l'écoulement du gaz derrière le choc. On introduit en plus un mécanisme de fragmentation mécanique des gouttelettes sous l'effet de l'onde de choc (modèle de désintégration selon Hsiang et Faeth (1992) avec une seule fragmentation, voir Mar (2012)).

- La volatilité du carburant liquide est prise en compte via sa température d'ébullition et la chaleur d'évaporation.
- L'évaporation des gouttelettes obéit à une loi classique (loi en  $d^2$ ).
- Les réactions chimiques entre le combustible évaporé et les gaz oxydant sont décrites par une cinétique à deux étapes : une phase d'induction suivie d'une phase de combustion.
- Les pertes aux parois sont ignorées.

Dans le formalisme de la théorie d'écoulement biphasique de Nigmatulin (1970), le milieu diphasique est vu comme la juxtaposition de deux fluides continus, coexistant et s'interpénétrant. Les équations de bilan sont traitées séparément, pour chaque phase.

Les interactions entre les phases sont traitées par la modélisation des termes sources des équations de bilan.

## 6.2 Equations de bilan pour les phases liquide et gazeuse

Nous établissons les équations de bilan pour chaque phase, liquide et gaz, en prenant en compte la désintégration mécanique puis la vaporisation des gouttelettes.

Nous décrivons ensuite les termes d'échange de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Ces termes sources permettent le couplage entre les deux systèmes d'équations de bilan.

Enfin, nous présentons les équations spécifiques au bilan de masse des espèces gazeuses présentes durant la réaction chimique.

### 6.2.1 Equations de bilan pour la phase liquide

La dynamique de l'écoulement en aval du front de choc provoque une désintégration rapide des gouttelettes suivie d'une évaporation partielle ou totale.

Cependant, deux hypothèses supplémentaires sont établies :

- la désintégration des gouttelettes est accompagnée par une évaporation partielle de ces dernières (si la température d'ébullition des gouttelettes est atteinte : c'est la loi d'évaporation classique du  $d^2$ ).
- Les microgouttelettes « filles » formées par la désintégration ne subissent qu'une évaporation pure.
- **Bilan de masse**

Le taux de perte de masse  $\mathbf{J}$  de la phase condensée (taux de transfert de masse entre les deux phases) s'établit en considérant les interactions entre l'écoulement convectif généré par le passage de l'onde de choc incidente et les gouttelettes, ce qui donne : une désintégration + une évaporation des gouttelettes initiales, suivie de l'évaporation pure des microgouttelettes formées. Ainsi, on aura :

- désintégration + évaporation des gouttelettes initiales (gouttelettes «mères») :

$$\frac{\partial \sigma_1}{\partial t} + \mathbf{div}(\sigma_1 \mathbf{u}_d) = -\mathcal{S}_1 - \mathbf{J}_1 \quad (6.1a)$$

- évaporation pure des microgouttelettes formées (gouttelettes «filles») :

$$\frac{\partial \sigma_2}{\partial t} + \mathbf{div}(\sigma_2 \mathbf{u}_d) = \mathcal{S}_1 - \mathbf{J}_2 \quad (6.1b)$$

Ici, l'indice 1 caractérise les gouttelettes « mères » et l'indice 2 les gouttelettes « filles ».

Ainsi :  $\sigma_1$ ,  $\mathbf{u}_d$ ,  $\mathcal{S}_1$  et  $\mathbf{J}_1$  sont respectivement la concentration (densité apparente), le vecteur de vitesse, le taux de désintégration de gouttes mères et le taux d'évaporation des gouttelettes « mères ». On retrouve les mêmes paramètres, d'indice 2, pour les gouttelettes « filles ».

Notons que  $\sigma_1 = \rho_d \varphi_d$ , où  $\rho_d$  est la densité du liquide et  $\varphi_d$  est la fraction volumique des gouttelettes.

La somme des équations (6.1a) et (6.1b) montre que la masse du liquide ne diminue qu'à cause de l'effet de l'évaporation.

- **Bilan de quantité de mouvement**

- pour des gouttelettes «mères») :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\sigma_1 u_{d1}) + \mathbf{div}(\sigma_1 u_{d1} \mathbf{u}_d) = f_1 - \mathcal{S}_1 u_{d1} - \mathbf{J}_1 u_{d1} \quad (6.2a)$$

- pour des microgouttelettes «filles» :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\sigma_2 u_{d2}) + \text{div}(\sigma_2 u_{d2} u_{d2}) = f_2 + S_1 u_{d1} - J_2 u_{d2} \quad (6.2b)$$

$f_1$  étant la force de trainée exercée par les gaz sur les gouttelettes « mères ». Cette force permet d'accélérer les gouttelettes en aval du choc. Tandis que le produit  $J_1 u_{d1}$  est une force réactive qui tend à diminuer l'impulsion des gouttelettes à cause de l'évaporation.

D'autre part, l'impulsion perdue par les gouttelettes « mères », grâce au produit  $S_1 u_{d1}$ , est récupérée par les gouttelettes « filles » formées. Puis, le terme  $J_2 u_{d2}$  va augmenter l'impulsion du gaz.

- **Bilan d'énergie**

- pour des gouttelettes «mères» :

$$\frac{\partial E_{d1}}{\partial t} + \text{div}(u_{d1} E_{d1}) = -S_1 e_{d1} - J_1 e_{d1} + f_1 u_{d1} + q_1 \quad (6.3a)$$

-évaporation pure des microgouttelettes «filles» :

$$\frac{\partial E_{d2}}{\partial t} + \text{div}(u_{d2} E_{d2}) = S_1 e_{d2} - J_2 e_{d2} + f_2 u_{d2} + q_2 \quad (6.3b)$$

avec :

$$E_{d_i} = \sigma_i \left( e_{d_i} + \frac{u_{d_i}^2}{2} \right) \quad (6.4)$$

où :

$E_{d_i}$  (i = 1, 2) : énergie totale des gouttelettes,

$e_{d_i}$  (i = 1, 2) : énergie interne des gouttelettes et est donnée par l'expression  $e_{d_i} = c_l T_{d_i}$

$c_l$  : capacité calorifique massique de liquide,

$T_{d_i}$  : température des gouttelettes,

$q_i$  (i = 1, 2) : taux d'échange de chaleur entre gaz et gouttelettes.

L'énergie totale des gouttelettes « mères » perdue à cause de la désintégration est récupérée par les gouttelettes « filles » produites lors de la désintégration.

- **Nombre de gouttelettes**

La loi de variation du nombre de gouttelettes initiales « mères » où  $n_1$  est défini par une équation de bilan qui prend la forme :

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \text{div}(n_1 u_{d1}) = 0 \quad (6.5)$$

avec l'hypothèse que le nombre de gouttelettes « mères » ne varie pas. Mais leur désintégration donne naissance aux gouttelettes filles avec un diamètre plus petit du fait de la désintégration (leur nombre augmente) et qui correspond aux conditions d'écoulement instantané et local derrière le front du choc selon le modèle de fragmentation de Hsiang et Faeth (1992).

Cependant, le nombre de gouttelettes « filles »  $n_2$  dans l'unité de volume générées à la fin de la désintégration, est déterminé en se basant sur la conservation de masse :

$$n_2 = \frac{6\sigma_2}{\pi\rho_d d_2^3} \quad (6.6)$$

avec  $\sigma_2$  leur densité,  $\rho_d$  la masse volumique de la phase liquide,  $d_2$  le diamètre des gouttelettes « filles » stable obtenu après désintégration. Selon le modèle de Hsiang et Faeth

(1992),  $d_2$  est défini comme :

$$d_2 = 6,2 \left( \frac{\rho_d}{\rho} \right)^{0,25} \left[ \frac{\mu d_1}{(\rho_d |u - u_{d2}|)} \right]^{0,5} \quad (6.7)$$

avec  $\rho$  et  $u$  la densité et vitesses de gaz,  $\mu$  la viscosité dynamique du liquide.

## 6.2.2 Equations de bilan pour la phase gazeuse

- **Bilan de masse**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho u) = \sum_1^2 J_i \quad (6.8)$$

- **Bilan de quantité de mouvement**

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \text{div}(\rho u \cdot u) = -\text{grad}(p) + \sum_1^2 J_i u_{di} - f \quad (6.9)$$

où  $f = f_1 + f_2$  est le taux d'augmentation de l'impulsion de la phase gazeuse.

- **Bilan d'énergie**

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \text{div}[u(E + p)] = \sum_1^2 J_i e_{di} - \sum_1^2 f_i u_{di} + Q \frac{d\rho_{rp}}{dt} - q \quad (6.10)$$

où  $q = q_1 + q_2$

L'énergie totale  $E$  de la phase s'exprime par l'expression :

$$E = \rho \left( e + \frac{1}{2} u^2 \right) \quad (6.11)$$

où :  $E, e, u, p, \rho$  représentent respectivement l'énergie totale, l'énergie interne, la vitesse matérielle, la pression et la densité de la phase gazeuse,

$Q$  étant la chaleur de réaction entre la vapeur combustible et l'oxydant,

$\rho_{rp}$  représente la densité des produits de réaction.

Remarque : La somme des équations de bilan, (6.1, a et b) et (6.8) ; (6.2, a et b) et (6.9) ; (6.3, a et b) et (6.10) montrent une conservation globale de la masse (en raison de l'évaporation des gouttelettes), de la quantité de mouvement et de l'énergie du mélange biphasique.

### 6.2.3 Paramètres d'interactions entre les phases gazeuse et liquide

Dans cette partie, on va décrire les termes de transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie permettant le couplage entre les deux systèmes d'équations de bilan. Ces termes sources sont générés par la désintégration et l'évaporation des gouttelettes sous l'effet du choc et de l'écoulement convectif en aval de celui-ci.

#### 6.2.3.1 Taux de désintégration de gouttelettes liquides

Le taux de désintégration  $S_1$  est piloté par le temps de désintégration  $\tau_{b_1}$  pendant le processus de fragmentation des gouttelettes.

$$S_1 = \frac{\sigma_1}{\tau_{b_1}} \quad (6.12)$$

où  $\tau_{b_1}$  est le temps total de désintégration (une seule désintégration dans notre cas) qui selon le modèle de désintégration de Hsiang et Faeth (1992) est exprimé par la relation :

$$\tau_{b_1} = \frac{5d_1}{\left[1 - \left(\frac{Oh}{7}\right)\right] |u - u_{d1}|} \left(\frac{\rho_d}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.13)$$

où  $Oh$  est le nombre d'Ohnesorge, qui s'écrit :

$$Oh = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d d \sigma_d}}$$

### 6.2.3.2 Taux de vaporisation de gouttelettes liquides

Le taux d'évaporation est issu du chauffage des gouttelettes par convection du fait de la température élevée des gaz environnants. Dans notre modèle numérique, ce taux sera explicité de la manière suivante :

$$\left. \begin{aligned} J_i &= 0 \quad \text{si} \quad T_{di} < T_d^{eb} \\ J_i &= \frac{dm_i}{dt} = \frac{q_i}{L_v} \quad \text{si} \quad T_{di} \geq T_d^{eb} \end{aligned} \right\} \quad (6.14)$$

où :  $i=1, 2$ ,  $L_v$  est la chaleur latente d'évaporation,  $T_d^{eb}$  la température d'ébullition du liquide, et  $q_i$  le flux de chaleur entre les deux phases : son expression est donnée dans le paragraphe 6.2.3.4, où l'on voit un effet de la convection sur le taux d'évaporation via les nombres de Nusselt et de Reynolds.

### 6.2.3.3 Taux d'échange d'impulsion entre la phase gazeuse et la phase liquide

La force de traînée  $f_i$  ( $i = 1, 2$ ) exercée sur des gouttelettes dans un écoulement gazeux, est due au gradient de pression du gaz sur la surface de ces gouttelettes. Dans les conditions

d'écoulement derrière une onde de choc, cette force de traînée est prédominante; les autres forces contribuent moins et peuvent être incorporées dans un coefficient de traînée efficace  $C_D$ . L'influence des interactions directes entre gouttelettes est négligée, de même que la compression des gouttelettes. On peut ainsi exprimer la force de traînée comme suit :

$$f_i = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_d} \frac{\sigma_i}{d_i} C_{D_i} (u - u_{di}) |u - u_{di}| \quad (6.15)$$

Le coefficient de traînée est calculé par la relation (Nigmatulin, 1970) :

$$C_{D_i} = \frac{24}{Re_i} + \frac{4,4}{\sqrt{Re_i}} + 0,42 \quad (6.16)$$

On rappelle que le nombre de Reynolds est défini par :  $Re_i = \frac{\rho |u - u_{di}| d_i}{\mu}$  où,  $|u - u_{di}|$  est la vitesse relative gouttelettes/gaz,  $d_i$  est le diamètre des gouttelettes et  $\mu$  est la viscosité dynamique du gaz.

#### 6.2.3.4 Taux d'échange d'énergie entre les phases

Ici, on néglige l'influence des interactions directes entre les gouttelettes, on peut ainsi présenter le taux du transfert de chaleur  $q_i$  ( $i = 1, 2$ ) dû à la convection et au rayonnement du gaz à chaque fraction de gouttelettes comme suit :

$$q_i = \frac{6\sigma_i}{\rho_d d_i} \left[ \frac{Nu_i \lambda_g (T - T_{di})}{d_i} + \varepsilon \sigma_B (T^4 - T_{di}^4) \right] \quad (6.17)$$

où  $\rho_d$  est la densité du liquide,  $Nu_i$  est le nombre de Nusselt,  $\lambda_g$  est la conductivité thermique,  $\varepsilon$  l'émissivité,  $\sigma_B$  la constante de Boltzmann.  $T$  et  $T_{di}$  sont les températures respectives du gaz et des gouttelettes.

Le nombre de Nusselt est défini comme étant le rapport du flux de chaleur convectif transféré aux gouttelettes au flux de chaleur de conduction transféré dans le gaz. Pour des gouttelettes liquides sphériques et incompressibles, ce nombre de Nusselt dépend des nombres de Reynolds  $Re_i$  et de Prandtl  $Pr$ .

$$Nu_i = 2 + 0,6Pr\sqrt{Re_i} \quad \text{avec:} \quad Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda_g} \quad (6.18)$$

où :  $c_p$  est la capacité thermique massique à pression constante et  $\mu = \rho.v_g$ , la viscosité dynamique des gaz.

## 6.2.4 Phases de combustion

### 6.2.4.1 Réaction chimique dans la phase gazeuse

Derrière le front de choc, les gouttelettes liquides se vaporisent et forment avec l'air un mélange combustible dans la phase d'induction. Lorsque la phase d'induction s'achève c'est la phase de réaction exothermique qui commence, formant des produits de détonation. Cette phase de réaction prend fin lorsque la totalité de vapeur de combustible et/ou d'oxydant est consommée.

#### ► Période d'induction

La période d'induction représente la phase de production de vapeur combustible par évaporation des gouttelettes liquides entre le front de choc et le début de la zone de réaction.

La fraction du délai d'inflammation  $Y$  dans la zone d'induction est pilotée par une loi de type Arrhenius qui est définie comme suit :

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \text{div}(\bar{u}Y) = -\frac{1}{t_{ind}} = -Z_{ind} \exp\left(-\frac{\varepsilon_a}{RT}\right) \quad (6.19)$$

où :  $Z_{ind}$ ,  $\varepsilon_a$ , sont respectivement le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation gouvernant la phase d'induction,  $t_{ind}$  le délai d'inflammation,  $R$  et  $T$  représentent respectivement la constante universelle des gaz parfaits et la température des gaz.

La fraction du délai d'inflammation est définie de telle sorte que  $Y = 1$  avant le front de détonation; la condition  $Y = 0$  marque le début de la réaction chimique (plus la température de la phase gazeuse est importante, plus la période d'induction est courte).

► **Taux de combustion de vapeur**

Pour modéliser le taux de réaction du mélange réactif lorsque  $Y=0$ , on utilise le schéma cinétique simplifié introduit par Westbrook et Dryer (1981). Ce taux est explicité de la manière suivante :

$$\Gamma_{vap} = - Z_{arr} [\rho_{vap}]^b [\rho_{ox}]^a \cdot \exp - \frac{E_{Ac}}{RT} \quad (6.20)$$

où :  $Z_{arr}$  : facteur pré-exponentiel gouvernant la phase de combustion, il est défini

comme suit :  $Z_{arr} = \frac{A_c (10^6)^{1-b-a}}{(Wm_{vap})^{b-1} \cdot (Wm_{ox})^a}$  (Westbrook et Dryer (1981))

$A_c$  : Facteur pré-exponentiel des réactions chimiques gazeuses,

$E_{AC}$  : énergie d'activation gouvernant la phase de combustion,

$\rho_{vap}$  : concentration massique de la vapeur combustible,

$\rho_{ox}$  : concentration massique en oxydant,

$b$  : exposant associé à  $\rho_{vap}$ ,

$a$  : exposant associé à  $\rho_{ox}$ ,

$Wm_{vap}$  : masse molaire du combustible,

$Wm_{ox}$  : masse molaire de l'oxydant.

D'après (Westbrook et Dryer, 1981), les paramètres cinétiques  $A_c$  et  $E_{AC}$  ainsi que les exposants  $a$  et  $b$  de l'équation (6.20) pour les carburants liquides objets de notre étude sont données dans le tableau 6.1.

Carburant liquide	$E_{AC}$	$A_c$	a	b
n-Heptane	30	$5,1 \cdot 10^8$	1,5	0,25
n-Octane	30	$4,6 \cdot 10^8$	1,5	0,25
Isooctane	30	$3,68 \cdot 10^8$	1,5	0,25
n-Décane	30	$3,8 \cdot 10^8$	1,5	0,25
n-Dodécane	30	$3 \cdot 10^8$	1,5	0,25

$E_{AC}$  est exprimée en kcal/mole et  $A_c$  en  $[\text{mole} \cdot \text{cm}^{-3}]^{1-b-a} \cdot \text{s}^{-1}$

Tableau 6.1 – Paramètres cinétiques de combustion des hydrocarbures utilisés (Westbrook et Dryer, 1981)

### 6.2.4.2 Equations des espèces

En amont du front de détonation, le milieu est composé uniquement d'oxydant ( $\rho_{ox}$ ), alors qu'à l'arrière de celui-ci, le milieu gazeux est composé de trois espèces : le gaz frais (oxydant), la vapeur de combustible ( $\rho_{vap}$ ), et les produits stœchiométriques de détonation du mélange gazeux ( $\rho_{rp}$ ). Les concentrations ainsi que les fractions massiques de chaque espèce sont définies comme suit :

$$\rho_g = \rho_{ox} + \rho_{rp} + \rho_{vap} \quad (6.21)$$

$$\rho_{ox} = X_{ox} \cdot \rho, \quad \rho_{rp} = X_{rp} \cdot \rho, \quad \rho_{vap} = X_{vap} \cdot \rho \quad (6.22)$$

$$X_{ox} + X_{rp} + X_{vap} = 1 \quad (6.23)$$

où :  $X_{ox}$ ,  $X_{vap}$ ,  $X_{rp}$  sont les fractions massiques respectives d'oxydant, de vapeur combustible, et des produits formés après la réaction entre l'oxydant et la vapeur produite par les gouttelettes liquides.

#### ► Taux de consommation d'oxydant

La consommation d'oxydant est contrôlée par le taux de réaction entre la vapeur et l'oxydant. Son bilan est explicité de la façon suivante :

$$\frac{\partial \rho_{ox}}{\partial t} + \text{div}(\rho_{ox} u) = -\phi_{st} \Gamma_{vap} \quad (6.24)$$

où :  $\Gamma_{vap}$  est le taux de réaction entre l'oxydant et la vapeur combustible, et  $\phi_{st}$  représente le coefficient stœchiométrique (environ égal à 15 avec l'air comme oxydant).

#### ► Taux de formation et de consommation de vapeur

Le taux de consommation de vapeur quant à lui, est contrôlé en même temps par le taux d'évaporation de la phase liquide et le taux de réaction de la vapeur défini dans l'équation 6.20. Son bilan est donné par la relation (où  $J = J_1 + J_2$ ):

$$\frac{\partial \rho_{vap}}{\partial t} + \text{div}(\rho_{vap} u) = J - \Gamma_{vap} \quad (6.25)$$

► **Taux de produits formés**

Le bilan des produits de détonation s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho_{rp}}{\partial t} + \text{div}(\rho_{rp} \mathbf{u}) = (1 + \phi_S) \Gamma_{\text{vap}} \quad (6.26)$$

► **Valeurs initiales des fractions massiques**

La connaissance des fractions massiques est primordiale dans l'établissement des espèces présentes dans la phase gazeuse.

A l'instant initial ( $t=0$ ) :  $X_{ox} = 1$ ,  $X_{\text{vap}} = 0$  et  $X_{rp} = 0$

**6.2.4.3 Paramètres thermodynamiques des gaz et équation d'état**

Les paramètres thermodynamiques des gaz sont calculés par pondération de chaque espèce représentée par sa fraction massique dans le mélange gazeux, il vient alors :

$$c_p = X_{ox} \cdot c_{p_{ox}} + X_{rp} \cdot c_{p_{rp}} + X_{\text{vap}} \cdot c_{p_{\text{vap}}} \quad (6.27)$$

$$c_v = X_{ox} \cdot c_{v_{ox}} + X_{rp} \cdot c_{v_{rp}} + X_{\text{vap}} \cdot c_{v_{\text{vap}}} \quad (6.28)$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (6.29)$$

où :  $c_p$  et  $c_v$  représentent respectivement la capacité calorifique massique des gaz à pression constante, et la capacité calorifique massique des gaz à volume constant.

La masse molaire du mélange de gaz  $W$  quant à elle, est explicitée de la manière suivante :

$$\frac{1}{W_m} = X_{ox} \frac{1}{W_{ox}} + X_{rp} \frac{1}{W_{rp}} + X_{\text{vap}} \frac{1}{W_{\text{vap}}} \quad (6.30)$$

Le système d'équations de bilan des phases liquides et gazeuses est complété par les équations d'état (6.31) et (6.32). Ici on introduit l'hypothèse du gaz parfait; il vient alors :

$$p = \frac{\rho RT}{W} \quad (6.31)$$

$$e = c_v T \quad (6.32)$$

### 6.3 Méthode numérique, Traitement numérique

Le code de calcul EFAE (Enhanced Fuel-Air Explosion) utilisé dans le cadre de cette thèse a été élaboré B. Khasainov (2005). Ce code est basé sur la méthode des différences finies en représentation Eulérienne. Il permet de faire des modélisations monodimensionnelles (1D), bidimensionnelles (2D) et tridimensionnelles (3D) de la propagation de la détonation dans des mélanges réactifs homogènes et hétérogènes. Le code de calcul EFAE fonctionne sur le principe d'un schéma explicite : tous les paramètres sont calculés en utilisant des données issues du pas de temps précédent. On définit le nombre de Courant  $CFL$  ( $CFL < 1$ ) de telle sorte qu'on limite le pas de temps  $\Delta t$  afin d'assurer la stabilité du schéma :

$$\Delta t \leq CFL \frac{|\Delta x|}{|u + c|_{\min}} \quad (6.33)$$

où  $u$  : vitesse des gaz

$c$  : célérité du son

$\Delta t$  : pas de temps

$\Delta x$  : dimension minimale de la cellule numérique.

Oran et Boris (2001) notent quatre types d'erreurs pouvant être engendrées par la méthode des différences finies lors de la discrétisation des équations. Ces erreurs sont représentées dans le Tableau 6.2.

Types d'erreurs	Causes et conséquences sur la solution
Erreurs locales	Elles sont liées à la précision de l'échantillonnage des variables (simple précision, double précision, ...etc.)
Erreurs d'amplitudes	la diffusion numérique lisse et amortit le profil d'une grandeur au cours du temps
Erreurs de phases	mauvaise évaluation d'une grandeur qui dévie alors de sa valeur théorique
Erreurs de Gibbs	incertitude spatiale de la représentation discrète d'une fonction continue, notamment lors de forts gradients.

Tableau 6. 2 □ Types d'erreurs rencontrées avec la méthode des différences finies (Oran et Boris, 2001)

Il est possible de réduire les erreurs de Gibbs en jouant sur la résolution numérique. Il est également possible de réduire les autres erreurs liées à la méthode des différences finies.

Un schéma numérique peut être considéré comme stable s'il réunit les trois critères suivants :

- conservatif,
- causal (les contraintes physiques limitant la transmission des informations sont prises en compte),
- positif ou monotone

Pour obtenir un bon compromis entre ces critères, plusieurs algorithmes non linéaires peuvent être utilisés. On peut citer, entre autres, les algorithmes FCT (Flux-Corrected Transport) (Oran et Boris, 2001), PPM (Piecewise-Parabolic Method), HOG (High-Order Godunov) ou encore TVD (Total-Variation Diminishing). Dans le cadre de cette thèse, on utilise un schéma de type FCT avec une précision d'ordre 2 en temps et en espace.

### 6.3.1 Maillage numérique

Pour des simulations en géométrie plane (1D), cylindrique (2D) ou sphérique (3D), le code de calcul EFAE emploie un maillage rectiligne et une technique d'adaptation des mailles numériques le long de l'axe de propagation de la détonation. Cette façon de discrétiser l'espace cartésien permet de garder une résolution constante dans la zone de réaction de la détonation.

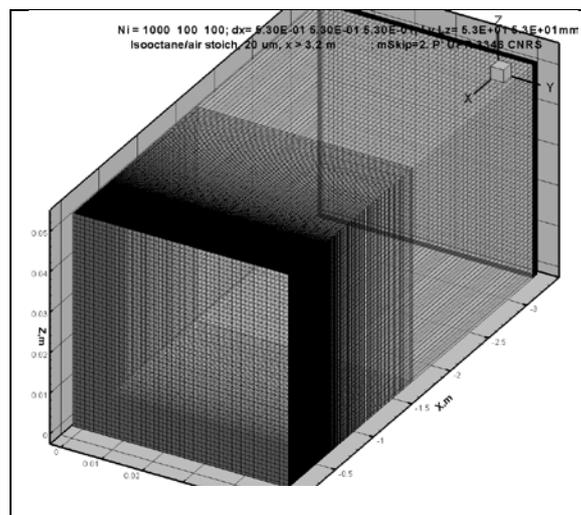


Figure 6. 1 – Maillage numérique 3D

Dans nos études, le domaine de calcul est un tube semi-infini de section carrée. Il est fermé du côté gauche, où la détonation est amorcée avec une source d'explosion ponctuelle. Les parois latérales sont considérées comme étant des parois rigides. Nous admettons que les gaz frais sont au repos en amont du choc, à la pression et température ( $P_0$ ,  $T_0$ ), et en aval la vitesse matérielle s'annule à l'extrémité fermée du tube.

### 6.3.2 Adaptation du maillage

Le maillage sans adaptation ne permet pas de faire des calculs sur des grandes distances de propagation tout en gardant une résolution fine dans la zone de réaction chimique, car cela conduit à des coûts prohibitifs. Cependant lorsqu'une détonation autonome et stationnaire se déplace à une célérité  $D$  (2000 m/s comme ordre de grandeur), la zone de détente derrière le front de détonation s'étend sur une zone de longueur  $D.t/2$ , conformément au modèle de Taylor-Zeldovich (TZ). Au-delà, on se trouve dans la zone du noyau de l'écoulement où les paramètres restent constants. Lors de l'adaptation, la zone de calcul est allongée et le maillage est redéfini. L'adaptation s'opère lorsque le choc se rapproche de la fin du domaine de calcul. En augmentant la taille des mailles dans la zone du noyau et en recommençant le maillage, on récupère des mailles et on les ajoute en avant du front de détonation. L'évolution typique de la longueur de la maille adaptative  $\Delta x$  (mm) en fonction de la distance est représentée sur la figure 6.2 (a), ainsi que la pression et le nombre de Mach dans la région où on a commencé à adapter le maillage (figure 6.2 (b)). On voit qu'on peut garder une meilleure résolution dans la zone de réaction où le nombre de Mach (relativement au front) est inférieur à 1.

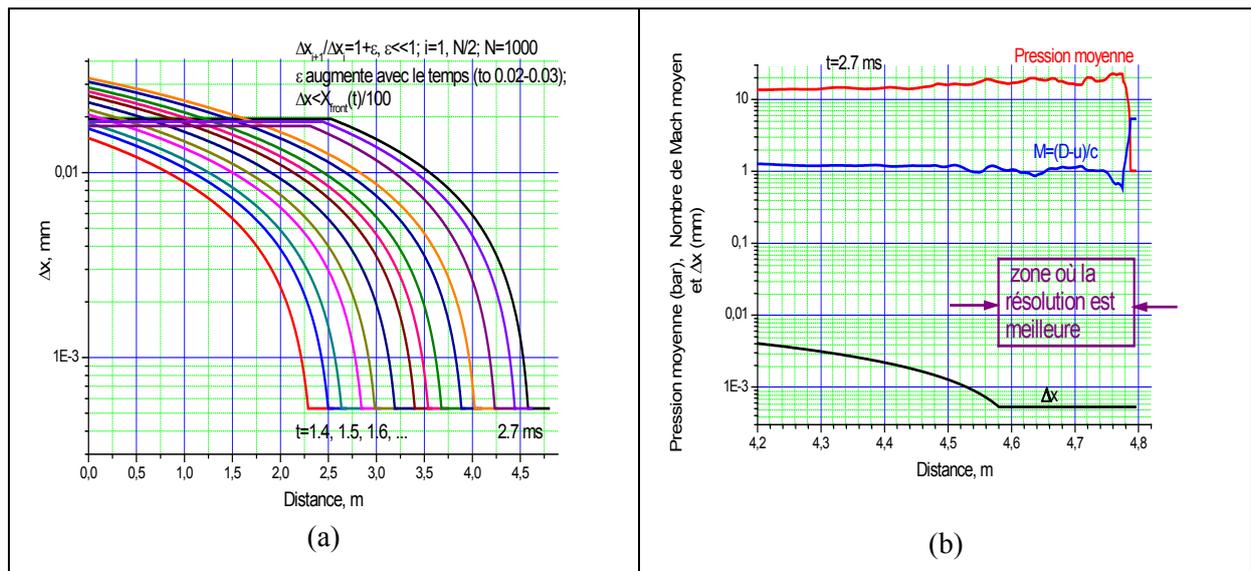


Figure 6. 2 □(a) Evolution de la taille de mailles numériques en fonction de la distance, (b) Pression et nombre de Mach ( $M=(D-u)/c$ ) dans la zone d'adaptation des mailles

La loi d'adaptation du maillage utilisée s'exprime de la manière suivante :

$$\frac{\Delta X_{n+1}}{\Delta X_n} = 1 - \varepsilon \quad (6.34)$$

où:  $\varepsilon$  est le facteur de progression géométrique ( $\varepsilon \ll 1$ ;  $\varepsilon$  augmente avec la progression des calculs en variant de 0,001 à  $\sim 0,1-0,2$ ); l'indice "n" désigne les mailles adaptées ( $n=1$  à  $N_x/2$ );  $N_x$  est le nombre de mailles (par exemple sur la Figure 6.2 (a),  $N_x=1000$  et  $N_n=500$ ).

La longueur de la maille numérique augmente géométriquement en s'éloignant du front de détonation pour atteindre une longueur maximale correspondant à  $D.t/100$ . L'utilisation d'un maillage adaptatif ne modifie pas la vitesse de propagation de la détonation, ni l'allure des profils physiques dans la zone de réaction en raison du caractère supersonique de l'onde de détonation. Cependant, si la distance de propagation de la détonation est grande, un lissage des courbes peut avoir lieu dans la zone où la taille des mailles est la plus élevée.

### 6.3.3 Schéma FCT (Flux-Corrected-Transport)

Sur la Figure 6.3 est représenté l'organigramme des différentes étapes d'intégration du système d'équations différentiel par le code EFAE avec utilisation de la méthode FCT. Le principe de base consiste en un ajustement des flux à chaque interface, en fonction des contraintes physiques. La méthode FCT utilise la méthode des temps fractionnés, c'est-à-dire une pré-estimation des grandeurs sur le premier demi-pas de temps. Cette méthode fournit une

précision d'ordre 2 en temps. La Figure 6.3 montre les différentes étapes de résolution du système d'équations du code EFAE, d'après Khasainov (2005).

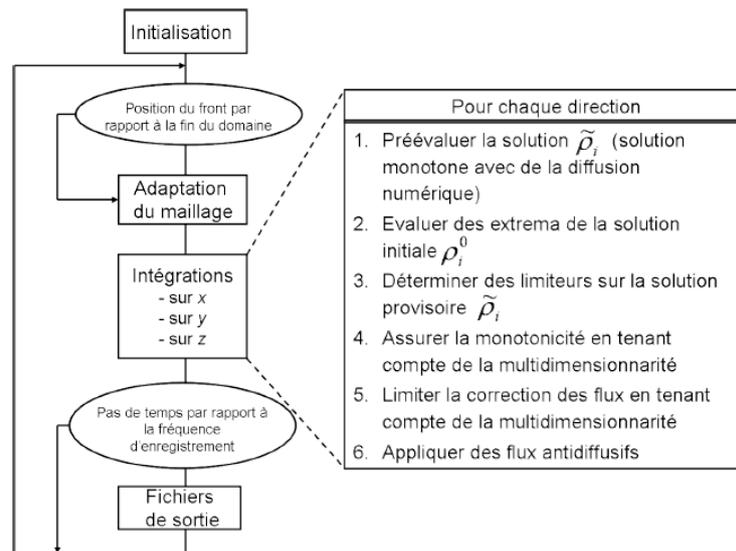


Figure 6. 3 □ Etapes de l'intégration du système différentiel modélisant les équations par le code EFAE par utilisation de la méthode FCT

Virot (2009) a effectué une vérification de la condition d'entropie de l'algorithme FCT (qui n'utilise pas de solveur de Riemann), pour un problème classique du tube à choc, en utilisant deux conditions initiales différentes. Il a trouvé que cette condition n'est pas mise en défaut.

### 6.3.4 Conditions initiales du problème

Les paramètres d'entrées du code EFAE sont regroupés dans un fichier d'entrée formaté qui permet de définir toutes les données physico-chimiques nécessaires à la simulation d'un problème. Parmi les nombreuses possibilités offertes par le code EFAE, les données peuvent être regroupées en différentes catégories qui sont :

- la géométrie : taille du domaine, nombre de mailles le long des axes X, Y et Z,
- les paramètres de résolution : nombre de courant CFL, adaptation,
- l'amorçage : on peut amorcer la détonation par une source ponctuelle, par un saut de pression ou par choc (mais il faut noter que le régime de détonation quasi-stationnaire ne dépend pas des conditions d'amorçage),

- les propriétés des gaz : (pression et température initiales, masses moléculaires d'oxydant, de vapeur et de produits, lois de cinétique chimique),
- les propriétés des gouttelettes : (taille initiale, concentration, densité, viscosité, tension superficielle, chaleur de réaction, lois de cinétique chimique, ...etc.),
- le modèle de désintégration : nombre de désintégrations considéré et type de modèle de désintégration (Hsiang, Pilch ou G elfand). Dans notre travail, une seule désintégration, suivant le modèle de Hsiang et Faeth (1992) est utilisée.
- Ecriture et sauvegarde des données : choix des grandeurs de sortie, écriture des fichiers de sortie, période pour imprimer les résultats et les traces de pression maximale.

## **Chapitre 7**

### **Simulations numériques des détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides**



## 7.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats des simulations numériques 1D, 2D et 3D des écoulements réactifs et instationnaires (1D, 2D et 3D) pour les détonations de mélanges biphasiques gaz/aérosols de carburants liquides.

Trois carburants liquides ont été étudiés : isooctane (M1), heptane (M2) et octane (M3) pour une taille de gouttelettes liquides fixe égale à 30  $\mu\text{m}$ .

Nous confrontons ces résultats numériques avec ceux obtenus dans les mêmes conditions expérimentales.

Comme pour les expériences, on étudiera l'influence de la richesse du mélange et de la dilution de l'oxydant (D0, D1 et D2).

Le présent chapitre comprendra trois parties :

- des calculs monodimensionnels, afin de déterminer les caractéristiques du régime stationnaire.
- analyse des caractéristiques de la structure cellulaire pour les différents cas considérés (calculs 2D).
- examen de l'évolution des paramètres thermomécaniques au niveau et en aval du front de détonation.

## 7.2 Paramètres d'entrée

Ils sont définis par les données du chapitre 2.4 figurant dans les tableaux 2.4 à 2.6 et celles de l'annexe 2. Nous rappelons ici les valeurs des principaux paramètres.

## 7.2.1 Paramètres thermodynamiques des espèces gazeuses

Tel qu'indiqué dans le chapitre 6.2.4, en aval du choc incident, la phase gazeuse comprend trois espèces : les gaz frais, le combustible évaporé et les produits de détonation.

Les paramètres thermodynamiques correspondants à ces espèces, pour les trois carburants liquides utilisés et les trois dilutions considérées sont rassemblés dans le tableau 7.0.

Carburant	Gaz frais (Oxydant)		Combustible évaporé		Produits de détonation	
	$\gamma_{ox}$	$W_{m_{ox}}$ (kg/mole)	$\gamma_{vap}$	$W_{m_{vap}}$ (kg/mole)	$\gamma_{rp}$	$W_{m_{rp}}$ (kg/mole)
<b>Dilution D0</b>						
<b>Isooctane</b>	1,34191	0,02885	1,30857	0,04232	1,16535	0,02793
<b>Heptane</b>	1,31820	0,02885	1,28856	0,08697	1,16524	0,02790
<b>Octane</b>	1,32020	0,02885	1,30034	0,08437	1,16519	0,02793
<b>Dilution D1</b>						
<b>Isooctane</b>	1,37505	0,02934	1,45468	0,01094	1,14316	0,02705
<b>Heptane</b>	1,37523	0,02934	1,46979	0,01154	1,14315	0,02700
<b>Octane</b>	1,37525	0,02934	1,46825	0,01029	1,14316	0,02704
<b>Dilution D2</b>						
<b>Isooctane</b>	1,39096	0,03001	1,44215	0,00996	1,13579	0,02584
<b>Heptane</b>	1,39088	0,03001	1,44568	0,01055	1,13582	0,02578
<b>Octane</b>	1,39008	0,03001	1,44404	0,00987	1,13587	0,02582

Tableau 7.0 – Paramètres thermodynamiques des espèces gazeuses

Ces valeurs sont des moyennes ajustées de sorte qu'elles puissent servir de données d'entrée pour les mélanges de richesse  $0,5 < r < 2$ . Le détail des paramètres d'entrée figure sur les tableaux 7.1, 7.2, 7.3 pour les mélanges M1, M2, M3 respectivement.

## 7.2.2 Paramètres théoriques CJ en fonction de la richesse

Ce sont les propriétés théoriques de l'état CJ déterminées à partir du code thermochimique TDS (Victorov, 2001). Les résultats correspondants aux différents mélanges étudiés, en fonction de la richesse, sont extraites de l'annexe 2 et représentés dans les tableaux 7.1 a et 7.1 b pour M1, 7.2 a et 7.2 b pour M2, et 7.3 a et 7.3 b pour M3, où  $\sigma_p$  est la concentration des particules liquides,  $\phi_{St}$  est le coefficient stœchiométrique,  $\gamma_{CJ}$  et  $W_{mCJ}$  sont le coefficient polytropique et la masse moléculaire au point CJ du mélange stœchiométrique et  $Q_p$  est la chaleur de réaction par 1 kg de liquide.

### Mélange M1-D0-r :

r	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,7
$\sigma_p$ (kg/m <sup>3</sup> )	0,0628	0,0706	0,0784	0,0863	0,0941	0,1020	0,1098	0,1177	0,1255	0,133
$\phi_{St}$	15,033									
$D_{CJ}$ (m/s)	1717	1762	1795	1817	1829	1832	1827	1818	1806	1791
$\gamma_{CJ}$	1,16535									
$W_{mCJ}$ (kg/mole)	0,02793									
$Q_p$ (J/kg)	$7,087 \cdot 10^7$									

Tableau 7.1 (a) – Paramètres de l'état CJ pour le mélange M1-D0-r

**Mélanges M1-D1-r et M1-D2-r :**

M1-D1-r						M1-D2-r		
r	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	0,8	0,9	1,0
$\sigma_p$ (kg/m <sup>3</sup> )	0,0996	0,1120	0,1245	0,1369	0,1494	0,1494	0,1681	0,1867
$\phi_{St}$	9,632					6,567		
$D_{CJ}$ (m/s)	1875	1914	1948	1977	2000	2000	2043	2082
$\gamma_{CJ}$	1,14316					1,13579		
$W_{m_{CJ}}$ (kg/mole)	0,02705					0,02584		
$Q_p$ (J/kg)	6,565.10 <sup>7</sup>					5,641.10 <sup>7</sup>		

Tableau 7.1 (b) – Paramètres de l'état CJ pour les mélanges M1-D1-r et M1-D2-r

**Mélanges M2-D0-r :**

r	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2
$\sigma_p$ (kg/m <sup>3</sup> )	0,0626	0,0704	0,0782	0,0860	0,0938
$\phi_{St}$	15,081				
$D_{CJ}$ (m/s)	1719	1764	1797	1819	1832
$\gamma_{CJ}$	1,16524				
$W_{m_{CJ}}$ (kg/mole)	0,02790				
$Q_p$ (J/kg)	7,159.10 <sup>7</sup>				

Tableau 7.2 (a) – Paramètres de l'état CJ pour le mélange M2-D0-r

**Cas des mélanges M2-D1-r et M2-D2-r :**

<b>M2-D1-r</b>				<b>M2-D2-r</b>		
<b>r</b>	0,9	1,0	1,2	0,7	0,8	0,9
<b><math>\sigma_p</math></b> <b>(kg/m<sup>3</sup>)</b>	0,1117	0,1241	0,1489	0,1303	0,1489	0,1675
<b><math>\phi_{St}</math></b>	9,663			6,588		
<b>D<sub>CJ</sub> (m/s)</b>	1917	1950	2003	1953	2002	2046
<b><math>\gamma_{CJ}</math></b>	1,14315			1,13582		
<b>W<sub>mCJ</sub></b> <b>(kg/mole)</b>	0,02700			0,02578		
<b>Q<sub>p</sub> (J/kg)</b>	6,596.10 <sup>7</sup>			5,666.10 <sup>7</sup>		

Tableau 7.2 (b) – Paramètres de l'état CJ pour les mélanges M2-D1-r et M2-D2-r

**Mélange M3-D0-r :**

<b>r</b>	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,7
<b><math>\sigma_p</math></b> <b>(kg/m<sup>3</sup>)</b>	0,0628	0,0706	0,0784	0,0863	0,0941	0,1020	0,1098	0,1177	0,1333
<b><math>\phi_{St}</math></b>	15,033								
<b>D<sub>CJ</sub> (m/s)</b>	1719	1764	1796	1819	1831	1834	1830	1821	1795
<b><math>\gamma_{CJ}</math></b>	1,16519								
<b>W<sub>mCJ</sub></b> <b>(kg/mole)</b>	0,02793								
<b>Q<sub>p</sub> (J/kg)</b>	7,133.10 <sup>7</sup>								

Tableau 7.3 (a) – Paramètres de l'état CJ pour le mélange M3-D0-r

### Mélanges M3-D1-r et M3-D2-r :

M3-D1-r					M3-D2-r					
r	0,8	0,9	1,0	1,2	1,3	0,7	0,8	0,9	1,0	
$\sigma_p$ (kg/m <sup>3</sup> )	0,0996	0,1120	0,1245	0,1494	0,1618	0,1307	0,1494	0,1681	0,1867	
$\phi_{St}$	9,632					6,567				
$D_{CJ}$ (m/s)	1876	1916	1950	2002	2021	1953	2002	2045	2084	
$\gamma_{CJ}$	1,14316					1,13587				
$Wm_{CJ}$ (kg/mole)	0,02704					0,02582				
$Q_p$ (J/kg)	$6,576 \cdot 10^7$					$5,649 \cdot 10^7$				

Tableau 7.3 (b) – Paramètres de l'état CJ pour les mélanges M3-D1-r et M3-D2-r

Remarque : Les valeurs de  $\phi_{St}$ ,  $\gamma_{CJ}$ ,  $Wm_{CJ}$  et de chaleur de réaction par 1 kg de gouttelettes  $Q_p$  correspondent aux produits stœchiométriques.

