



HAL
open science

Comportements dynamiques de la détonation dans des compositions gazeuses non-uniformes

Stéphane Boulal

► **To cite this version:**

Stéphane Boulal. Comportements dynamiques de la détonation dans des compositions gazeuses non-uniformes. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2017. Français. NNT : 2017ESMA0004 . tel-01508647

HAL Id: tel-01508647

<https://theses.hal.science/tel-01508647v1>

Submitted on 14 Apr 2017

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

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

THÈSE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE

DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE MÉCANIQUE ET D'AÉROTECHNIQUE

(DIPLOME NATIONAL – ARRÊTÉ DU 25 MAI 2016)

ÉCOLE DOCTORALE : SCIENCES ET INGÉNIERIE EN MATÉRIAUX, MÉCANIQUE,
ÉNERGÉTIQUE ET AÉRONAUTIQUE

SECTEUR DE RECHERCHE : ÉNERGÉTIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION

PRÉSENTÉE PAR :

STÉPHANE BOULAL

COMPORTEMENTS DYNAMIQUES DE LA DÉTONATION DANS DES COMPOSITIONS GAZEUSES NON-UNIFORMES

DIRECTEUR DE THÈSE : **PIERRE VIDAL**

CO-ENCADRANTE : **RATIBA ZITOUN**

SOUTENUE LE 17 FÉVRIER 2017

DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY :

PRÉSIDENT

M. LUC VERVISCH

PROFESSEUR – CORIA – INSA DE ROUEN

RAPPORTEURS

MME. AKIKO MATSUO

PROFESSEUR – UNIVERSITÉ KEIO, JAPON

M. THIERRY POINSOT

DIRECTEUR DE RECHERCHE – IMFT – CNRS

MEMBRES

M. MARC BELLENOUE

PROFESSEUR – INSTITUT P' – ISAE-ENSMA

M. MICHEL CAZALENS

EXPERT COMBUSTION – SAFRAN TECH

M. DMITRY DAVIDENKO

INGÉNIEUR DE RECHERCHE – ONERA/DEFA

M. PIERRE VIDAL

CHARGÉ DE RECHERCHE – INSTITUT P' – CNRS

MME. RATIBA ZITOUN

MAÎTRE DE CONFÉRENCE – INSTITUT P' – UNIVERSITÉ DE POITIERS

À mon père

Remerciements

Je tiens à exprimer mes plus chaleureux remerciements à mes directeurs de thèse M. PIERRE VIDAL et MME. RATIBA ZITOUN pour leurs conseils et enseignements, leurs soutiens, leurs disponibilités et la grande cordialité des relations continûment témoignée durant ces trois années.

Je remercie MM. YVES GERVAIS et JACQUES BORÉE de m'avoir accueilli dans le département Fluides, Thermique, Combustion de l'Institut Pprime.

Je remercie MME. AKIKO MATSUO et M. THIERRY POINSOT d'avoir accepté de juger ce travail, M. LUC VERVISCH d'avoir accepté la présidence de mon jury de thèse et MM. MARC BELLENOUE, MICHEL CAZALENS et DMITRY DAVIDENKO d'avoir participé à son évaluation.

Je remercie la société SAFRAN AIRCRAFT ENGINES pour le financement de ma thèse et, particulièrement, M. MATTHIEU LEYKO (SAFRAN TECH) pour son suivi et M. BERNARD ROBIC (SAFRAN AIRCRAFT ENGINES) de l'avoir initiée.

Je remercie M. MARC BELLENOUE d'avoir accueilli mon étude au sein de la chaire CAPA.

Je remercie MME. AKIKO MATSUO de m'avoir invité et accueilli pendant deux mois dans son laboratoire de l'Université Keio. Je remercie l'ensemble des membres de ce laboratoire, en particulier M. TAKUYA MATSUMOTO, pour la chaleur de leur accueil et des relations de travail. Je remercie également M. JIRO KASAHARA de m'avoir invité à réaliser un séminaire à l'Université de Nagoya.

Je tiens spécifiquement à remercier mes fidèles compères MM. MAXIME CARRON, NICOLAS PAPIN et JEAN-CARL ROUSSEAU pour leurs participations enthousiastes à l'avancement de mes travaux expérimentaux et pour leurs soutiens constants pendant ces trois années. Ce travail n'aurait pas, non plus, pu être mené à bien sans les concours de MM. JACQUES BAILLARGEAT, ROMAIN BOUJU, BENOIT CARME, ALAIN CLAVERIE, FRANCK MERCIER, VINCENT MONTASSIER, LAURICK PROUTEAU et YANN THOMAS.

Ma gratitude s'adresse également aux enseignants et chercheurs de l'Institut Pprime et de l'ISAE-ENSMA MM. HAZEM EL-RABBII, ALEXANDRE GLAD, JOCELYN LUCHE et DJAMEL KARMED, aux doctorants et post-doctorants MM. MOEZ BEN HOUIDI, RADOUAN BOUKHARFANE, AIMAD ER-RAIY, GEOFFREY JARSALÉ, ROMAIN LE DORTZ, ETIENNE MATHIS, MAXIME REYNAUD et SIMON ROBLIN et aux personnels administratifs et techniques MMES. FRANÇOISE ASTIER, CÉCILE BOYE, BÉNÉDICTE CAROUGE, MARIE-CANNELLE COSSIN, CATHERINE LAVALLADE et MM. SOVAN CHAN, HERVÉ DOREAU et OLIVIER MARCHAND.

Je tiens enfin à exprimer toute mon affection à ma mère, à ALINE et à l'ensemble de ma famille pour leurs soutiens sans faille.

Résumé

Notre étude porte sur la caractérisation expérimentale et numérique de la dynamique des ondes de détonation dans des prémélanges gazeux non-uniformément distribués dont les gradients de composition sont orientés selon la direction de propagation de la détonation. Elle vise à améliorer la compréhension des phénomènes complexes présents dans une chambre de combustion de moteur à détonations pulsées (PDE) ou rotatives (RDE) et dans des situations de fuites accidentelles de combustibles. Nous rappelons d'abord le contexte de notre étude, la phénoménologie de la détonation dans les gaz et les travaux antérieurs sur la propagation de la détonation dans des compositions non-uniformes. Nous décrivons ensuite le banc expérimental que nous avons conçu pour satisfaire à la contrainte de génération contrôlée de gradients de composition dans une chambre d'étude de section carrée $50 \times 50 \text{ mm}^2$ et de longueur 665 mm, et les diagnostics que nous avons mis en œuvre : sondes à oxygène, capteurs de pression dynamique, enregistrements sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone, strioscopie et spectroscopie par chimiluminescence ultra-rapides. Nous présentons alors les résultats de nos expériences dans des compositions de propane ou d'éthane et d'oxygène à la pression et à la température initiales 200 mbar et 290 K. Nous avons considéré des distributions monotones, de richesse décroissante, et des distributions non-monotones, de richesse décroissante puis croissante. Dans les distributions monotones, nous avons identifié deux types d'extinction de la détonation, l'un brusque, par découplage choc-flamme, pour des gradients suffisamment forts, l'autre progressif, par transition vers des modes marginaux de propagation, pour des gradients plus faibles. Nous avons proposé et validé des critères d'existence de la détonation fondés sur les échelles caractéristiques du problème. Nous avons démontré, pour ces distributions, la capacité de simulations numériques avec cinétique chimique détaillée à représenter nos expériences, dans le cadre d'une collaboration avec l'Université Keio. Dans les distributions non-monotones, nous avons identifié des comportements super-critique, critique et sous-critique, selon que la détonation est transmise ou non de la zone où la richesse diminue vers celle où elle augmente. Nous avons en particulier identifié les conditions de réamorçage d'une détonation éteinte dans la zone de richesse décroissante. Notre étude souligne l'intérêt de travaux futurs sur des non-uniformités de compositions initiales constitués de gaz brûlés et de gaz frais et donc, également, des non-uniformités de température initiale. Elle souligne aussi la nécessité de diagnostics optiques et d'outils numériques performants, et de schémas détaillés de cinétique chimique adaptés aux hautes pressions et températures caractérisant la dynamique des détonations.

Mots-clés : Détonation, compositions non-uniformes, extinction, réamorçage, moteurs à détonations