### 7.2.3 Paramètres cinétiques

Comme décrit au chapitre 6, le processus de combustion des gouttelettes se déroule en deux étapes :

- production de vapeur combustible susceptible de réagir en phase gazeuse, étape généralement endothermique.
- la réaction chimique proprement dite, exothermique.

Ces deux étapes sont modélisées par des lois de type Arrhenius.

Ainsi, le tableau 7.4 (a) comprend les valeurs de l'énergie d'activation et du facteur pré-exponentiel pour la phase de production de vapeur, valables pour toutes les dilutions de la phase oxydante.

Carburant	Période d'Induction	
	Energie d'activation $E_{a_i}$ (cal/mole)	Facteur pré-exponentiel $A_i$ ( $s^{-1}$ )
Isooctane	43000	$1,2 \cdot 10^{11}$
Heptane	36200 (Voronin et Zhdan, 1984)	$1,3 \cdot 10^{11}$
Octane	38750 (Seshadri et al., 2008)	$1,66 \cdot 10^{11}$

Tableau 7.4 (a) – Paramètres cinétiques pour la phase de production de vapeur

D'autre part, le tableau 7.4 (b) décrit les valeurs du facteur pré-exponentiel pour la phase de combustion, obtenus après ajustement par itérations successives afin d'arriver à un bon accord entre la taille de la cellule de détonation calculée et celle des expériences. Il est important de souligner que pour chaque liquide considéré, on a déterminé une seule valeur de  $A_c$ , qui conduit à un accord raisonnable sur toute la plage de richesse étudiée.

L'énergie d'activation par contre est identique pour tous les mélanges et vaut 30 kcal/mole (Westbrook et al., 1981).

Carburant	Valeurs du facteur pré-exponentiel ( $(kg \cdot m^{-3})^{1-b} \cdot s^{-1}$ )		
	Dilution		
	D0	D1	D2
M1	$3 \cdot 10^5$	$15 \cdot 10^5$	$15 \cdot 10^5$
M2	$3 \cdot 10^5$	$13,5 \cdot 10^5$	$14 \cdot 10^5$
M3	$3 \cdot 10^5$	$14 \cdot 10^5$	$14 \cdot 10^5$

Tableau 7.4 (b) – Valeurs du facteur pré-exponentiel pour la phase de combustion

après ajustement

## 7.3 Dynamique de formation de la détonation : Calculs monodimensionnels

Avant d'effectuer des simulations numériques bidimensionnelles instationnaires, on a d'abord procédé à des calculs monodimensionnels qui permettent d'une part, de rechercher la distance nécessaire pour atteindre le régime de détonation stationnaire, d'autre part de définir des longueurs caractéristiques (induction et combustion).

### 7.3.1 Description du maillage

Les simulations sont réalisées avec le code EFAE en géométrie 1D plane, avec adaptation au niveau de la zone de réaction (zone supersonique, dans le référentiel du laboratoire), jusqu'à une distance de propagation de la détonation de 4 m.

Les paramètres d'entrée relatifs au maillage pour ce cas sont représentés dans le tableau 7.5. La longueur initiale du domaine de calcul dans tous les cas  $L_x = 0,53$  m, et  $N_{fine} = N_{adap} = N_x/2$ .

Carburant	M1			M2			M3		
Dilution	D0	D1	D2	D0	D1	D2	D0	D1	D2
$N_x$	1400	3400	4000	1600	3400	4400	2000	3400	4000
$\Delta X$ (mm)	0,379	0,156	0,133	0,331	0,156	0,121	0,265	0,156	0,133
$E_i$ (MJ/m <sup>2</sup> ) à $x=0$ (*)	8	4	3	8	3,5	2,5	8	3,5	3,5

Tableau 7.5 – Paramètres d'entrée relatifs au maillage et à l'énergie d'amorçage  $E_i$ , dans le cas des calculs 1D

(\*) : L'amorçage s'opère par une explosion ponctuelle qui consiste à déposer une énergie importante au point de départ (instant initial  $t = 0$  et à  $X = 0$ ). Le choix de ce mode d'amorçage, pour les calculs 1D, est motivé par le faible coût de calcul et la distance courte de relaxation vers le régime quasi-stationnaire.

$N_x$  est le nombre de mailles numériques le long de l'axe  $x$  du tube de détonation,  $N_{fine}$  est le nombre de mailles dans la zone la mieux résolue en voisinage avec le front de détonation (qui nécessite une résolution beaucoup plus fine que la zone de détente qui la suit) et  $\Delta X$  la taille de la maille numérique la plus fine (résolution).

Dans la direction de propagation, on affecte une quantité constante de mailles  $N_{fine}$  à la deuxième moitié du maillage. La première partie du maillage avec  $N_{adapt} = N_x - N_{fine}$  mailles sert à calculer la solution entre le fond du tube à détonation et la zone de meilleure résolution.

Le nombre de Courant est pris égal à 0,25 et  $\nu_{Num}$  est le facteur de diffusion numérique résiduel de la méthode FCT égal à 0,975.

### 7.3.2 Résultats et Analyse

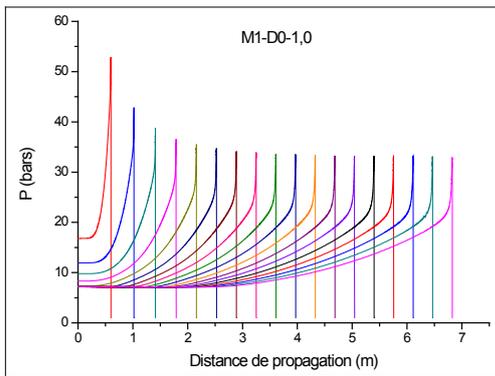
Sur les figures 7.1, 7.2 et 7.3 sont représentés l'évolution des profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation pour les mélanges M1-D0-1,0, M2-D0-1,0 et M3-D0-1,0.

On constate que l'amplitude du choc est initialement très élevée (et donc la célérité de détonation aussi). Ceci est une conséquence du fait que l'énergie fournie au départ par la source d'amorçage est importante : le régime est celui d'une détonation forte poussée par cette énergie d'amorçage élevée : c'est un effet « piston ». Au cours de sa progression, la détonation relaxe vers un régime quasi-stationnaire et autonome (où les conditions d'amorçage n'influent plus la propagation) qui est obtenu pour des distances supérieures à environ 2,15 m (soit un temps de l'ordre de 1 ms). Les caractéristiques de la zone de transition vers le régime quasi-stationnaire sont similaires pour les trois mélanges considérés.

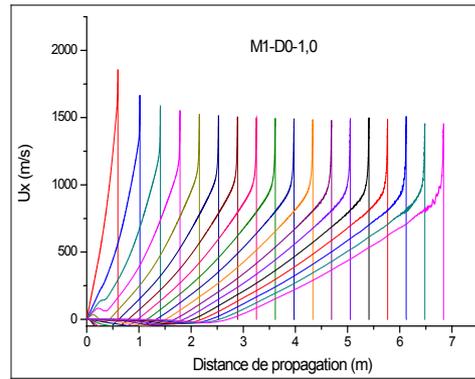
D'autre part, en analysant les profils de vitesse matérielle des gaz et de pression des figures 7.1, 7.2 et 7.3, on vérifie qu'ils tendent vers la solution auto-semblable de Taylor-Zeldovich : la vitesse matérielle des gaz est nulle et la pression est constante et vaut environ  $0,4P_{CJ}$  dans la zone du noyau, entre  $x = 0$  et  $x = Dt/2$ . Puis, la vitesse matérielle monte linéairement dans la seconde moitié, de  $x = Dt/2$  à  $x \approx Dt$ .

Les profils sur les figures 7.1, 7.2 et 7.3 montrent aussi que des fluctuations existent, bien que la détonation soit autonome et stationnaire. Ceci est du à l'instabilité intrinsèque du modèle 1D de détonation.

Par ailleurs, les déficits en célérité de détonation enregistrés varient entre 1,2 % pour les mélanges M1-D0-1,0 et M2-D0-1,0 à 2,2 % pour le mélange M3-D0-1,0, déficits dus à la combustion incomplète des gouttelettes de carburant liquide lorsqu'on atteint le point sonique. Ce déficit dépend de la volatilité des carburants. En effet, il est plus important dans le cas de l'octane qui est moins volatil que l'isooctane et l'heptane.

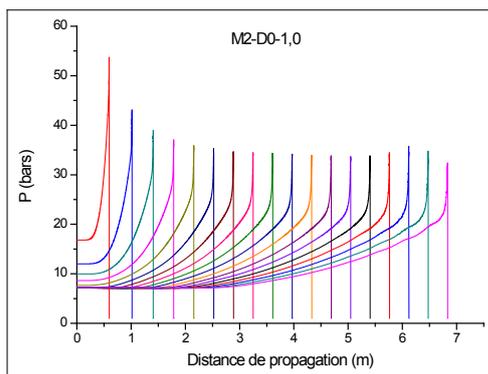


(a) : Pression

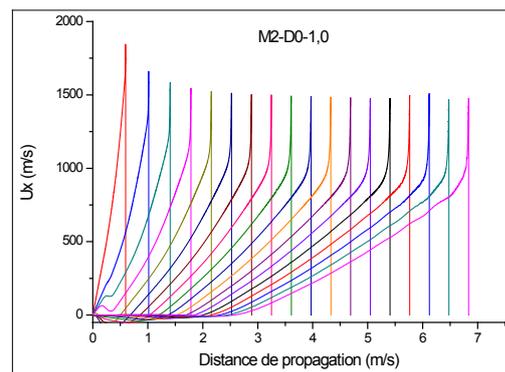


(b) : Vitesse matérielle des gaz

Fig. 7.1 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M1-D0-1,0 ( $T_0 = 298 \text{ K}$ ,  $P_0 = 1 \text{ bar}$ )

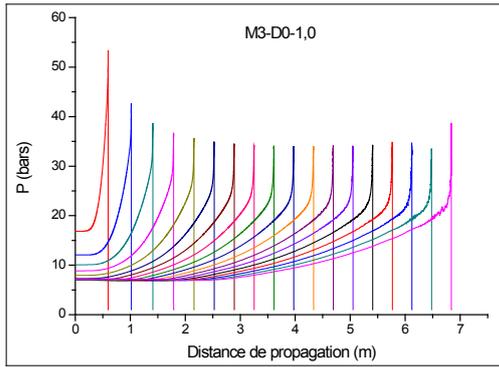


(a) : Pression

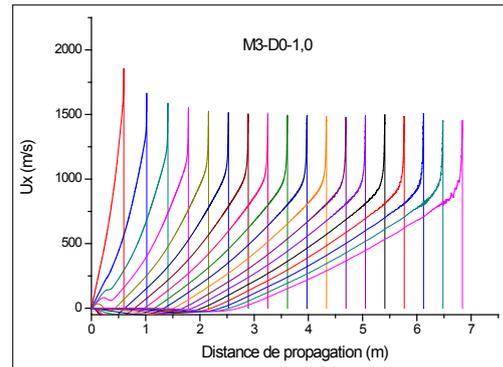


(b) : Vitesse matérielle des gaz

Fig. 7.2 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M2-D0-1,0 ( $T_0 = 298 \text{ K}$ ,  $P_0 = 1 \text{ bar}$ )



(a) : Pression



(b) : Vitesse matérielle des gaz

Fig. 7.3 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M3-D0-1,0 ( $T_0 = 298 \text{ K}$ ,  $P_0 = 1 \text{ bar}$ )

Afin d'analyser les étapes d'avancement de la réaction, on présente sur la figure 7.4 les profils de fractions massiques d'oxydant  $Y_{ox}$ , du fuel évaporé  $Y_{vap}$  et des produits de détonation  $Y_{rp}$ , ainsi que la fraction de la période d'induction  $(\text{Vap})_{\text{Ind}}$  dans le cas du mélange M2-D0-0,8. On présente également sur la même figure l'évolution de la concentration et du rayon des gouttelettes liquides « mères ». Ainsi, on peut déterminer la longueur d'induction, définie comme la distance séparant le front de choc incident et le début de la consommation de vapeur et d'oxydant, et la longueur correspondant à la zone de réaction qui débute à la fin de la zone d'induction et se termine au point où toute la vapeur est consommée (maximum de produits de détonation formés). Ces valeurs valent respectivement 2 mm pour la longueur d'induction et 5,5 mm pour la longueur de combustion. On constate que la longueur d'induction est petite. Par conséquent, on peut déduire que les réactions chimiques exothermiques débutent pratiquement immédiatement après la vaporisation et la désintégration des gouttelettes liquides mères en gouttelettes liquides filles. On voit aussi que la période d'induction est plus courte que la période de combustion, ce qui constitue une grande différence avec les mélanges gazeux.

A la distance  $X = 3,083 \text{ m}$  (fin de la zone de réaction), la phase gazeuse est constituée de produits de détonation, majoritaires avec une fraction massique  $Y_{rp} \approx 0,75$  à  $0,8$ , et d'une fraction d'oxydant qui avoisine  $Y_{ox} \approx 0,2$  à  $0,25$ , telle que  $Y_{rp} + Y_{ox} = 1$ . Ce qui était tout à fait attendu car le mélange initial était pauvre (richesse de 0,8), donc un excès initial d'oxydant.

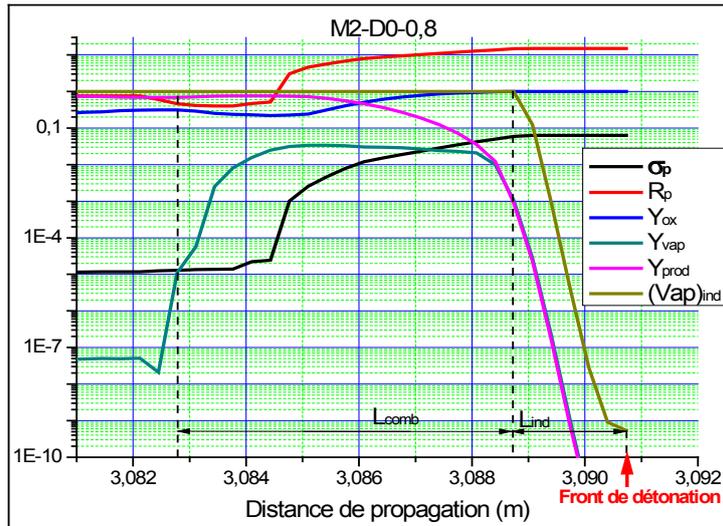


Fig. 7.4 – Profils des fractions massiques des espèces gazeuses ; de la fraction de période d’induction ; de la concentration et du rayon des gouttelettes « mères », pour le mélange M2-D0-0,8 (298 K, 1 bar)

## 7.4 Simulations numériques bidimensionnelles instationnaires de la détonation dans les aérosols d’isooctane (M1)

On présente l’ensemble des résultats relatifs à la structure cellulaire de détonation pour les mélanges M1-D0-r, M1-D1-r et M1-D2-r. Selon la dilution, on considère pour chaque cas une certaine plage de richesse similaire aux conditions opératoires expérimentales.

### 7.4.1 Paramètres de simulations bidimensionnelles

Le tableau 7.6 présente les paramètres du maillage utilisé pour ces calculs.

Les longueurs initiales du domaine de calcul sont respectivement  $L_x = 0,53$  m selon l’axe X du tube à détonation, et  $L_y = 0,053$  m selon l’axe Y. (Notons que  $L_y = h$ , arête de la section carrée du tube).

<b>Carburant</b>	<b>M1</b>		
<b>Dilution</b>	D0	D1	D2
$N_x$	1400	3400	4000
$N_y$	140	340	400
$L_x$ (m)	0,53		
$L_y = h$ (m)	0,053		
$\Delta X = \Delta Y$ (mm)	0,379	0,156	0,133
$N_{\text{fine}} = N_{\text{adap}}$	700	1700	2000

Tableau 7.6 – Paramètres de simulations bidimensionnelles

## 7.4.2 Formation de la détonation

L'amorçage de la détonation dans les calculs bidimensionnels est modélisé par un dépôt d'énergie plan sur toute la section du tube (à l'instant initial). L'énergie d'initiation correspondante est ajustée de manière à éviter de trop fortes surpressions au départ et d'assurer la transition au régime quasi-stationnaire le plus tôt possible. La comparaison des profils de pression et de vitesse matérielle des gaz en fonction de la distance de propagation avec la -solution autosemblable de Taylor-Zeldovich, permet de détecter l'existence d'un surplus d'énergie fourni par l'amorçage. Aussi, l'énergie d'initiation critique a été définie par un processus itératif.

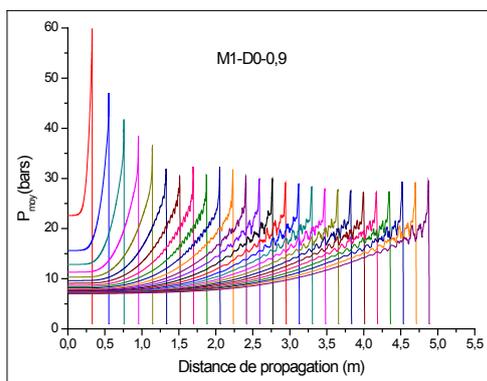
Les profils de pression (figure 7.5 (a)) et de vitesse matérielle (figure 7.5 (b)) moyennes<sup>1</sup> dans la section du tube confirment l'établissement du régime de détonation autonome et quasi-stationnaire à partir d'une distance de propagation qui avoisine 2,1 m. Les

<sup>1</sup> La pression et la vitesse moyenne sont définies comme suit :

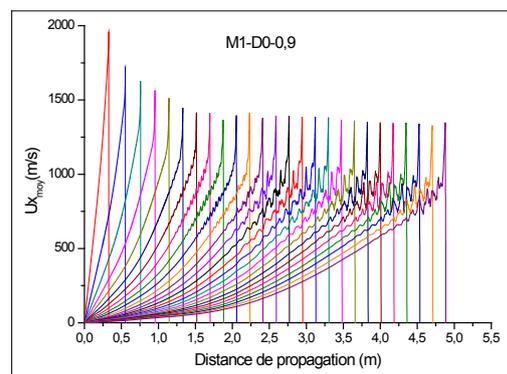
$$\bar{P}(x,t) = \frac{1}{h} \int_0^h P(x,y,t) dy \quad \text{et} \quad \bar{u}(x,t) = \frac{1}{h} \int_0^h u(x,y,t) dy$$

calculs 2D donnent ainsi la même valeur pour la longueur de transition au régime stationnaire que les calculs en 1D.

D'autre part, la distribution des profils de pression et de vitesse matérielle le long de la paroi inférieure du tube, c'est à dire  $P(x, y = 0, t)$  et  $u(x, y = 0, t)$ , (figures 7.6 (a) et (b)) nous amène à constater que les valeurs de pression et de vitesse matérielle correspondantes sont plus élevées que celles qui découlent des profils des figures 7.5 (a) et (b) correspondant à la pression et la vitesse matérielle moyenne dans la section du tube. Ceci est dû à l'interaction de points triples avec les parois du tube.

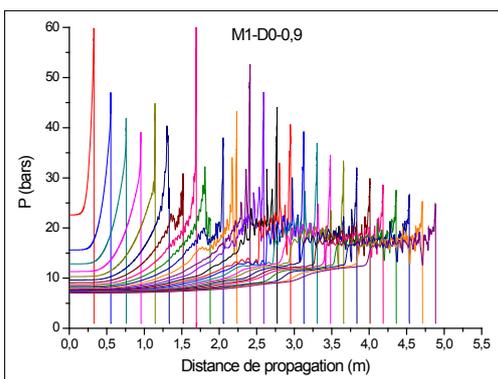


(a) : Pression moyenne

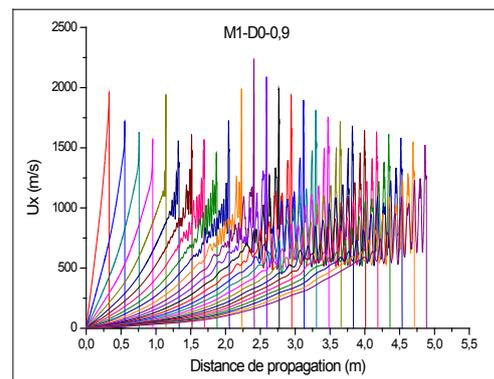


(b) : Vitesse matérielle moyenne des gaz

Fig. 7.5 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) moyennes dans la section du tube en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M1-D0-0,9



(a) : Pression



(b) : Vitesse matérielle des gaz

Fig. 7.6 – Profils de pression (a) et de vitesse matérielle des gaz (b) le long de la paroi  $y = 0$  du tube en fonction de la distance de propagation, pour le mélange M1-D0-0,9

### 7.4.3 La structure cellulaire

#### 7.4.3.1 Formation de la structure cellulaire du mélange M1-D0-0,8

Sur la figure 7.7 où sont montrées les traces de pression maximale, on constate que la détonation se propage d'une façon pratiquement monodimensionnelle jusqu'à une distance de 1,2 m, où l'on observe l'apparition d'ondes transverses faibles et le développement de points triples qui génèrent des pressions élevées. Les trajectoires de ces points triples dessinent l'image des cellules de détonation. A cette distance, la taille des cellules formées se situe autour de 35 mm (une cellule et demie dans le canal). Comme la détonation est forte dans cette zone, la taille des cellules est plus petite que celle de la détonation CJ. Il faut donc attendre que le régime de propagation relaxe vers le régime quasi-stationnaire.

L'évolution de la structure cellulaire de détonation passe ainsi par trois phases :

- une 1<sup>ère</sup> phase où la détonation se propage d'une façon monodimensionnelle, sans tracer de cellules,
- une seconde phase transitoire où l'on aperçoit l'apparition de plusieurs cellules de détonation, sur une distance de 20 et 30 cm, causées par les pressions élevées générées par l'initiation de la détonation en régime de détonation forte.
- une dernière phase qui correspond à la relaxation de l'onde de détonation vers un régime quasi-stationnaire pour des distances supérieures à 2 m. A partir de cette distance, on constate la reproductibilité du motif cellulaire, correspondant à une structure à une demi-cellule de détonation qui se reproduit d'une façon régulière. Cette demi-cellule occupe la totalité de la section carrée du tube soit  $\lambda/2 \approx 53$  mm, ce qui correspond par extrapolation à une taille de cellule de détonation  $\lambda \approx 106$  mm .

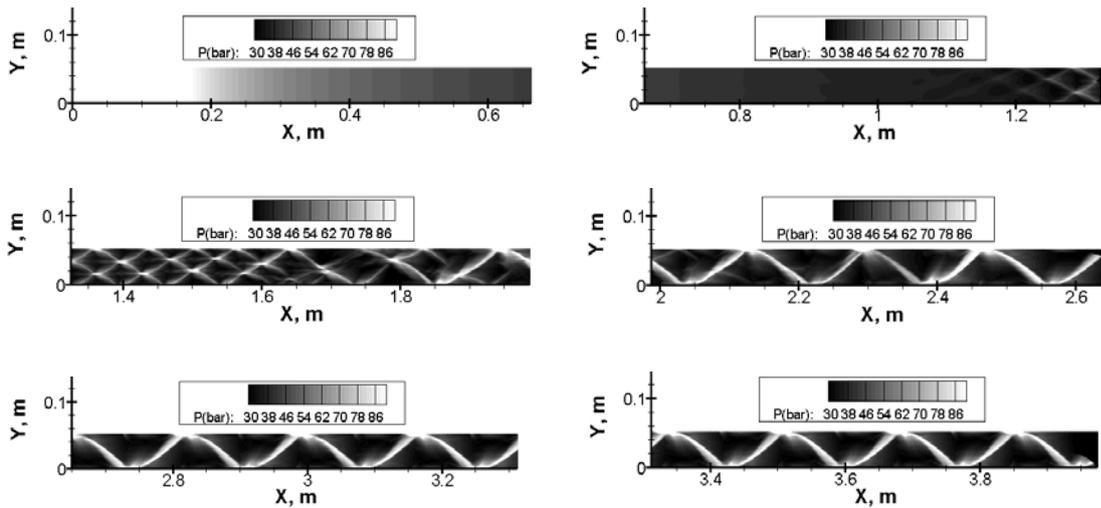


Fig. 7.7 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange pauvre M1-D0-0,8

#### 7.4.3.2 Effet de la richesse r

Lorsque la richesse augmente, on constate sur la figure 7.8 (correspondant à la stoechiométrie) une tendance de la diminution de la taille des cellules de détonation. Ceci s'explique par le fait que la réaction chimique de combustion est plus rapide.

Cependant, on n'obtient la quasi-stationnarité du régime de détonation qu'à partir d'une distance de propagation de 3,4 m avec une structure à une demi-cellule. La zone transitoire vers le régime stationnaire est ici plus longue car l'énergie d'amorçage utilisée est la même que dans le cas précédent (mélange M1-D0-0,8), et ce, bien que la réactivité du mélange M1-D0-1,0 soit plus importante.

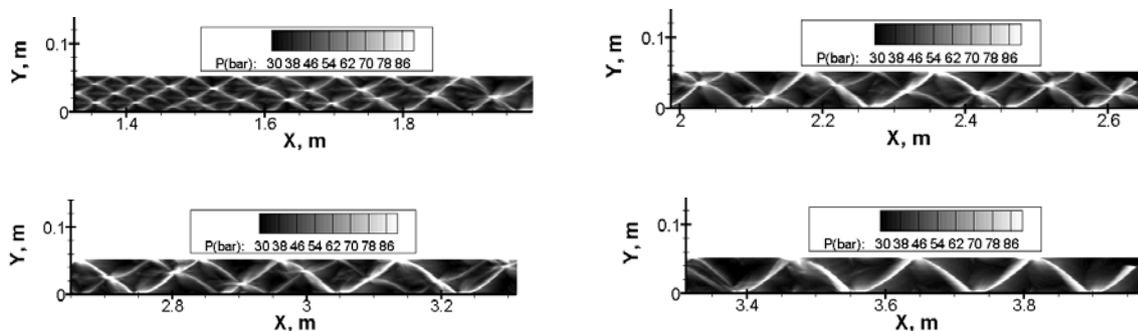


Fig. 7.8 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,0 stoechiométrique

Dans le cas des mélanges riches, le régime de propagation stationnaire est caractérisé par une structure à une seule cellule dans la largeur du tube. Sur les figures 7.9 à 7.12 correspondants aux mélanges M1-D0-r, r étant les richesses 1,3 ; 1,4 ; 1,5 et 1,6 respectivement, on observe qu'en fonction de la richesse, la distance correspondant à la transition d'une structure multicellulaire (détonation forte) à une structure à une seule cellule varie peu. Cette faible différence peut être expliquée par le fait que la réactivité change, en fonction de la richesse, tandis que l'énergie d'amorçage ne change pas.

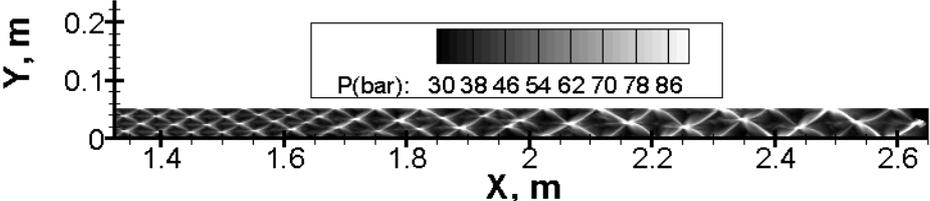


Fig. 7.9 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,3

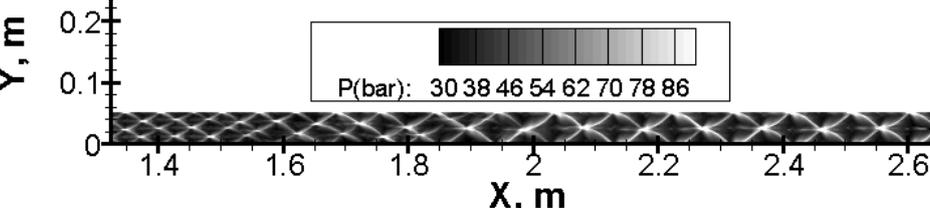


Fig. 7.10 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,4

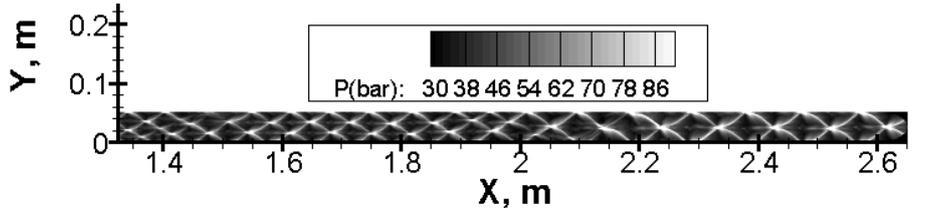


Fig. 7.11 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,5

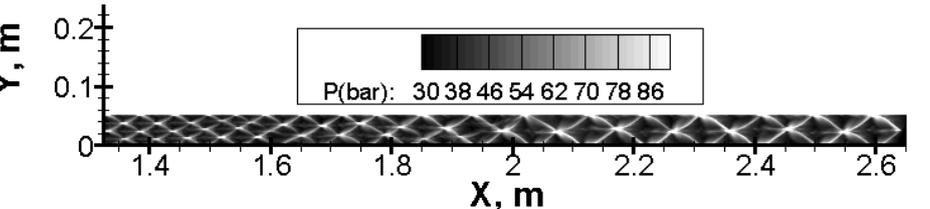


Fig. 7.12 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,6

Pour le cas des mélanges pauvres, on observe sur les figures 7.13 et 7.14 (pour les richesses  $r = 0,8$  et  $0,9$ ) que la distance correspondant à la transition vers la structure cellulaire finale varie avec la richesse.

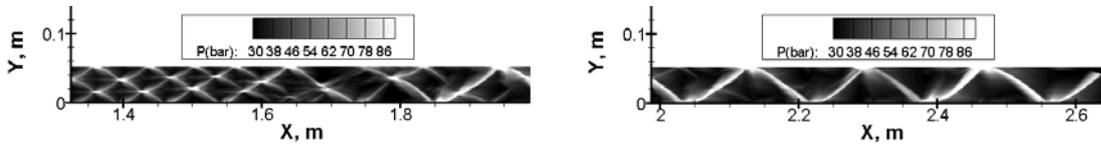


Fig. 7.13 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-0,8

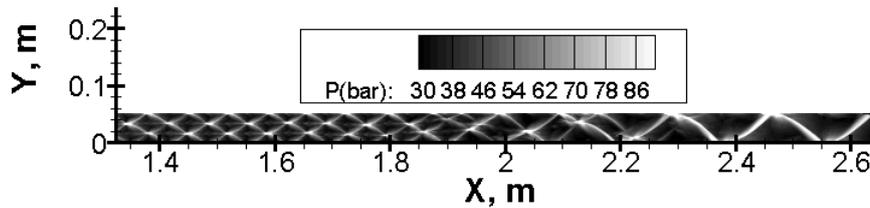


Fig. 7.14 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-0,9

On constate également, sur les figures 7.15, 7.16, 7.17 et 7.18 (correspondant aux richesses 1,2 ; 1,4 : 1,5 et 1,7), la présence d'une seule cellule de détonation dont le motif cellulaire est légèrement déformé pour la richesse 1,2, alors qu'au fur et à mesure que la richesse augmente, ce motif cellulaire a tendance à s'ordonner pour former une cellule nette, bien régulière, notamment pour les richesses de 1,5 et 1,7.

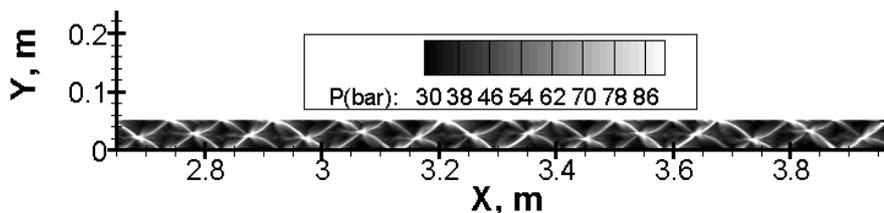


Fig. 7.15 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,2

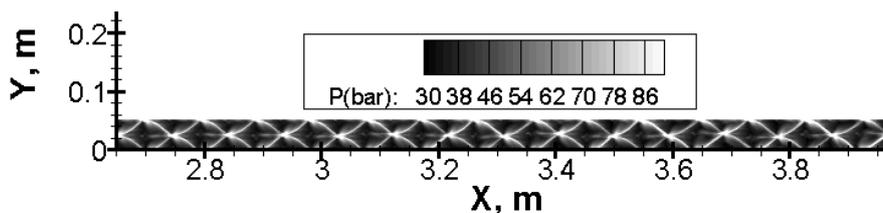


Fig. 7.16 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,4

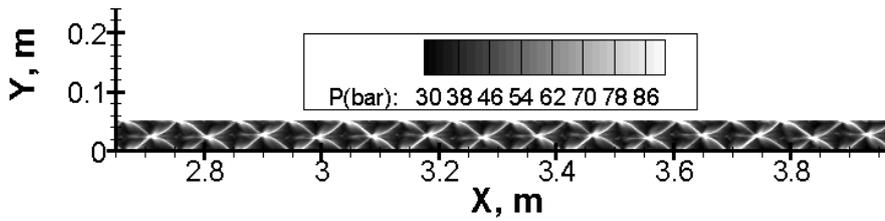


Fig. 7.17 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,5

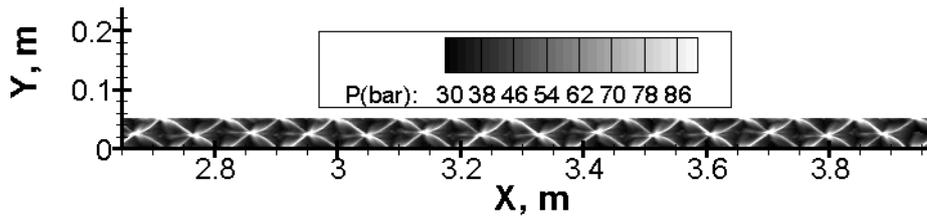


Fig. 7.18 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D0-1,7 pour les distances plus grandes que 2,6 m

Ces résultats sont en accord avec les observations expérimentales. Ainsi, on obtient un régime marginal avec une structure à une demi-cellule pour  $0,8 \leq r \leq 1,1$  et un régime avec une cellule complète pour  $r > 1,2$ .

### 7.4.3.3 Influence du rapport de dilution $\beta$

A partir des figures 7.19 (a), (b), (c), (d) et (e) pour les mélanges M1-D1-r (rapport de dilution  $\beta = 2$ ) avec une richesse  $r$  comprise entre 0,8 et 1,2, on constate que des structures multicellulaires apparaissent, quelle que soit la richesse, et que la taille de la cellule de détonation diminue quand la richesse augmente. Ainsi, à une richesse de 0,8, on note 2 à 3 cellules dans la section du tube, tandis qu'à la stœchiométrie, le nombre de cellules passe à 2,5 - 3 cellules, et augmente pour atteindre 3,5 - 4 cellules en milieu riche, notamment pour une richesse de 1,2. Il y a lieu de souligner que, quelle que soit la richesse, la résolution du maillage numérique ainsi que le facteur pré-exponentiel correspondant à la réaction chimique restent les mêmes (dans le cas de 4 cellules, il y a 85 mailles numériques pour chaque cellule, ce qui permet une résolution numérique suffisante).

Ainsi, en utilisant une seule valeur du facteur d'ajustement  $A_c$ , on retrouve les mêmes tendances que celles des observations expérimentales dans une large plage de richesses et de dilutions.

Par ailleurs, on constate l'apparition d'une structure cellulaire irrégulière en particulier en milieux pauvre et stœchiométrique. Cette irrégularité s'atténue lorsque la richesse croît. Cette irrégularité dépend du facteur de Zeldovich, exprimé par la relation  $\beta_Z = \frac{E_{A_i}}{RT_{ZND}}$ . Dans les cas considérés, on trouve que les valeurs de  $\beta_Z$  dépassent toutes 6,5, ce qui entraîne des structures cellulaires irrégulières (Manzhalei, 1977). Pour la dilution D1, il est d'environ 11 en milieu pauvre puis diminue en allant vers les richesses élevées ( $\beta_Z = 10,3$  pour  $r = 1,2$ ). C'est pourquoi, la structure cellulaire reste irrégulière quelle que soit la richesse.

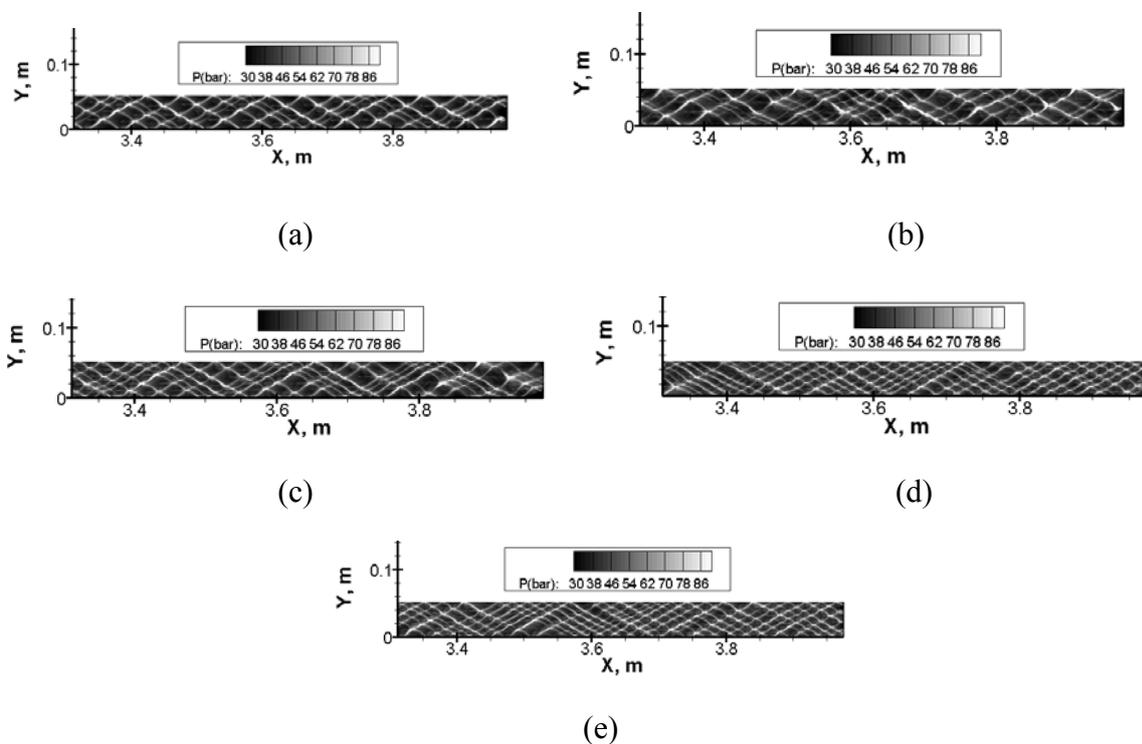
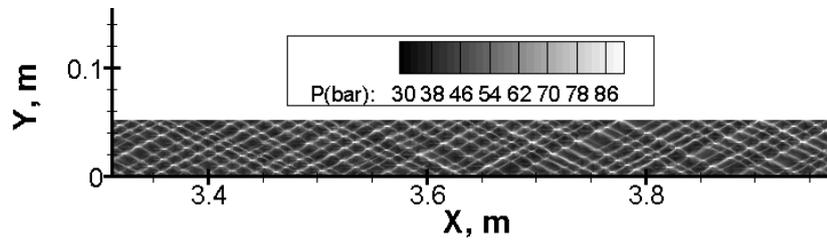


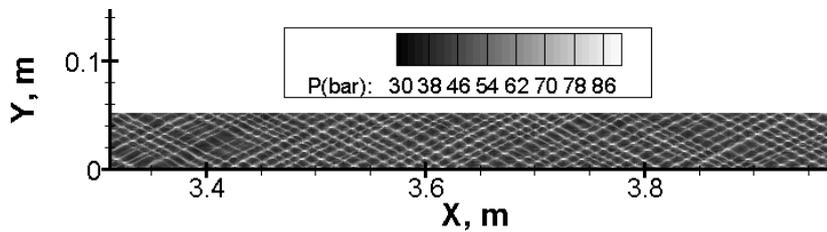
Fig. 7.19 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D1-r, avec  $r = 0,8$  (a),  $r = 0,9$  (b),  $r = 1,0$  (c),  $r = 1,1$  (d) et  $r = 1,2$  (e).

Si on diminue encore le rapport de dilution  $\beta$  (en passant de  $\beta = 2$  à 1), on observe, sur les figures 7.20 (a), (b) et (c) correspondant aux mélanges M1-D2-r où la richesse  $r$  est comprise entre 0,8 et 1,0, la formation de cellules de détonation irrégulières notamment en milieu pauvre, mais moins marquante que celle observée pour la dilution D1. Ceci est du à la diminution du facteur de Zeldovich dont la valeur est 9,6 à richesse de 0,8 et de 8,9 à la stœchiométrie. D'autre part, la taille des cellules continue à diminuer. Ainsi, pour la même

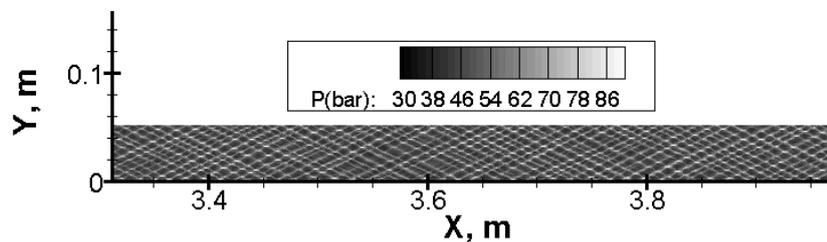
richesse ( $r = 0,8$ ), on note 4 à 5 cellules dans la section du tube pour la dilution D2, alors qu'on avait obtenu 2 à 3 cellules pour la dilution D1.



(a)



(b)



(c)

Fig. 7.20 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M1-D2-r, avec  $r = 0,8$  (a),  $r = 0,9$  (b) et  $r = 1,0$  (c).

Les résultats ainsi obtenus sont en accord avec les observations expérimentales.

En résumé, le modèle développé est capable de reproduire des tendances expérimentales sur la taille des cellules de détonation  $\lambda$  :

- $\lambda$  diminue, quand la richesse augmente, à dilution fixe,
- $\lambda$  diminue, quand la dilution diminue, à richesse fixe.

## 7.5 Simulations numériques bidimensionnelles instationnaires de la détonation dans les aérosols d'heptane (M2)

On présente les résultats relatifs à la structure cellulaire de détonation pour les mélanges M2-D0-r, M2-D1-r et M2-D2-r. Dans un premier temps, on étudie l'effet de la richesse sur cette structure cellulaire. La plage de richesse retenue est celle correspondant aux conditions expérimentales. Puis, on discute de l'effet de la dilution sur la taille des cellules.