Abstract

Our study is an experimental and numerical work on the dynamical behaviours of detonation waves in non-uniformly distributed premixed gases with composition gradients parallel to the direction of the detonation propagation. The study aims at improving the understanding of the complex phenomena involved in the combustion chambers of pulsed or rotating detonation engine (PDE, RDE) and after accidental leaks of fuels. We first remind the context of our study, the phenomenology of gaseous detonation and the previous works on detonation propagation in non-uniform compositions. We then describe the experimental set-up that we have designed in order to meet the constraint of a controlled generation of composition gradients in a 50×50 mm² square-section, 665-mm length test chamber, and the diagnoses that we have implemented : oxygen probes, fast pressure transducers, carbon-sooted plates and ultrafast Schlieren and chemiluminescence spectroscopy. Next, we present the results of our experiments in mixtures of propane or ethane and oxygen with initial pressure and temperature 200 mbar and 290 K, respectively. We have considered monotonic distributions, with decreasing equivalence ratio, and non-monotonic distributions, with decreasing then increasing equivalence ratio. In the monotonic distributions, we have identified two types of detonation quenching, one sudden, with a shock-flame decoupling, for the steeper gradients, the other progressive, with a transition through marginal modes of detonation propagation, for the weaker gradients. We have proposed and validated criteria for detonation, based on the characteristic scales of the problem. We have demonstrated, for these monotonic distributions, the ability of numerical simulations with detailed schemes of chemical kinetics to represent our experimental observations, through a collaboration with Keio University. In the non-monotonic distributions, we have identified super-critical, critical and sub-critical behaviours, depending on whether the detonation is transmitted or not from the domain where the equivalence ratio decreases to that where it increases. In particular, we have identified the re-initiation conditions for a detonation that was quenched in the domain of decreasing equivalence ratio. Our study stresses the interest for future works to consider non-uniform distributions of mixtures comprising burnt gases and fresh reactants, and, consequently, non-uniform distributions of temperature. It also stresses the need for performing optical diagnoses and numerical capacities and for detailed schemes of chemical kinetics adapted to the high pressures and temperatures characterizing detonation dynamics.

Keywords : Detonation, non-uniform compositions, quenching, re-initiation, detonation engines

Table des matières

Notations	v
Introduction	1
Vue d'ensemble des détonations	1
Cadre et objectifs de l'étude	1
Le contexte Propulsion et détonation	2
Détonation et états initiaux non-uniformes	3
Plan du manuscrit	4
1 Descriptions de la détonation dans des compositions uniformes	5
1.1 Lois de bilan	7
1.2 La détonation vue comme une discontinuité totalement réactive	10
1.2.1 Le modèle Chapman–Jouguet	10
1.2.2 Écoulement des produits de détonation : détente de Taylor–Zel'dovich	13
1.3 Zone de réactions moyenne stationnaire de la détonation	16
1.3.1 Le modèle Zel'dovich–von Neumann–Döring plan	16
1.3.2 Le modèle Zel'dovich–von Neumann–Döring faiblement courbé	19
1.4 Structure réelle cellulaire de la détonation : instabilité locale et modes de propagation	20
1.4.1 Détonations multicellulaires	20
1.4.2 Détonations marginales et limites de propagation	23
1.5 Instabilités globales de la détonation : comportements dynamiques transitoires	26
2 Propagation de la détonation dans des compositions non-uniformes	29
2.1 Généralités	29
2.2 L'application à la propulsion	31
2.3 Gradient de composition normal	32
2.4 Gradient de composition parallèle	35
2.5 Position et apports de notre étude	40
3 Dispositif et protocole expérimentaux	43
3.1 Vue d'ensemble	43
3.1.1 Chambre d'étude	45
3.1.2 Tube d'amorçage	46

3.2	Génération des gradients de composition	47
3.3	Procédures d'injection et de mise à feu	49
3.4	Caractérisation des distributions de composition	51
3.4.1	Mesure de la concentration locale d'oxygène	51
3.4.2	Modélisation numérique du mécanisme de diffusion moléculaire	54
4	Techniques de mesure	59
4.1	Capteurs de pression dynamique	59
4.2	Enregistrements sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone	62
4.3	Visualisation par strioscopie	63
4.4	Spectroscopie par chimiluminescence	65
5	Dynamiques de la détonation dans des distributions monotones de richesse	67
5.1	Extinction brusque par découplage choc-flamme	69
5.2	Extinction progressive marginale	75
5.3	Présence d'un maximum de réactivité	82
5.4	Modélisation : critères d'extinction de la détonation	87
5.4.1	Calculs ZND et corrélations expérimentales	87
5.4.2	Extinction marginale	89
5.4.3	Extinction par découplage choc-flamme	89
5.5	Conclusion	92
6	Dynamiques de la détonation dans des distributions non-monotones de richesse	93
6.1	Transmission super-critique	95
6.2	Extinction sous-critique	98
6.3	Transmission critique	102
6.4	Analyse	109
6.5	Conclusion	112
7	Simulations numériques	113
7.1	Équations et schémas numériques	113
7.1.1	Systèmes d'équations	113
7.1.2	Schémas numériques	115
7.2	Représentation des conditions expérimentales	116
7.2.1	Géométrie et conditions aux limites	116
7.2.2	Conditions initiales	117
7.2.3	Reproduction des conditions d'amorçage	117

7.3	Résultats	119
7.3.1	Extinction brusque par découplage choc-flamme	120
7.3.2	Extinction progressive marginale	124
7.4	Conclusion	127
	Conclusion	129
	Annexe A Cinétique chimique détaillée	133
	Annexe B Détonation ZND faiblement courbée et sensibilité à la cinétique chimique	135
	Annexe C Circuit d'injection	155
	Annexe D Séquence de mise à feu	157
	Annexe E Propriétés de détonation des mélanges étudiés	159
	Bibliographie	161

Notations

Symboles latins

Symbole	Signification	Dimension	Unité SI
A	Constante de la loi d'Arrhenius	T^{-1}	s^{-1}
c	Célérité du son	LT^{-1}	m/s
c_p	Capacité calorifique spécifique à pression constante	$L^2T^{-2}\Theta^{-1}$	J/K/kg
c_v	Capacité calorifique spécifique à volume constant	$L^2T^{-2}\Theta^{-1}$	J/K/kg
C_i	Concentration molaire de l'espèce i	NL^{-3}	mol/m ³
D	Célérité de l'onde de détonation ou de choc	LT^{-1}	m/s
D_{diff}	Coefficient de diffusion moléculaire	L^2T^{-1}	m ² /s
d	Dimension transverse du confinement, ou largeur du domaine de calcul	L L	m m
d_{crit}	Diamètre critique de transmission	L	m
E	Énergie totale par unité de volume	$ML^{-1}T^{-2}$	J/m ³
e	Énergie interne spécifique	L^2T^{-2}	J/kg
E_a	Énergie d'activation	$ML^2T^{-2}N^{-1}$	J/mol
E_a^*	Énergie d'activation réduite	–	–
E_s	Énergie transmise par une source	$ML^{-\alpha}T^{-2}$	J/m ^{2$-\alpha$}
F	Vecteur des flux dans la direction x	–	–
Fo	Nombre de Fourier	–	–
G	Vecteur des flux dans la direction y	–	–
g	Échelle caractéristique de la détonation, ou variable générique	– –	– –
\mathbf{g}	Vecteur des variable indépendantes	–	–
h	Enthalpie spécifique, ou largeur et profondeur de la chambre d'étude	L^2T^{-2} L	J/kg m
I^-, I^+	Invariants de Riemann	LT^{-1}	m/s
k	Coefficients de corrélation	–	–
L	Longueur de la chambre d'étude, ou longueur du domaine de calcul	L L	m m
L_{cell}	Longueur moyenne des structures cellulaires	L	m
L_{driver}	Longueur de la section d'amorçage	L	m
LFL	Limite d'inflammabilité pauvre	–	–
$\ell_{1/2}$	Longueur de demi-réaction du modèle ZND	L	m
ℓ_c	Longueur chimique caractéristique du modèle ZND	L	m
ℓ_i	Longueur d'induction du modèle ZND	L	m
M	Nombre de Mach	–	–
\mathcal{M}	Masse molaire	MN^{-1}	kg/mol

Symbole	Signification	Dimension	Unité SI
m	Constante de la loi d'Arrhenius	—	—
m_{OH}^n	Masse instantanée de OH par unité de profondeur	ML^{-1}	kg/m
N_r	Nombre de réactions chimiques élémentaires	—	—
N_{sp}	Nombre d'espèces chimiques	—	—
n	Constante de la loi d'Arrhenius, ou nombre de moles, ou nombre de modes transverses	— N —	— mol —
P	Pression	$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$	Pa
Q_{p0}	Chaleur spécifique de réaction à pression constante	L^2T^{-2}	J/kg
Q_{v0}	Chaleur spécifique de réaction à volume constant	L^2T^{-2}	J/kg
R	Constante universelle des gaz, ou rayon de courbure et position du front d'onde	$\text{ML}^2\text{T}^{-2}\Theta^{-1}\text{N}^{-1}$ L —	J/K/mol m —
S	Vecteur des termes sources chimiques	—	—
s	Entropie spécifique	$\text{L}^2\text{T}^{-2}\Theta^{-1}$	J/K/kg
T	Température	Θ	K
t	Temps physique	T	s
t_c	Temps chimique caractéristique du modèle ZND	T	s
t_i	Temps d'induction du modèle ZND	T	s
U	Vecteur des variables conservatives	—	—
u	Vitesse matérielle dans le repère du Laboratoire	LT^{-1}	m/s
\mathbf{u}	Vecteur vitesse matérielle	LT^{-1}	m/s
u_p	Vitesse du piston	LT^{-1}	m/s
v	Volume spécifique	L^3M^{-1}	m^3/kg
w_i	Vitesse d'évolution des fractions massiques Y_i	T^{-1}	s^{-1}
\mathbf{w}	Vecteur des vitesses d'évolution w_i	T^{-1}	s^{-1}
X	Fraction volumique ou molaire	—	—
x	Abscisse longitudinale pour les modèles TZ et ZND, ou direction transverse de la chambre d'étude	L L	m m
y	Profondeur de la chambre d'étude,	L	m
Y	Degré d'avancement de la réaction chimique globale	—	—
Y_i	Fraction massique de l'espèce i	—	—
\mathbf{Y}	Vecteur des fraction massiques Y_i	—	—
Y_{OH}	Fraction massique de OH	—	—
Z	Abscisse adimensionnelle dans la chambre d'étude	—	—
z	Abscisse dans la chambre d'étude, ou distance au choc dans le modèle ZND	L L	m m
z_s	Position du front de choc	L	m