### 7.5.1 Paramètres de simulations bidimensionnelles

Les paramètres de simulations 2D pour les mélanges M2-D0-r, M2-D1-r et M2-D2-r sont rassemblés dans le tableau 7.7.

Carburant	M2		
	D0	D1	D2
Dilution	D0	D1	D2
$N_x$	1600	3400	4400
$N_y$	160	340	440
$L_x$ (m)	0,53		
$L_y = h$ (m)	0,053		
$\Delta X = \Delta Y$ (mm)	0,331	0,156	0,121
$N_{\text{fine}} = N_{\text{adap}}$	800	1700	2200

Tableau 7.7 – Paramètres de simulations bidimensionnelles

### 7.5.2 La structure cellulaire

#### 7.5.2.1 Effet de la richesse

Les figures 7.21 à 7.26 montrent la formation des structures cellulaires de détonation pour les mélanges M2-D0-r, où r varie entre 0,8 et 1,3 respectivement. On retrouve les mêmes séquences que pour le cas du mélange M1-D0-r, à savoir qu'au début, la détonation se propage d'une façon monodimensionnelle, puis une structure multicellulaire apparaît, qui

transite finalement, soit en une demi-cellule (cas pauvre), soit en plusieurs cellules (cas riche), selon la dilution (Remarque : seule la partie terminale de la propagation est représentée sur les figures 7.21 à 7.26).

Les distances de parcours pour l'établissement du régime quasi-stationnaire de détonation sont plus petites que pour le cas du mélange à base d'isooctane. Ainsi, par exemple, pour la richesse 0,8 on note une distance transitoire de 1,6 m au lieu de 2 m (il en est de même pour l'apparition des premières traces, visibles à partir d'une distance d'environ 1 m pour le cas du mélange M2-D0-0,8). Ceci pourrait être dû au fait que la résolution utilisée pour le mélange à base d'heptane est meilleure que celle utilisée pour l'isooctane. Mais le test de convergence (« grid convergence test ») qu'on a effectué dans le cas du mélange M3 (cf. § 7.6.3) montre qu'avec la résolution utilisée, les résultats de calculs ne dépendent pas du maillage. On peut donc expliquer la diminution de la distance de formation de la détonation stationnaire par la réactivité plus importante du mélange M2 (l'énergie d'amorçage, pour la dilution D0, est la même).

On observe la présence des mêmes régimes de détonation que ceux identifiés dans le cas du mélange M1-D0-r. Ainsi :

- pour les mélanges pauvres ou stœchiométriques ( $0,8 \leq r \leq 1,1$ ), on observe la structure à une demi-cellule ( $\lambda \approx 106$  mm).
- dans le milieu riche ( $r > 1,1$ ), on a un régime comprenant une structure à une seule cellule de taille  $\lambda \approx 53$  mm.

Pour ce dernier cas, on retrouve la même observation que pour le mélange M1-D0-r, à savoir que le motif cellulaire (correspondant à une cellule de détonation) a tendance à devenir plus régulier avec l'augmentation de la richesse.

Ces résultats rejoignent les observations expérimentales, et, ce, pour l'ensemble des richesses étudiées.

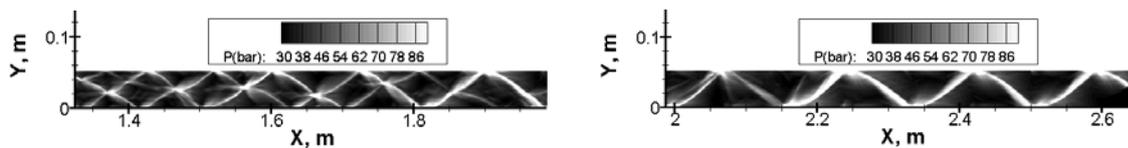


Fig. 7.21 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-0,8

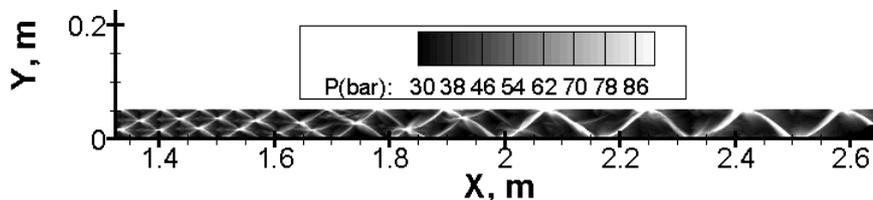


Fig. 7.22 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-0,9

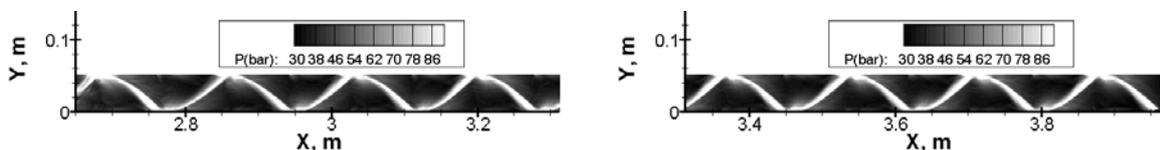


Fig. 7.23 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,0

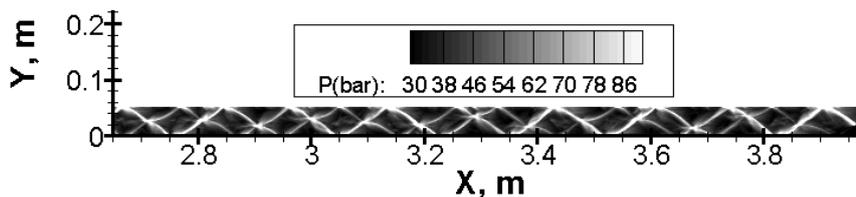


Fig. 7.24 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,1

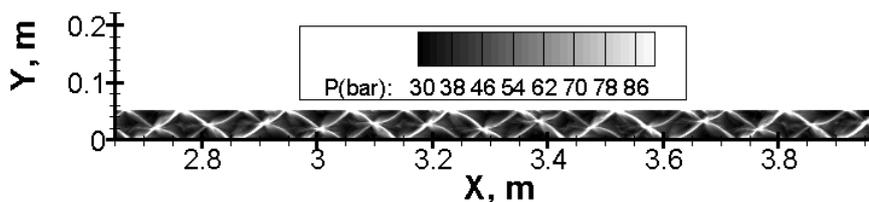


Fig. 7.25 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,2

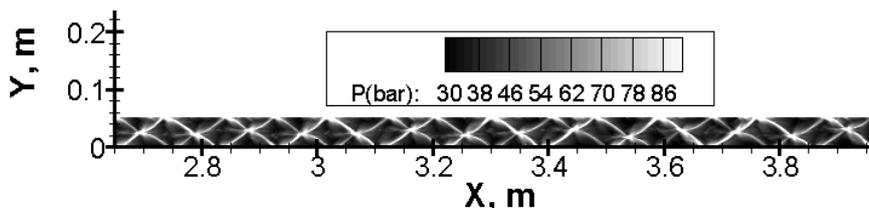


Fig. 7.26 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D0-1,3

### 7.5.2.2 Influence du rapport de dilution $\beta$

Les figures 7.27 ( (a), (b) et (c)) correspondent aux mélanges M2-D1-r pour des richesses de 0,9 (a), 1,0 (b) et 1,2 (c) quand la dilution change de D0 à D1. D'autre part, les figures 7.28 à 7.30 représentent les mélanges M2-D2-r où la richesse r est comprise entre 0,7 et 0,9 quand la dilution change de D0 à D2.

Sur ces figures, il n'y a plus de structures cellulaires à une demi-cellule. On n'observe que des structures multicellulaires, quelle que soit la richesse. Ce cas est similaire aux mélanges à base d'isooctane M1-D1-r et M1-D2-r.

La taille des cellules de détonation diminue, soit avec l'augmentation de la richesse, soit avec la diminution du rapport de dilution  $\beta$ .

Ainsi, pour la dilution D2, le nombre de cellules de détonation est multiplié par 2 (3-3,5 à 6,5 cellules) lorsqu'on passe d'une richesse 0,7 à 0,9. Pour la dilution D1, la variation est moins marquée ; on passe de 3 cellules (à richesse 0,9) à 3,5 cellules (à richesse 1,2). La diminution du rapport de dilution  $\beta$  favorise donc l'obtention d'un nombre de cellules plus élevé (dans la section du tube) et de plus petite taille.

Ces résultats sont en bon accord avec les observations expérimentales.

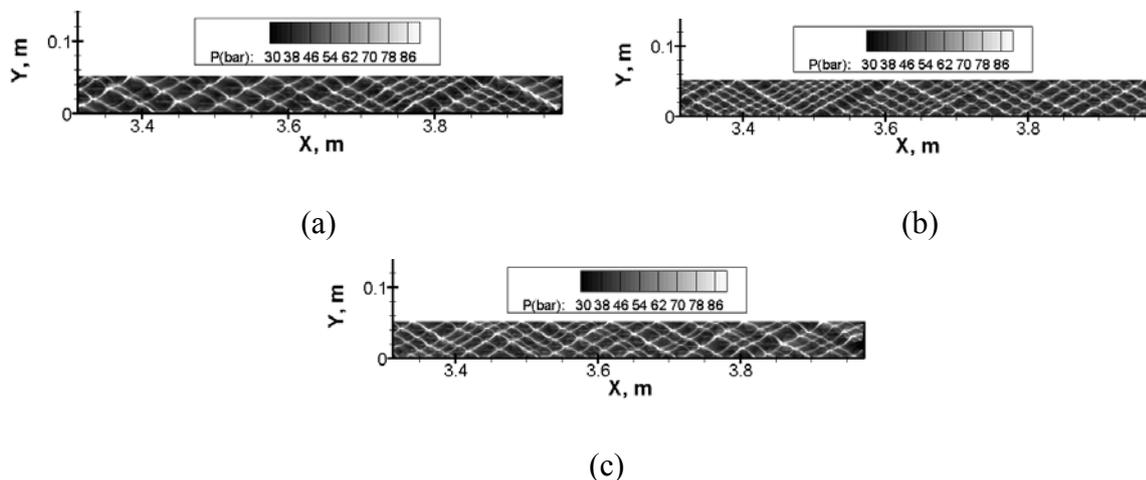


Fig. 7.27 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D1-r, avec  $r = 0,9$  (a),  $r = 1,0$  (b) et  $r = 1,2$  (c).

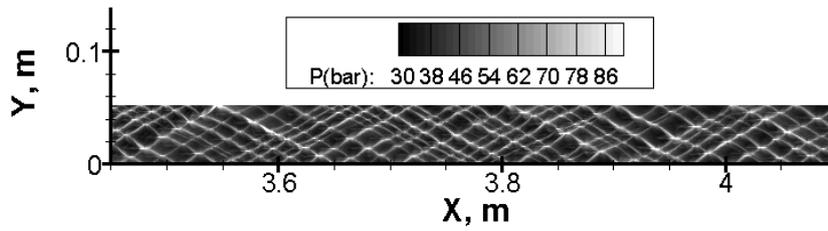


Fig. 7.28 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D2-0,7

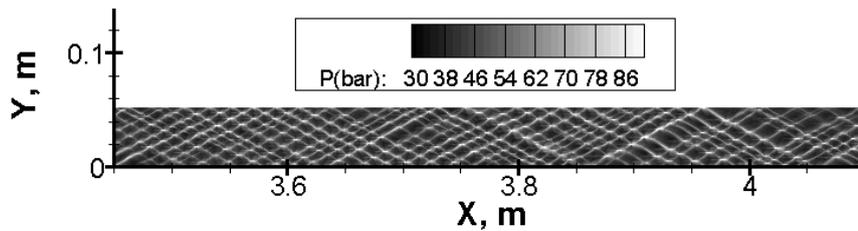


Fig. 7.29 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D2-0,8

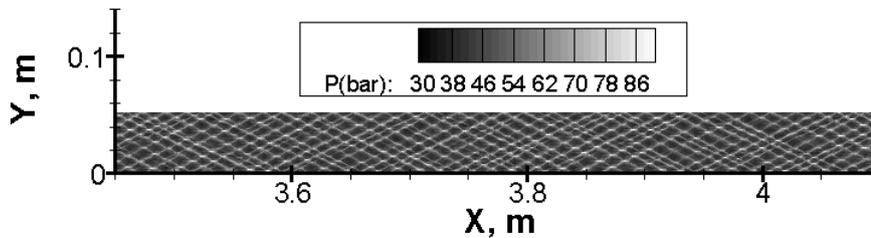


Fig. 7.30 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M2-D2-0,9

## 7.6 Simulations numériques bidimensionnelles instationnaires de la détonation des aérosols d'octane (M3)

Comme pour l'isooctane et l'heptane, étudiés dans les chapitres 7.4 et 7.5, on présente ici les résultats relatifs à la structure cellulaire de détonation pour les mélanges M3-D0-r, M3-D1-r et M3-D2-r.

### 7.6.1 Paramètres de simulations bidimensionnelles

Les paramètres de simulations 2D pour les mélanges M3-D0-r, M3-D1-r et M3-D2-r sont représentés dans le tableau 7.8.

<b>Carburant</b>	<b>M3</b>		
<b>Dilution</b>	D0	D1	D2
$N_x$	2000	3400	4000
$N_y$	200	340	400
$L_x$ (m)	0,53		
$L_y = h$ (m)	0,053		
$\Delta X = \Delta Y$ (mm)	0,265	0,156	0,133
$N_{\text{fine}} = N_{\text{adap}}$	1000	1700	2000

Tableau 7.8 – Paramètres de simulations bidimensionnelles

## 7.6.2 La structure cellulaire

### 7.6.2.1 Influence de la richesse

Les figures 7.31 à 7.39 montrent l'évolution de la structure cellulaire de détonation pour les mélanges M3-D0-r, où r varie entre 0,8 et 1,7 respectivement.

On observe les mêmes séquences que pour les cas des mélanges M1-D0-r et M2-D0-r, à savoir : un régime de détonation qui se propage d'une façon monodimensionnelle (non reproduite sur les figures), puis apparition d'une structure multicellulaire qui transite finalement, soit en une demi-cellule (cas pauvre), soit en une cellule complète (cas riche).

Les distances de parcours pour l'établissement du régime quasi-stationnaire de détonation sont semblables à celles observés dans le mélange M2-D0-r.

On retrouve aussi les mêmes régimes de détonation :

- la structure à une demi-cellule dans le milieu pauvre ou stœchiométrique ( $0,8 \leq r \leq 1,1$ ), (avec  $\lambda/2 \approx 53$  mm).

- dans des mélanges riches ( $r > 1,1$ ), on a un régime normal comprenant une structure à une seule cellule au plus, de taille  $\lambda \approx 53$  mm.

Toutefois, on constate qu'entre les richesses 0,9 et 1,2, on se trouve à la limite entre une structure à une demi-cellule et une structure normale avec une cellule complète. Les cellules complètes deviennent plus régulières avec l'augmentation de la richesse. Cette différence réside dans le fait que l'octane est un carburant moins volatil que l'isooctane et l'heptane.

Ces résultats restent en bon accord avec les observations expérimentales.

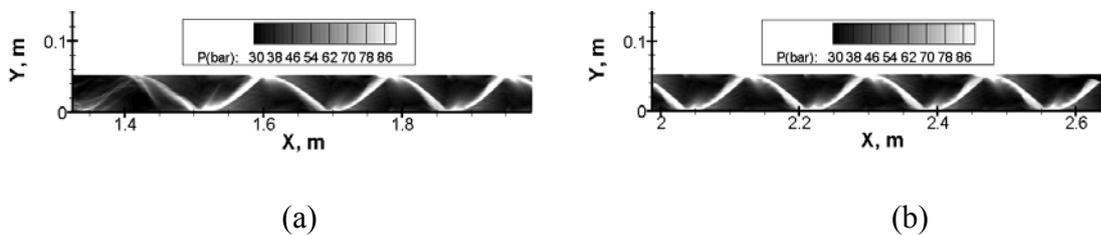


Fig. 7.31 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-0,8

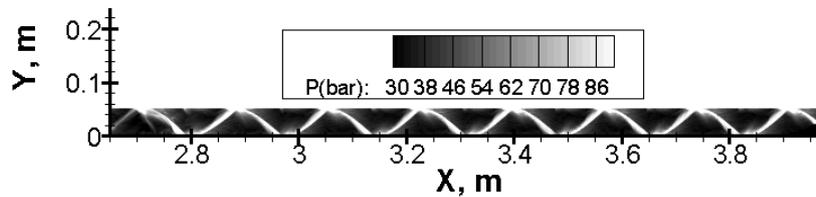


Fig. 7.32 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-0,9

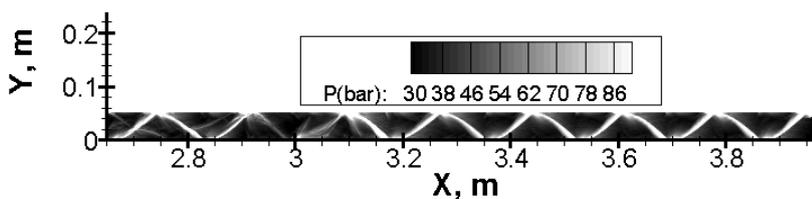


Fig. 7.33 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,0

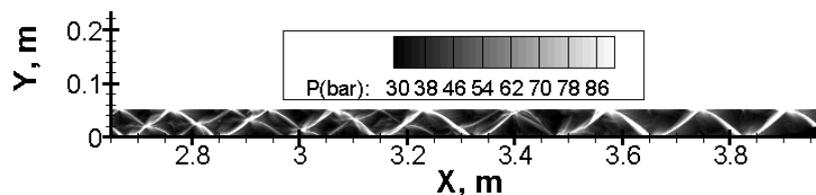


Fig. 7.34 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,1

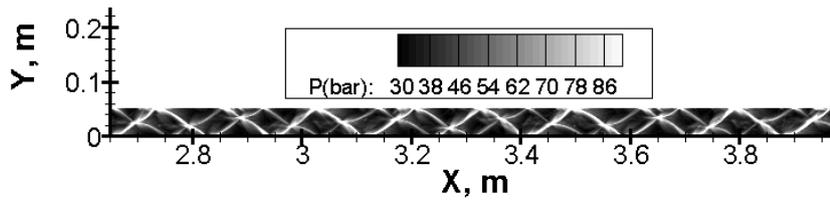


Fig. 7.35 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,2

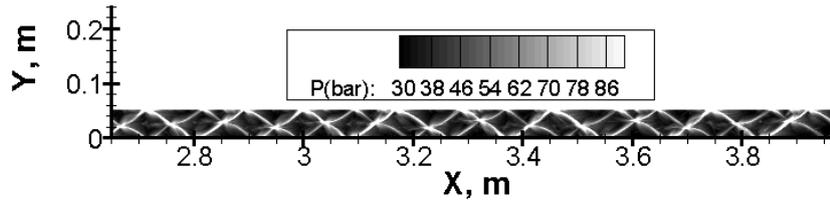


Fig. 7.36 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,3

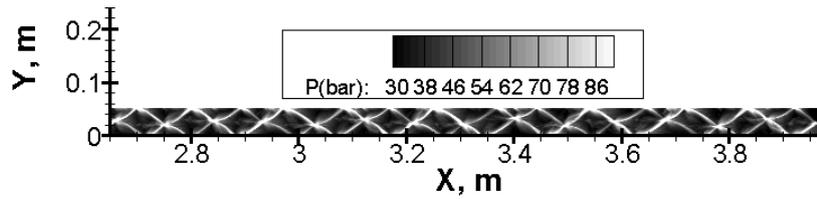


Fig. 7.37 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,4

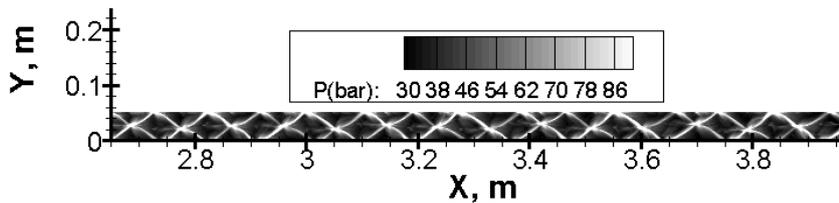


Fig. 7.38 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,5

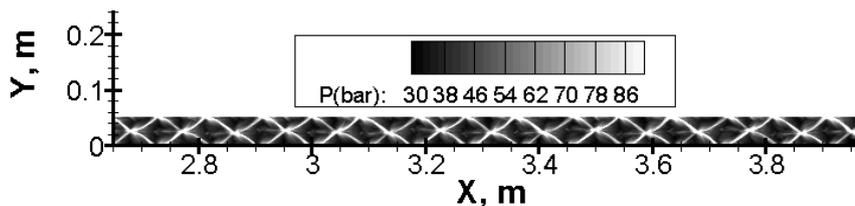


Fig. 7.39 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D0-1,7

### 7.6.2.2 Influence du rapport de dilution $\beta$

Dès que le rapport de dilution diminue, on trouve un régime normal multicellulaire, quelle que soit la richesse. Le nombre de cellules de détonation a tendance à augmenter quand la dilution diminue.

C'est ce qui ressort des figures 7.40 à 7.44 correspondant aux mélanges M3-D1-r pour des richesses de 0,8 à 1,3. Les figures 7.45 à 7.48 montrent des structures cellulaires pour les richesses de 0,7 à 1,0, et à dilution D2 et confirment que la taille des cellules diminue proportionnellement à la dilution. Cependant, les écarts observés d'une dilution à une autre ne sont pas aussi importants que pour le cas des deux mélanges précédents et notamment pour le mélange à base d'heptane (M2).

Pour la dilution D1, le nombre de cellules de détonation varie de 2 à 4 cellules, quand la richesse passe de 0,8 à 1,3. Alors que pour la dilution D2, le nombre de cellules passe de 3 à 5, pour des richesses pauvres et stœchiométriques (de 0,7 jusqu'à 1). Cependant, on note dans ce cas que la structure n'est régulière que pour  $r = 0,8$ .

On retrouve les mêmes tendances que lors des observations expérimentales. Notons une fois encore que cet accord est obtenu après l'ajustement d'un seul paramètre, le facteur pré-exponentiel pour la phase de combustion  $A_c$ .

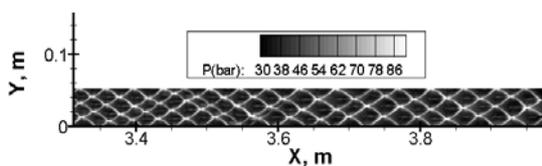


Fig. 7.40 – Structure cellulaire de détonation

pour un mélange M3-D1-0,8

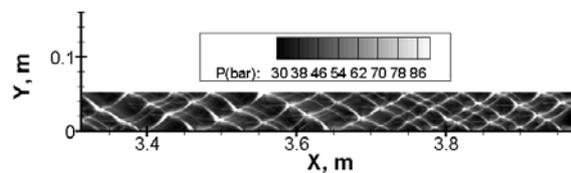


Fig. 7.41 – Structure cellulaire de détonation

pour un mélange M3-D1-0,9

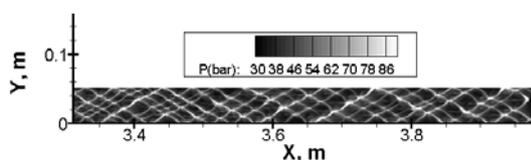


Fig. 7.42 – Structure cellulaire de détonation

pour un mélange M3-D1-1,0

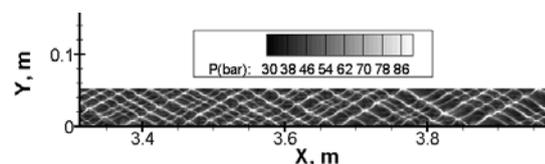


Fig. 7.43 – Structure cellulaire de détonation

pour un mélange M3-D1-1,2

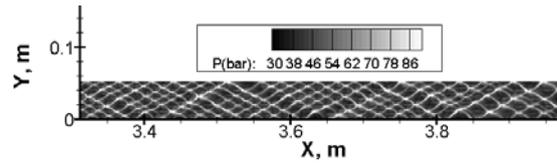


Fig. 7.44 – Formation de la Structure cellulaire de détonation  
pour un mélange M3-D1-1,3

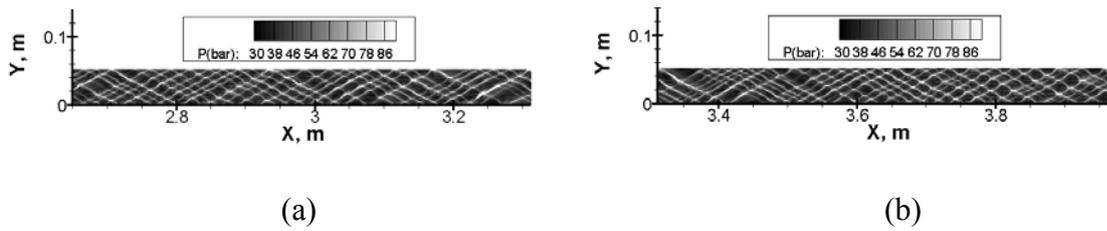


Fig. 7.45 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-0,7

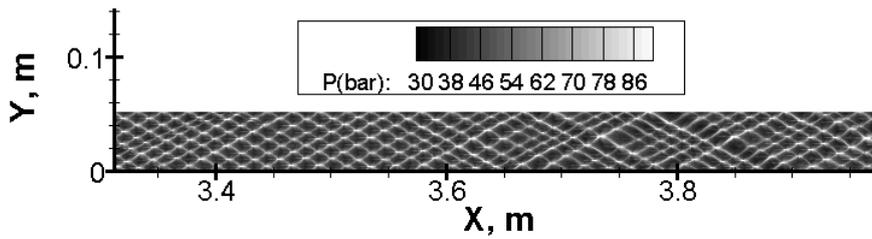


Fig. 7.46 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-0,8

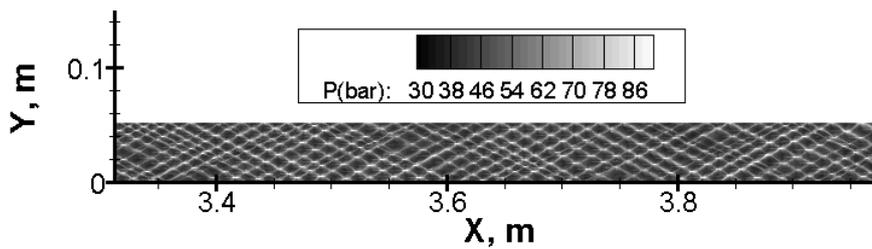


Fig. 7.47 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-0,9

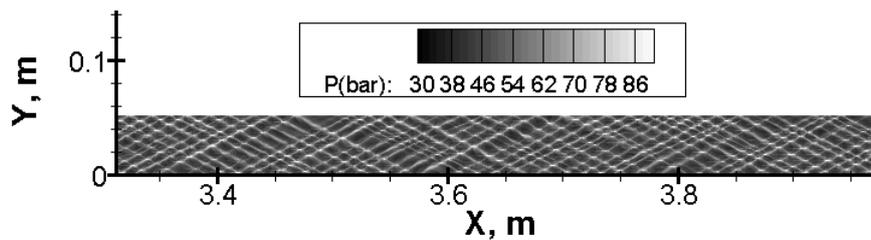


Fig. 7.48 – Formation de la structure cellulaire de détonation pour un mélange M3-D2-1,0

### 7.6.3 Influence du maillage sur les résultats

Pour le mélange M3-D0-0,9, nous avons procédé à des tests de sensibilité des résultats à la finesse du maillage en doublant la résolution initiale ( $\Delta X = \Delta Y = 0,265$  mm) pour un maillage de résolution  $\Delta X = \Delta Y = 0,133$  mm.

Les simulations numériques ont été effectuées dans les mêmes conditions opératoires. On constate qu'on obtient une structure cellulaire (figure 7.49) similaire et de même taille de cellule que celle obtenue avec la résolution initiale (figure 7.32) à savoir une demi-cellule de taille  $\lambda \approx 106$  mm. La demi-cellule est reproductible et régulière.

Cette comparaison montre donc que la structure cellulaire (et la taille de la cellule de détonation correspondante) est indépendante de la résolution et donc notre résolution initiale est suffisante.

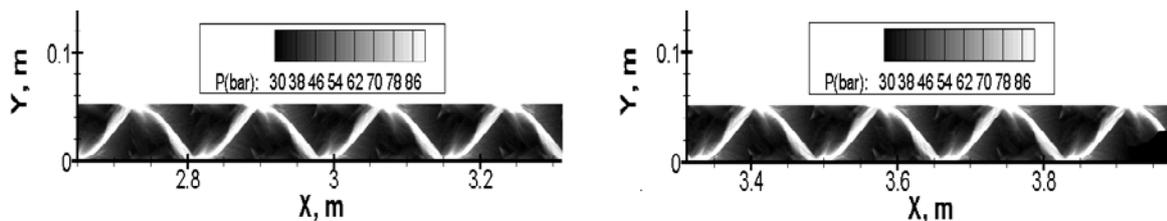


Fig. 7.49 – Structure cellulaire de la détonation pour un mélange M3-D0-0,9, avec une résolution numérique double de la résolution initiale  $\Delta X = \Delta Y = 0,133$  mm

### 7.6.4 Influence du diamètre du tube

Pour le mélange M3-D0-1,0, on a effectué des simulations bidimensionnelles (avec la résolution standard) en prenant un tube dont la section était cinq fois plus large que le tube initial (la largeur initiale étant de 53 mm), ceci afin de mettre en évidence la structure cellulaire de la détonation correspondante et définir une taille de la cellule indépendante de la largeur du tube.

Les simulations numériques ont été effectuées dans les mêmes conditions opératoires. On obtient une structure cellulaire (figure 7.50) assez régulière et reproductible. Le canal, de largeur 265 mm (5 fois la largeur initiale), renferme dans ce cas 2 cellules et demie. La taille

de la cellule est de 106 mm, la même que sur la figure 7.33 pour le même mélange dans un canal « standard ».

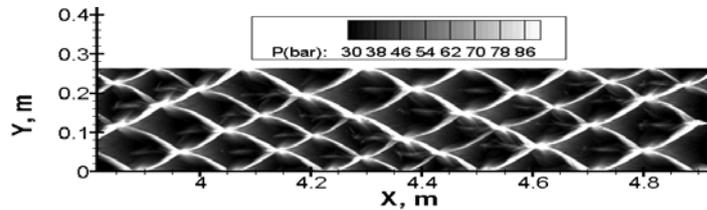


Fig. 7.50 – Structure cellulaire de la détonation pour un mélange M3-D0-1,0, pour un tube 5 fois plus large que le tube expérimental

## 7.7 Caractérisation thermomécanique

Pour analyser la structure fine de l'onde de détonation, on examine dans ce paragraphe les traces de pression maximale et les paramètres thermomécaniques au niveau et en aval du front de détonation, en traçant des cartographies des champs de pression, de masse volumique et de température pour la phase gazeuse, ainsi que celles des fractions massiques des différentes espèces gazeuses présentes, et du rayon des gouttelettes mères.

Cette analyse est faite pour trois régimes de détonation dans les mélanges M2-D0 en fonction de la richesse : la structure à une demi-cellule ( $r = 0,8$  et  $r = 1$ ) et le régime normal avec une structure multicellulaire ( $r = 1,3$ ).

On étudie aussi l'influence du rapport de dilution  $\beta$ .

### 7.7.1 Influence de la richesse

#### 7.7.1.1 Mélange pauvre

La figure 7.51 montre pour le mélange M2-D0-0,8, d'une part les trajectoires de points triples (en haut) et, d'autre part, des cartographies de champ de pression (a), de la température (b), de la masse volumique du gaz (c), de Schlieren numérique (c'est à dire le gradient de densité de la phase gazeuse) (d), de l'avancement de la réaction représenté par les profils des fractions massiques des espèces gazeuses présentes (des produits de détonation (e), de l'oxydant (f), de la phase vapeur (g)) du rayon des gouttelettes « mères » (h).

Cette représentation correspond à l'instant 2,203 m s après l'initiation (c'est à dire une distance de propagation de 3,77 m). A cette distance de propagation, on estime que la stationnarité du régime de détonation est vérifiée (figure 7.7).

Sur le diagramme de pression (figure 7.51(a)), on observe la présence d'une onde transverse matérialisée par un point triple en aval du front incident situé à  $x = 3,77$  m et  $y = 0,02$  m environ. Les trajectoires de points triples (en haut) indiquent que le point triple se propage vers la paroi haute en consommant de la vapeur combustible. En impactant la paroi, l'onde transverse est réfléchi.

Ces zones de points triples correspondent aux zones de pressions les plus élevées. Le profil de température de la phase gazeuse (figure 7.51(b)) montre que dans la zone où est localisé le point triple, la température des gaz augmente et devient suffisante pour démarrer la réaction chimique. En revanche, les zones correspondant aux températures de gaz les plus élevées se situent plus en arrière du front de détonation (dans les gaz brûlés, où la réaction est terminée et la température atteint son maximum). Autrement dit, les réactions chimiques qui ont lieu entre l'oxydant et le carburant évaporé se produisent dans des zones où la pression est relativement basse par rapport à l'amplitude de l'onde transverse, et non, comme c'est le cas avec les détonations en phase gazeuse homogène, dans les zones à haute pression au niveau des points triples, ce qui constitue une différence majeure, caractéristique des détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides.

Concernant la masse volumique des gaz (figure 7.51(c)), sa distribution est très semblable à celle de la pression et est donc maximale au niveau des points triples.

Il en est de même pour la distribution du gradient de densité des gaz (figure 7.51(d)) qui est maximal également au niveau des points triples.

Cependant, les figures représentant les fractions massiques des espèces gazeuses montrent que l'accumulation des produits de détonation commence juste derrière l'onde transverse (figure 7.51(e)) en aval du front de détonation. D'autre part, s'agissant d'un mélange pauvre, les diagrammes de fraction en oxydant (figure 7.51(f)) et en carburant évaporé (figure 7.51(g)) montrent que loin du front de détonation, une fois la réaction terminée, les espèces gazeuses ne contiennent plus que les produits de détonation et une fraction résiduelle de l'oxydant (mélange est pauvre  $r=0.8$ ). Le carburant dans sa phase vapeur est totalement consommé.

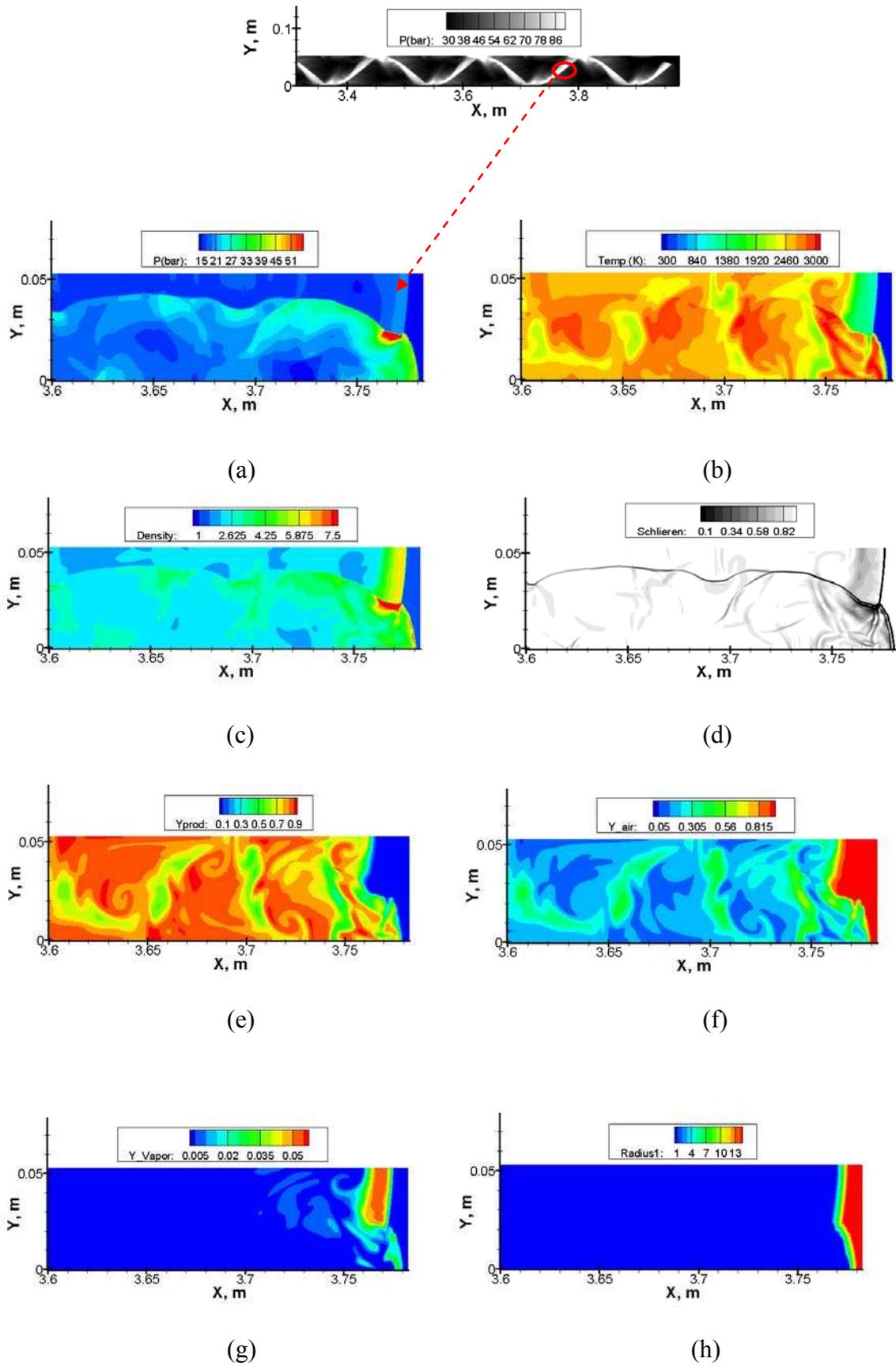


Fig. 7.51 – Distributions des paramètres thermomécaniques à  $t = 2,203$  ms, pour un mélange M2-D0,0,8

### 7.7.1.2 Mélange stoechiométrique

Pour le mélange stoechiométrique M2-D0-1,0, les cartographies des paramètres thermomécaniques sont représentés sur la figure 7.52, où l'on observe les distributions de pression (a), de température des gaz (b), des fractions massiques des espèces gazeuses (c), (d), et (e), ainsi que du rayon des gouttelettes (f). Cette représentation correspond à l'instant 2,180 ms après l'initiation (c'est à dire une distance de propagation de 3,87 m).

Sur le diagramme de pression, on observe la présence d'un point triple en aval du front incident, situé à  $x = 3,85$  m et  $y = 0,032$  m environ, caractérisé par des pressions et des températures élevées derrière l'onde transverse qui se propage vers la paroi supérieure en consommant la vapeur de carburant. Les températures les plus élevées sont situées loin derrière le front de détonation, dans les gaz brûlés.

En aval du front incident et avant l'arrivée de l'onde transverse, la consommation de l'oxydant et de la phase vapeur n'a pas encore commencé. Ce n'est qu'à la fin de la réaction chimique que les espèces gazeuses ne contiennent que des produits de détonation dans les gaz brûlés.

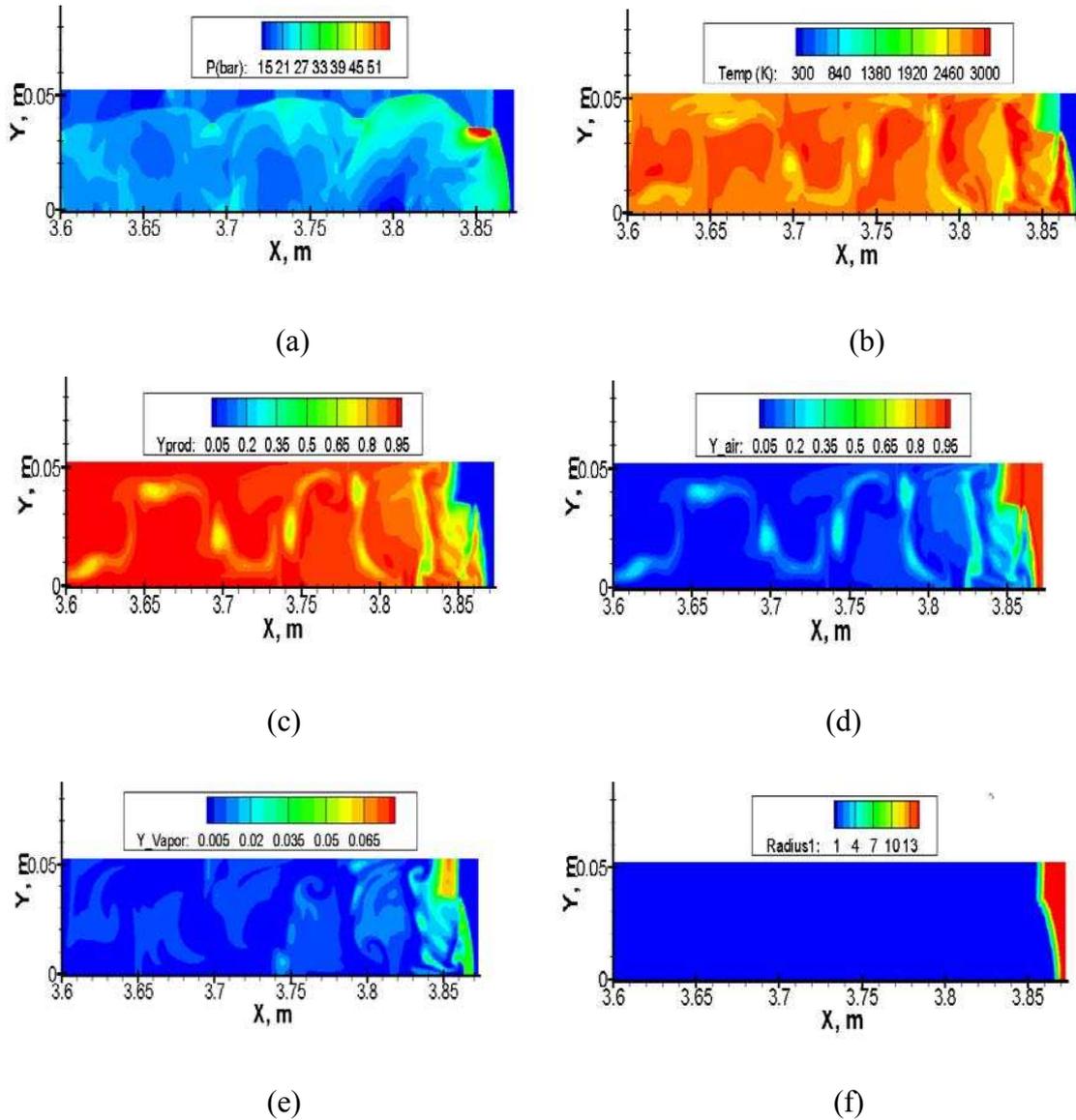


Fig. 7.52 – Distributions des paramètres thermomécaniques à  $t = 2,180$  ms, pour un mélange M2-D0-1,0

### 7.7.1.3 Mélange riche

Pour le mélange riche ( $r = 1,3$ ), la figure 7.53 montre la présence de deux points triples sur le profil de la pression (a) derrière le front de détonation. Ces points sont situés à environ  $x = 3,825$  m ( $y = 0,05$  m) et  $x = 3,855$  m ( $y = 0,035$  m). Le premier point triple se propage vers la paroi supérieure tandis que le second se propage vers la paroi inférieure. On observe d'importantes élévations de pression et de températures (b) derrière les ondes transverse.