Symboles grecs

Symbole	Signification	Dimension	Unité SI
α	Index de la géométrie	—	—
β	Paramètre de dilution	—	—
γ	Rapport des capacités calorifiques	—	—
Δ	Pas de la grille de calcul,	L	m
Δt	Pas de temps	T	s
δ	Épaisseur de la couche de diffusion,	L	m
	épaisseur hydrodynamique	L	m
ζ	Abscisse théorique de la surface de séparation	L	m
η	Facteur de correction du coefficient de diffusion	—	—
κ	Courbure totale du front d'onde	L ⁻¹	m ⁻¹
λ	Largeur moyenne des structures cellulaires,	L	m
	longueur d'onde électromagnétique	L	m
μ	Décrément molaire	—	—
ν_{st}	Coefficient stœchiométrique molaire	N	mol
ξ	Variable de similitude de l'écoulement TZ	—	—
ρ	Masse volumique	ML ⁻³	kg/m ³
σ_i	Coefficient de thermicité de l'espèce i	—	—
σ	Vecteur des coefficients de thermicité σ_i	—	—
τ	Temps de diffusion moléculaire	T	s
τ_{inj}	Temps d'injection	T	s
ϕ	Richesse	—	—
$\dot{\omega}_i$	Taux de production molaire de l'espèce i	NL ⁻³ T ⁻¹	mol/m ³ /s
Ω_{OH}	Taux d'évolution nette de la masse de OH produite	T ⁻¹	s ⁻¹
$\nabla\phi_C$	Valeur critique du gradient de composition	L ⁻¹	m ⁻¹

Indices et exposants

$(\cdot)_*$	Condition normale ou de référence	$(\cdot)^n$	Relatif au pas de temps n
$(\cdot)_0$	État initial, état amont	$(\cdot)_{\text{num}}$	Relatif aux simulations numériques
$(\cdot)_1$	État aval	$(\cdot)_P$	Relatif aux produits
$(\cdot)^c$	Point thermodynamique critique	$(\cdot)_R$	Relatif aux réactifs
$(\cdot)^{\text{chambre}}$	Relatif à la chambre d'étude	$(\cdot)_S$	État relatif à une détonation forte
$(\cdot)_{\text{crit}}$	Condition critique	$(\cdot)^{\text{th}}$	Grandeur théorique
$(\cdot)_{\text{CJ}}$	État Chapman-Jouguet	$(\cdot)_{\text{tube}}$	Relatif au tube d'amorçage
$(\cdot)_{\text{exp}}$	Relatif aux expériences	$(\cdot)_W$	État relatif à une détonation faible
$(\cdot)_H$	État choqué dit de von Neumann	$(\cdot)_{\text{O}_2}, (\cdot)^{\text{O}_2}$	Relatif à l'oxygène O_2
$(\cdot)_i$	Relatif à l'espèce chimique i , relatif au capteur i	$(\cdot)_{\text{C}_2\text{H}_6}, (\cdot)^{\text{C}_2\text{H}_6}$	Relatif à l'éthane C_2H_6
$(\cdot)_i$	Relatif à la section (tube) d'amorçage	$(\cdot)_{\text{C}_3\text{H}_8}, (\cdot)^{\text{C}_3\text{H}_8}$	Relatif au propane C_3H_8
$(\cdot)_k$	Relatif à la réaction élémentaire k	$(\cdot)^{\text{C}_2\text{H}_6/\text{O}_2}$	Relatif au mélange $\text{C}_2\text{H}_6/\text{O}_2$
$(\cdot)_n$	Direction normale à la discontinuité	$(\cdot)^{\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2}$	Relatif au mélange $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$

Opérateurs

$\bar{\cdot}$	Opérateur Moyenne
$\Delta \cdot$	Opérateur Différence
$\delta \cdot$	Opérateur Différentiation infinitésimale, opérateur Incertitude absolue
$\nabla \cdot$	Opérateur Gradient
$\text{div} \cdot$	Opérateur Divergence
$d \cdot / dt$	Opérateur Dérivée matérielle
$\ \cdot\ $	Opérateur Norme

Abréviations

1D	Unidimensionnel
2D	Bidimensionnel
3D	Tridimensionnel
\mathcal{A}	Gaz receveur
CJ	Chapman-Jouguet
\mathcal{D}	Gaz donneur
\mathcal{H}	Hugoniot
HI	Haute Intensité
\mathcal{I}	Gaz inerte
JANNAF	<i>Joint Army-Navy-NASA-Air Force</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LFL	<i>Lower Flammability Limit</i>

MTS	<i>Multi-TimeScale</i>
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
PDE	<i>Pulsed Detonation Engine</i>
PPFa	Pauvre-Pauvre-Faible
PPFo	Pauvre-Pauvre-Fort
RANS	<i>Reynold Averaged Navier-Stokes</i>
RDE	<i>Rotating Detonation Engine</i>
\mathcal{RM}	Rayleigh-Michelson
RPFo	Riche-Pauvre-Fort
SWACER	<i>Shock Wave Amplification by Coherent Energy Release</i>
TDD	Transition Déflagration Détonation
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
TZ	Taylor-Zel'dovich
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
ZND	Zel'dovich-von Neumann-Döring

Introduction

Vue d'ensemble des détonations

La détonation et la déflagration sont les modes de propagation, respectivement supersonique et subsonique de la combustion (MALLARD et LE CHATELIER [1]). Ces phénomènes sont depuis longtemps étudiés dans le cadre de problématiques liées à la défense, à la sécurité industrielle et à la propulsion. Les pionniers des recherches dans ce domaine sont ABEL [2] pour les explosifs condensés (nitroglycérine, coton poudre, etc.), et BERTHELOT et VIEILLE [3] et DIXON [4] pour les mélange gazeux réactifs. Le phénomène de transition spontanée d'une déflagration vers une détonation a été identifié par MALLARD et LE CHATELIER [1] lors de recherches sur les coups de grisou dans les mines de charbon dont les conséquences humaines et matérielles étaient désastreuses dans le contexte social et économique du XIX^{ème} siècle.

Le premier modèle de détonation a été élaboré indépendamment par CHAPMAN [5] et JOUGUET [6]. Ce modèle décrit la détonation comme une discontinuité plane, totalement réactive et sonique. Il permet de déterminer les caractéristiques d'une détonation dans un mélange gazeux à partir de ses conditions initiales de composition, de pression et de température. ZEL'DOVICH [7] et TAYLOR [8] ont ensuite déterminé l'écoulement instationnaire des produits de combustion derrière une telle discontinuité. VIEILLE [9] a le premier présenté la structure d'une onde de détonation comme une onde de choc soutenue par une zone de réactions chimiques induites par ce choc. Cette description de l'onde a été formalisée dans un modèle unidimensionnel plan par ZEL'DOVICH [10], VON NEUMANN [11] et DÖRING [12] (ZND).

Cependant, DENISOV et TROSHIN [13] ont montré que la structure réelle de la détonation était tridimensionnelle et instationnaire, constituée de cellules. Depuis, de nombreuses études expérimentales ont dégagé des corrélations robustes entre la longueur chimique caractéristique associée à la zone de réactions moyenne de la description ZND et la largeur moyenne des cellules de détonation. De manière plus générale, les expériences ont aussi établi des corrélations entre cette largeur moyenne et les longueurs caractéristiques associées aux comportements dynamiques des détonations et, donc, des lois d'échelles utiles aux dimensionnements de dispositifs ou d'installations.

L'amélioration continue des techniques d'observation et de simulation numérique permet de progresser dans la description de ce phénomène complexe liant essentiellement l'hydrodynamique compressible et la cinétique chimique, et dont beaucoup d'aspects demeurent des sujets de recherche.

Cadre et objectifs de l'étude

Notre étude s'inscrit dans le cadre d'un projet de recherche global, la chaire industrielle CAPA (Combustion Alternative pour la Propulsion Aérobic), réunissant l'ANR, SAFRAN, MBDA-France, l'Institut Pprime (UPR3346 CNRS) et l'ISAE-ENSMA, qui vise à une meilleure description des modes de combustion à volume constant ou par détonation en vue de leur application à la propulsion. En effet, ils présentent un meilleur potentiel de rendement thermique que le mode de combustion à pression constante utilisé depuis de nombreuses années.

L'objectif spécifique de notre étude est ainsi de contribuer à améliorer la compréhension de la dynamique de la détonation dans des compositions non-uniformes idéalisant celles rencontrées dans des moteurs à détonations. Notre approche est de type fondamental : nous avons cherché à obtenir des comportements génériques à partir d'expériences simples. Ces dernières permettent donc de fournir, d'une part, une base de cas tests pour les simulations numériques de configurations réalistes et, d'autre part, des indications pratiques pour la conception des chambres de moteurs à détonations.