En aval du front de détonation, les diagrammes des fractions massiques des espèces gazeuses montrent que la réaction commence à l'arrière des zones de pression maximales. D'autre part,

s'agissant d'un mélange riche, on vérifie que dans la zone au-delà de laquelle la réaction est terminée, les espèces gazeuses ne contiennent que les produits de détonation (c) et une part résiduelle de carburant évaporé non réagi (e), car le mélange est riche. L'oxydant (d) est par contre totalement consommé.

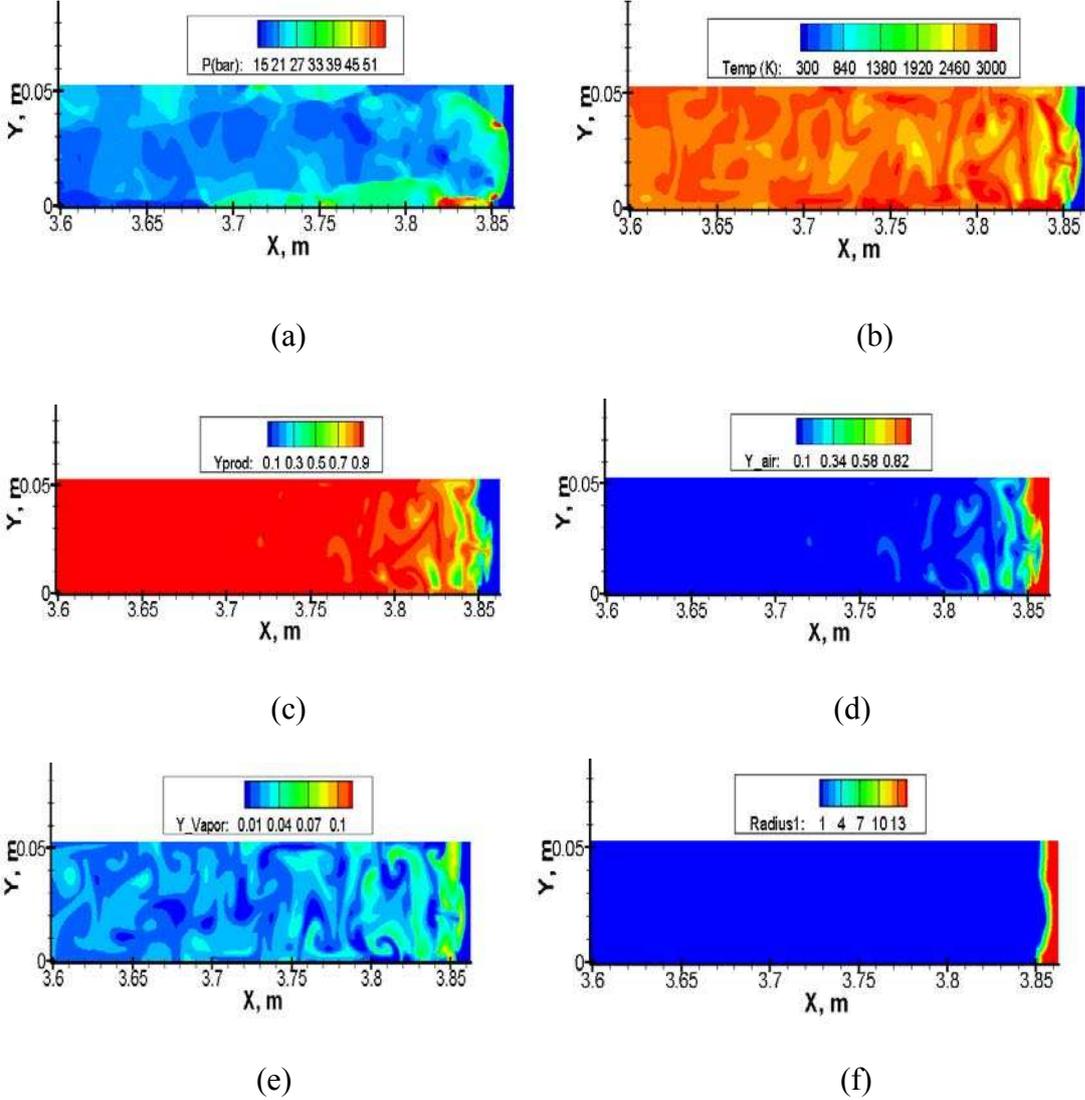


Fig. 7.53 – Profils des paramètres thermomécaniques à  $t = 2,180$  ms, pour un mélange M2-D0-1,3

Concernant le diagramme de l'évolution du rayon des gouttelettes mères, entre les trois richesses (figures 7.51(h), 7.52 (f) et 7.53 (f)), on constate de légères variations de l'épaisseur de la zone d'évaporation de gouttelettes mères au niveau des points triples.

### 7.7.2 Influence de la dilution

Sur la figure 7.54, on a représenté les diagrammes des paramètres thermomécaniques d'avancement de la réaction chimique pour le mélange M2-D2-0,8, c'est-à-dire pour une dilution  $\beta = 1$ .

On constate qu'à l'inverse du mélange M2-D0-0,8, qui est beaucoup plus dilué, on a 5 à 6 cellules dans le canal. Comme précédemment, derrière les ondes transverses, on a une augmentation brutale de la pression accompagnée d'une montée de la température, conduisant au démarrage de la combustion de vapeur. Donc, ce mélange moins dilué est beaucoup plus réactif.

Par rapport au mélange M2-D0-0,8 où l'on obtient un seul point triple et donc une demi-cellule, le nombre de cellules de détonation obtenu avec le mélange M2-D2-0,8 est d'environ cinq à six cellules. Le rapport du nombre de cellules de détonation entre les deux dilutions, à richesse constante (milieu pauvre), est de 10.

D'autre part, on constate que la masse volumique et le gradient de densité des gaz sont également maximaux dans les zones de haute pression (points triples).

En ce qui concerne les espèces gazeuses, la combustion est complète, mais il reste une fraction résiduelle d'oxydant (mélange pauvre).

Le diagramme du rayon des gouttelettes mères indique que leur désintégration et leur évaporation se produisent beaucoup plus rapidement.

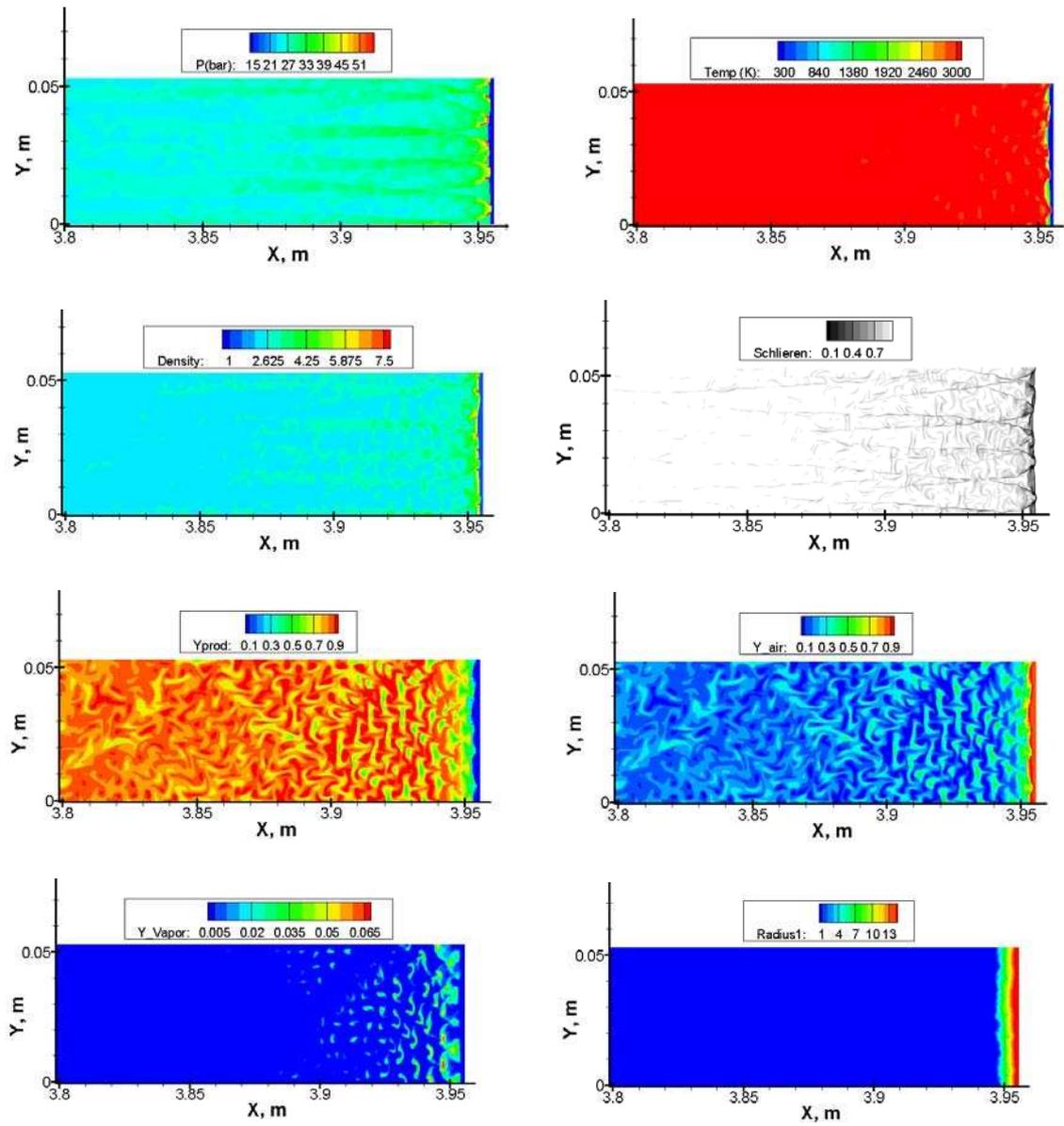


Fig. 7.54 – Profils des paramètres thermomécaniques à  $t = 2,203$  ms, pour un mélange M2-D2-0,8

## 7.8 Simulations numériques tridimensionnelles instationnaires des détonations hétérogènes gaz/gouttelettes liquides

On a effectué des simulations numériques tridimensionnelles instationnaires de la propagation de la détonation dans le mélange M1-D0-0,8 pour une taille de gouttelettes liquides de 30  $\mu\text{m}$ , afin de mettre en évidence le régime hélicoïdal observé lors des expériences.

Les conditions initiales du mélange M1-D0-0,8 sont les mêmes que pour les simulations 2D, mais avec un maillage 3D d'une résolution 1000x100x100 ( $\Delta X = \Delta Y = \Delta Z = 0,53 \text{ mm}$ ).

Le calcul a été initié par une simulation 2D entre le point d'initiation et une distance de propagation de 4 m. Les résultats des simulations 3D présentés dans ce cas correspondent à une distance X au-delà de 4,5 m, distance où la propagation de la détonation est stationnaire.

La figure 7.55 représente les traces des valeurs maximales de pression. Elles sont typiques de l'évolution de la détonation vers le régime hélicoïdal dans un tube de section carrée (53x53)  $\text{mm}^2$ .

Les enregistrements montrent que le pas P de la détonation hélicoïdale, représenté par la distance axiale entre les deux motifs, est de l'ordre de 200 mm, ce qui correspond au périmètre mouillé du tube ( $P \approx 4h$ , où  $h = 53 \text{ mm}$ ).

L'angle formé entre les bandes et l'axe du tube vaut environ  $45^\circ$ , ce qui confirme que la propagation de la détonation hélicoïdale est stationnaire.

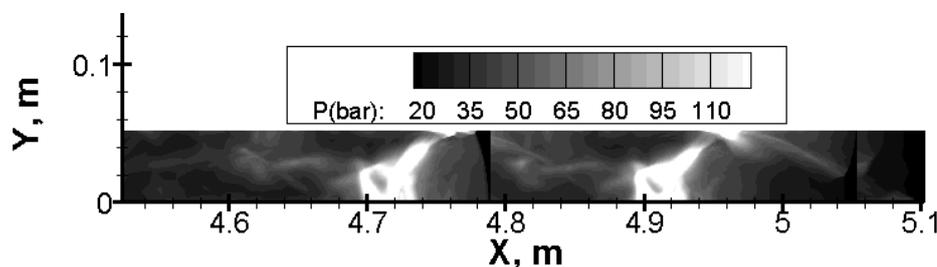


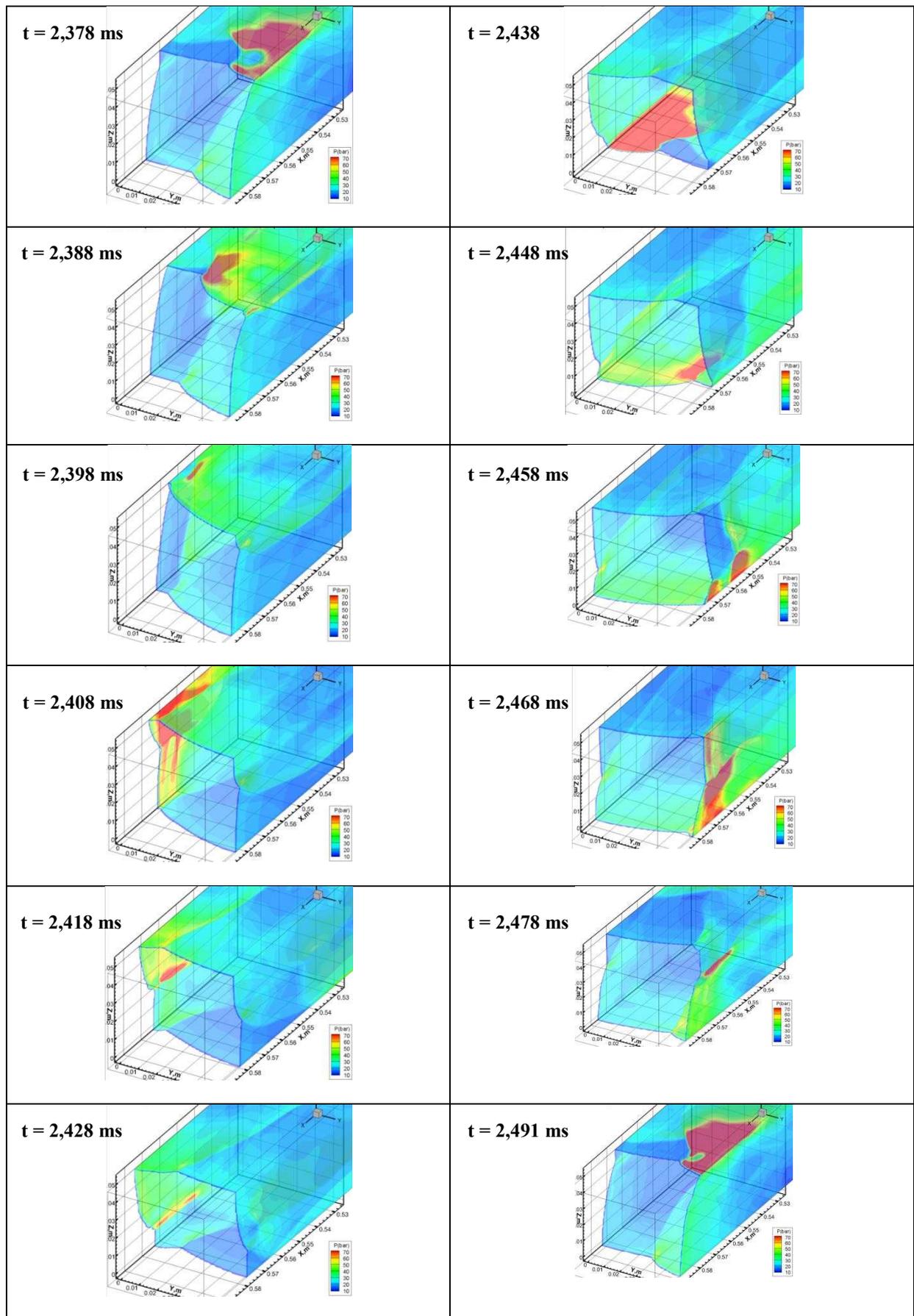
Fig. 7.55 – Traces de pression maximale correspondant au régime hélicoïdal dans un tube carré ( $h = 53 \text{ mm}$ ) pour le mélange M1-D0-0,8

La figure 7.56 montre les contours des isobares de pression 3D pour le mélange M1-D0-0,8, à des instants compris entre  $t = 2,378$  ms et  $t = 2,491$  ms ( $\Delta t = 10$   $\mu$ s).

Afin d'obtenir une meilleure visibilité de l'écoulement à l'intérieur du tube, un effet de transparence de parois a été utilisé. De plus les résultats sont montrés dans le repère lié au front de la détonation.

On constate que la détonation hélicoïdale tourne dans le sens des aiguilles d'une montre. On observe un seul point triple qui se propage de façon « rotative » dans une zone proche de la paroi du tube. Le cycle complet est effectué en un temps  $t \approx 113$   $\mu$ s, ce qui correspond à un pas  $P$  de 200 mm.

Ce résultat est en accord avec les observations expérimentales pour les mêmes conditions opératoires.



**Fig. 7.56** – Simulation tridimensionnelle de la détonation hélicoïdale dans un tube carré ( $h = 53$  mm) pour le mélange M1-D0-0,8



## **CONCLUSIONS**



Dans le cadre de cette thèse nous avons cherché à acquérir des connaissances nouvelles pour améliorer la compréhension des mécanismes de propagation de la détonation dans des mélanges hétérogènes d'aérosols gaz/gouttelettes liquides. Il s'agissait, d'une part, de mettre en évidence et d'analyser la structure cellulaire caractéristique de la détonation, et, d'autre part, d'étudier l'influence des caractéristiques physico-chimiques de l'aérosol (phase liquide et oxydant gazeux) sur la détonabilité et les régimes de propagation. Les expériences auxquelles nous avons procédé avaient pour but d'établir une base de données expérimentales, tandis que les simulations numériques cherchaient à mettre au point un modèle susceptible de reproduire qualitativement et quantitativement les résultats expérimentaux pour les mêmes mélanges.

1 - Le montage expérimental qui a été mis au point permet de remplir le tube à détonation, sur toute sa longueur, avec des aérosols de caractéristiques contrôlées. Il est composé principalement d'un tube à détonation vertical, d'environ 4m de longueur et de section carrée ( $h = 53$  mm de côté), équipé de capteurs de pressions pour suivre l'évolution de la célérité et de la pression au cours de la propagation de l'onde incidente, ainsi que de plaques disposées en paroi permettant l'enregistrement de la structure cellulaire par la méthode des traces de Mach, sur une distance de 420 mm. Une caractéristique importante de cette installation est la technique de génération de l'aérosol par atomiseur ultrasonique, qui permet la génération d'un aérosol avec une distribution granulométrique quasi monodispersée. L'amorçage par un tube à choc auxiliaire a été calibré sur des mélanges hydrogène-air stœchiométriques.

2 - Les carburants sélectionnés étaient de la famille chimique des alcanes saturés  $C_nH_{2n+2}$  : isooctane, heptane, octane, décane et dodécane. Ils diffèrent par leur poids moléculaire mais surtout par leur pression de vapeur saturante. Un monergol, le nitrométhane, a également été étudié. La taille moyenne des gouttelettes (déterminée par interférométrie à Phase Doppler) était de 30  $\mu\text{m}$ . La phase gazeuse oxydante était constituée d'oxygène et d'azote avec un rapport de dilution  $\beta$  variant de 1 à 3,76 (air). Des mélanges oxygène-argon ont aussi été utilisés avec l'isooctane. Toutes les expériences ont eu lieu dans les conditions standards de température et de pression ( $T = 293$  K et  $P = 1$  bar).

3 - Pour les mélanges dans lesquels la détonation a été initiée, il a été possible de mettre en évidence des régimes de propagation où des traces de la structure cellulaire ont été enregistrées. C'est un résultat important, car les résultats expérimentaux disponibles en ce

domaine étaient quasi-inexistants. Les régimes de propagation de la détonation dépendent de la richesse  $r$  et de la dilution  $\beta$ :

Pour les carburants très volatils, heptane et iso-octane :

- En mélange avec l'air, trois régimes de détonation ont été observés, en fonction de la richesse : pour  $0,7 \leq r \leq 0,9$  le régime hélicoïdal ; pour  $0,9 < r \leq 1,1$ , un régime marginal avec une structure à demi-cellule ; et pour  $r \geq 1,2$ , un régime normal avec une structure multicellulaire.
- Lorsque le rapport de dilution  $\beta$  diminue, on n'observe que le régime à structure multicellulaire et la taille des cellules de détonation diminue avec  $\beta$ .

Pour les carburants moins volatils comme l'octane :

- En mélange avec l'air, on retrouve les mêmes régimes de détonation en fonction de la richesse, mais la largeur de la cellule de détonation est proche de la section du tube  $\lambda = h = 53$  mm.
- Lorsque  $\beta$  diminue, pour une même richesse, la largeur des cellules est plus grande dans le cas de l'octane que celle de l'heptane et de l'iso-octane, l'écart s'accroissant davantage quand la dilution est la plus faible ( $\beta = 1$ ).

Pour les mélanges d'iso-octane, dilués avec l'argon, l'effet du gaz monoatomique améliore considérablement la régularité de la structure cellulaire permettant ainsi d'obtenir des tailles de cellules de détonation très petites, avec un motif reproductible, en taille et en forme géométrique. La taille de la cellule de détonation est autour de 4 à 5 mm pour la dilution  $\beta = 2$ , et de 1 à 2 mm pour la dilution  $\beta = 1$ .

4 - Pour les carburants peu volatils, décane et dodécane, la détonation n'a pas été obtenue avec des aérosols de granulométrie  $30 \mu\text{m}$ , quelle que soit la richesse et la dilution, même en augmentant l'intensité du choc généré par le dispositif d'initiation. Cependant, pour la dilution la plus faible ( $\beta = 1$ ), on a observé la propagation d'une zone de combustion entretenue par choc. En revanche, Mar (2012) a observé l'initiation de la détonation dans des aérosols de même composition, mais de granulométrie  $8 \mu\text{m}$ .

5 - Pour le nitrométhane avec l'air, la détonation n'a pas été obtenue avec des aérosols de granulométrie  $30 \mu\text{m}$ , même en augmentant l'intensité du choc généré par le dispositif d'initiation. En revanche, la détonation a été établie dans des aérosols nitrométhane-air de richesse 0,25 et de granulométrie  $8 \mu\text{m}$ . Une structure cellulaire remarquablement régulière a

été observée, dont la largeur est celle de la section du tube,  $\lambda = h = 53$  mm. C'est la première fois, à notre connaissance, que la détonation a été initiée dans un aérosol de nitrométhane – air dans les conditions standard de température et de pression.

6 - Un modèle numérique a été développé pour la simulation de la structure cellulaire, dont la nouveauté consiste en la prise en compte des effets de la richesse du mélange et de la dilution de la phase oxydante. Seul le facteur pré-exponentiel de la réaction vapeur-oxydant est ajusté en fonction de la nature chimique du carburant liquide. Le modèle numérique prend aussi en compte la désintégration mécanique des gouttelettes sous l'effet du choc précurseur.

- Des simulations numériques des détonations dans des mélanges biphasiques gaz/gouttelettes liquides ont été effectuées pour l'isooctane, l'heptane et l'octane. Les résultats des simulations effectuées en configuration bi-dimensionnelle, en fonction de la richesse et de la dilution conduisent à des régimes de propagation et à des tailles de la structure cellulaire de détonation en accord raisonnable avec les résultats expérimentaux.
- Les simulations numériques tri-dimensionnelles effectuées dans le mélange isooctane-air pauvre de richesse 0,8 ont mis en évidence la formation d'un régime de propagation hélicoïdal, dont les caractéristiques de propagation et la structure sont en très bon accord avec les observations expérimentales.

La possibilité que des aérosols d'hydrocarbures puissent détoner avec l'air dans des conditions initiales standards de température et de pression est confirmée. La plupart des travaux menés auparavant concluaient à la grande difficulté, voire l'impossibilité, de faire détoner des aérosols dans de l'air : la détonation n'avait été obtenue que dans de l'oxygène pur ou, dans le cas de l'air, après une période préalable d'induction permettant aux gouttelettes de se vaporiser suffisamment pour permettre la propagation d'une détonation en phase gazeuse.

Cependant, la taille des structures cellulaires de détonation que nous avons enregistrées montre que la détonabilité de ces aérosols est moindre que celle de la plupart des mélanges à base d'hydrocarbures gazeux. Comme pour les mélanges gazeux homogènes, les paramètres de composition chimique influencent cette détonabilité : lorsque la richesse diminue, on observe des régimes de propagation caractéristiques des régimes limites : structures à demi-cellule, détonations hélicoïdales ; à l'inverse, lorsque le rapport de dilution diminue, on observe des régimes de propagation multi-têtes. La détonabilité dépend aussi de la volatilité du carburant liquide : en effet, la détonabilité est conditionnée par un taux de production

d'une quantité de vapeur suffisante pour que l'énergie libérée par la combustion du mélange permette la propagation de la détonation. De ce point de vue, la comparaison de nos résultats avec ceux menés en parallèle par Mar (2012) sur l'influence de la granulométrie des aérosols indique que le paramètre prédominant est la taille des gouttelettes de carburant.

# **BIBLIOGRAPHIE**



- Alekseev V.I., Dorofeev S.B., and Sidorov V.P.**, Direct initiation of detonations in unconfined gasoline sprays., *Shock Waves*, (Vol. 6, No. 2, pp. 67-71), 1996.
- Auffret Y., Desbordes D., Presles H.N.**, Detonation Structure and Detonability of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> – O<sub>2</sub> mixtures at elevated initial temperature, *Shock Waves* 11 : 89-96, 2001.
- Austin J.M. and Shepherd J.E.**, Detonations in hydrocarbon fuel blends, *Combustion and flame*, 132 (2003) 73-90.
- Babushok V. I. and Dakdancha**, Global kinetic parameters for high-temperature gas-phase reactions, translated from *Fizika Goreniya*, Vol (9), N° 4, pp. 48-80, 1993.
- Bar-Or, R., Sichel, M., and Nicholls, J. A.**, “The Propagation of Cylindrical Detonations in Monodisperse Sprays,” Eighteenth Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, pp. 1599-1606, 1981.
- Benedick W.B., Tieszen S.R., Knystautas R., Lee J.H.S.**, (1989), "Detonation of unconfined Large-scale Fuel Spray-Air Clouds", 12th international colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems Vol.12: 297-310.
- Beeson H.D., McClenagan R.D., Bishop C.V., Benz F.J., Pitz W.J., Westbrook C.K., and Lee J.H.S.** Detonability of hydrocarbon fuels in air. *AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics*, (Vol. 133, pp. 19-36), 1991.
- Berthelot M. et Vieille P.**, Sur la vitesse de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz. *Compte Rendu Hebdomadaires de l'Académie des Sciences*, T93 et 94, 1881.
- Borisov A. A., Gelfand B. E., Gubin S. A., Kogarko S. M., and Podgrebenkov A L.**, “The Reaction Zone of Two-Phase Detonations,” *Astronautica Acta*, Vol. 15, No. 5, 1970, pp. 411–417.
- Borisov A.A., Khasainov B.A., Veyssiere B., Saneev EL, Khomiz S.V., Fomin I.B.** *Chem Phys Rep* 1991; 10(2):250-72.
- Borzou B., Maxwell B. et Radulescu M.I.**, Influence of the reaction to induction length ratio on the stability of cellular detonations, 23 rd ICDERS, 2011.
- Bowen J.R., Ragland K.W., Steffes F.J., and Loflin T.G.**, Heterogeneous detonation supported by fuel fogs or films. 13<sup>th</sup> Symposium (International) on *Combustion*, (Pittsburgh, PA : The Combustion Institute, p. 1131-1139), 1971.
- Briand A.** : *Contribution à l'étude de la structure des détonations dans les milieux biphasiques*, Thèse de Docteur de l'ENSMA, Laboratoire de Combustion et Détonique, ENSMA, Poitiers, 2009.
- Bull, D.C., McLeod M.A., and Mizner G.A.**, Detonation of unconfined fuel aerosols, *Gasdynamics of Detonations and Explosions*, edited by Bowen J.R., Manson N., Oppenheim A.K., and Soloukhin R.I., *Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 75, AIAA, New York, 1981, pp. 48–60.

- Bull D.C., Elsworth J.E., and Shuff P.J.**, Detonation cell structures in fuel/air mixtures, *Combustion and flame*, 45, 7-22 (1982).
- Burgoyne J.H. and Cohen L.**, The effect of drop size on flame propagation in liquid aerosols. *Proceedings of the Royal Society*, Vol. 225 (1162), pp. 375-392, 1954.
- Campbell C., Woodhead D.N.**, Striated Photographic Records of Explosion Waves, *Journal of Chemical Society* : 1572-1578, 1927.
- Carvalho F. et Soares A.J.**, On the dynamics and linear stability of one-dimensional steady detonation waves, *J. Phys. A: Math. Theor.*, pp.1-27, 2012.
- Chapman D.L.**, On the rate of explosion in gases, *Philosophical Magazine* 47: 90-104, 1899.
- Chikos J.S., Hosseini S., et Hesse D.G.**, Determination of vaporization enthalpies of simple organic molecules by correlations of changes in gas chromatographic net retention times, *Thermochimica Acta* 249, pp. 41-62, 1995.
- Chikos J.S. et Acree Jr. W.E.**, Enthalpies of vaporization of organic and organometallic compounds 1820-2002, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, Vol. 32, No. 2, 2003.
- Chu B-T.**, Vibration of the gaseous column behind a strong detonation wave. 1st Gas Dynamics Symposium on Aerochemistry, 95/111, 1956.
- Cramer F.B.**, The onset of detonation in a droplet combustion field, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 9, Academic Press, New York, pp. 482, 1963.
- Dabora E.K., Ragland K.W., and Nicholls J.A.**, Drop size effects in spray detonations. *Proceedings of the Combustion Institute*, (Vol. 12, *Combustion Institute, Pittsburgh*, pp. 19-26), 1969.
- Dabora E.K.**, "A model for spray detonations", *Acta Astronautica* Vol.6: 269-280, 1979.
- Dabora, E. K.**, "Lean Detonation Limit of Sensitized Kerosene Sprays in Air," *Dynamics of Detonations and Explosions: Detonations*, edited by Kuhl A.L., Leyer J.C., Borisov A.A., and Sirignano W.A., *Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 133, *AIAA, Washington, DC*, 1991, pp. 311-324.
- Denisov Y.N., Troshin Y.K.**, (1959), Pulsating spinning detonation gaseous mixture tubes. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 125, 110-113.
- Denisov Y.N., Troshin Y.K.**, (1962), "On the mechanism of detonative combustion", 8<sup>th</sup> International Symposium on Combustion 8: 600.
- Desbordes D., Guerraud C., Hamada L. and Presles H.N.**, Failure of the classical dynamic parameters relationships in highly regular cellular detonation systems. *Progress in Astronautics and Aerodynamics*, vol. 153, pages 347-359, 1993.

- Dobre M.**, Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques : Le Formalisme d'Entropie Maximale, Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, 2003.
- Dormal M., Libouton J-C. et Van Tiggelen P.J.**, Evolution of induction time in detonation cells, *Acta Astronautica*, Vol. 6, pp. 875-884, 1979.
- Dove J.E. et Wagner H.G.**, A Photographic Investigation of the Mechanism of Spinning Detonation. 8th Symposium on Combustion, 589–600, 1962.
- Döring W.**, "Über den Detonationsvorgang in Gasen", *Annalen der Physik* 435 (67): 421-436, 1943.
- Eidelman S., Sichel M.**, (1981), "The Transitional Structure of Detonation Waves in Multi-Phase Reactive Media", *Combustion Science and Technology* 26: 215-224.
- Fay J. A.**, A Mechanical Theory of Spinning Detonation. *The journal of chemical physics*, 20(6), 942–950, 1952.
- Fickett W. and Davis W.C.**, Detonation. University of California Press, Berkeley, CA,, 338-340, 1979.
- Franzelli B., Riber E., Sanjosé M. et Poinso T.**, A two step chemical scheme for kerosene-air premixed flames, *Combustion and Flame*, (2010).
- Fraser R.P.**, Seventh symposium (International) on Combustion, p. 783, Butterworths, 1959.
- Frolov S.M.**, "Limits of heterogeneous detonation", Minsk International Colloquium on Physics of Shock Waves, *Combustion, Detonation and Non-Equilibrium Processes*, MIC 2005, Minsk, 12-17 Nov., 2005.
- Frolov S.M., Basevich VyA, Aksenov V.S.** In: Roy G.D., Mashayek F., editors. Proceedings of the 14<sup>th</sup> ONR Propulsion Meeting, Chicago, IL: University of Illinois at Chicago; 2001, p. 202.
- Frolov S.M., Basevich VyA, Aksenov V.S., Polikhov S.A.** In: Roy G.D., Frolov S.M. Santoro R., Tsyganov S., editors. Confined detonations and pulse detonation engines. Moscow: Torus Press; 2003. P. 157-74.
- Gamezo V.N., Desbordes D. et Oran E.S.**, Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations, *Combustion and Flame* 116: 154-165, 1999.
- Gamezo V.N., Vasilēv A.A., Khokhlov A.M. and Oran E.S.**, Fine cellular structures produced by marginal detonations, *Proceedings of the Combustion Institute*, Volume 28, pp. 611–617, 2000.
- Gavrikov A.I., Efimenko A.A. et Dorofeev S.B.**, A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics, *Combustion and Flame* 120: 19-33, 2000.
- Gladilin A.M., Grigorov A.I., Sagidullin G.G.** Detonation processes in two phase media. Moscow: Nedra; 1991.

- Goodwin D.**, Cantera, Division of engineering and applied science California institute of Technology, 2010.
- Gubin S.A. and Sichel M.**, Calculation of the detonation velocity of a mixture of liquid fuel droplets and a gaseous oxidizer. *Combustion, Science and Technology*, (Vol. 17, No. 3-4, pp. 109-117), 1977.
- Guilly V.**, Etude de la diffraction de la détonation des mélanges C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> stœchiométriques dilués par l'argon. Ph.D. thesis, Université de Poitiers, 2007.
- Hsiang L.-P. and Faeth G. M.**, Near-limit drop deformation and secondary breakup, *Int. J. of Multiphase Flow*, vol. 18 (5), pp. 635-652, 1992.
- Jouguet E.**, Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz. *Journal des mathématiques pures et appliquées*, 1, 327-425, 1905.
- Kaneshige M., Shepherd J.E.**, Detonation Database, Explosion Dynamics Laboratory Report FM97-8, 1997.
- Kee R. J., Rupley F. M. et Miller J. A.**, Chemkin II : a Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Sandia National Laboratories Report SAND89- 8009, 1989, reprinted january 1993.
- Kessler D.A. et Gamezo V.N.**, Wave structure and irregular detonation cells, AIAA-2011-798, 2011.
- Khasainov B. A. and Veyssiere B.**, Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures, *Shock Waves*, vol. 6, pp. 9-15, 1996.
- Khasainov B.**, Final report, "Modeling particle combustion in detonations and explosions". *Laboratoire de Combustion et de Détonique*, UPR 9028 CNRS. ENSMA, 2005.
- Knystautas R., Guirao C., Lee J.H.S et A. Sulmistras A.**, Measurement of cell size in hydrocarbon-air mixtures and predictions of critical tube diameter, critical initiation energy, and detonability limits. Pages 23-37 of : *Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 94. AIAA, 1984.
- Kuchta, J. M.**, Investigation of fire and explosion accidents in the chemical, mining, and fuel-related industries - a manual. Bulletin 680, U.S. Bureau of Mines, 1985.
- Kuo, Kenneth K.**, Principles of Combustion, New York: John Wiley & Sons, 1986.
- Lacas F., Versaevel P., Scouflaire P., Coeur G. Joly**, Design and performance of an ultrasonic atomization system for experimental combustion applications, *Particle & particle systems characterization* ISSN 0934-0866, 1994, V ol. 11, n°2, pp.166-171 (19 ref).
- Lee, J.H.S.**, "On the Transition from Deflagration to Detonation," *Dynamics of Explosions*, Vol. 106: *Progress in Astronautics and Aeronautics*, AIAA, NY, 1986.

- Lee, J.H.S.**, The detonation phenomenon, Cambridge university, 2008.
- Leung C. et al.**, Characteristics analysis of the one dimensional pulsating dynamics of chain-branching detonations, *Physics of fluids*, Vol.22, 2010.
- Libouton J.C., Dormal M., Van Tiggelen P.J.**, The role of chemical kinetics on structure of detonation waves, 15th Symposium (International) on Combustion 15(1) :79-86, 1975.
- Lin Z.C., Nicholls J.A., Tang M.J., Kauffman C.W. et Sichel M.**, Twentieth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburg, pp. 1709-1716, 1984.
- Lu P.L., Slagg N., Fishburn B.D., and Ostrowski P.P.**, Relation of chemical and physical processes in two-phase detonations, *Acta Astronautica*, Vol (6), pp. 815 – 826, 1979.
- Mallard E., Le Châtelier H.**, Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les mélanges explosifs. *Compte Rendu Hebdomadaires de l'Académie des Sciences*, T93, 145–148, 1881.
- Manson N.**, On the structure of so-called helical detonation waves in gaseous mixture. *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci.* 222, 46–48, 1946.
- Manzhalei V.I.**, Fine structure of the leading front of a gas detonation, *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 13(3), pp. 402-404, 1977.
- Mar M.**, Détonations dans les aérosols de gouttelettes de carburants liquides: Etude de l'influence de la granulométrie des gouttelettes, Thèse de doctorat, Institut P'-ENSMA, Poitiers, (2012).
- Matignon C.**, Etude de la détonation de deux mélanges stœchiométriques (CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> et CH<sub>4</sub>/C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>) Influence de la proportion relative des deux combustibles et de la température initiale élevée, laboratoire LCD-ENSMA, Poitiers, 2000.
- Mitrofanov V.V. and Soloukhin R.I.**. The diffraction of multifront detonation waves. *Sov. Phys. Dokl.*, (Vol. 9, p. 1055), 1964.
- Nicholls J.A.**, Stream and droplet breakup by shock waves. NASA SP-194, pages 126–128. 40, 1972.
- Nicholls J.A., Bar-or R., Gabrijel Z., Petkus E.**, "Recent experiments on heterogeneous detonation waves", *AIAA Journal* Vol.18 (No.5 Technical Notes): 605-606, 1980.
- Nicholls J.A., Sichel M., Fry R., Glass D.R.**, "Theoretical and experimental study of cylindrical shock and heterogeneous detonation waves", *Acta Astronautica* Vol.1: 385-404, 1974.
- Nigmatulin R. I.** : *Methods of mechanics of a continuous medium for the description of multiphase mixtures*, *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 34, n°6, pp. 1033-1049 (traduction du Prikl. Matemat. Mekh. vol. 34, n°6, pp 1097-1112), 1970.

- Oppenheim A.K.**, Novel Insight into the Structure and Development of Detonation. *Astronautica Acta*, 11(6), 391–400, 1965.
- Oran E.S. and Boris J.P.**, Numerical Simulation of Reactive Flow. 2nd edition. Cambridge University Press, 2001.
- Papavassiliou J.**, Measurements of cellular structure in liquid aerosol detonation, thesis-Department of mechanical engineering McGill university, Montreal, 1991.
- Papavassiliou J., Makris A., Knystautas R., Lee J.H.S., Westbrook C.K., and Pitz W.J.**, Measurements of cellular structure in spray detonation. *Dynamic Aspects of Explosion Phenomena*, (Edited by Khul A.L., Leyer J.C., Borisov A.A and Sirignano W.A., Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 154, AIAA, Washington, DC, pp. 148-169), 1993.
- Perry R.H et Green D.W.**, Perry's Chemical Engineer's Handbook, McGraw-Hill, 1997, 7<sup>e</sup> Ed, 2400p.
- Radulescu M.I., Ng H.D., Lee J.H.S. et Varatharajan B.**, Proc. Combustion Institute, pp. 2825-2831, 2002.
- Radulescu M.I.**, The propagation and failure mechanism of gaseous detonations: experiments in porous-walled tubes, Ph.D. Thesis, McGill University, Montreal, 2003.
- Ragland, K. W., Dabora, E. K., and Nicholls, J. A.**, "Observed Structure of Spray Detonations," *Physics of Fluids*, Vol. 11, No. 11, 1968, pp. 2377–2388.
- Reynolds W. C.**, The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis : Implementation in the Interactive Program STANJAN. Department of Mechanical Engineering, Standford University, 1986.
- Roy, G. D., Frolov, S. M., Borisov, A. A., and Netzer, D. W.**, "Pulse Detonation Propulsion: Challenges, Current Status, and Future Perspective," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 30, 2004, pp. 545–672.
- Schelkin K.I., Troshin Ya.K.**, Non-Stationnary Phenomena in the Gaseous Detonation Front, *Combustion and Flame* 7 : 143-151 (1963).
- Schelkin K.I., Troshin Ya.K.**, "Gasdynamics of Combustion", Mono Book Co., Baltimore, 1965.
- Schott G.L.** Observations of the Structure of Spinning Detonation. *The Physics of Fluids*, 8(5), 850–865, 1965.
- Seshadri K., Humer S. and Seiser R.**, Activation-energy asymptotic theory of autoignition of condensed hydrocarbon fuels in non-premixed flows with comparison to experiment, *Combustion theory and Modeling*, Vol. 12 (5), 831-855, 2008.
- Short M. et Quirk J.J.**, *J. Fluid Mech.* 339, 89-119, 1997.

- Short M. et Sharpe G.J.**, Pulsating instability of detonations with a two-step chain-branching reaction model: theory and numeric, *Combustion theory and modeling*, Vol.7, pp.401-416, 2003.
- Stamps W.D., Slezak S.E., et Tieszen R.S.**, Observations of the cellular structure of fuel-air detonations, *Combustion and Flame*, 144 (2006), 289-298.
- Stanyukovich K. P.**, *Unsteady Motion of Continuous Media*. Pergamon Press, New York, 1960.
- Strehlow R.A., R.Liaugminas, R.H.Watson, J.R.Eyman**, "Transverse wave structure in detonations", *Proceedings of the combustion institute* 11: 683-692, 1967.
- Strehlow R.A.**, Gas Phase Detonation : Recent Developments, *Combustion and Flame* 12 : 81-101, 1968.
- Strehlow R.A. et Engel C.D.**, Transverse Waves in Detonations : II. Structure and Spacing in  $H_2 - O_2$ ,  $C_2H_2 - O_2$ ,  $CH_4 - O_2$  Systems. *AIAA Journal*, 7(2), 492-496, 1969.
- Takai R. et al.**, Study of detonation wave structure, 15<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 69-78, 1974
- Tieszen S.R., Stamps D.W., Westbrook C.K. et Pitz W.J.**, Gaseous hydrocarbon-air detonations. *Combust and Flame*, 84(3) : 376-390, 1991.
- Tsuboi N. and Hayashi A.K.**, Detailed structure of spinning detonation in circular tube. *Combustion and Flame*, (Vol. 149, pp. 144-161), 2007.
- Urtiew P.A., Tarver C.M.**, Effects of Cellular Structure on the Behaviour of Gaseous Detonation Waves Under Transient Conditions, *Progress in Astronautics and Aeronautics* 75 : 370-384, 1981.
- Vatani A., Mehrpooya M. et Gharagheizi F.**, Prediction of standard enthalpy of formation by a QSPR Model, *International Journal of Molecular Sciences*, 8, 407-432, 2007.
- Victorov S. B., Gubin S. A., Maklashova I. V. and Revyakin I. I.**, Thermodynamic TDS code: Application to detonation properties of condensed explosives, *Proceedings of the 32<sup>nd</sup> International Annual Conference of ICT, Energetic Materials, Ignition, Combustion and Detonation*, pp. 69.1-69.15, ICT , Karlsruhe, 2001.
- Victorov S. B., Gubin S. A., Maklashova I. V.**, An equation of state and detonation properties of hydrazine-Nitromethane liquid mixtures, *Shock waves* 11, pp. 105-114 , 2001.
- Vieille P.**, Sur le role des discontinuités dans les phénomènes de propagation. *Mémoire des poudres et Salpêtres*, 10, 177, 1900.
- Virost F.**, 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 de Docteur Ingénieur, ENSMA, Université de Poitiers (France), 2009.
- von Neuman J.**, *Theory of Detonation Waves*. Progress report to the National Defense Research Committee, PB 31090, 1942.