Le contexte Propulsion et détonation

L'idée d'utiliser la détonation comme mode de combustion dans les systèmes propulsifs aéronautiques et spatiaux date d'une soixantaine d'années. La détonation constitue, en effet, une alternative intéressante au régime de combustion subsonique, quasi-isobare actuellement employé dans les chambres de combustion classiques car les longueurs et les temps de réaction qui lui sont associés sont très courts, et le front de détonation génère par lui-même de très hautes pression et température, sans qu'il soit nécessaire d'adjoindre à la chambre un système de précompression du mélange combustible. On montre par exemple que l'énergie générée par une onde de détonation se propageant dans un prémélange d'air et de combustible en proportion stœchiométrique aux conditions ambiantes de température et de pression est de l'ordre de $1\text{-}10 \text{ GW/m}^2$ de surface d'onde. Des moteurs utilisant la détonation comme mode de combustion présentent donc le triple avantage d'une masse et d'un encombrement réduits, d'une plus grande simplicité et, donc, d'une robustesse et d'une fiabilité accrues.

Les deux principaux concepts de moteurs à détonations sont : (i) le moteur à détonations pulsées ou *Pulsed Detonation Engine* (PDE) et (ii) le moteur à détonations rotatives ou *Rotating Detonation Engine* (RDE) (Figures 1 et 2).

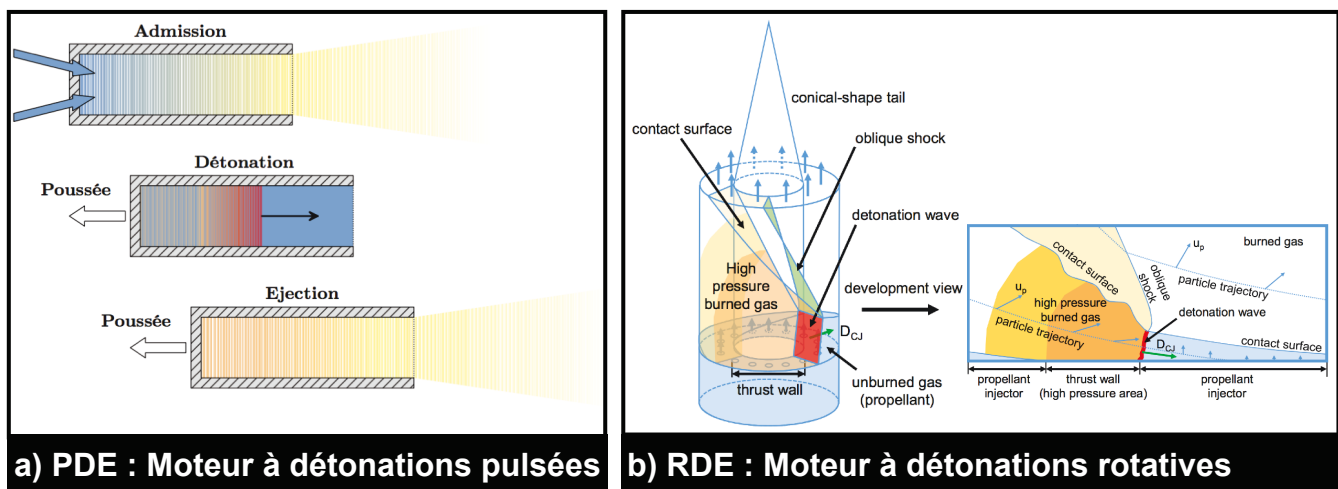


FIGURE 1 – Schémas de principe des concepts des moteurs à détonations a) pulsées et b) rotatives (ISHIHARA et al. [14]).

Depuis les études pionnières de NICHOLLS et al. [15, 16] et VOITSEKHOVSKII [17], ces concepts ont été étudiés dans de nombreux laboratoires de recherche ou industriels internationaux. Toutefois, ces études

sont trop souvent de type numérique alors qu'un certain nombre de phénomènes génériques demandent à être étudié expérimentalement et séparément, avant d'envisager une intégration de type moteur. En préalable à une possible rupture technologique, qui amènerait les moteurs à détonations à recevoir un développement industriel, il est nécessaire de mieux connaître, maîtriser et modéliser la détonation dans le contexte de la propulsion. De nombreux aspects fondamentaux (détonation en milieux non-uniformes, en chambres courbées, détonabilité des kérosènes et autres combustibles potentiels, etc.) et technologiques (initiations de détonations à partir d'une source de faible énergie, refroidissement des parois, bruits et vibrations, contrôles, etc.) doivent ainsi être étudiés [18–20]. Des revues et articles détaillant l'état de l'art, les différents concepts et les perspectives de développement et de démonstration des moteurs à détonations sont disponibles [18, 21–26].