- Voronin D.V. and Zhdan S.A.**, Calculation of heterogeneous detonation initiation in tube by explosion of hydrogen-oxygen mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, (Vol. 20, No. 4, pp. 112-116), 1984.
- Weber W.F.**, Spray combustion in the presence of a traveling wave. *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 8, pp. 59, 1962.
- Westbrook C.K. and Dryer F.L.**, Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion, Science and Technology*, Vol. 27, p. 31-43, 1981.
- Westbrook C.K. and Urtiew P.A.**, Chemical kinetic prediction of critical parameters in gaseous detonation. In *19th Symp. Int. Combust. Proc.*, pages 615-623, 1982.
- Westbrook C.K.**, *AIAA J.* 24 :2002-2009, 1986.
- Williams F.A.**, Structure of detonations in dilute sprays. *Physics of Fluids*, (Vol. 4, No. 11, pp. 1434-1443), 1961.
- Zel'dovich, Ya.B.**, On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz. (Journal of Experimental and Technical Physics)*, 10, 542–568, 1940.

# **ANNEXES**



## **Annexe 1**

# **Structure tridimensionnelle du front de détonation**



## A1-1 La structure cellulaire ; « détonation multi-tête »

Les modèles de CJ et ZND présentent la détonation comme la propagation d'une onde plane et donc monodimensionnelle. En réalité, cette onde possède une structure réelle beaucoup plus complexe que celle décrite par ces deux théories.

Un certain nombre d'observations expérimentales de la structure de l'onde de détonation ont mis en évidence le caractère localement instationnaire de l'onde de détonation. A ce titre, Campbell et Woodhead (1927) ont été les premiers à mettre en évidence le caractère non plan de la détonation.

En 1959, Denisov et Troshin ont également observé, par la méthode de traces de suie, de fortes discontinuités au niveau du front de détonation, des discontinuités qui ont des formes tantôt concave, tantôt convexe par rapport aux gaz frais.

En réalité, la détonation est un phénomène intrinsèquement instable et la structure réelle de l'onde de détonation est tridimensionnelle. Sa célérité de propagation n'est stationnaire qu'en moyenne et s'accompagne d'un mouvement cyclique du front de détonation (Denisov et Troshin, 1962; Shchelkin et Troshin, 1965; Strehlow, 1967) induisant des motifs périodiques appelés « Cellules de détonation ».

Les instabilités du front de détonation donnent lieu à la formation de points triples, intersection de trois ondes de choc (cf. figure A1.1): l'onde incidente TI qui se propage dans la direction de la propagation, l'onde de Mach TM qui est due à la réflexion de l'onde incidente et l'onde transverse TT générée par la réflexion de Mach. Le déplacement de ces points triples est dû au mouvement longitudinal de l'onde incidente et à la propagation des ondes transversales le long de l'onde incidente. Il peut être observé expérimentalement par la technique des traces de Mach : sur une plaque recouverte de suie, disposée le long de la paroi dans le sens de la propagation, les points triples, qui sont des lieux de très fortes pressions et très fortes températures, arrachent localement la suie et inscrivent ainsi sur la plaque l'empreinte de leur trajectoire. L'ensemble des trajectoires des points triples forme un maillage tridimensionnel périodique. Chaque motif élémentaire est appelé cellule de détonation et est caractérisé par sa largeur  $\lambda$  (voir figure A1.2). Il y a lieu de souligner que les traces sur les plaques de suie apparaissent uniquement lors de la propagation d'une détonation. Aucune trace n'est observée lorsque le choc précurseur et la zone de réaction sont découplées (Oppenheim, 1965).

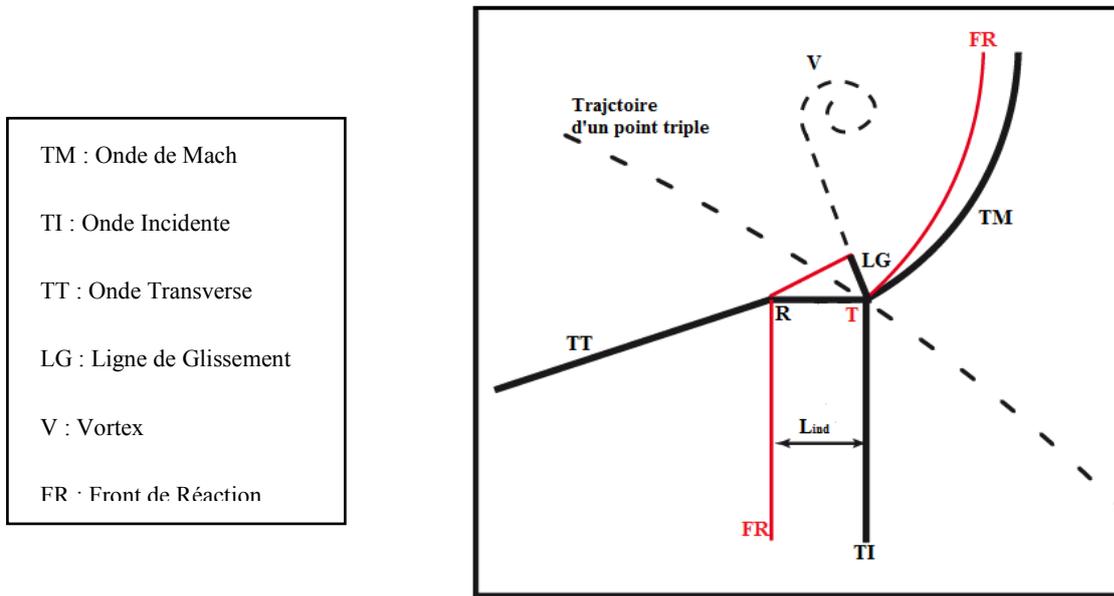


Fig. A1.1 – Structure d’une onde de détonation : réflexion de Mach et point triple.

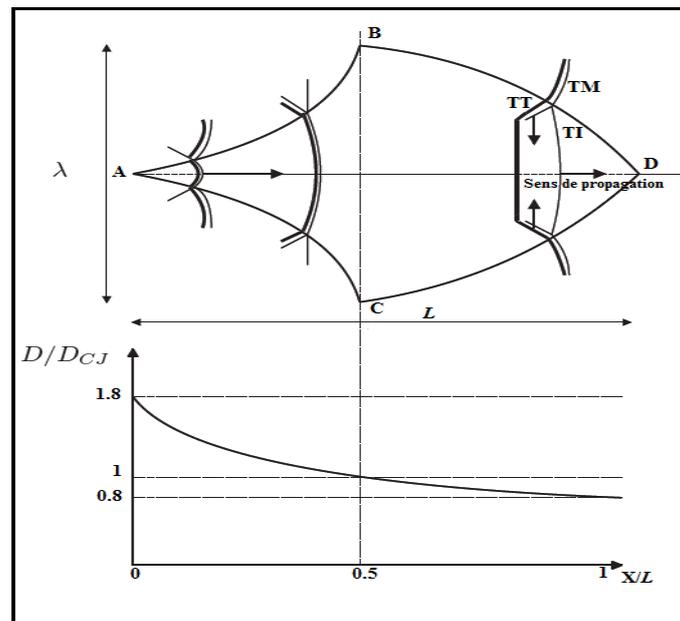


Fig. A1.2 – Schéma d’une cellule de détonation et de l’évolution de la célérité de l’onde de détonation le long de l’axe de la cellule (Takai et al., 1974 ; Dormal et al., 1979)

Les réactions chimiques s’effectuent dans une zone derrière les ondes de choc, comme indiqué sur la figure A1.1.

La collision de deux ondes transverses au début de chaque cellule provoque une explosion locale qui génère une détonation forte ( $D/D_{CJ} \approx 1,6-1,8$ ) (Takai et al., 1974; Dormal et al., 1979; Fickett et al., 1979) engendrant des pressions, températures et célérités maximales (cf. figure A1.2). Les délais d'auto-inflammation à cet endroit sont très courts et la zone de réaction est étroitement liée à l'onde de choc. Au fur et à mesure de la propagation dans la cellule, l'onde de choc de tête s'atténue, entraînant une diminution de la pression et de la température derrière celle-ci et donc une augmentation des délais d'auto-inflammation provoquant par conséquent le découplage progressif du front de choc et de la zone de réaction pour ainsi atteindre en moyenne  $D/D_{CJ} \approx 1$  en son milieu (segment BC de la figure A1.2). A partir de la moitié de la cellule, le choc conducteur devient une onde incidente constituant deux réflexions de Mach avec les ondes des cellules adjacentes. L'amortissement se poursuit et il en est de même pour le phénomène de découplage onde de choc de tête-zone de réaction chimique jusqu'à la fin de la cellule. Une partie des gaz frais choqués par l'onde incidente est alors re-choquée par les ondes transverses issues des cellules adjacentes, ce qui provoque l'auto-inflammation du mélange. En fin de cellule (point D de la figure A1.2),  $D/D_{CJ} \approx 0,6-0,8$ . Une nouvelle collision de points triples reproduit le même phénomène et le départ d'un nouveau cycle dans la cellule suivante. C'est cette dynamique cyclique qui auto-entretient la propagation de la détonation.

Les dimensions caractéristiques d'une cellule de détonation sont  $\lambda$  et  $L$ , représentant respectivement la largeur et la longueur de la cellule. Quel que soit le mélange étudié, le rapport de ces deux caractéristiques dans l'état CJ est d'environ 0,6 (Urtiew et al., 1981; Bull et al., 1982). L'angle moyen  $\theta$  correspondant à la trajectoire des points triples par rapport à la direction principale de propagation est d'environ  $30^\circ$  tel que :  $\text{tg}\theta = \frac{\lambda}{L} = 0,6$ .

#### **A1-2 Corrélation taille des cellules $\lambda$ et longueur d'induction $L_i$**

Shchelkin et Troshin (1963, 1965) furent les premiers à proposer que les dimensions des cellules de détonation, mesurées expérimentalement, puissent être corrélées avec l'épaisseur de la zone de réaction chimique, déterminée sur la base du modèle ZND monodimensionnel, de l'onde de détonation. Strehlow et Engel (1969) ont posé que la longueur caractéristique de la zone de réaction comprend la distance d'induction  $L_i$  et une zone de libération d'énergie, siège de recombinaisons trimoléculaires, appelée distance de

recombinaison  $L_r$ . Ils ont montré que la taille de cellule  $\lambda$  est proportionnelle à  $(L_i + L_r)$ . En général, et particulièrement pour les détonations dans les mélanges gazeux, le temps de la zone de recombinaison est très petit devant celui de la zone d'induction. Par conséquent, la longueur caractéristique de la zone de réaction se résumera à la longueur d'induction  $L_i$ , ce qui entraîne une proportionnalité entre la taille de la cellule  $\lambda$  et la longueur d'induction chimique  $L_i$ . Lorsque la détonation a atteint le régime de propagation autonome et stationnaire, on obtient  $\lambda_{CJ} = k.L_{i,ZND}$  ( $L_{i,ZND}$  est calculée sur la base du modèle ZND),  $k$  étant une constante caractéristique du mélange considéré, qui dépend de la nature du combustible, des conditions initiales ( $P_0, T_0$ ), de la richesse et de la dilution du mélange réactif.

La prédiction de la taille de la cellule à partir du seul calcul de la longueur de la zone de réaction reste pour l'instant impossible : le coefficient  $k$  n'est a priori pas calculable. Il peut cependant être évalué expérimentalement, soit à partir de la base de données établie par Kaneshige et Shepherd (1997), soit par comparaison de  $\lambda_{CJ}$  et  $L_i$ . Il ressort que pour la majorité des systèmes réactifs,  $k$  varie entre 10 et 100 pour différents mélanges explosifs (Gavrikov et al., 2000). D'après Westbrook et Urtiew (1982), pour les mélanges hydrocarbures-air à la température standard,  $k \approx 29$ .

### **A1-3 Régularité de la structure cellulaire**

Lors des enregistrements expérimentaux de la structure cellulaire de détonation, certains mélanges réactifs présentent une structure irrégulière où coexistent des cellules de tailles différentes. La détermination de la taille de la cellule dans ce cas peut être difficile. Cette régularité ou non de la structure cellulaire est fonction du mélange réactif utilisé, de la géométrie du tube, de la capacité calorifique du gaz et de la dilution.

En effet, la structure cellulaire de détonation a tendance à être plus régulière dans les tubes carrés ou rectangulaires, pour les gaz à faible capacité calorifique (Strehlow et al., 1967) et pour des mélanges réactifs dilués par des gaz inertes monoatomiques, en particulier l'argon. Avec l'argon, la structure cellulaire est d'une excellente régularité, en particulier à cause de la chaleur spécifique réduite du diluant, la température au point ZND est plus élevée, ce qui favorise les réactions de ramification (J.H.S. Lee, 2008). En revanche, la dilution par un gaz inerte polyatomique entraîne une augmentation de la capacité calorifique du mélange réactif et une diminution de la température et de la pression derrière l'onde de choc. En conséquence, la cinétique de réaction est ralentie et la période d'induction augmente (et donc la distance

d'induction). Pour des mélanges fortement dilués (dilution > 60 %), de très bonnes régularités ne sont obtenues que dans le cas des gaz rares tel l'Argon. Les mélanges d'hydrocarbures-oxygène et, plus encore, les mélanges hydrocarbures-air conduisent à l'obtention de structures cellulaires beaucoup plus irrégulières.

Cette notion de régularité de la structure cellulaire a conduit Strehlow (1968) puis Libouton et al. (1975) à établir une classification des mélanges réactifs en fonction de la régularité de leur structure cellulaire, en se basant sur des résultats d'observations expérimentales. Quatre catégories peuvent être distinguées, comme le montre la figure A1.3.

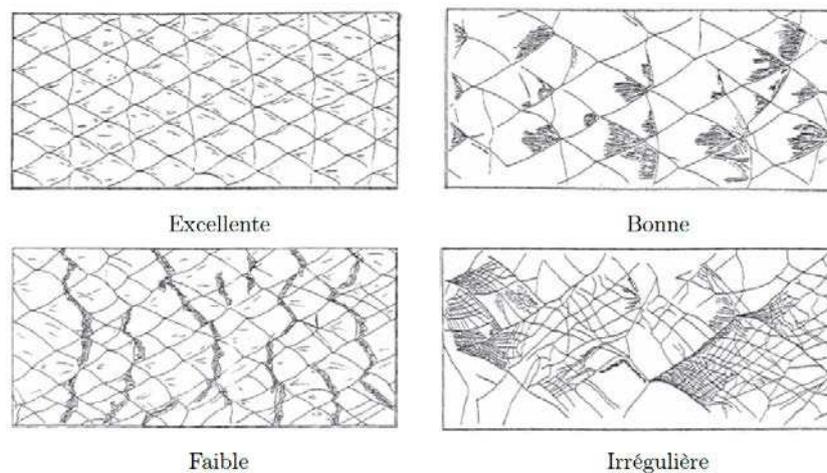


Fig. A1.3 – Classification des structures cellulaires selon leur régularité (Libouton et al., 1975)

**Excellent** : toutes les cellules de la structure sont superposables. Configuration généralement obtenue pour des systèmes chimiques ( $H_2/O_2$ ), ou pour des mélanges fortement dilués par un gaz inerte tel l'Argon.

**Bonne** : légère variation de la largeur des cellules. La structure reste cependant  $\pm$  régulière.

**Faible** : de nouvelles traces diagonales apparaissent et disparaissent au sein de la structure cellulaire principale.

**Irrégulière** : lecture difficile de la structure. Dans ce cas, une sous-structure apparaît à l'apex des cellules de la structure principale.

La structure de l'onde est liée à sa stabilité. Des détonations fortement instables sont caractérisées par des ondes transverses fortes et des structures cellulaires irrégulières. De plus dans le cas des détonations fortement instables, on observe souvent la présence d'une sous-structure cellulaire, dont la taille correspondante est très inférieure à celle de la cellule principale. Selon Manzhalei et al. (1977), et Gamezo et al. (2000), cette apparition de cellules de détonation secondaires se produit quand le facteur de Zeldovich du mélange réactif, défini

par  $\beta_z = \frac{E_a}{RT_{ZND}}$ , est supérieur à 6,5. Cependant cette sous-structure existe uniquement dans la première moitié de la cellule principale.

Les cellules de détonation secondaires peuvent être 10 à 1000 fois plus petites que les cellules de détonation primaires qui les logent. Selon Manzhalei et al. (1977), l'existence d'une structure fine requiert qu'au moins deux cellules de la structure fine soient logées à l'intérieur de la cellule principale, ce qui entraîne la condition  $\frac{2x}{a} > 2$  ( $x$  étant la trajectoire de l'onde transverse et  $a$  la longueur de la cellule de détonation de la structure fine). Ils établissent alors que si  $\beta_z < 6,2$ , on a absence de structure fine et la structure cellulaire est régulière. Dans le cas contraire,  $\beta_z > 6,5$ , une structure fine existe, mais la structure cellulaire de détonation devient irrégulière. D'autre part, Manzhalei a souligné que la sous-structure et la structure principale ont la même origine. Au début de chaque cellule de la structure principale, la vitesse de détonation locale  $D > D_{CJ}$  et par conséquent une sous-structure de largeur  $\lambda < \lambda_{CJ}$  apparaît (figure A1.4) conformément à l'expression :

$$\frac{\lambda}{\lambda_{CJ}} \approx \frac{D}{D_{CJ}} \exp \frac{E_a}{RT_{ZND}} \left[ \left( \frac{D_{CJ}}{D} \right)^2 - 1 \right] \quad (1.A1)$$

$D$  diminue le long de chaque cellule de la structure principale,  $\lambda$  augmente en convergeant vers  $\lambda_{CJ}$  quand  $D \approx D_{CJ}$  (milieu de la cellule). La sous-structure par conséquent ne pourra pas exister dans la deuxième moitié des cellules principales.

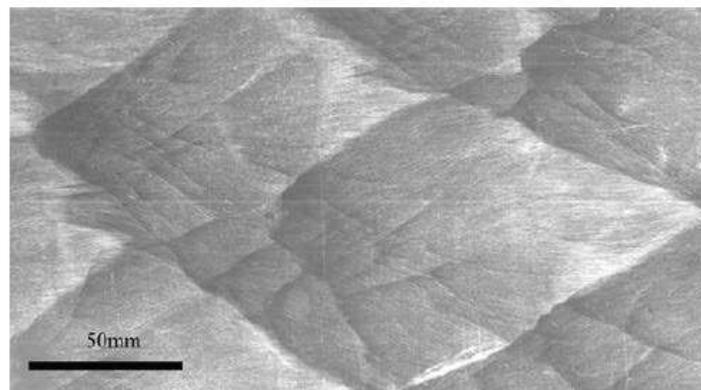


Fig. A1.4 – Structure cellulaire du mélange  $CH_4 + 2O_2 + 0.2Air$  à  $P_0 = 110$  mbars (Guilly, 2007).

## A1 □4 Instabilités et régularité de la structure

A la suite de Manzhalei et al. (1977), Gamezo et al. (1999) ont montré que la régularité de la structure cellulaire est contrôlée par le facteur de Zeldovich  $\beta_Z = \frac{E_a}{RT_{ZND}}$  qui représente le facteur d'amplification des perturbations dans un écoulement réactif. Ils établissent que l'augmentation de  $\beta_Z$  favorise l'obtention de structures plus irrégulières caractérisées par des fréquences élevées d'apparition et de disparition des points triples, une pression plus élevée au niveau des points triples et des variations plus importantes de la vitesse du choc précurseur  $D$  à l'intérieur de la cellule de détonation (A titre indicatif,  $\frac{D}{D_{CJ}}$  appelé degré de force de la détonation varie environ de 1,7 à 0,7 pour  $\beta_Z = 7,4$  et de 1,25 à 0,9 pour  $\beta_Z = 2,1$ ), de points triples plus forts, et une pénétration plus en arrière du front des poches de gaz qui n'ont pas réagi.

Cependant, Gavrikov et al. (2000), Gamezo et al. (2000), Kessler et al. (2011) ont montré que la régularité de la structure cellulaire de détonation est contrôlée non seulement par le facteur de Zeldovich  $\beta_Z = \frac{E_a}{RT_{ZND}}$ , facteur cinétique qui peut être interprété comme une caractéristique de la sensibilité du temps de réaction global aux variations de la température après le choc ; mais également par la chaleur dégagée par les réactions chimiques, facteur thermochimique :  $\frac{Q}{C_v T_0}$ , dégagement efficace de l'énergie chimique du mélange par rapport à l'énergie thermique initiale.

On peut utiliser plutôt le rapport des températures  $\frac{T_{ZND}}{T_0}$  au lieu de  $\frac{Q}{C_v T_0}$  (Gavrikov, 2000),  $T_0$  étant la température initiale. Aussi, il ressort que le rapport  $k = \frac{\lambda}{\delta}$  pourrait être considéré comme fonction des deux paramètres  $\beta_Z = \frac{E_a}{RT_{ZND}}$  et  $\frac{T_{ZND}}{T_0}$  regroupés dans une même expression analytique semi-empirique, où  $\delta$  est la largeur caractéristique de la zone de réaction :

$$\delta = (D_{CJ} - u_{ZND}) \cdot \tau \quad (2.A1)$$

$$\delta = (D_{CJ} - u_{ZND}) \frac{RC_v T_{ZND}^2}{E_a Q A \rho_{ZND}} \exp\left(\frac{E_a}{RT_{ZND}}\right) \quad (\text{Gavrikov, 2000}) \quad (3.A1)$$

avec  $\begin{cases} \frac{E_a}{RT_{ZND}} = 5 - 10 \\ \frac{T_{ZND}}{T_0} = 4,5 - 5,5 \end{cases}$  pour le cas de mélanges de certains hydrocarbures-oxygène-azote.

$Q$  affecte donc l'instabilité de la détonation et le facteur pré-exponentiel  $A$  contrôle les délais d'induction et les tailles des structures cellulaires primaires et secondaires (Gamezo, 2000).

Par ailleurs, la nature du modèle cinétique de la réaction chimique (modèle à une étape ou à plusieurs) et la forme de la structure de la zone de réaction ont également un effet important sur la stabilité de la détonation. La composition chimique entre l'étape de propagation des radicaux et celle des réactions de terminaison contribue à la formation du contour de la structure de la zone de réaction. Les modèles de cinétique de réactions à plusieurs étapes sont plus réalistes que le modèle traditionnel à une seule étape et représentent mieux les phénomènes et les mécanismes cinétiques de la réaction chimique.

En effet, dans le modèle de la cinétique de réaction d'Arrhenius à deux étapes, utilisé par Short et Sharpe (2003), Mazaheri et al. (2004) et Liang et al. (2010), où la première étape est une zone d'induction thermiquement neutre (pas de dégagement de chaleur), le paramètre qui contrôle l'instabilité ou non de la structure cellulaire est le produit  $\chi$  du facteur de Zeldovich  $\beta_Z$  par le rapport des longueurs caractéristiques d'induction et de recombinaison (rapport introduit par Short et Quirk (1997), Short et Sharpe (2003), Radulescu (2002, 2003) et Borzou et al. (2011)) :

$$\chi = \frac{E_a}{RT_{ZND}} \frac{l_{ind}}{l_r} \quad (4.A1)$$

Pour de faibles valeurs du paramètre  $\chi$ , on obtient une bonne régularité de la structure cellulaire de détonation. Dans le cas où  $\chi > 10$ , on observe des détonations avec des structures cellulaires irrégulières. La stabilité de la structure cellulaire est favorisée par de faibles valeurs de l'énergie d'activation et des distances de la zone de recombinaison plus importantes (comparées à celles de la zone d'induction). A l'inverse, l'irrégularité ou

l'instabilité de la structure cellulaire (favorisant éventuellement la formation de cellules de détonation secondaires) est obtenue pour des valeurs de l'énergie d'activation élevées et lorsque les longueurs d'induction augmentent.

De leur côté, Carvalho et Soares (2012) indiquent que pour une valeur fixe de l'énergie d'activation  $E_a$ , la structure cellulaire de la détonation est plus régulière et devient stable pour des valeurs de la chaleur de la réaction chimique  $Q$  plus grandes, tandis que pour  $Q$  fixe le même comportement est observé lorsque la valeur de l'énergie d'activation diminue.  $Q$  et  $E_a$  ont donc un effet inverse sur la stabilité ou non de la structure cellulaire de la détonation.

#### **A1 - 5 Sensibilité de la détonation : variation de la taille de la cellule de détonation $\lambda$ en fonction des conditions initiales**

L'expression de la longueur d'induction chimique dans le modèle ZND est donnée par la relation :

$$L_{i,ZND} = BD_{CJ} \rho_0^{-n} X_c^\alpha X_\alpha^\beta \exp\left(\frac{E_a}{RT_{ZND}}\right) \quad (5.A1)$$

indiquant que le rapport de proportionnalité entre  $\lambda$  et  $L_i$  et donc la taille de la cellule de détonation dépendent de la composition initiale du mélange réactif (richesse et dilution), des conditions initiales ( $P_0, T_0$ ) et du degré de force de la détonation  $D/D_{CJ}$ . ( $X_i$  étant la fraction massique du composé  $i$  dans le mélange initial).

Remarque : typiquement, pour les mélanges  $C_n H_m / \text{air}$  :  $n \approx 1$  (ordre global de la réaction).

#### **- Effet de la pression initiale $P_0$ :**

Dans l'équation (5.A1), on a  $D_{CJ}(P_0) \approx \text{constante}$  et l'on obtient (Desbordes et al., 1993; Auffret et al, 2001):

$$L_{i,ZND} \propto \rho_0^{-n} \text{ ou encore } L_{i,ZND} \propto p_0^{-n} \quad (6.A1)$$

L'augmentation de la pression initiale  $P_0$ , pour une température initiale donnée fixe, provoque une diminution de la taille des cellules.

### - Effet de la température initiale $T_0$ :

Compte tenu du fait que  $D_{CJ}(T_0) \approx \text{constante}$  et que le rapport  $T_{ZND}/T_0$  varie peu, alors :

$$L_{i,ZND} \propto \rho_0^{-n} \exp\left(\frac{E_a}{RT_{ZND}}\right) \quad (7.A1)$$

Il s'ensuit que l'influence de la température initiale  $T_0$  sur la taille de la structure cellulaire dépend de la valeur du rapport  $E_a/RT_{ZND}$  :

- si  $\frac{E_a}{RT_{ZND}} \leq 5 \Rightarrow L_{i,ZND} \propto \rho_0^{-n}$  ou encore  $L_{i,ZND} \propto T_0$ , par conséquent  $\lambda \propto T_0$ , la taille de la cellule augmente avec la température initiale.
- Si  $\frac{E_a}{RT_{ZND}} > 5 \Rightarrow \exp\left(\frac{E_a}{RT_{ZND}}\right)$  varie inversement à  $T_0$ , la taille de la cellule dépend peu ou diminue avec la température initiale.

### - Effet de la richesse $r$ :

Pour les mélanges  $C_nH_m/\text{air}$ , la chaleur libérée par la réaction est maximale pour des richesses légèrement supérieures à la stœchiométrie. Il en est de même pour  $D_{CJ}$  et pour le rapport  $\frac{T_{ZND}}{T_0}$ . Par conséquent,  $L_{i,ZND}$  est minimum pour des richesses légèrement supérieures à 1.

Autrement dit, la variation de  $L_{i,ZND}$ , et donc de la taille de la cellule de détonation avec la richesse suit une courbe en forme de U dont le minimum se situe autour des richesses légèrement supérieures à la stœchiométrie (Knystautas, 1984).

### - Effet de la dilution :

En fonction de l'augmentation de la concentration du diluant au sein de l'oxydant, d'après l'expression (2.36) ceci entraîne l'augmentation de la longueur d'induction. La largeur des cellules de détonation augmente en conséquence proportionnellement.

### - Effet du degré de force de la détonation :

Compte tenu du fait que  $\frac{T_{ZND}}{T_0} \propto \left(\frac{D}{D_{CJ}}\right)^2$  et partant de l'expression (5.A1), on peut en déduire que  $L_{i,ZND}$  et donc la taille de la cellule de détonation diminue exponentiellement avec l'augmentation de sa célérité (en fonction de  $D/D_{CJ}$ ).

### A1 □6 Corrélations entre la largeur de cellules et les conditions critiques d'initiation et de propagation de la détonation

Sur la base des travaux sur la structure cellulaire, des critères basés sur la taille des cellules de détonation ont été établis concernant les conditions critiques de propagation et les conditions critiques d'initiation des détonations.

- On considère que la condition pour qu'une détonation autonome et stationnaire puisse se propager dans un tube de diamètre  $d$ , il faut que sa section contienne au moins une largeur de cellule, c'est-à-dire  $\lambda \approx d$ . Dans le cas des détonations hélicoïdales, qui sont considérées comme un régime limite des détonations autonomes, les théories acoustiques établies par Manson (1946), Fay (1952) puis Chu (1956) ont aidé plus tard à montrer que  $\lambda$  avoisine la taille du confinement et que typiquement  $\lambda = \pi d$ .

- la transmission d'une onde de détonation plane se propageant d'un tube rigide dans un espace libre peut être jugée par son aptitude à résister à une expansion de l'écoulement : Mitrofanov et Soloukhin (1964) ont établi la nécessité d'existence d'une surface minimale pour le réamorçage, et donc un diamètre critique de tube  $d_c$ , qui est corrélé à la largeur de la cellule de détonation par  $d_c = 13\lambda$  lorsque la détonation est stationnaire et autonome.

Ces critères empiriques ont été généralisés en s'appuyant sur des processus de libération d'énergie simplifiés (libération monotone et en une seule étape). Toutefois, des travaux récents (Virot, 2009) ont montré que les processus de libération de l'énergie dans l'onde de détonation étaient plus complexes que les modèles classiques retenus jusqu'à présent, et qu'en conséquence, les corrélations classiques basées sur la dimension de la structure cellulaire devaient être revisitées.



## **Annexe 2**

**Résultats de calculs par TDS (Victorov, 2001)  
de paramètres CJ de la détonation pour des  
mélanges étudiés**



### Isooctane / Air

Richesse	3	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
Célérité de détonation, m/s	1514	1540	1566	1591	1615	1638	1661	1682	1702	1722
Température, K	1518	1586	1658	1731	1804	1879	1955	2032	2110	2189
Pression, bar	13,8	14,2	14,6	15,1	15,5	15,9	16,3	16,7	17,0	17,4
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,297	2,292	2,288	2,284	2,280	2,275	2,271	2,266	2,262	2,257
Masse moléculaire, kg/kmol	21,0339	21,2732	21,5313	21,801	22,0814	22,3724	22,6746	22,9884	23,3144	23,6532
[dln(p)/dln(v)]s	1,31285	1,31107	1,30685	1,30234	1,29784	1,29339	1,28892	1,28438	1,27972	1,27485

Richesse	2	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
Célérité de détonation, m/s	1741	1758	1775	1791	1805	1818	1827	1832	1829	1817
Température, K	2269	2350	2432	2515	2597	2678	2753	2816	2855	2860
Pression, bar	17,7	18,0	18,3	18,6	18,9	19,2	19,4	19,6	19,6	19,4
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,253	2,248	2,244	2,241	2,239	2,238	2,240	2,246	2,251	2,251
Masse moléculaire, kg/kmol	24,0053	24,3711	24,7512	25,1456	25,5539	25,9744	26,4023	26,8272	27,2332	27,6044
[dln(p)/dln(v)]s	1,2697	1,26414	1,25799	1,25094	1,24243	1,23154	1,21711	1,19892	1,18045	1,16809

Richesse	1	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5
Célérité de détonation, m/s	1795	1762	1717	1659	1585	1495
Température, K	2828	2757	2644	2487	2287	2052
Pression, bar	18,9	18,1	17,0	15,7	14,1	12,4
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,241	2,223	2,196	2,163	2,129	2,095
Masse moléculaire, kg/kmol	27,9314	28,2071	28,4231	28,573	28,6631	28,7141
[dln(p)/dln(v)]s	1,16535	1,17224	1,18787	1,20963	1,23219	1,25202

**Isooctane/(O2+2N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1692	1768	1827	1875	1914	1948	1977	2000	2019	2032
<b>Température, K</b>	2616	2820	2966	3071	3148	3201	3235	3251	3248	3225
<b>Pression, bar</b>	16,7	18,6	20,0	21,3	22,4	23,3	24,1	24,8	25,4	25,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,228	2,269	2,301	2,327	2,349	2,368	2,385	2,399	2,411	2,419
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9412	28,6708	28,3209	27,9212	27,4924	27,0468	26,5908	26,1277	25,659	25,1859
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,19043	1,16819	1,15477	1,14749	1,14404	1,14316	1,14436	1,14764	1,15331	1,16165

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2039	2041	2038	2031	2020	2006	1989	1971	1950	1927
<b>Température, K</b>	3184	3125	3052	2969	2878	2783	2686	2587	2488	2389
<b>Pression, bar</b>	26,0	26,0	26,0	25,8	25,5	25,2	24,9	24,4	24,0	23,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,425	2,429	2,432	2,436	2,440	2,445	2,451	2,457	2,463	2,470
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,7106	24,2363	23,7676	23,3088	22,8632	22,4326	22,0181	21,6199	21,238	20,8723
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,17254	1,18514	1,19825	1,21089	1,22262	1,2334	1,24332	1,25249	1,26098	1,26886

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1903	1877	1850	1821	1790	1758
<b>Température, K</b>	2290	2192	2095	2000	1906	1814
<b>Pression, bar</b>	23,0	22,4	21,8	21,2	20,6	20,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,477	2,484	2,492	2,499	2,507	2,514
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	20,5222	20,1874	19,8674	19,5616	19,2698	18,9933
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27618	1,283	1,28941	1,29551	1,30138	1,30685

**Isooctane/(O2+1,5N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1757	1828	1884	1931	1972	2008	2039	2066	2088	2106
<b>Température, K</b>	2811	2989	3116	3209	3278	3327	3361	3378	3380	3365
<b>Pression, bar</b>	18,5	20,3	21,8	23,1	24,2	25,3	26,3	27,1	27,9	28,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,288	2,327	2,357	2,383	2,407	2,428	2,447	2,465	2,481	2,495
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9375	28,5311	28,0645	27,5684	27,0603	26,5492	26,0397	25,5336	25,0315	24,5336
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16795	1,15248	1,14443	1,1405	1,13895	1,13896	1,14023	1,14278	1,14681	1,15265

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2118	2126	2128	2125	2119	2108	2094	2077	2057	2035
<b>Température, K</b>	3334	3285	3222	3145	3059	2965	2867	2765	2660	2555
<b>Pression, bar</b>	28,9	29,2	29,3	29,3	29,1	28,9	28,6	28,2	27,7	27,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,507	2,516	2,523	2,530	2,536	2,543	2,550	2,557	2,564	2,572
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,0403	23,5529	23,0736	22,6048	22,1491	21,7083	21,2834	20,8748	20,4828	20,1071
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16053	1,17035	1,18159	1,19348	1,20537	1,21692	1,22798	1,23854	1,24858	1,25807

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2011	1984	1956	1925	1893	1859
<b>Température, K</b>	2449	2343	2238	2134	2031	1930
<b>Pression, bar</b>	26,6	26,0	25,3	24,6	23,9	23,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,580	2,588	2,597	2,605	2,614	2,624
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	19,7476	19,404	19,0759	18,7631	18,4651	18,1829
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26698	1,27527	1,28299	1,29017	1,29692	1,3032

### Isooctane/(O2+N2)

Richesse	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1	1,1	1,2	1,3	1,4
Célérité de détonation, m/s	1828	1895	1951	2000	2043	2082	2117	2147	2174	2196
Température, K	3017	3169	3279	3361	3424	3470	3502	3520	3525	3515
Pression, bar	20,6	22,4	24,0	25,4	26,8	28,1	29,2	30,3	31,3	32,1
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,365	2,401	2,433	2,461	2,487	2,512	2,536	2,558	2,580	2,599
Masse moléculaire, kg/kmol	28,819	28,2399	27,6331	27,0233	26,4222	25,8351	25,2637	24,7082	24,1677	23,6411
[dln(p)/dln(v)]s	1,14918	1,14068	1,13681	1,13529	1,1351	1,13579	1,1372	1,13933	1,14236	1,14652

Richesse	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2	2,1	2,2	2,3	2,4
Célérité de détonation, m/s	2214	2227	2235	2237	2235	2229	2218	2204	2186	2165
Température, K	3491	3452	3398	3330	3250	3161	3064	2961	2854	2744
Pression, bar	32,8	33,4	33,8	34,0	34,0	33,9	33,7	33,4	32,9	32,4
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,617	2,633	2,646	2,658	2,669	2,680	2,689	2,699	2,709	2,718
Masse moléculaire, kg/kmol	23,1276	22,6268	22,1389	21,6648	21,2053	20,7616	20,3342	19,9233	19,5287	19,1505
[dln(p)/dln(v)]s	1,1521	1,15928	1,16799	1,17793	1,18865	1,19972	1,2109	1,22205	1,2331	1,24394

Richesse	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3
Célérité de détonation, m/s	2141	2115	2086	2054	2020	1984
Température, K	2632	2518	2404	2291	2179	2068
Pression, bar	31,8	31,1	30,3	29,5	28,7	27,8
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,728	2,737	2,747	2,758	2,768	2,779
Masse moléculaire, kg/kmol	18,7883	18,4419	18,1113	17,7961	17,4964	17,2128
[dln(p)/dln(v)]s	1,25446	1,2645	1,27395	1,28273	1,29085	1,29828

**Isooctane/O<sub>2</sub>+3,76Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1548	1603	1644	1677	1705	1728	1748	1765	1778	1788
<b>Température, K</b>	2805	2973	3088	3173	3235	3281	3312	3329	3331	3318
<b>Pression, bar</b>	17,2	18,8	20,0	21,0	21,8	22,5	23,1	23,6	23,9	24,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,766	2,819	2,853	2,877	2,896	2,910	2,922	2,930	2,935	2,935
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	37,4576	37,0665	36,643	36,2052	35,7614	35,3154	34,8684	34,4207	33,9713	33,5191
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27297	1,23442	1,21369	1,20202	1,19543	1,19216	1,19151	1,19339	1,19812	1,20627

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1793	1794	1791	1783	1772	1759	1742	1724	1703	1681
<b>Température, K</b>	3288	3241	3178	3102	3016	2922	2824	2721	2617	2510
<b>Pression, bar</b>	24,2	24,2	24,0	23,6	23,2	22,8	22,3	21,7	21,2	20,6
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,932	2,924	2,914	2,904	2,894	2,885	2,877	2,871	2,865	2,860
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	33,0632	32,6034	32,1409	31,6782	31,2182	30,7636	30,3161	29,877	29,4469	29,0267
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,21823	1,23371	1,25147	1,26991	1,28786	1,30489	1,32096	1,33607	1,35014	1,36301

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1656	1630	1603	1575	1545	1514
<b>Température, K</b>	2404	2297	2191	2086	1983	1882
<b>Pression, bar</b>	19,9	19,3	18,7	18,0	17,4	16,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,857	2,854	2,853	2,852	2,852	2,853
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,6169	28,2181	27,8308	27,4552	27,0915	26,7401
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,37451	1,38457	1,39322	1,40065	1,40711	1,4128

**Isooctane/(O2+2Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1669	1720	1762	1799	1831	1860	1886	1908	1928	1944
<b>Température, K</b>	3099	3227	3321	3392	3447	3488	3517	3535	3541	3534
<b>Pression, bar</b>	20,3	21,8	23,1	24,2	25,2	26,1	27,0	27,7	28,4	28,9
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,809	2,844	2,871	2,893	2,912	2,930	2,946	2,960	2,973	2,983
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	35,6163	34,9891	34,3596	33,7386	33,1305	32,5365	31,9564	31,3892	30,8335	30,2876
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,19683	1,18204	1,17415	1,16977	1,16744	1,1665	1,16668	1,16796	1,17048	1,17453

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1957	1966	1971	1972	1969	1962	1952	1938	1922	1903
<b>Température, K</b>	3514	3480	3431	3368	3293	3208	3115	3015	2910	2800
<b>Pression, bar</b>	29,4	29,7	29,8	29,8	29,7	29,4	29,1	28,6	28,1	27,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,991	2,997	3,000	3,000	3,000	2,998	2,997	2,995	2,993	2,991
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	29,75	29,2199	28,697	28,1819	27,6758	27,18	26,6956	26,2233	25,7633	25,3158
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,18045	1,18848	1,1986	1,21042	1,22333	1,23682	1,25058	1,26452	1,27858	1,29266

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1881	1856	1829	1800	1768	1735
<b>Température, K</b>	2687	2571	2454	2336	2219	2103
<b>Pression, bar</b>	26,8	26,1	25,3	24,5	23,7	22,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,989	2,987	2,987	2,987	2,988	2,991
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,881	24,459	24,0504	23,6556	23,2751	22,9092
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,30651	1,31978	1,33213	1,34328	1,35314	1,36178

## Heptane / Air

<b>Richesse</b>	<b>3</b>	<b>2,9</b>	<b>2,8</b>	<b>2,7</b>	<b>2,6</b>	<b>2,5</b>	<b>2,4</b>	<b>2,3</b>	<b>2,2</b>	<b>2,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1525	1551	1576	1601	1624	1647	1669	1689	1709	1728
<b>Température, K</b>	1537	1605	1676	1748	1821	1895	1970	2046	2123	2202
<b>Pression, bar</b>	13,9	14,3	14,7	15,2	15,6	16,0	16,3	16,7	17,1	17,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,281	2,277	2,274	2,270	2,267	2,263	2,259	2,255	2,250	2,246
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	20,9891	21,2323	21,4914	21,7616	22,0423	22,3338	22,6364	22,9506	23,2771	23,6163
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,31304	1,31037	1,30607	1,3016	1,29716	1,29274	1,2883	1,28378	1,27912	1,27425

<b>Richesse</b>	<b>2</b>	<b>1,9</b>	<b>1,8</b>	<b>1,7</b>	<b>1,6</b>	<b>1,5</b>	<b>1,4</b>	<b>1,3</b>	<b>1,2</b>	<b>1,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1747	1764	1780	1795	1809	1821	1830	1835	1831	1819
<b>Température, K</b>	2281	2361	2443	2524	2606	2685	2759	2821	2859	2863
<b>Pression, bar</b>	17,7	18,1	18,4	18,7	18,9	19,2	19,4	19,6	19,6	19,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,242	2,239	2,235	2,232	2,231	2,231	2,233	2,239	2,245	2,245
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,9687	24,335	24,7156	25,1104	25,5192	25,9401	26,3682	26,7935	27,2002	27,5728
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26908	1,2635	1,25732	1,25022	1,24165	1,23072	1,21629	1,19824	1,18005	1,16792

<b>Richesse</b>	<b>1</b>	<b>0,9</b>	<b>0,8</b>	<b>0,7</b>	<b>0,6</b>	<b>0,5</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1797	1764	1719	1661	1587	1497
<b>Température, K</b>	2831	2760	2648	2490	2290	2055
<b>Pression, bar</b>	18,9	18,1	17,0	15,7	14,1	12,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,236	2,218	2,192	2,160	2,126	2,093
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	27,9018	28,1802	28,3995	28,5529	28,6463	28,7004
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16524	1,17207	1,18759	1,20928	1,23187	1,25179

### Heptane/(O<sub>2</sub>+2N<sub>2</sub>)

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1694	1770	1829	1877	1917	1950	1979	2003	2022	2035
<b>Température, K</b>	2619	2823	2969	3074	3150	3204	3238	3253	3251	3229
<b>Pression, bar</b>	16,7	18,6	20,0	21,3	22,3	23,3	24,1	24,8	25,3	25,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,223	2,264	2,295	2,320	2,341	2,359	2,375	2,388	2,399	2,407
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9178	28,6421	28,2876	27,8837	27,4513	27,0025	26,5437	26,0783	25,6078	25,1336
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,19012	1,16799	1,15466	1,14744	1,14402	1,14315	1,14434	1,14759	1,15317	1,16136

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2043	2045	2043	2036	2026	2012	1996	1978	1958	1937
<b>Température, K</b>	3189	3131	3059	2978	2889	2795	2699	2602	2504	2406
<b>Pression, bar</b>	25,9	26,0	25,9	25,8	25,5	25,2	24,9	24,5	24,0	23,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,412	2,415	2,418	2,420	2,424	2,428	2,433	2,438	2,443	2,449
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,6576	24,1832	23,7148	23,2565	22,8114	22,3814	21,9674	21,5698	21,1884	20,823
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,17204	1,18442	1,19733	1,20983	1,22147	1,2322	1,2421	1,25127	1,25978	1,26769

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1913	1888	1861	1833	1803	1772
<b>Température, K</b>	2308	2212	2116	2022	1929	1837
<b>Pression, bar</b>	23,0	22,5	21,9	21,3	20,7	20,1
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,455	2,462	2,468	2,475	2,482	2,488
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	20,4732	20,1386	19,8187	19,513	19,2211	18,9437
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27504	1,2819	1,28833	1,29443	1,30029	1,30583

**Heptane/(O2+1,5N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1759	1830	1886	1933	1974	2010	2041	2069	2091	2109
<b>Température, K</b>	2814	2992	3118	3211	3280	3330	3363	3380	3382	3368
<b>Pression, bar</b>	18,5	20,3	21,7	23,0	24,2	25,2	26,2	27,0	27,8	28,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,283	2,320	2,350	2,375	2,397	2,417	2,435	2,452	2,467	2,480
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9087	28,4966	28,0251	27,5247	27,0128	26,4984	25,986	25,4775	24,9735	24,4742
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16774	1,15237	1,14439	1,14049	1,13896	1,13897	1,14024	1,14275	1,14673	1,15248

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2122	2130	2133	2131	2124	2114	2101	2085	2066	2044
<b>Température, K</b>	3337	3290	3228	3153	3068	2976	2879	2779	2676	2572
<b>Pression, bar</b>	28,8	29,1	29,2	29,2	29,1	28,8	28,5	28,1	27,7	27,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,490	2,498	2,505	2,511	2,516	2,522	2,527	2,533	2,540	2,546
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,9801	23,4925	23,0134	22,5452	22,0903	21,6504	21,2265	20,8189	20,4278	20,0529
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16022	1,16985	1,18087	1,19256	1,20428	1,21569	1,22666	1,23715	1,24716	1,25664

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2021	1995	1968	1938	1907	1874
<b>Température, K</b>	2468	2363	2259	2157	2055	1955
<b>Pression, bar</b>	26,6	26,0	25,4	24,7	24,0	23,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,553	2,560	2,568	2,576	2,584	2,592
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	19,6942	19,3512	19,0236	18,7111	18,4134	18,1307
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26557	1,2739	1,28166	1,28888	1,29566	1,30199

### Heptane/(O2+N2)

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1829	1897	1953	2002	2046	2085	2120	2151	2177	2200
<b>Température, K</b>	3020	3171	3281	3363	3426	3472	3504	3522	3527	3518
<b>Pression, bar</b>	20,6	22,4	24,0	25,4	26,7	28,0	29,1	30,2	31,2	32,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,358	2,393	2,423	2,450	2,474	2,498	2,520	2,541	2,561	2,579
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,7828	28,1976	27,5857	26,9714	26,3665	25,776	25,2018	24,6439	24,1015	23,5735
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14907	1,14064	1,13681	1,13531	1,13513	1,13582	1,13721	1,13933	1,14232	1,14643

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2218	2231	2240	2243	2241	2235	2226	2212	2195	2175
<b>Température, K</b>	3494	3456	3402	3336	3258	3170	3075	2974	2869	2761
<b>Pression, bar</b>	32,7	33,2	33,6	33,8	33,9	33,8	33,6	33,2	32,8	32,3
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,595	2,610	2,622	2,633	2,643	2,652	2,660	2,669	2,677	2,685
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,0592	22,558	22,0704	21,5968	21,1384	20,6959	20,2698	19,8603	19,4672	19,0903
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15192	1,15896	1,1675	1,17724	1,18775	1,19863	1,20964	1,22064	1,23156	1,24231

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2152	2127	2098	2068	2035	2000
<b>Température, K</b>	2651	2539	2427	2315	2204	2094
<b>Pression, bar</b>	31,7	31,0	30,3	29,5	28,7	27,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,693	2,702	2,710	2,719	2,728	2,738
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	18,7294	18,3843	18,0546	17,7403	17,4412	17,1576
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,25278	1,26282	1,27229	1,28112	1,2893	1,29682

**Heptane/(O<sub>2</sub>+3,76Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1550	1604	1645	1678	1706	1730	1750	1767	1780	1790
<b>Température, K</b>	2808	2975	3091	3175	3237	3283	3314	3331	3334	3321
<b>Pression, bar</b>	17,2	18,8	20,0	21,0	21,8	22,5	23,1	23,5	23,9	24,1
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,764	2,815	2,848	2,872	2,890	2,903	2,914	2,922	2,926	2,926
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	37,4375	37,0422	36,6149	36,1737	35,7267	35,2776	34,8278	34,3775	33,9257	33,4716
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27237	1,23407	1,21347	1,20186	1,1953	1,19203	1,19137	1,1932	1,19784	1,20582

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1795	1797	1794	1787	1776	1763	1747	1730	1710	1688
<b>Température, K</b>	3292	3246	3184	3109	3025	2933	2836	2736	2633	2528
<b>Pression, bar</b>	24,2	24,2	24,0	23,7	23,3	22,8	22,3	21,8	21,2	20,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,922	2,914	2,904	2,893	2,883	2,874	2,866	2,858	2,852	2,847
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	33,0141	32,5532	32,09	31,627	31,1671	30,7128	30,2657	29,8269	29,3974	28,9776
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,21752	1,23265	1,25002	1,2681	1,28577	1,30257	1,31847	1,33347	1,3475	1,36041

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1664	1639	1613	1585	1556	1526
<b>Température, K</b>	2423	2318	2213	2110	2008	1908
<b>Pression, bar</b>	20,0	19,4	18,8	18,2	17,5	16,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,842	2,839	2,837	2,836	2,835	2,835
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,5681	28,1696	27,7824	27,4069	27,0431	26,6914
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,37201	1,38223	1,39105	1,39864	1,40522	1,41102

### Heptane/(O2+2Ar)

Richesse	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1	1,1	1,2	1,3	1,4
Célérité de détonation, m/s	1670	1722	1764	1801	1833	1862	1888	1911	1930	1947
Température, K	3101	3229	3323	3394	3449	3490	3519	3537	3543	3536
Pression, bar	20,3	21,8	23,0	24,2	25,2	26,1	26,9	27,7	28,3	28,9
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,804	2,837	2,863	2,884	2,902	2,919	2,934	2,947	2,958	2,968
Masse moléculaire, kg/kmol	35,5856	34,9532	34,3191	33,6939	33,0819	32,4843	31,9011	31,331	30,7728	30,2247
[dln(p)/dln(v)]s	1,19661	1,18191	1,17406	1,1697	1,16738	1,16644	1,16661	1,16787	1,17035	1,17433

Richesse	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2	2,1	2,2	2,3	2,4
Célérité de détonation, m/s	1960	1969	1975	1976	1973	1967	1957	1944	1929	1910
Température, K	3517	3483	3435	3374	3300	3217	3125	3027	2924	2816
Pression, bar	29,3	29,6	29,7	29,7	29,6	29,4	29,0	28,6	28,1	27,5
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,975	2,979	2,981	2,981	2,980	2,978	2,976	2,973	2,970	2,967
Masse moléculaire, kg/kmol	29,6854	29,1541	28,6305	28,1151	27,6092	27,1139	26,6303	26,159	25,7001	25,2539
[dln(p)/dln(v)]s	1,18014	1,188	1,1979	1,20944	1,22208	1,23528	1,24877	1,26245	1,27627	1,29015

Richesse	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3
Célérité de détonation, m/s	1889	1866	1840	1811	1781	1748
Température, K	2705	2592	2476	2361	2245	2131
Pression, bar	26,9	26,2	25,4	24,6	23,8	23,0
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,964	2,962	2,960	2,960	2,960	2,961
Masse moléculaire, kg/kmol	24,8203	24,3996	23,992	23,5982	23,2183	22,8529
[dln(p)/dln(v)]s	1,30386	1,31709	1,32948	1,34074	1,35076	1,35957

### Octane / Air

<b>Richesse</b>	<b>3</b>	<b>2,9</b>	<b>2,8</b>	<b>2,7</b>	<b>2,6</b>	<b>2,5</b>	<b>2,4</b>	<b>2,3</b>	<b>2,2</b>	<b>2,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1524	1550	1576	1600	1624	1646	1668	1689	1709	1728
<b>Température, K</b>	1538	1606	1677	1749	1822	1896	1972	2048	2125	2203
<b>Pression, bar</b>	14,0	14,4	14,8	15,2	15,7	16,0	16,4	16,8	17,1	17,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,298	2,293	2,289	2,285	2,281	2,276	2,272	2,267	2,263	2,258
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	21,031	21,273	21,531	21,801	22,081	22,372	22,674	22,988	23,314	23,653
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,31299	1,31058	1,30628	1,30179	1,29733	1,2929	1,28844	1,2839	1,27923	1,27434

<b>Richesse</b>	<b>2</b>	<b>1,9</b>	<b>1,8</b>	<b>1,7</b>	<b>1,6</b>	<b>1,5</b>	<b>1,4</b>	<b>1,3</b>	<b>1,2</b>	<b>1,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1746	1764	1780	1795	1809	1821	1830	1834	1831	1819
<b>Température, K</b>	2283	2363	2445	2526	2608	2687	2761	2822	2860	2865
<b>Pression, bar</b>	17,8	18,1	18,4	18,7	19,0	19,3	19,5	19,7	19,7	19,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,253	2,249	2,245	2,242	2,239	2,239	2,241	2,246	2,252	2,251
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,005	24,370	24,750	25,144	25,552	25,972	26,399	26,822	27,227	27,598
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26916	1,26357	1,25737	1,25025	1,24165	1,23067	1,21617	1,19807	1,1799	1,16784

<b>Richesse</b>	<b>1</b>	<b>0,9</b>	<b>0,8</b>	<b>0,7</b>	<b>0,6</b>	<b>0,5</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1796	1763	1719	1661	1587	1497
<b>Température, K</b>	2832	2761	2649	2491	2291	2056
<b>Pression, bar</b>	18,9	18,1	17,0	15,7	14,2	12,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,242	2,223	2,196	2,163	2,129	2,095
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	27,925	28,202	28,419	28,571	28,662	28,714
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16519	1,17199	1,18748	1,20918	1,23181	1,25176

**Octane/(O2+2N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1694	1770	1829	1876	1916	1950	1978	2002	2021	2034
<b>Température, K</b>	2620	2824	2970	3075	3151	3205	3239	3255	3253	3232
<b>Pression, bar</b>	16,8	18,6	20,1	21,3	22,4	23,3	24,2	24,9	25,4	25,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,228	2,269	2,302	2,328	2,349	2,369	2,385	2,399	2,411	2,420
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9383	28,6655	28,3134	27,9119	27,4817	27,0349	26,5782	26,1148	25,6462	25,1737
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,19004	1,1679	1,1546	1,14741	1,14402	1,14316	1,14435	1,14759	1,15315	1,16132

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2042	2045	2042	2035	2025	2012	1996	1978	1958	1936
<b>Température, K</b>	3191	3134	3063	2981	2892	2799	2703	2605	2507	2409
<b>Pression, bar</b>	26,1	26,1	26,1	25,9	25,7	25,4	25,0	24,6	24,2	23,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,426	2,430	2,433	2,437	2,441	2,446	2,452	2,458	2,464	2,471
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,6993	24,2263	23,7589	23,3015	22,8571	22,4276	22,0141	21,6168	21,2357	20,8706
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,17198	1,18436	1,19729	1,20983	1,2215	1,23226	1,24217	1,25136	1,2599	1,26783

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1912	1887	1860	1832	1802	1771
<b>Température, K</b>	2311	2214	2118	2024	1931	1839
<b>Pression, bar</b>	23,2	22,7	22,1	21,5	20,9	20,3
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,478	2,486	2,493	2,501	2,508	2,516
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	20,521	20,1866	19,8668	19,5612	19,2695	18,9926
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,2752	1,28207	1,28853	1,29466	1,30053	1,30605

**Octane/(O2+1,5N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1759	1829	1886	1933	1974	2009	2041	2068	2090	2108
<b>Température, K</b>	2815	2993	3119	3212	3281	3331	3365	3383	3385	3371
<b>Pression, bar</b>	18,5	20,3	21,8	23,1	24,3	25,3	26,3	27,2	27,9	28,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,288	2,327	2,358	2,384	2,407	2,428	2,447	2,465	2,481	2,495
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9323	28,5234	28,0545	27,5567	27,0471	26,535	26,0246	25,5181	25,0159	24,5183
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16766	1,15232	1,14436	1,14049	1,13897	1,139	1,14027	1,14279	1,14676	1,15249

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2121	2129	2132	2130	2124	2114	2100	2084	2065	2044
<b>Température, K</b>	3340	3294	3231	3157	3072	2980	2883	2783	2680	2576
<b>Pression, bar</b>	29,0	29,3	29,4	29,4	29,3	29,1	28,7	28,4	27,9	27,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,507	2,516	2,524	2,531	2,538	2,544	2,551	2,558	2,566	2,573
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,0258	23,5395	23,0614	22,5941	22,1399	21,7005	21,2769	20,8696	20,4787	20,104
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16021	1,16983	1,18085	1,19256	1,20431	1,21575	1,22673	1,23724	1,24726	1,25677

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2020	1994	1967	1937	1906	1873
<b>Température, K</b>	2471	2366	2262	2159	2058	1958
<b>Pression, bar</b>	26,9	26,3	25,6	24,9	24,2	23,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,581	2,590	2,598	2,607	2,616	2,625
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	19,7453	19,4024	19,0748	18,7623	18,4646	18,1823
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26571	1,27407	1,28185	1,28911	1,2959	1,30223

**Octane/(O2+N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1829	1897	1953	2002	2045	2084	2119	2149	2176	2199
<b>Température, K</b>	3021	3172	3282	3365	3427	3474	3506	3525	3530	3521
<b>Pression, bar</b>	20,6	22,4	24,0	25,5	26,8	28,1	29,3	30,4	31,4	32,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,365	2,401	2,433	2,461	2,487	2,512	2,536	2,558	2,580	2,599
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,8108	28,229	27,62	27,0085	26,406	25,8177	25,2456	24,6896	24,1489	23,6226
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14903	1,14062	1,13681	1,13533	1,13517	1,13587	1,13728	1,1394	1,14239	1,14649

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2217	2230	2239	2242	2240	2234	2225	2211	2194	2174
<b>Température, K</b>	3498	3460	3407	3340	3262	3175	3080	2979	2874	2765
<b>Pression, bar</b>	32,9	33,5	33,9	34,1	34,2	34,1	33,9	33,6	33,2	32,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,617	2,633	2,647	2,659	2,670	2,681	2,691	2,701	2,710	2,720
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,1096	22,6097	22,123	21,6502	21,1923	20,7502	20,3244	19,915	19,522	19,1452
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15197	1,159	1,16753	1,17728	1,1878	1,1987	1,20972	1,22074	1,23167	1,24244

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2151	2125	2097	2066	2033	1998
<b>Température, K</b>	2655	2543	2431	2318	2207	2097
<b>Pression, bar</b>	32,1	31,4	30,7	29,9	29,1	28,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,729	2,739	2,749	2,759	2,770	2,781
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	18,7842	18,439	18,1092	17,7947	17,4955	17,2121
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,25292	1,26298	1,27248	1,28134	1,28954	1,29706

**Octane/(O2+3,76Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1550	1604	1645	1678	1706	1729	1750	1767	1780	1790
<b>Température, K</b>	2809	2976	3092	3176	3238	3284	3315	3333	3336	3324
<b>Pression, bar</b>	17,3	18,8	20,0	21,0	21,8	22,5	23,1	23,6	24,0	24,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,767	2,819	2,853	2,877	2,896	2,910	2,922	2,930	2,935	2,936
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	37,453	37,0599	36,6347	36,1955	35,7505	35,3034	34,8556	34,4071	33,9573	33,505
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27223	1,23399	1,21345	1,20188	1,19535	1,19211	1,19145	1,19328	1,1979	1,20584

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1795	1797	1794	1787	1776	1763	1748	1730	1710	1688
<b>Température, K</b>	3295	3249	3188	3113	3029	2937	2840	2739	2636	2532
<b>Pression, bar</b>	24,3	24,2	24,1	23,8	23,4	22,9	22,4	21,9	21,3	20,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,933	2,925	2,916	2,906	2,896	2,888	2,880	2,873	2,868	2,863
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	33,0494	32,5902	32,1286	31,667	31,2083	30,755	30,3089	29,871	29,4422	29,0231
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,21749	1,23259	1,24998	1,26811	1,28582	1,30267	1,31861	1,33365	1,34772	1,36067

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1664	1639	1613	1585	1556	1525
<b>Température, K</b>	2426	2321	2216	2112	2010	1910
<b>Pression, bar</b>	20,2	19,5	18,9	18,3	17,6	17,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,859	2,857	2,855	2,855	2,855	2,855
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,6143	28,2163	27,8296	27,4544	27,091	26,7397
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,37234	1,38261	1,3915	1,39914	1,40577	1,4116

**Octane/(O2+2Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1670	1721	1764	1800	1833	1861	1887	1910	1930	1947
<b>Température, K</b>	3102	3231	3324	3396	3451	3492	3521	3539	3545	3539
<b>Pression, bar</b>	20,4	21,8	23,1	24,2	25,2	26,2	27,0	27,8	28,4	29,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,809	2,844	2,871	2,893	2,912	2,930	2,946	2,960	2,973	2,984
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	35,6075	34,9781	34,3467	33,7241	33,1145	32,5193	31,9383	31,3703	30,8141	30,2679
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,19658	1,18192	1,17411	1,16977	1,16747	1,16655	1,16673	1,16799	1,17047	1,17444

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1960	1969	1974	1975	1973	1966	1957	1944	1928	1910
<b>Température, K</b>	3520	3487	3439	3378	3305	3222	3130	3032	2929	2821
<b>Pression, bar</b>	29,4	29,8	29,9	29,9	29,8	29,6	29,2	28,8	28,3	27,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,992	2,997	3,000	3,001	3,001	3,000	2,999	2,997	2,995	2,993
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	29,7305	29,2008	28,6787	28,1647	27,6598	27,1655	26,6826	26,212	25,7537	25,308
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,18023	1,18807	1,19795	1,2095	1,22215	1,23538	1,24889	1,26258	1,27642	1,29032

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1889	1865	1839	1811	1780	1748
<b>Température, K</b>	2710	2596	2481	2364	2249	2134
<b>Pression, bar</b>	27,1	26,4	25,6	24,8	24,0	23,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,992	2,990	2,990	2,990	2,991	2,993
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,8748	24,4543	24,0471	23,6533	23,2736	22,9082
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,30406	1,31733	1,32977	1,3411	1,35118	1,36004

### Décane / Air

Richesse	3	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
Célérité de détonation, m/s	1523	1549	1575	1599	1623	1645	1667	1688	1708	1727
Température, K	1539	1607	1679	1751	1824	1898	1974	2050	2128	2206
Pression, bar	14,1	14,5	14,9	15,4	15,8	16,2	16,5	16,9	17,3	17,6
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,322	2,316	2,311	2,306	2,301	2,296	2,291	2,285	2,280	2,274
Masse moléculaire, kg/kmol	21,091	21,330	21,588	21,857	22,137	22,427	22,729	23,042	23,367	23,705
[dln(p)/dln(v)]s	1,31276	1,31087	1,30659	1,30207	1,29758	1,29312	1,28864	1,28408	1,27939	1,27448

Richesse	2	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
Célérité de détonation, m/s	1746	1763	1779	1795	1809	1821	1830	1834	1831	1818
Température, K	2286	2366	2447	2529	2611	2690	2764	2825	2862	2866
Pression, bar	17,9	18,2	18,5	18,8	19,1	19,4	19,6	19,7	19,7	19,5
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,269	2,264	2,259	2,255	2,252	2,251	2,252	2,257	2,261	2,260
Masse moléculaire, kg/kmol	24,056	24,420	24,799	25,192	25,598	26,017	26,442	26,863	27,265	27,633
[dln(p)/dln(v)]s	1,26929	1,26368	1,25746	1,25031	1,24166	1,2306	1,21599	1,19782	1,1797	1,16773

Richesse	1	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5
Célérité de détonation, m/s	1796	1763	1719	1660	1587	1497
Température, K	2833	2763	2650	2493	2293	2057
Pression, bar	19,0	18,1	17,1	15,7	14,2	12,5
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,250	2,230	2,203	2,169	2,134	2,099
Masse moléculaire, kg/kmol	27,958	28,233	28,448	28,597	28,685	28,733
[dln(p)/dln(v)]s	1,1651	1,17187	1,18731	1,20903	1,23173	1,25172

**Décane/(O<sub>2</sub>+2N<sub>2</sub>)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1694	1770	1828	1876	1915	1949	1977	2001	2020	2033
<b>Température, K</b>	2622	2826	2972	3077	3153	3207	3241	3258	3256	3235
<b>Pression, bar</b>	16,8	18,6	20,1	21,4	22,5	23,4	24,3	25,0	25,6	26,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,234	2,277	2,311	2,338	2,361	2,382	2,400	2,415	2,428	2,438
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,9674	28,6986	28,3501	27,9519	27,5248	27,0811	26,6273	26,1667	25,7008	25,2308
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,18991	1,16779	1,15452	1,14737	1,144	1,14317	1,14437	1,1476	1,15313	1,16126

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2041	2044	2041	2035	2024	2011	1995	1977	1957	1935
<b>Température, K</b>	3195	3139	3067	2986	2897	2804	2707	2610	2511	2413
<b>Pression, bar</b>	26,2	26,3	26,3	26,1	25,9	25,6	25,3	24,9	24,5	24,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,446	2,451	2,456	2,461	2,467	2,473	2,480	2,487	2,495	2,503
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,7586	24,2876	23,8218	23,3656	22,9221	22,4935	22,0806	21,6839	21,3032	20,9384
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,17189	1,18427	1,19724	1,20983	1,22155	1,23234	1,24229	1,2515	1,26006	1,26802

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1911	1886	1859	1831	1801	1770
<b>Température, K</b>	2315	2218	2122	2027	1934	1842
<b>Pression, bar</b>	23,5	22,9	22,4	21,8	21,2	20,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,511	2,520	2,529	2,538	2,547	2,556
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	20,5892	20,255	19,9354	19,63	19,3385	19,0627
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27542	1,28233	1,28882	1,29498	1,30088	1,30633

**Décane/(O2+1,5N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1758	1829	1885	1932	1973	2008	2039	2066	2089	2107
<b>Température, K</b>	2817	2995	3121	3214	3283	3333	3367	3385	3388	3375
<b>Pression, bar</b>	18,6	20,4	21,9	23,2	24,4	25,5	26,5	27,3	28,1	28,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,296	2,336	2,369	2,396	2,421	2,444	2,465	2,485	2,503	2,518
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,966	28,5614	28,0964	27,6022	27,096	26,587	26,0796	25,5759	25,0764	24,5812
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16755	1,15224	1,14432	1,14048	1,13899	1,13904	1,14032	1,14284	1,1468	1,15251

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2120	2128	2131	2129	2123	2112	2099	2083	2064	2042
<b>Température, K</b>	3345	3298	3237	3162	3078	2986	2889	2788	2685	2581
<b>Pression, bar</b>	29,2	29,5	29,7	29,7	29,6	29,4	29,1	28,7	28,3	27,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,532	2,543	2,552	2,560	2,569	2,577	2,585	2,594	2,603	2,612
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,0909	23,6064	23,1299	22,6638	22,2105	21,7718	21,3488	20,9419	20,5513	20,1768
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,1602	1,1698	1,18083	1,19257	1,20436	1,21583	1,22684	1,23738	1,24742	1,25695

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2019	1993	1965	1936	1905	1871
<b>Température, K</b>	2476	2371	2267	2163	2061	1961
<b>Pression, bar</b>	27,2	26,6	26,0	25,3	24,6	23,9
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,622	2,632	2,642	2,653	2,663	2,674
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	19,8182	19,4754	19,1479	18,8354	18,5377	18,2561
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26593	1,27432	1,28214	1,28943	1,29625	1,30254

**Décane/(O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1829	1896	1952	2001	2044	2083	2117	2148	2175	2197
<b>Température, K</b>	3023	3174	3284	3367	3430	3476	3509	3528	3534	3526
<b>Pression, bar</b>	20,7	22,5	24,1	25,6	27,0	28,3	29,5	30,6	31,6	32,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,375	2,414	2,447	2,477	2,506	2,533	2,559	2,583	2,607	2,629
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,8505	28,2735	27,6689	27,0612	26,4622	25,8772	25,308	24,7547	24,2166	23,6924
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14896	1,14059	1,13681	1,13536	1,13522	1,13594	1,13736	1,1395	1,14249	1,14658

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2216	2229	2237	2240	2239	2233	2223	2210	2193	2173
<b>Température, K</b>	3503	3465	3413	3347	3269	3182	3087	2986	2880	2772
<b>Pression, bar</b>	33,3	33,9	34,3	34,5	34,6	34,6	34,4	34,1	33,7	33,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,649	2,667	2,683	2,697	2,710	2,723	2,735	2,747	2,759	2,770
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,1815	22,6833	22,198	21,7263	21,2693	20,8277	20,4022	19,9931	19,6002	19,2234
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15204	1,15905	1,16758	1,17733	1,18788	1,19881	1,20985	1,22088	1,23183	1,24262

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2150	2124	2096	2065	2032	1996
<b>Température, K</b>	2661	2549	2436	2324	2212	2102
<b>Pression, bar</b>	32,6	32,0	31,3	30,5	29,6	28,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,782	2,794	2,806	2,819	2,831	2,845
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	18,8624	18,517	18,1871	17,8724	17,573	17,2901
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,25313	1,26322	1,27275	1,28165	1,28989	1,29738

**Décane/(O2+3,76Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1550	1604	1645	1678	1705	1729	1749	1766	1780	1789
<b>Température, K</b>	2811	2978	3093	3178	3240	3286	3317	3335	3339	3327
<b>Pression, bar</b>	17,3	18,9	20,1	21,0	21,9	22,6	23,2	23,7	24,1	24,3
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,772	2,825	2,860	2,885	2,905	2,920	2,933	2,942	2,948	2,950
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	37,475	37,085	36,6628	36,2266	35,7844	35,3401	34,895	34,4493	34,0022	33,5526
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27203	1,23388	1,21342	1,20191	1,19543	1,19222	1,19158	1,1934	1,19799	1,20587

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1795	1797	1794	1787	1776	1763	1748	1730	1710	1688
<b>Température, K</b>	3299	3254	3193	3118	3034	2942	2845	2745	2641	2537
<b>Pression, bar</b>	24,4	24,4	24,2	23,9	23,5	23,1	22,6	22,1	21,5	20,9
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,948	2,942	2,933	2,924	2,915	2,907	2,901	2,895	2,890	2,886
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	33,0995	32,6428	32,1835	31,7239	31,2669	30,8152	30,3704	29,9338	29,506	29,0879
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,21746	1,23252	1,24993	1,26811	1,2859	1,30282	1,31881	1,3339	1,34804	1,36106

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1664	1639	1613	1585	1555	1525
<b>Température, K</b>	2431	2325	2220	2116	2013	1913
<b>Pression, bar</b>	20,3	19,7	19,1	18,4	17,8	17,1
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,883	2,882	2,881	2,881	2,882	2,883
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,6799	28,2827	27,8967	27,5221	27,1593	26,8085
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,37281	1,38316	1,39213	1,39985	1,40656	1,41244

**Décane/(O2+2Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1670	1721	1763	1800	1832	1861	1887	1910	1929	1946
<b>Température, K</b>	3104	3233	3326	3398	3453	3494	3524	3542	3549	3543
<b>Pression, bar</b>	20,4	21,9	23,2	24,3	25,3	26,3	27,1	27,9	28,6	29,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,817	2,854	2,882	2,905	2,927	2,946	2,963	2,979	2,994	3,006
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	35,6387	35,0135	34,386	33,7671	33,161	32,5691	31,9912	31,4262	30,8728	30,3294
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,19653	1,18194	1,17417	1,16987	1,1676	1,1667	1,1669	1,16817	1,17065	1,1746

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1959	1969	1974	1975	1972	1966	1957	1944	1928	1910
<b>Température, K</b>	3525	3492	3445	3384	3311	3228	3137	3039	2935	2828
<b>Pression, bar</b>	29,7	30,0	30,2	30,2	30,1	29,9	29,6	29,1	28,6	28,1
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,016	3,023	3,028	3,030	3,032	3,032	3,032	3,032	3,032	3,031
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	29,7946	29,2673	28,7473	28,2352	27,7319	27,2389	26,7572	26,2875	25,8301	25,385
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,18036	1,18817	1,19804	1,20959	1,22226	1,23552	1,24906	1,26277	1,27664	1,29056

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1889	1865	1839	1810	1780	1747
<b>Température, K</b>	2716	2602	2486	2370	2254	2139
<b>Pression, bar</b>	27,4	26,7	26,0	25,2	24,4	23,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,031	3,031	3,032	3,033	3,036	3,040
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,9524	24,5324	24,1254	23,7319	23,3523	22,9871
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,30435	1,31768	1,33019	1,34161	1,35178	1,36071

## Dodécane /Air

<b>Richesse</b>	<b>3</b>	<b>2,9</b>	<b>2,8</b>	<b>2,7</b>	<b>2,6</b>	<b>2,5</b>	<b>2,4</b>	<b>2,3</b>	<b>2,2</b>	<b>2,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1494	1521	1548	1574	1599	1623	1647	1669	1690	1711
<b>Température, K</b>	1487	1554	1627	1701	1777	1853	1930	2008	2088	2168
<b>Pression, bar</b>	13,7	14,1	14,5	15,0	15,4	15,8	16,2	16,6	17,0	17,3
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,337	2,328	2,323	2,318	2,312	2,307	2,301	2,295	2,289	2,283
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	21,146	21,372	21,627	21,895	22,175	22,465	22,766	23,079	23,403	23,741
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,31086	1,31221	1,30833	1,30374	1,29914	1,29459	1,29006	1,28548	1,2808	1,27593

<b>Richesse</b>	<b>2</b>	<b>1,9</b>	<b>1,8</b>	<b>1,7</b>	<b>1,6</b>	<b>1,5</b>	<b>1,4</b>	<b>1,3</b>	<b>1,2</b>	<b>1,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1730	1749	1766	1783	1798	1811	1822	1827	1825	1813
<b>Température, K</b>	2250	2332	2416	2500	2584	2667	2744	2808	2849	2855
<b>Pression, bar</b>	17,7	18,0	18,3	18,6	18,9	19,2	19,4	19,6	19,7	19,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,278	2,272	2,267	2,262	2,258	2,256	2,258	2,262	2,266	2,265
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,092	24,457	24,835	25,228	25,635	26,054	26,481	26,904	27,308	27,676
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27079	1,26527	1,25917	1,25218	1,24374	1,23291	1,21844	1,19998	1,18105	1,16833

<b>Richesse</b>	<b>1</b>	<b>0,9</b>	<b>0,8</b>	<b>0,7</b>	<b>0,6</b>	<b>0,5</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1791	1759	1714	1656	1582	1492
<b>Température, K</b>	2824	2753	2640	2482	2281	2046
<b>Pression, bar</b>	18,9	18,1	17,0	15,7	14,1	12,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,254	2,234	2,206	2,171	2,136	2,101
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	27,998	28,268	28,477	28,620	28,702	28,747
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16549	1,17247	1,18828	1,21016	1,23269	1,2524

**Dodécane/(O2+2N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1689	1765	1824	1871	1910	1944	1972	1995	2013	2026
<b>Température, K</b>	2611	2816	2963	3068	3144	3198	3232	3247	3243	3220
<b>Pression, bar</b>	16,8	18,6	20,1	21,4	22,5	23,4	24,3	25,0	25,5	25,9
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,238	2,281	2,316	2,345	2,369	2,390	2,409	2,426	2,439	2,450
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,995	28,7355	28,3954	28,0044	27,5833	27,1446	26,6947	26,2369	25,7726	25,3028
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,1909	1,16848	1,15491	1,14754	1,14405	1,14316	1,14439	1,14774	1,15355	1,16213

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2033	2034	2030	2021	2009	1994	1977	1957	1935	1911
<b>Température, K</b>	3178	3117	3041	2955	2862	2765	2665	2564	2462	2361
<b>Pression, bar</b>	26,2	26,2	26,1	25,9	25,7	25,4	25,0	24,6	24,1	23,6
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,458	2,464	2,469	2,474	2,480	2,488	2,495	2,503	2,512	2,521
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,8296	24,3564	23,8879	23,4289	22,9827	22,5514	22,1363	21,7375	21,3551	20,9889
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,17337	1,18637	1,19983	1,21273	1,22463	1,2355	1,24545	1,25462	1,26309	1,27092

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1885	1858	1829	1799	1767	1734
<b>Température, K</b>	2260	2160	2061	1964	1868	1774
<b>Pression, bar</b>	23,0	22,5	21,9	21,2	20,6	19,9
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,531	2,540	2,550	2,560	2,569	2,579
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	20,6385	20,3035	19,9833	19,6776	19,3864	19,1135
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27819	1,28498	1,29138	1,2975	1,3034	1,30846

**Dodécane/(O<sub>2</sub>+1,5N<sub>2</sub>)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1754	1824	1880	1927	1967	2003	2034	2060	2082	2099
<b>Température, K</b>	2807	2985	3113	3206	3275	3324	3358	3375	3377	3361
<b>Pression, bar</b>	18,5	20,3	21,8	23,2	24,4	25,5	26,4	27,3	28,1	28,7
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,301	2,342	2,376	2,405	2,431	2,455	2,477	2,498	2,517	2,533
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	29,0027	28,6082	28,1519	27,665	27,165	26,6611	26,1578	25,6572	25,1597	24,6653
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16827	1,15264	1,14449	1,14051	1,13894	1,13895	1,14024	1,14283	1,14695	1,15295

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2111	2118	2120	2116	2108	2096	2081	2062	2041	2018
<b>Température, K</b>	3329	3279	3213	3135	3045	2949	2847	2742	2635	2527
<b>Pression, bar</b>	29,2	29,5	29,6	29,5	29,4	29,1	28,8	28,4	27,9	27,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,547	2,559	2,569	2,578	2,587	2,596	2,605	2,615	2,625	2,635
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,1745	23,6884	23,2094	22,7401	22,2834	21,8413	21,4149	21,0048	20,6113	20,2343
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,16107	1,17122	1,18284	1,19509	1,20729	1,21907	1,23031	1,24098	1,25108	1,26058

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1992	1964	1934	1902	1868	1833
<b>Température, K</b>	2418	2310	2202	2096	1991	1888
<b>Pression, bar</b>	26,8	26,1	25,4	24,7	24,0	23,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,646	2,657	2,669	2,680	2,692	2,704
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	19,8736	19,529	19,2002	18,8868	18,5887	18,3088
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,26945	1,2777	1,28535	1,2925	1,29923	1,30526

### Dodécane/(O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>)

Richesse	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1	1,1	1,2	1,3	1,4
Célérité de détonation, m/s	1824	1891	1947	1995	2038	2076	2111	2141	2167	2189
Température, K	3014	3166	3276	3359	3421	3468	3500	3518	3523	3513
Pression, bar	20,6	22,5	24,1	25,6	27,0	28,3	29,5	30,6	31,6	32,5
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,381	2,421	2,456	2,488	2,518	2,547	2,574	2,600	2,625	2,649
Masse moléculaire, kg/kmol	28,8998	28,3335	27,7377	27,1374	26,5446	25,9647	25,3997	24,8496	24,3135	23,7904
[dln(p)/dln(v)]s	1,14933	1,14073	1,13681	1,13528	1,13508	1,13578	1,1372	1,13937	1,14246	1,14672

Richesse	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2	2,1	2,2	2,3	2,4
Célérité de détonation, m/s	2206	2219	2226	2228	2224	2217	2205	2189	2170	2148
Température, K	3489	3448	3392	3322	3240	3147	3047	2941	2831	2717
Pression, bar	33,3	33,8	34,2	34,5	34,5	34,4	34,2	33,8	33,4	32,8
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,670	2,689	2,706	2,721	2,735	2,749	2,762	2,775	2,788	2,801
Masse moléculaire, kg/kmol	23,2794	22,7799	22,2924	21,8176	21,3568	20,9112	20,4816	20,0683	19,6713	19,2906
[dln(p)/dln(v)]s	1,15245	1,15986	1,16888	1,17918	1,19026	1,20168	1,21316	1,22458	1,23583	1,24683

Richesse	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3
Célérité de détonation, m/s	2122	2094	2063	2029	1993	1955
Température, K	2602	2485	2368	2252	2137	2023
Pression, bar	32,2	31,4	30,7	29,8	28,9	28,0
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,814	2,827	2,841	2,855	2,869	2,884
Masse moléculaire, kg/kmol	18,9261	18,5777	18,2453	17,9287	17,6281	17,3457
[dln(p)/dln(v)]s	1,25742	1,26747	1,27687	1,28557	1,2936	1,3008

**Dodécane/(O<sub>2</sub>+3,76Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1546	1601	1641	1674	1702	1725	1745	1762	1775	1784
<b>Température, K</b>	2801	2969	3085	3169	3232	3278	3308	3325	3328	3314
<b>Pression, bar</b>	17,2	18,8	20,0	21,0	21,8	22,5	23,1	23,6	24,0	24,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,774	2,828	2,864	2,890	2,911	2,927	2,940	2,950	2,956	2,958
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	37,5025	37,1199	36,7043	36,2738	35,8369	35,3974	34,9567	34,5146	34,0706	33,6231
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,27392	1,23497	1,21406	1,2023	1,19568	1,19242	1,19181	1,19377	1,19865	1,20706

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1789	1790	1785	1777	1765	1751	1733	1714	1692	1668
<b>Température, K</b>	3283	3235	3170	3091	3002	2905	2804	2698	2591	2482
<b>Pression, bar</b>	24,3	24,2	24,0	23,7	23,3	22,8	22,3	21,7	21,1	20,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,956	2,949	2,940	2,930	2,922	2,914	2,908	2,902	2,898	2,895
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	33,1712	32,7145	32,254	31,7926	31,3333	30,879	30,4315	29,9921	29,5618	29,1413
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,21945	1,23554	1,254	1,27308	1,29156	1,30901	1,32537	1,34067	1,35481	1,36761

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1642	1615	1587	1557	1525	1493
<b>Température, K</b>	2372	2263	2154	2048	1942	1839
<b>Pression, bar</b>	19,9	19,2	18,5	17,9	17,2	16,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,893	2,892	2,892	2,894	2,895	2,897
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	28,7313	28,3325	27,9453	27,57	27,2068	26,8565
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,37894	1,38874	1,39714	1,40434	1,41064	1,41611

### Dodécane/(O<sub>2</sub>+2Ar)

Richesse	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1	1,1	1,2	1,3	1,4
Célérité de détonation, m/s	1667	1718	1760	1796	1828	1856	1882	1904	1924	1940
Température, K	3096	3225	3319	3390	3445	3486	3515	3533	3539	3532
Pression, bar	20,4	21,9	23,1	24,3	25,3	26,2	27,1	27,9	28,6	29,2
Densité, kg/m <sup>3</sup>	2,822	2,859	2,889	2,914	2,936	2,956	2,975	2,992	3,008	3,021
Masse moléculaire, kg/kmol	35,6836	35,0673	34,4477	33,8357	33,2358	32,6494	32,0763	31,5156	30,9656	30,4247
[dln(p)/dln(v)]s	1,19718	1,18227	1,17432	1,16992	1,16759	1,16667	1,16688	1,1682	1,17079	1,17495

Richesse	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2	2,1	2,2	2,3	2,4
Célérité de détonation, m/s	1952	1961	1965	1965	1961	1953	1942	1927	1910	1889
Température, K	3511	3476	3426	3361	3284	3196	3100	2996	2887	2774
Pression, bar	29,6	29,9	30,1	30,1	29,9	29,6	29,3	28,8	28,3	27,6
Densité, kg/m <sup>3</sup>	3,031	3,039	3,044	3,047	3,048	3,049	3,049	3,049	3,050	3,050
Masse moléculaire, kg/kmol	29,8913	29,3645	28,8438	28,33	27,8243	27,3282	26,8429	26,3693	25,9077	25,4583
[dln(p)/dln(v)]s	1,18105	1,18937	1,19988	1,21217	1,2256	1,2396	1,25384	1,26824	1,28272	1,29714

Richesse	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3
Célérité de détonation, m/s	1866	1839	1811	1780	1746	1711
Température, K	2657	2537	2417	2296	2176	2057
Pression, bar	26,9	26,2	25,4	24,5	23,6	22,8
Densité, kg/m <sup>3</sup>	3,050	3,051	3,053	3,056	3,060	3,065
Masse moléculaire, kg/kmol	25,0215	24,5977	24,1873	23,7911	23,4095	23,0434
[dln(p)/dln(v)]s	1,31121	1,32455	1,33682	1,34777	1,3574	1,36577

## Nitrométhane / Air

<b>Richesse</b>	<b>3</b>	<b>2,9</b>	<b>2,8</b>	<b>2,7</b>	<b>2,6</b>	<b>2,5</b>	<b>2,4</b>	<b>2,3</b>	<b>2,2</b>	<b>2,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2122	2118	2113	2108	2103	2098	2092	2086	2079	2072
<b>Température, K</b>	3259	3259	3258	3258	3257	3256	3255	3253	3251	3248
<b>Pression, bar</b>	37,6	37,2	36,9	36,5	36,1	35,6	35,2	34,7	34,3	33,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,276	3,256	3,235	3,214	3,192	3,170	3,147	3,122	3,097	3,071
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,600	23,687	23,778	23,875	23,976	24,082	24,195	24,314	24,439	24,572
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15806	1,15733	1,15658	1,1558	1,15498	1,15414	1,15327	1,15238	1,15145	1,15051

<b>Richesse</b>	<b>2</b>	<b>1,9</b>	<b>1,8</b>	<b>1,7</b>	<b>1,6</b>	<b>1,5</b>	<b>1,4</b>	<b>1,3</b>	<b>1,2</b>	<b>1,1</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2065	2057	2048	2038	2027	2016	2003	1988	1972	1954
<b>Température, K</b>	3244	3239	3234	3227	3218	3208	3195	3179	3159	3134
<b>Pression, bar</b>	33,2	32,7	32,1	31,5	30,9	30,2	29,5	28,7	27,9	27,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,044	3,017	2,987	2,957	2,925	2,892	2,858	2,821	2,783	2,743
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,712	24,862	25,020	25,189	25,369	25,560	25,765	25,983	26,216	26,464
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14955	1,14858	1,14762	1,14667	1,14575	1,14491	1,14417	1,14359	1,14325	1,14329

<b>Richesse</b>	<b>1</b>	<b>0,9</b>	<b>0,8</b>	<b>0,7</b>	<b>0,6</b>	<b>0,5</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1933	1909	1881	1846	1802	1744
<b>Température, K</b>	3102	3061	3008	2936	2835	2690
<b>Pression, bar</b>	26,1	25,0	23,9	22,5	21,0	19,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,700	2,654	2,604	2,550	2,488	2,417
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	26,728	27,008	27,301	27,603	27,904	28,182
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14389	1,14537	1,1483	1,15364	1,16321	1,17989

**Nitrométhane/(O2+2N2)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1870	1918	1956	1988	2014	2036	2056	2072	2087	2100
<b>Température, K</b>	3022	3121	3191	3242	3280	3309	3332	3349	3363	3374
<b>Pression, bar</b>	23,8	25,8	27,4	28,9	30,3	31,5	32,6	33,6	34,6	35,5
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,632	2,711	2,781	2,846	2,905	2,959	3,010	3,058	3,103	3,145
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	27,7528	27,3065	26,8921	26,5135	26,1694	25,8571	25,573	25,314	25,0773	24,8603
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14752	1,14154	1,13848	1,13692	1,13621	1,13602	1,13615	1,13651	1,13703	1,13766

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2112	2123	2132	2140	2148	2155	2162	2167	2173	2178
<b>Température, K</b>	3382	3388	3392	3395	3398	3399	3399	3399	3399	3398
<b>Pression, bar</b>	36,3	37,1	37,8	38,5	39,1	39,7	40,3	40,8	41,3	41,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,184	3,222	3,257	3,290	3,322	3,352	3,381	3,408	3,434	3,459
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,6606	24,4765	24,3062	24,1482	24,0014	23,8645	23,7367	23,6171	23,5049	23,3995
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,13836	1,13913	1,13993	1,14077	1,14162	1,14248	1,14334	1,14419	1,14504	1,14588

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2182	2187	2191	2194	2198	2201
<b>Température, K</b>	3397	3395	3394	3392	3390	3388
<b>Pression, bar</b>	42,2	42,6	43,0	43,4	43,8	44,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,482	3,505	3,527	3,548	3,568	3,587
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,3002	23,2067	23,1183	23,0348	22,9557	22,8806
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14671	1,14752	1,14831	1,14909	1,14985	1,15058

**Nitrométhane/(O<sub>2</sub>+1,5N<sub>2</sub>)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1912	1959	1995	2026	2051	2073	2092	2108	2122	2134
<b>Température, K</b>	3125	3212	3273	3318	3351	3377	3396	3411	3422	3431
<b>Pression, bar</b>	25,8	27,8	29,6	31,1	32,5	33,8	35,0	36,1	37,1	38,0
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	2,727	2,811	2,886	2,954	3,017	3,074	3,128	3,177	3,223	3,267
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	27,5087	27,0144	26,5712	26,1759	25,8232	25,5074	25,2236	24,9672	24,7348	24,5231
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14102	1,13722	1,13537	1,13452	1,13424	1,13431	1,13461	1,13507	1,13563	1,13628

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2145	2155	2164	2172	2179	2186	2191	2197	2202	2206
<b>Température, K</b>	3437	3441	3444	3446	3447	3447	3446	3445	3444	3442
<b>Pression, bar</b>	38,8	39,6	40,4	41,0	41,7	42,3	42,8	43,4	43,8	44,3
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,307	3,345	3,381	3,414	3,446	3,476	3,504	3,531	3,557	3,581
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,3295	24,1519	23,9883	23,8372	23,6972	23,5672	23,4461	23,333	23,2272	23,128
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,13698	1,13774	1,13852	1,13932	1,14014	1,14097	1,1418	1,14262	1,14345	1,14426

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2210	2214	2217	2220	2223	2226
<b>Température, K</b>	3440	3437	3435	3432	3430	3427
<b>Pression, bar</b>	44,7	45,2	45,6	45,9	46,3	46,6
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,604	3,626	3,647	3,667	3,686	3,705
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	23,0348	22,947	22,8643	22,7862	22,7123	22,6423
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14507	1,14586	1,14663	1,1474	1,14814	1,14887

### Nitrométhane/(O2+N2)

Richesse	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1	1,1	1,2	1,3	1,4
Célérité de détonation, m/s	2210	2005	2041	2070	2094	2115	2132	2148	2161	2172
Température, K	3440	3310	3362	3400	3429	3450	3466	3477	3486	3492
Pression, bar	44,7	30,4	32,3	34,0	35,5	36,8	38,1	39,2	40,2	41,1
Densité, kg/m <sup>3</sup>	3,604	2,944	3,024	3,096	3,162	3,222	3,278	3,328	3,375	3,419
Masse moléculaire, kg/kmol	23,0348	26,6338	26,1673	25,7614	25,4058	25,0923	24,8137	24,5647	24,3408	24,1383
[dln(p)/dln(v)]s	1,14507	1,13367	1,13279	1,13252	1,1326	1,13289	1,13332	1,13386	1,13446	1,13513

Richesse	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2	2,1	2,2	2,3	2,4
Célérité de détonation, m/s	2183	2192	2200	2207	2213	2219	2224	2228	2233	2236
Température, K	3496	3498	3500	3500	3499	3498	3496	3494	3491	3488
Pression, bar	42,0	42,8	43,5	44,2	44,8	45,4	45,9	46,4	46,9	47,3
Densité, kg/m <sup>3</sup>	3,459	3,497	3,532	3,565	3,596	3,625	3,653	3,678	3,703	3,726
Masse moléculaire, kg/kmol	23,9543	23,7863	23,6323	23,4907	23,3599	23,2387	23,1262	23,0215	22,9237	22,8321
[dln(p)/dln(v)]s	1,13583	1,13656	1,13732	1,1381	1,13888	1,13968	1,14047	1,14127	1,14206	1,14285

Richesse	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3
Célérité de détonation, m/s	2240	2243	2246	2249	2251	2253
Température, K	3485	3481	3478	3474	3471	3467
Pression, bar	47,7	48,1	48,5	48,8	49,2	49,5
Densité, kg/m <sup>3</sup>	3,748	3,768	3,788	3,807	3,824	3,841
Masse moléculaire, kg/kmol	22,7463	22,6656	22,5897	22,5181	22,4504	22,3864
[dln(p)/dln(v)]s	1,14363	1,14439	1,14515	1,14589	1,14662	1,14734

**Nitrométhane/(O<sub>2</sub>+3,76Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1696	1738	1773	1803	1829	1852	1872	1891	1907	1923
<b>Température, K</b>	3093	3173	3231	3273	3306	3331	3350	3365	3377	3386
<b>Pression, bar</b>	22,6	24,1	25,4	26,5	27,6	28,5	29,4	30,3	31,1	31,8
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,030	3,083	3,127	3,168	3,205	3,239	3,271	3,301	3,329	3,356
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	34,5371	33,8	33,1252	32,5083	31,9436	31,4256	30,9493	30,5099	30,1037	29,7271
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,18648	1,17548	1,16883	1,16453	1,16162	1,15963	1,15825	1,15731	1,15671	1,15636

<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1937	1950	1962	1973	1983	1993	2002	2010	2018	2026
<b>Température, K</b>	3394	3399	3403	3406	3408	3409	3409	3409	3409	3408
<b>Pression, bar</b>	32,5	33,1	33,7	34,3	34,9	35,4	35,9	36,4	36,9	37,3
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,381	3,406	3,429	3,451	3,472	3,493	3,512	3,531	3,549	3,566
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	29,377	29,0508	28,7463	28,4613	28,1941	27,9431	27,7069	27,4843	27,274	27,0752
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15619	1,15618	1,15629	1,15649	1,15676	1,15709	1,15747	1,15788	1,15831	1,15877

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2033	2039	2046	2052	2057	2063
<b>Température, K</b>	3406	3405	3403	3401	3399	3397
<b>Pression, bar</b>	37,7	38,1	38,5	38,9	39,3	39,6
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,583	3,599	3,615	3,630	3,644	3,658
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	26,8869	26,7083	26,5388	26,3776	26,2241	26,0779
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15924	1,15971	1,16019	1,16067	1,16115	1,16163

**Nitrométhane/(O2+2Ar)**

<b>Richesse</b>	<b>0,5</b>	<b>0,6</b>	<b>0,7</b>	<b>0,8</b>	<b>0,9</b>	<b>1</b>	<b>1,1</b>	<b>1,2</b>	<b>1,3</b>	<b>1,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	1806	1849	1885	1916	1943	1966	1987	2005	2021	2036
<b>Température, K</b>	3252	3318	3365	3399	3425	3445	3459	3471	3479	3485
<b>Pression, bar</b>	26,1	27,9	29,5	30,9	32,1	33,3	34,4	35,4	36,3	37,1
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,111	3,173	3,227	3,277	3,322	3,365	3,404	3,440	3,475	3,507
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	32,1771	31,3582	30,6398	30,0061	29,4434	28,9407	28,4891	28,0811	27,7107	27,3729
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,1593	1,15407	1,1509	1,14889	1,14758	1,14674	1,14623	1,14597	1,14589	1,14595

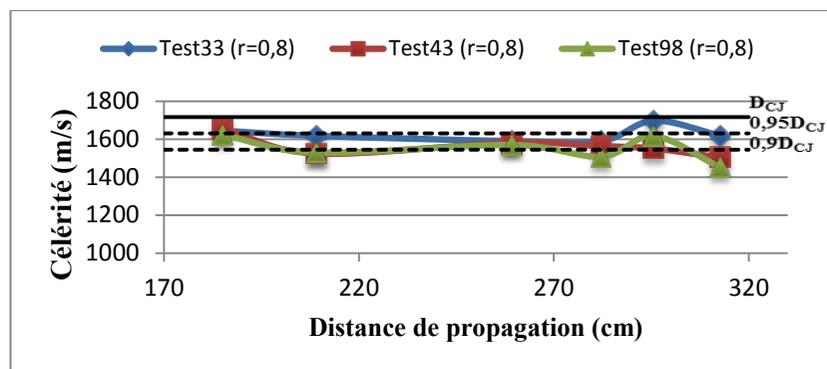
<b>Richesse</b>	<b>1,5</b>	<b>1,6</b>	<b>1,7</b>	<b>1,8</b>	<b>1,9</b>	<b>2</b>	<b>2,1</b>	<b>2,2</b>	<b>2,3</b>	<b>2,4</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2050	2062	2073	2083	2092	2101	2108	2116	2122	2129
<b>Température, K</b>	3489	3491	3493	3493	3493	3492	3490	3488	3486	3483
<b>Pression, bar</b>	37,9	38,6	39,3	40,0	40,6	41,2	41,7	42,2	42,7	43,2
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,537	3,565	3,592	3,618	3,642	3,665	3,686	3,707	3,726	3,745
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	27,0637	26,7795	26,5175	26,275	26,0501	25,8408	25,6456	25,4632	25,2922	25,1317
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,14613	1,14639	1,14673	1,14713	1,14758	1,14806	1,14857	1,1491	1,14965	1,15021

<b>Richesse</b>	<b>2,5</b>	<b>2,6</b>	<b>2,7</b>	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>3</b>
<b>Célérité de détonation, m/s</b>	2135	2140	2145	2150	2154	2158
<b>Température, K</b>	3480	3477	3474	3471	3467	3464
<b>Pression, bar</b>	43,6	44,0	44,4	44,8	45,1	45,4
<b>Densité, kg/m<sup>3</sup></b>	3,763	3,780	3,796	3,812	3,827	3,841
<b>Masse moléculaire, kg/kmol</b>	24,9807	24,8384	24,7041	24,5772	24,4569	24,3429
<b>[dln(p)/dln(v)]s</b>	1,15078	1,15135	1,15192	1,15249	1,15306	1,15363

## **Annexe 3**

### **Courbes des résultats expérimentaux supplémentaires**





(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

(b) Structure cellulaire

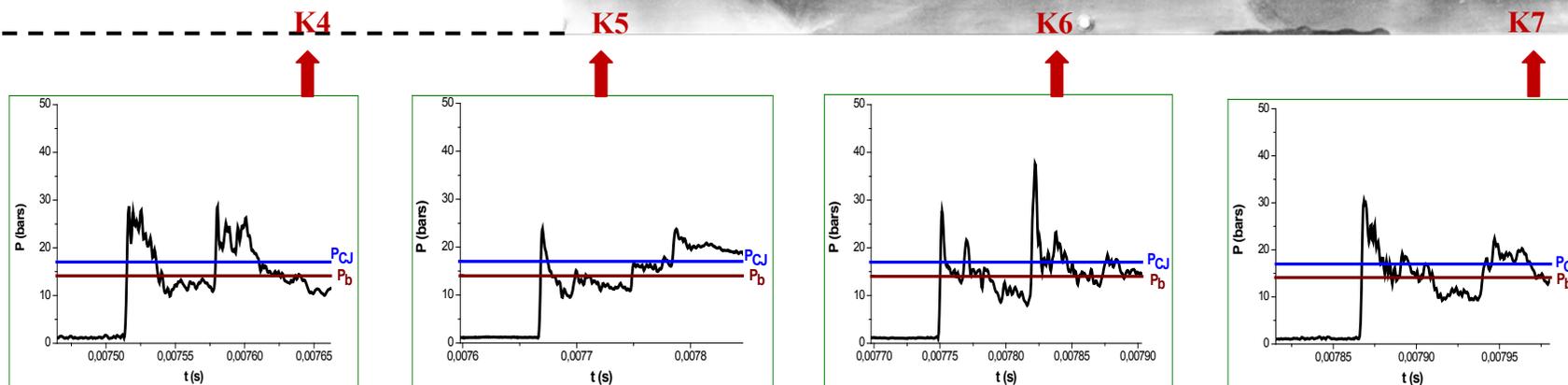
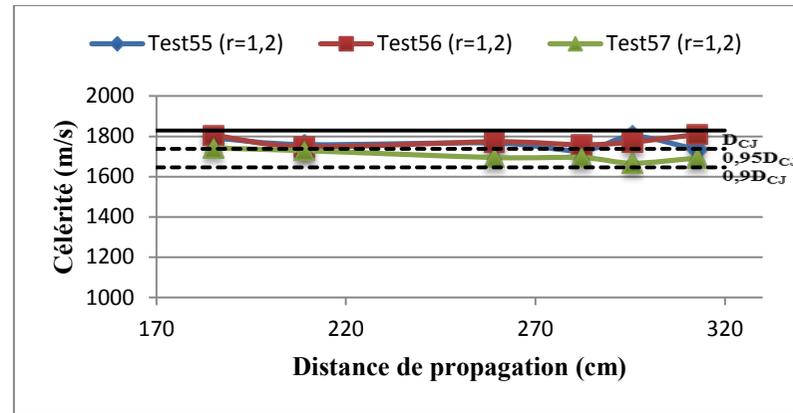


Fig. A3.1 – Mélange M1-D0-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

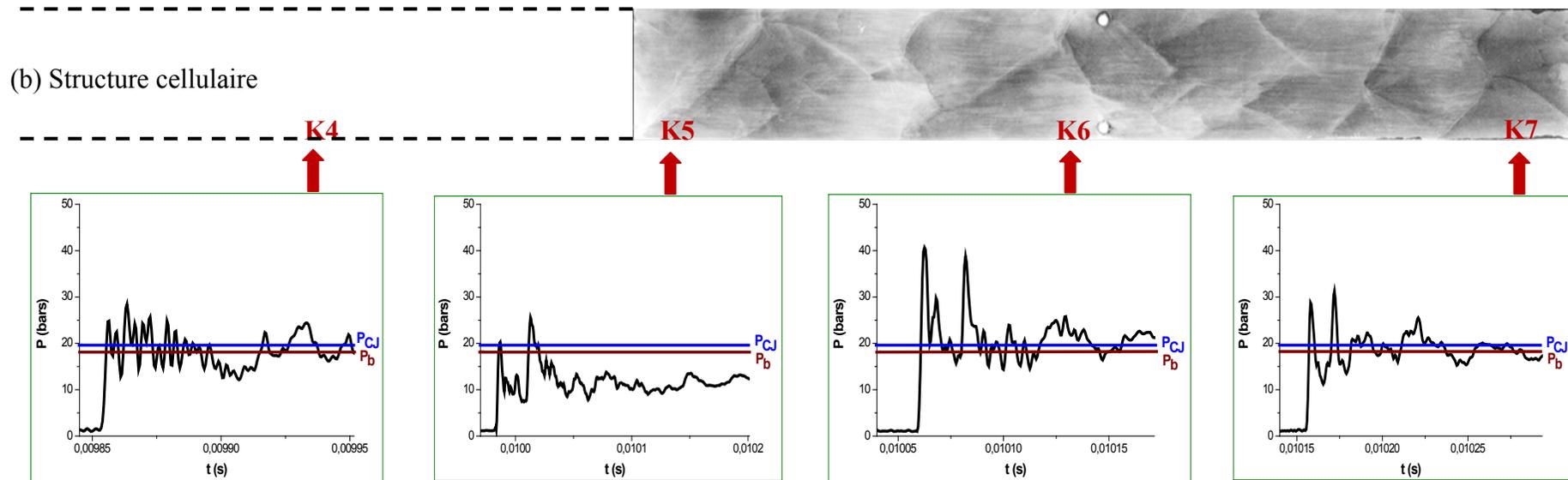
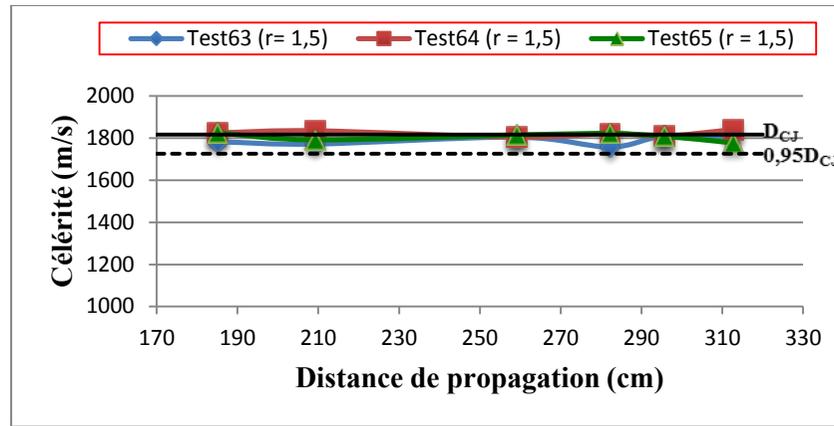


Fig. A3.2 – Mélange M1-D0-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

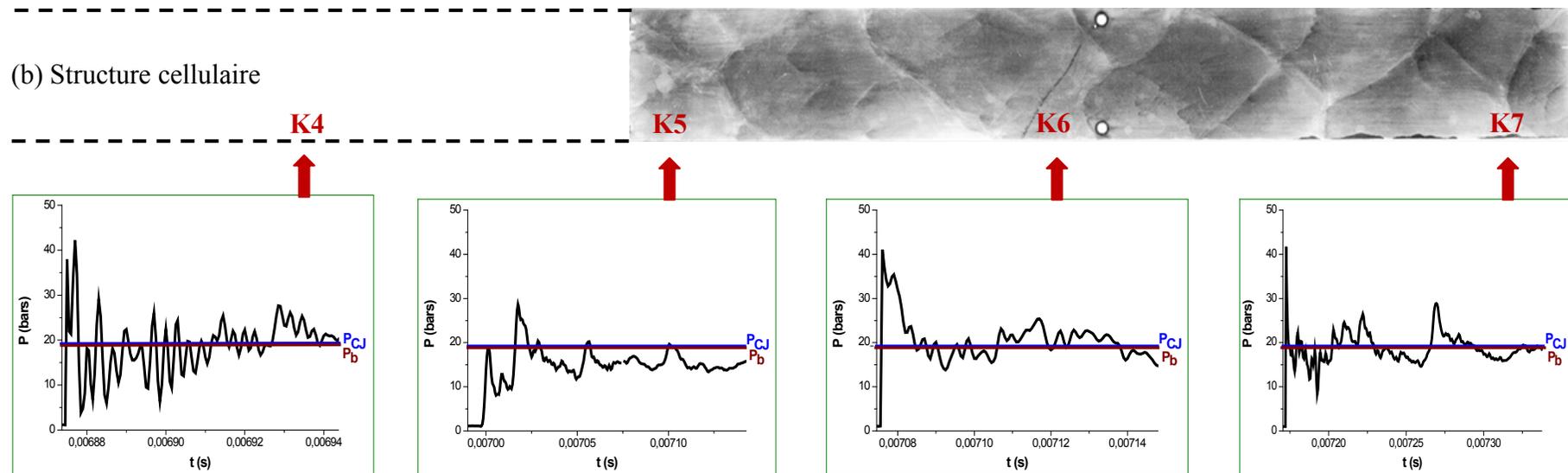
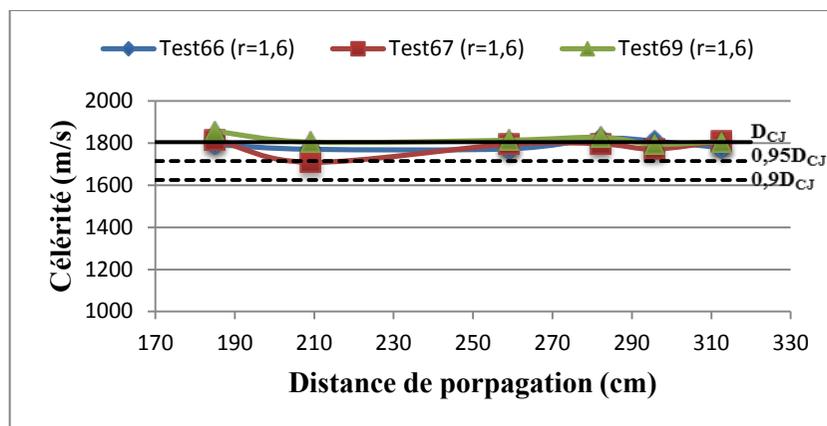


Fig. A3.3 – Mélange M1-D0-1,5 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

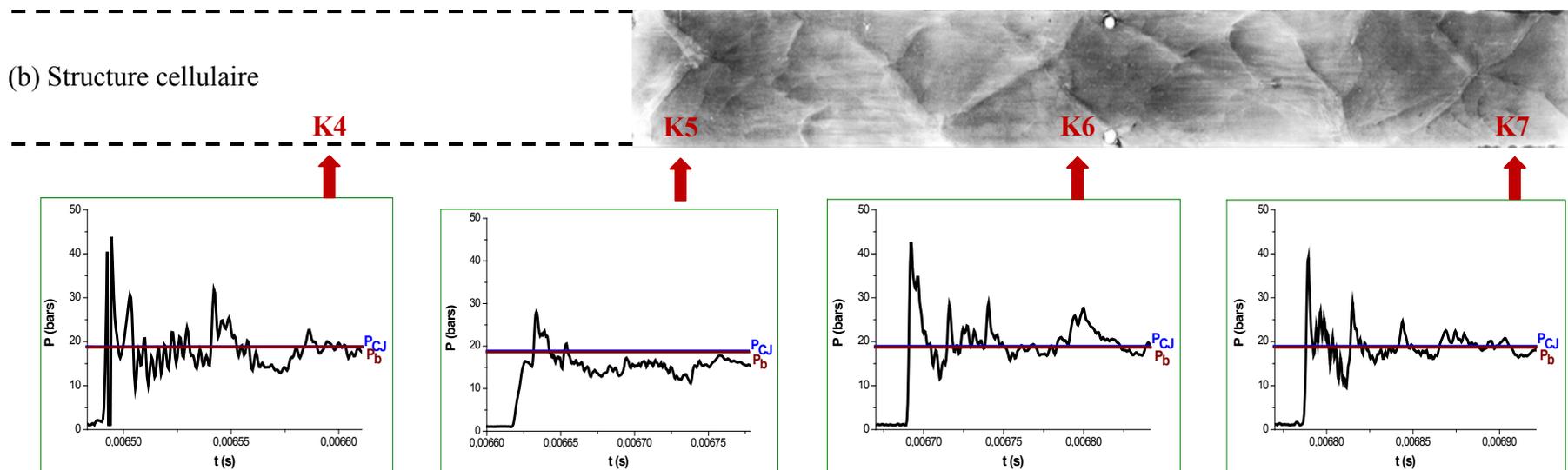
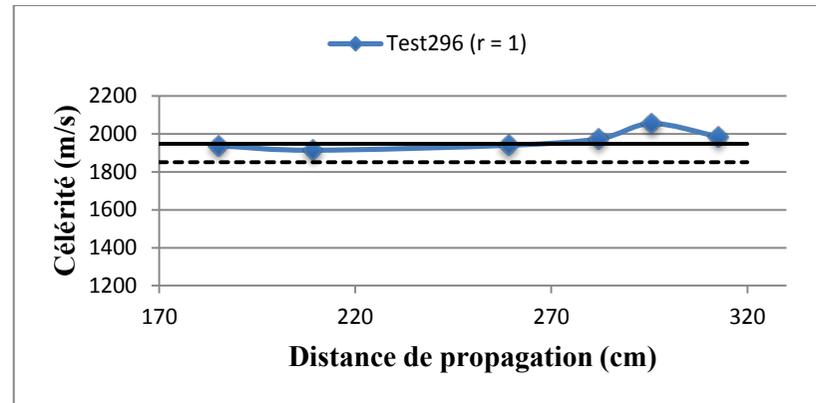


Fig. A3.4 – Mélange M1-D0-1,6 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

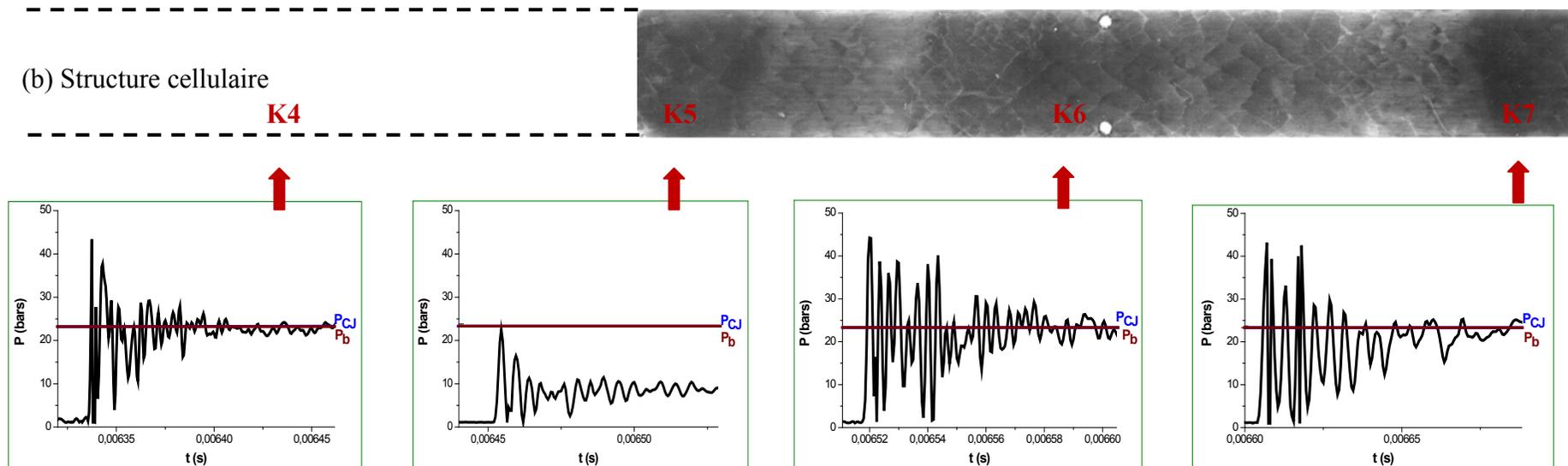
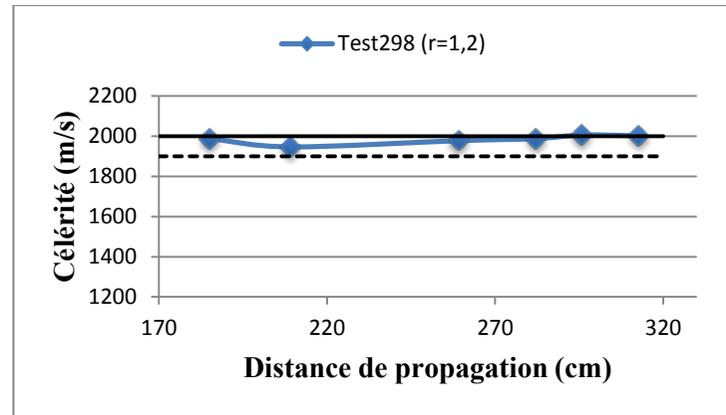


Fig. A3.5 – Mélange M1-D1-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

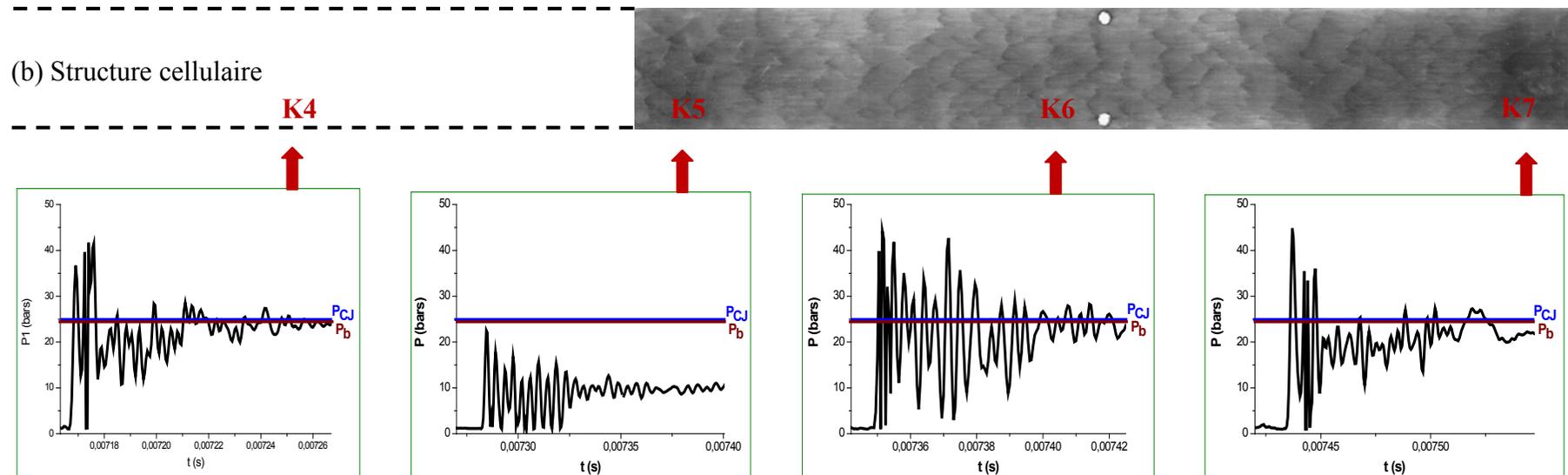
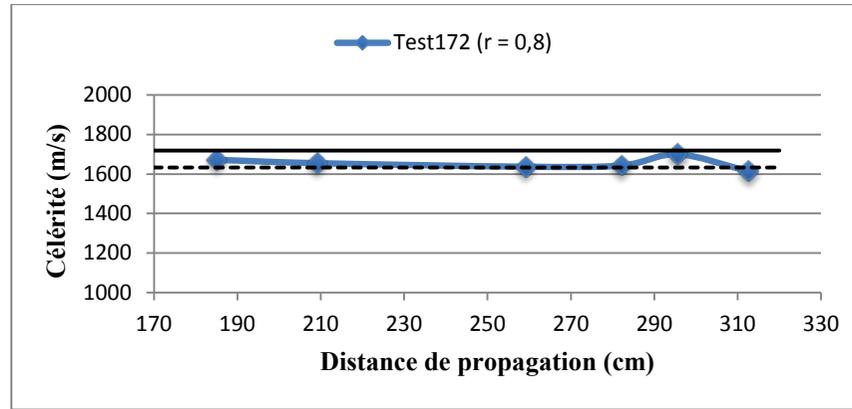


Fig. A3.6 – Mélange M1-D1-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

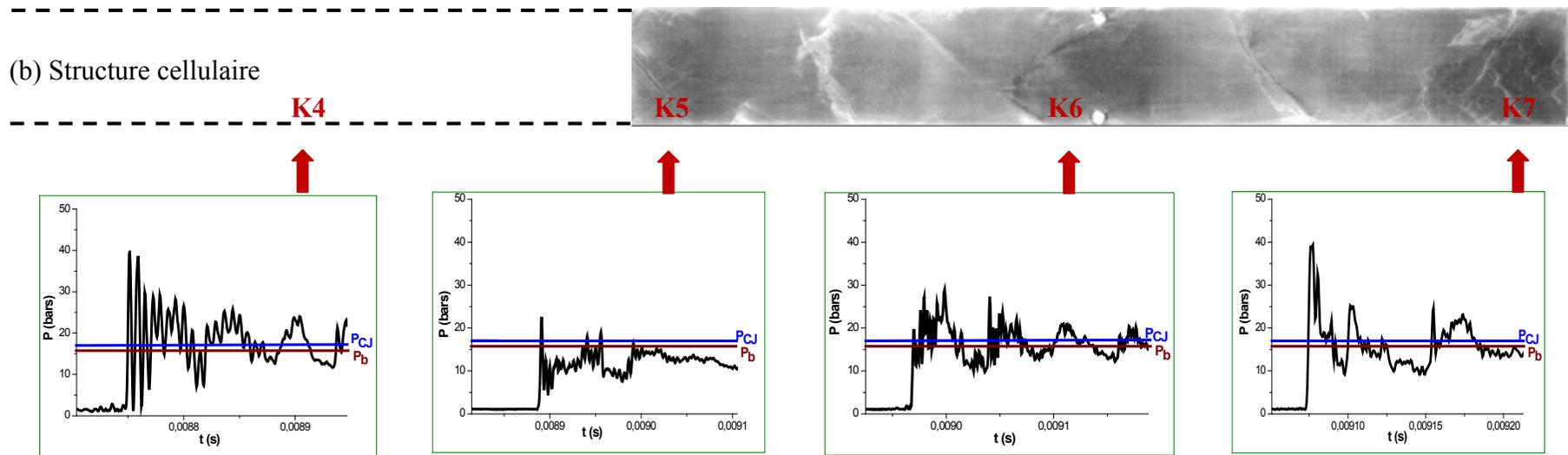
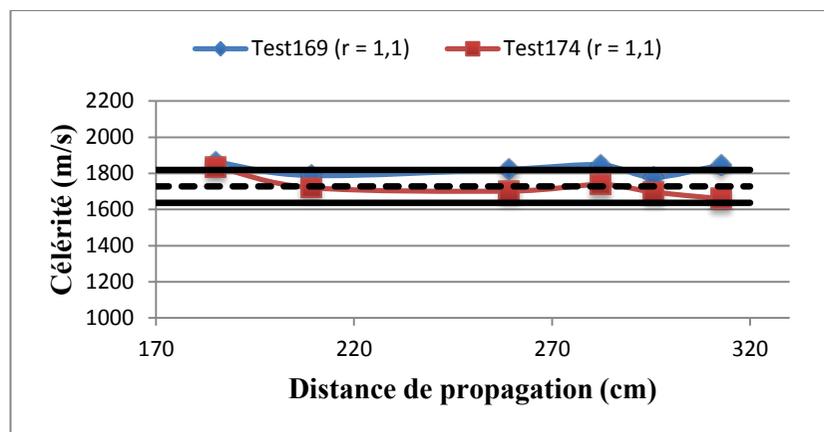


Fig. A3.7 – Mélange M2-D0-0,8 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

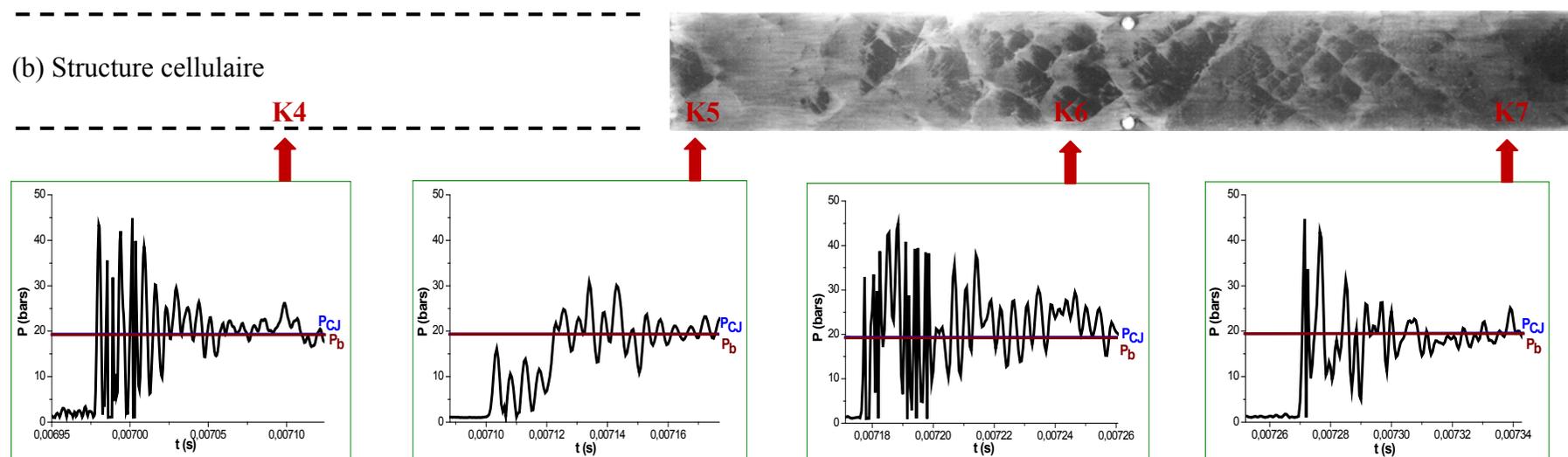
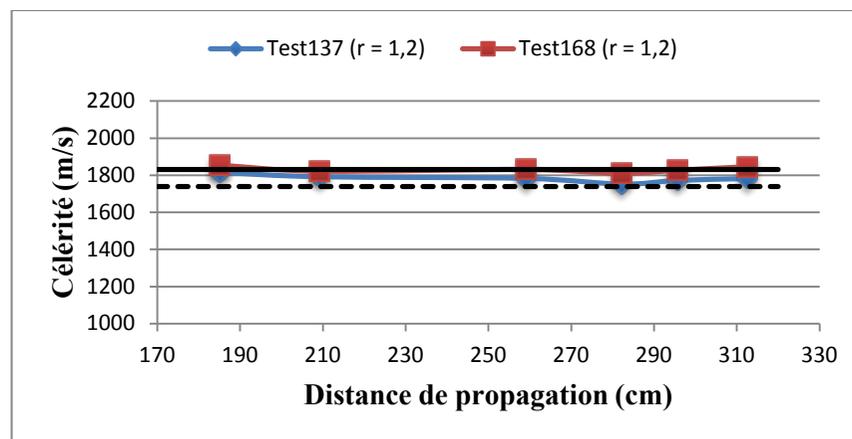


Fig. A3.8 – Mélange M2-D0-1,1 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

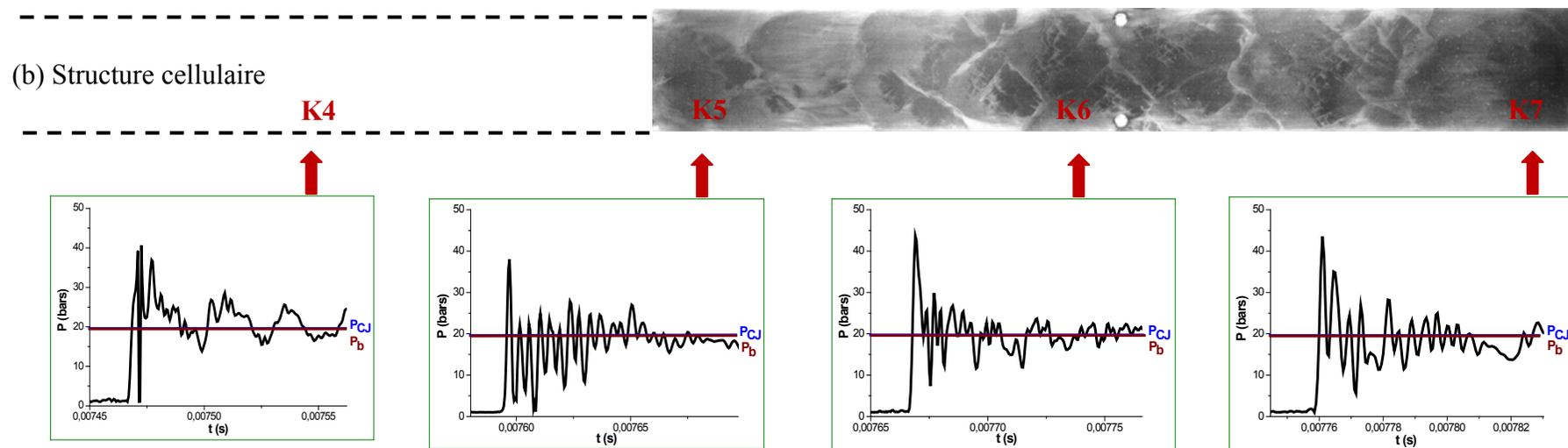
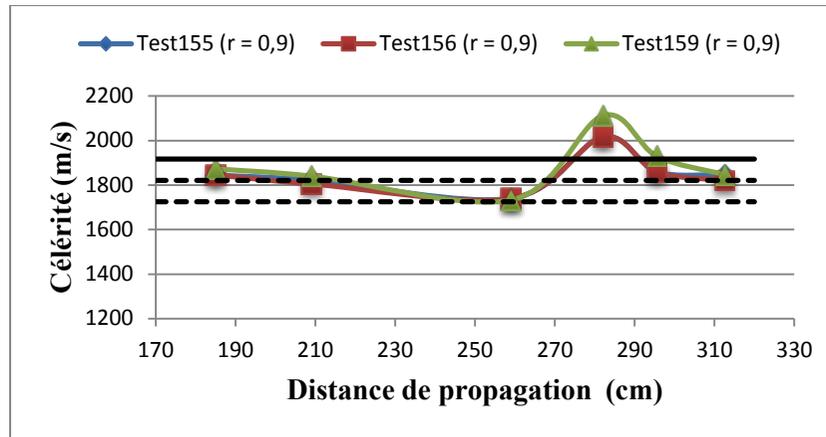


Fig. A3.9 – Mélange M2-D0-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

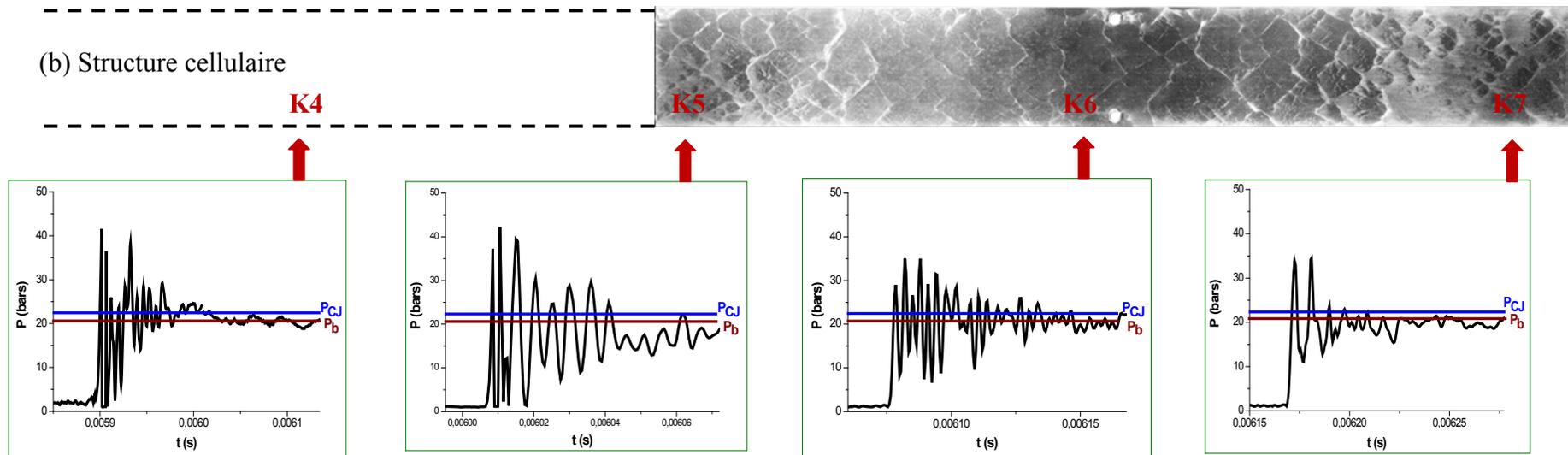
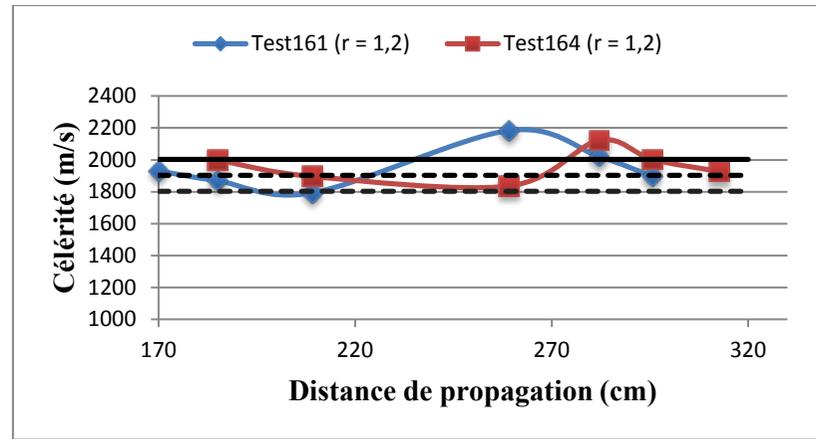


Fig. A3.10 – Mélange M2-D1-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

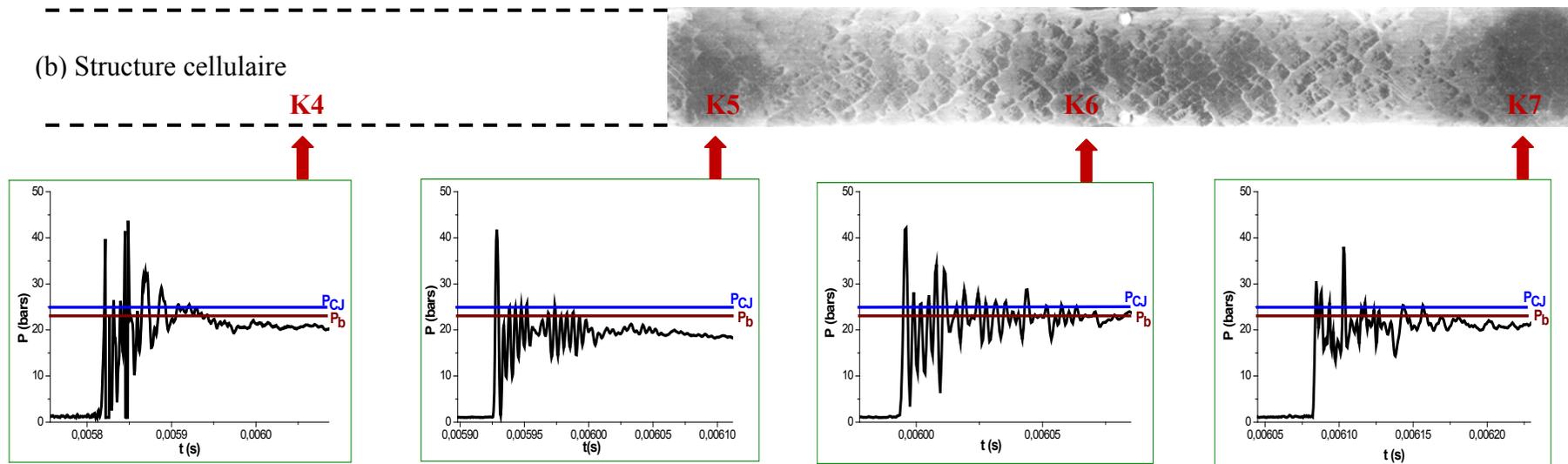
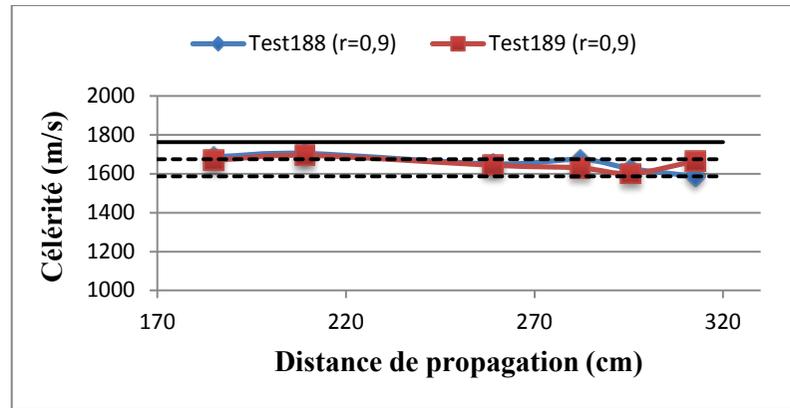


Fig. A3.11 – Mélange M2-D1-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

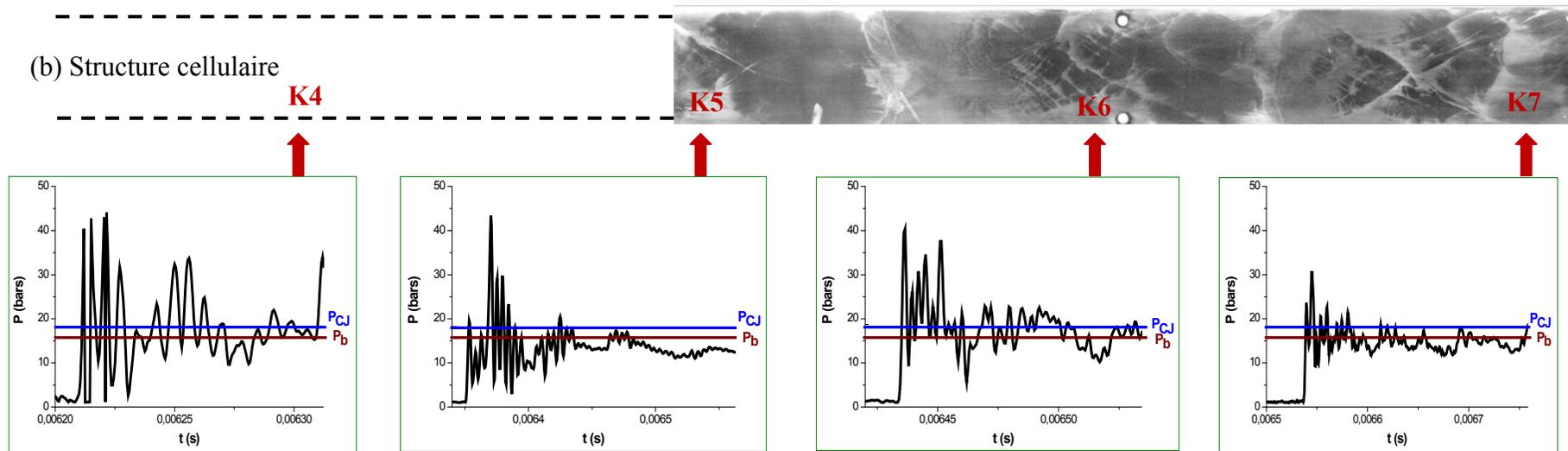
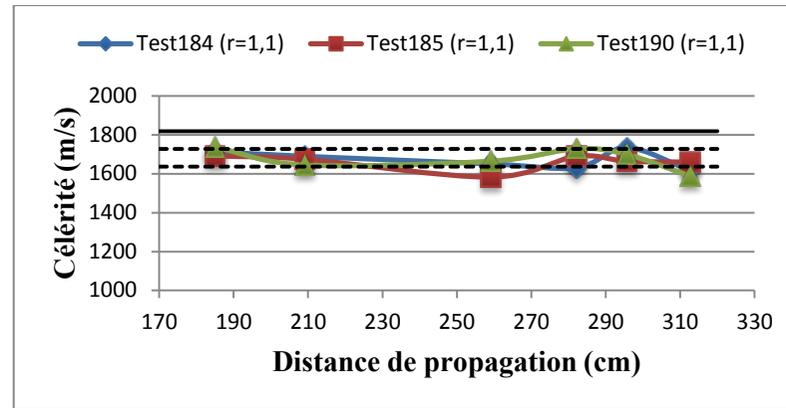


Fig. A3.12 – Mélange M3-D0-0,9 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

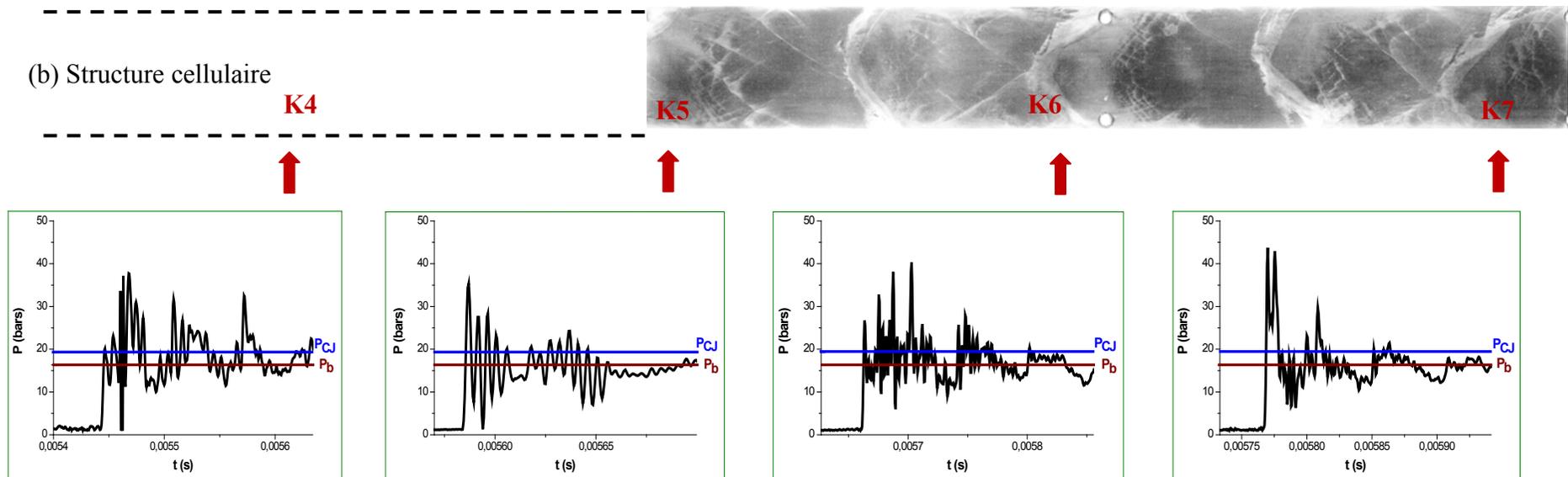
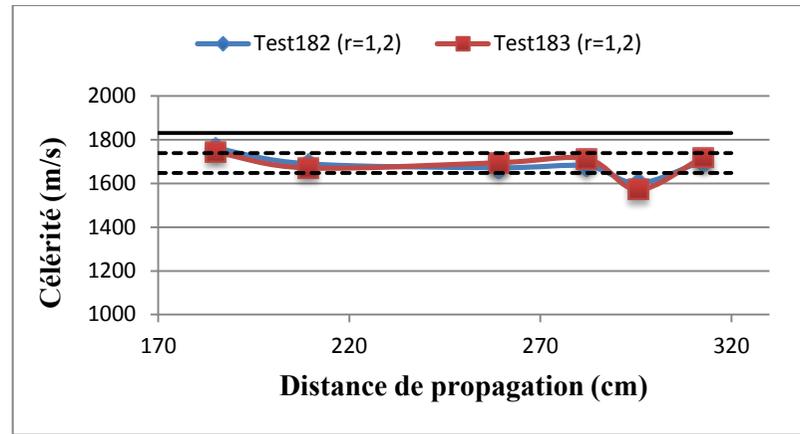


Fig. A3.13 – Mélange M3-D0-1,1 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

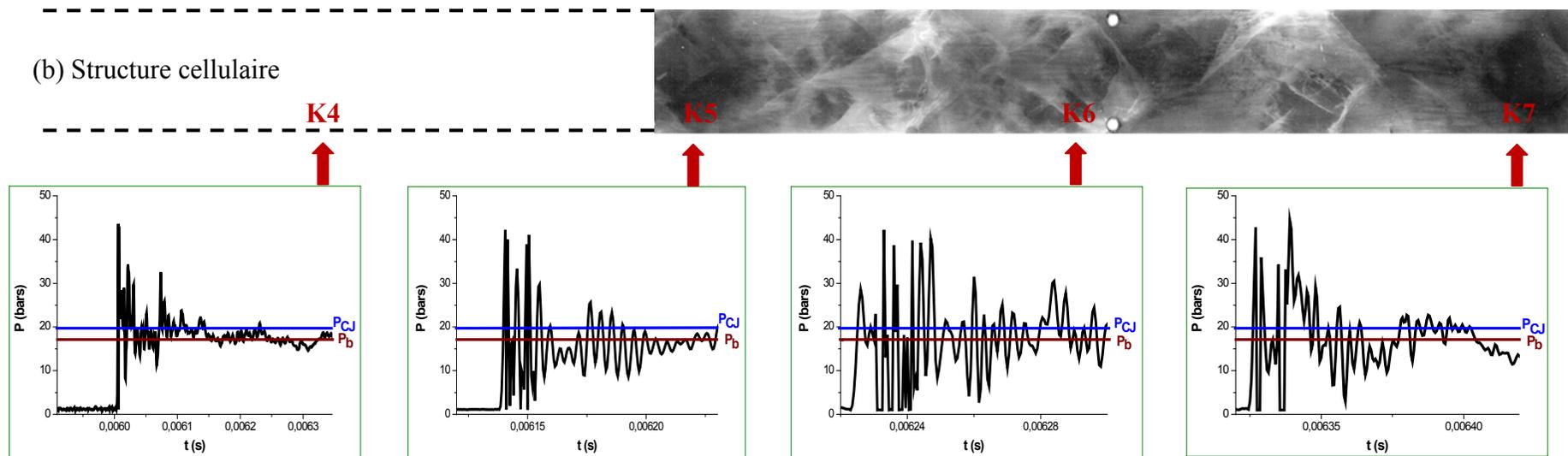
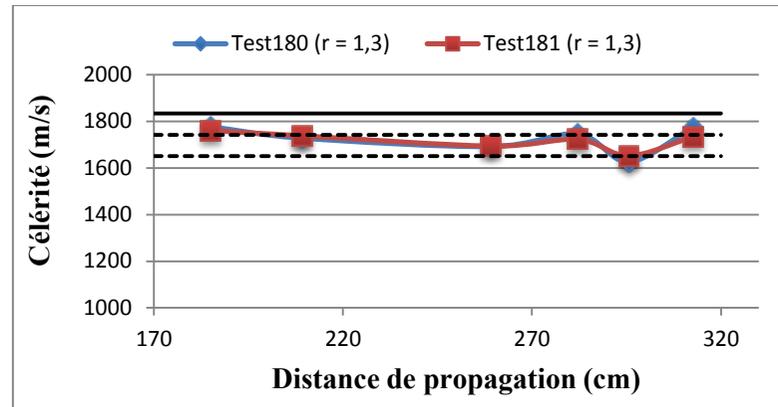


Fig. A3.14 – Mélange M3-D0-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

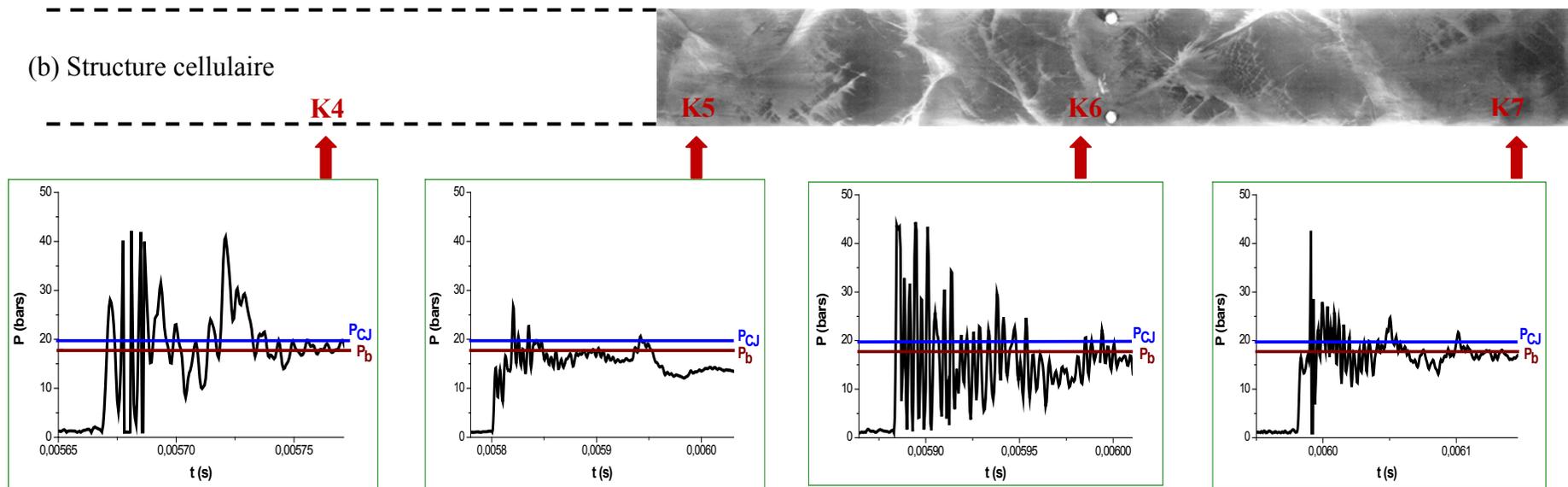
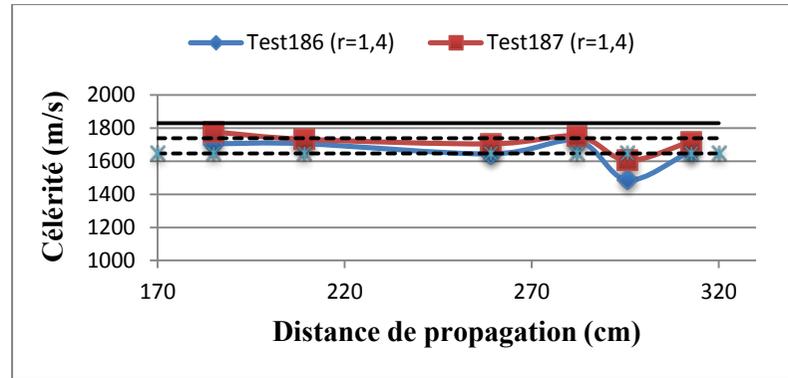


Fig. A3.15 – Mélange M3-D0-1,3 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



(a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

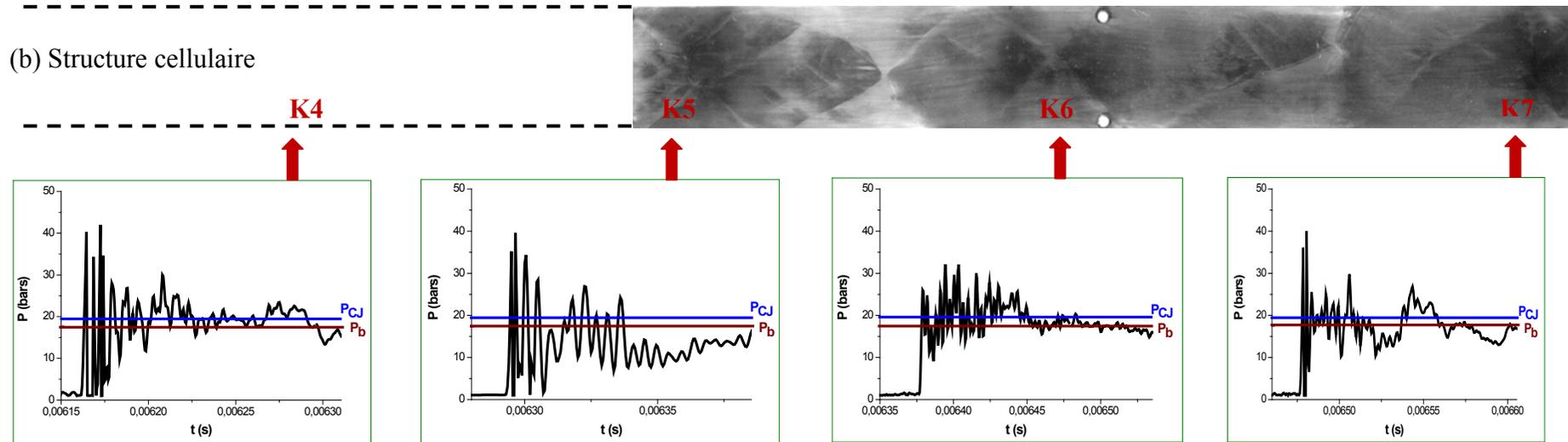
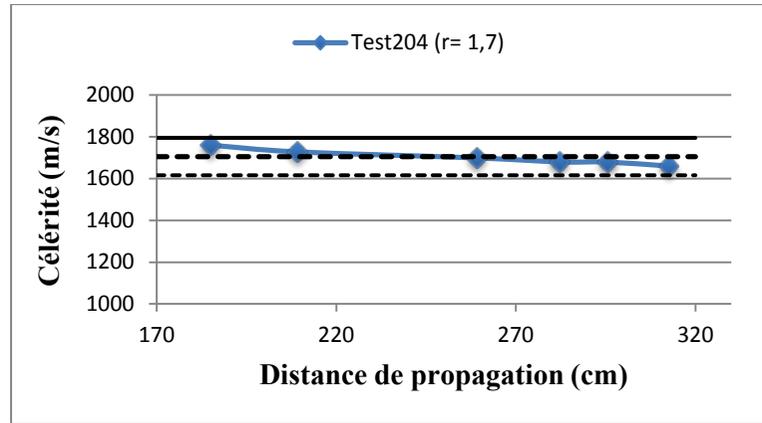


Fig. A3.16 – Mélange M3-D0-1,4 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

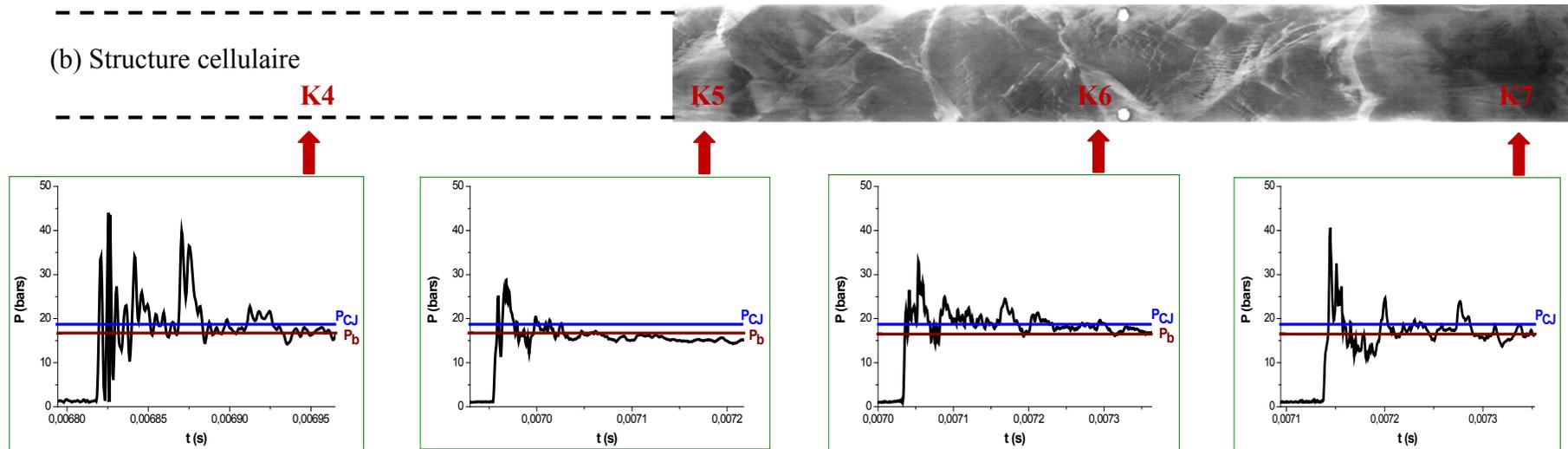
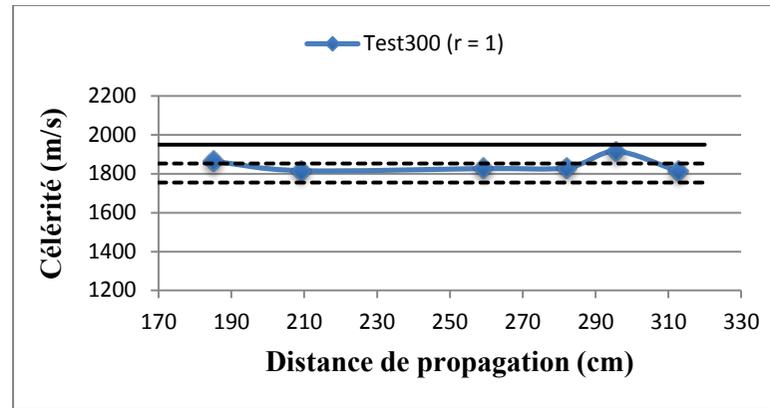


Fig. A3.17 – Mélange M3-D0-1,7 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

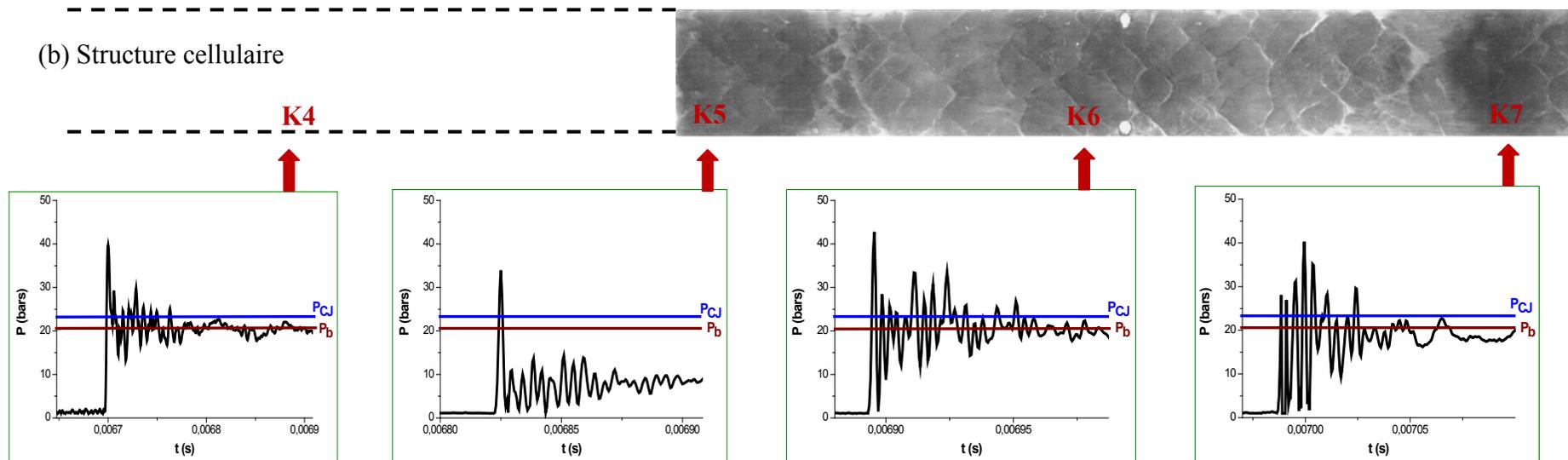
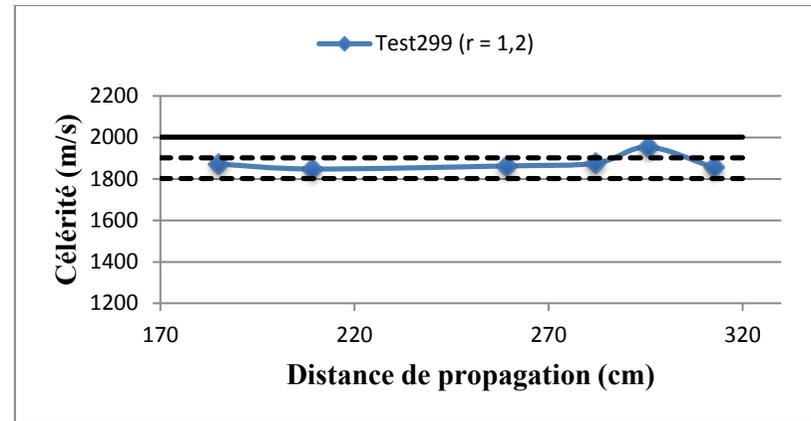


Fig. A3.18 – Mélange M3-D1-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation,

(b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

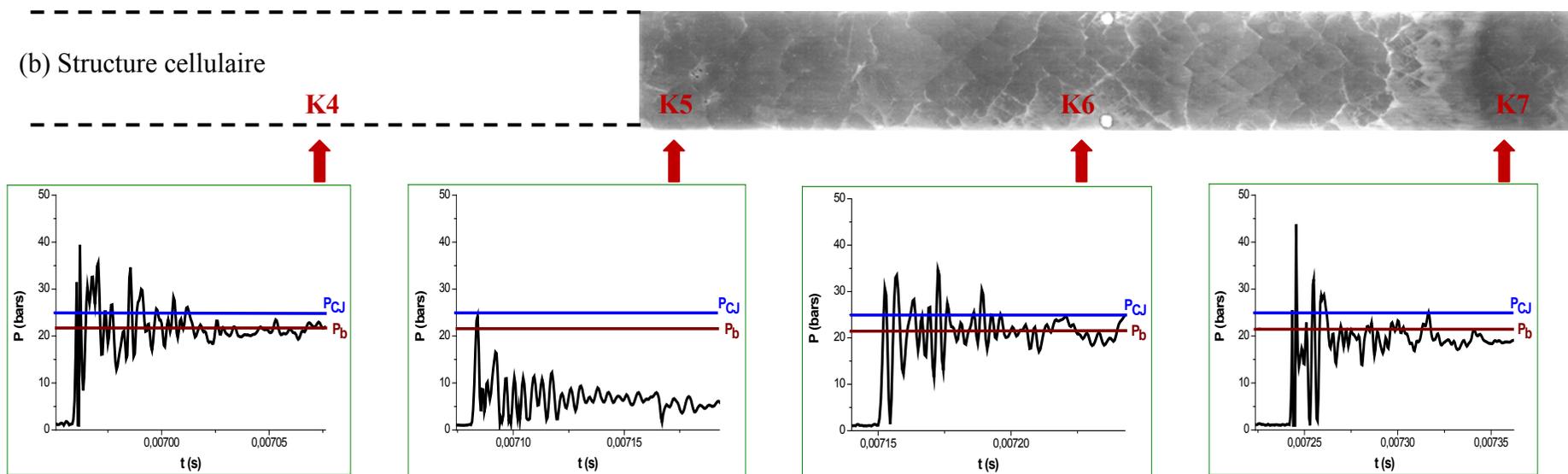
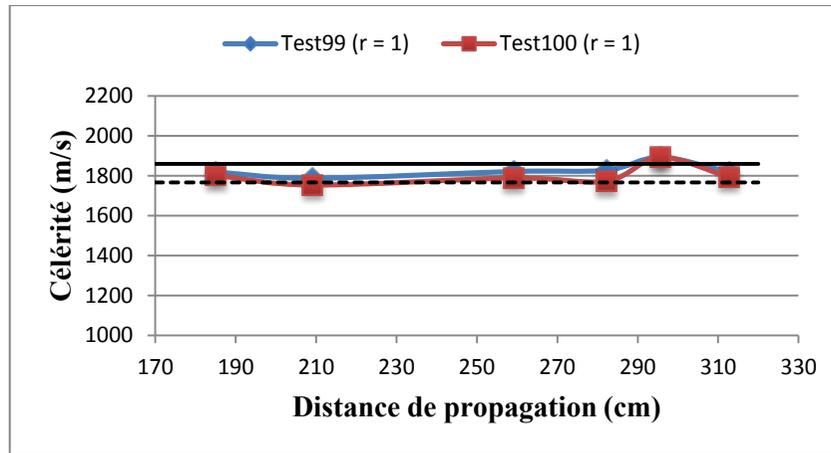


Fig. A3.19 – Mélange M3-D1-1,2 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

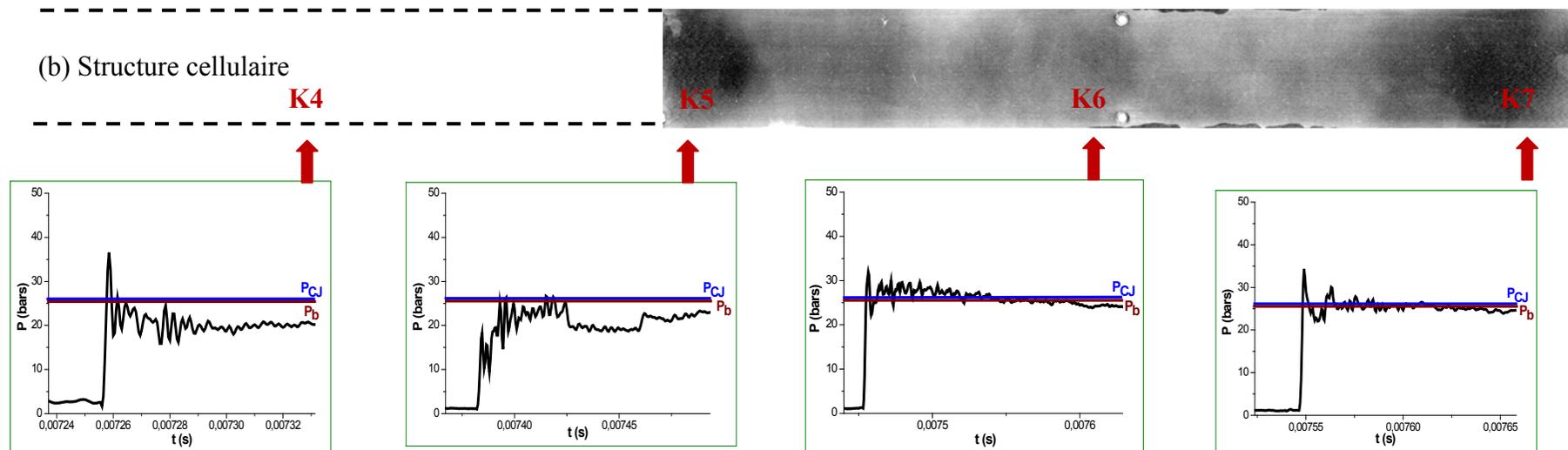
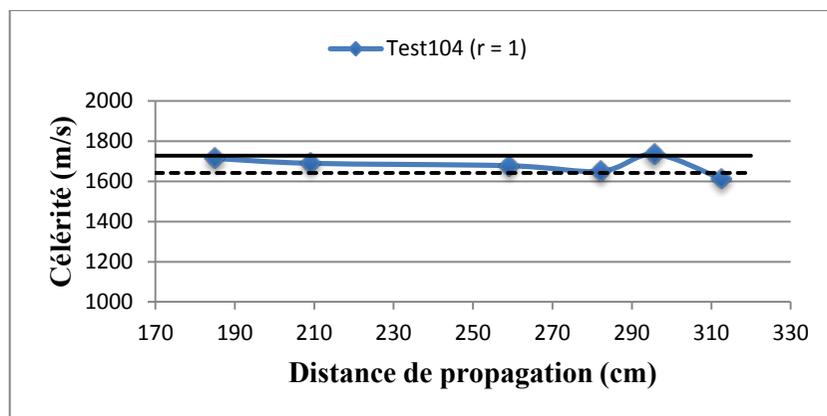


Fig. A3.20 – Mélange M1-D4-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression



a) Célérité de détonation en fonction de la distance de propagation

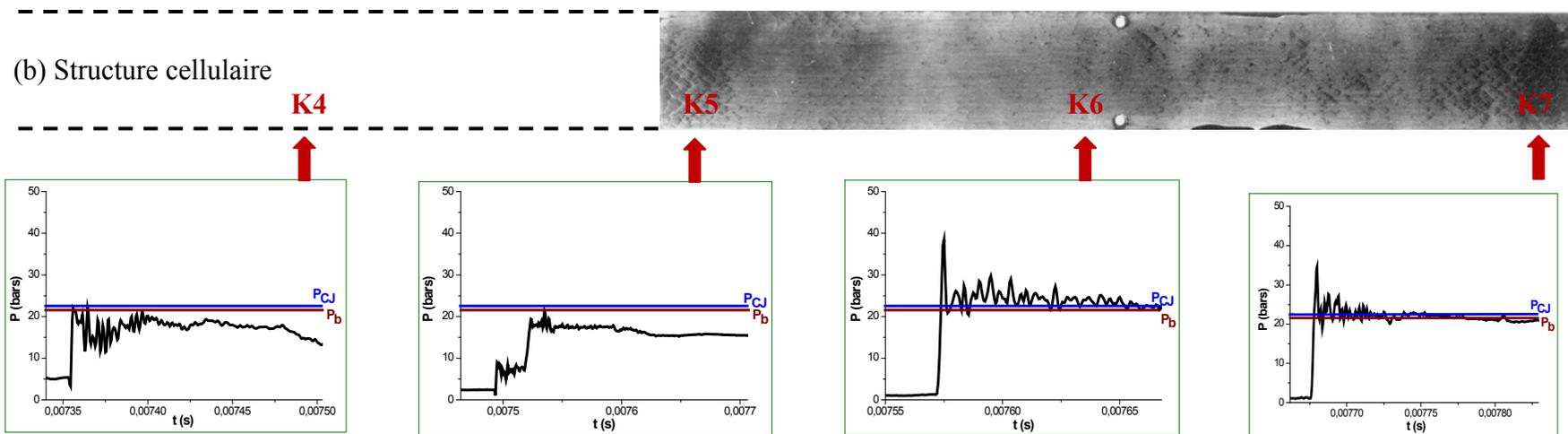


Fig. A3.21 – Mélange M1-D3-1,0 : (a) Célérité moyenne du front en fonction de la distance de propagation, (b) Enregistrement de la structure cellulaire, (c) Enregistrement de la pression sur les quatre derniers capteurs de pression





***Détonations dans les aérosols de gouttelettes liquides réactives. Etude de l'influence des propriétés physicochimiques de la phase liquide et de l'oxydant gazeux***

Dans des milieux hétérogènes d'aérosols de gouttelettes de carburants liquides, on a étudié l'influence des propriétés physicochimiques de la phase liquide et de l'oxydant gazeux sur les conditions d'initiation d'une détonation, ses caractéristiques de propagation et l'existence d'une structure cellulaire analogue à celle des mélanges gazeux. Les expériences ont été effectuées dans un tube de section carrée (53x53mm) et de longueur 4m, avec des gouttelettes de 30  $\mu\text{m}$ . Dans l'air, avec des carburants volatils (heptane, isooctane) 3 régimes de détonation ont été observés, lorsque la richesse croît : régime hélicoïdal ; marginal avec structure à demi-cellule ; régime normal avec structure multicellulaire. Lorsque le rapport de dilution diminue, on n'observe que le régime à structure multicellulaire et la taille des cellules diminue. Dans des carburants moins volatils (octane), on retrouve les mêmes régimes de détonation, mais les tailles de cellule sont plus grandes que celles de l'isooctane. Dans le cas de carburants peu volatils (décane ou dodécane), la détonation n'a pas été initiée, quelle que soit la richesse et la dilution. Avec le nitrométhane (cas d'un monergol) on a observé la formation et la propagation d'une détonation et mis en évidence la structure cellulaire. Un modèle numérique a été développé. Seul le facteur préexponentiel de la loi de cinétique chimique est ajusté en fonction de la nature du carburant. Les résultats des simulations effectuées, en configurations bi- et tri-dimensionnelles, en fonction de la richesse et de la dilution conduisent à des régimes de propagation et à des tailles de la structure cellulaire en accord raisonnable avec les expériences.

Mots-clés:

Détonation, Détonabilité, Aérosols, Onde de choc, Ecoulements biphasiques, Structure cellulaire de détonation, Volatilité des carburants, Atomiseur, Simulation numérique.

***Detonations in fuel /air spray mixtures: Study of the influence of physico-chemical properties of the liquid phase and of the gaseous oxidizer***

In heterogeneous media composed of liquid fuel sprays, influence of the physico-chemical properties of the liquid phase and of the gaseous oxidizer on conditions for detonation initiation and propagation characteristics as well as on the existence of a cellular structure, similar to that observed in homogeneous gaseous mixtures, has been studied. Experiments were performed in a square cross section (53x53mm), 4-meter long detonation tube, with 30  $\mu\text{m}$  droplets. In air, with volatile fuels (heptane, isooctane), three detonation regimes have been observed with increasing equivalence ratio: spinning regime; marginal one with half a cell structure; normal multi-headed detonation regime. When the dilution ratio decreases, only the multi-headed regime was observed, and the cell size diminishes. In less volatile fuel (octane), the same detonation regimes were observed, but the cell sizes are larger than those of isooctane. In hardly volatile fuels (decane or dodecane), it was not possible to initiate a detonation, whatever the equivalent or the dilution ratios. With nitromethane (monopropellant), the initiation and propagation of a detonation was observed, and the existence of the cellular structure was displayed. A numerical model has been built on, in which only the pre-exponential factor of the chemical kinetics law is adjusted depending on chemical properties of the considered fuel. Results of 2D and 3D numerical simulations, as function of the equivalent ratio and the dilution ratio, display propagation regimes and detonation cell sizes in reasonable agreement with experimental results.

Keywords:

Detonation, Detonability, Sprays, Two-phase flows, Shock waves, Detonation cellular structure, Fuel volatility, Atomizer, Numerical simulation.