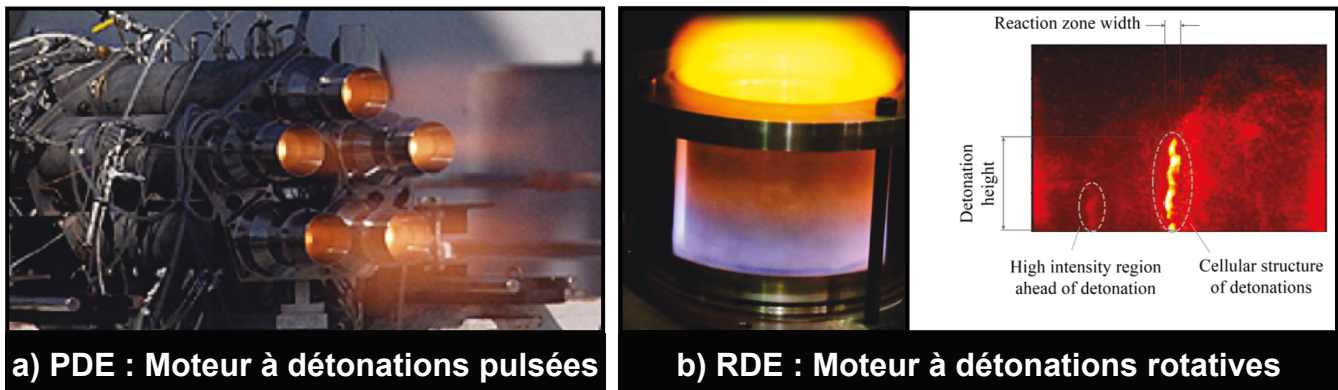


FIGURE 2 – Réalisations de chambres à détonations a) pulsées en configuration multi-tubes (©US NAVY) et b) rotatives (RANKIN et al. [27]).

Détonation et états initiaux non-uniformes

Une détonation peut être accidentelle ou intentionnelle. Les situations accidentelles sont par exemple celles de l'amorçage d'un mélange explosif formé dans une conduite industrielle ou lors d'une fuite d'un gaz combustible dans l'air. Les situations intentionnelles sont liées aux travaux de recherche et aux applications de défense et de propulsion, par exemple les moteurs à détonations. Dans beaucoup de ces situations, le mélange réactif n'est pas uniforme. Dans le cadre applicatif de la sécurité industrielle, le nuage explosif résultant d'une fuite de combustible présente des non-uniformités de composition, avec une richesse (concentration en combustible) plus élevée au voisinage de la fuite. Le principe de la mitigation d'une détonation accidentelle par décharge d'un gaz inerte ou d'un brouillard d'eau consiste à générer un domaine de composition non-uniforme qui assure l'extinction de la détonation. Dans le cadre applicatif des moteurs à détonations, l'injection des réactifs est réalisée séparément, pour des raisons de sécurité. Au cours du fonctionnement, le temps caractéristique de mélange entre le combustible et l'oxydant est plus long que le temps caractéristique de parcours d'une détonation. Le mélange des gaz frais et des résidus des produits de la détonation du cycle précédent constitue également une cause de non-uniformité de composition. Le mélange imparfait de combustible et d'oxydant et sa pollution par des gaz brûlés, peuvent agir comme des gaz inertes, et sont considérés comme en partie responsable du déficit de performances constaté entre les mesures et les modèles [28].

Plan du mémoire

Ce mémoire est organisé en sept chapitres. Le Chapitre 1 présente la phénoménologie de la détonation dans les gaz. Il décrit successivement les modèles de base de la détonation, ses instabilités locales et globales et les paramètres dynamiques associés. Le Chapitre 2 présente une revue bibliographique sur la propagation des détonations dans des compositions non-uniformes ; une section est dédiée au contexte applicatif de la propulsion par détonation. Les Chapitres 3 et 4 présentent l'installation expérimentale conçue et réalisée au cours de cette thèse et les techniques de mesures mises en œuvre. Le Chapitre 5 résume les résultats expérimentaux obtenus pour des distributions de richesse monotones et présente les critères d'extinction de la détonation que nous en avons déduit. Le Chapitre 6 présente les résultats expérimentaux obtenus pour des distributions de richesse non-monotones et propose une analyse phénoménologique dans le cadre général de celles des situations transitoires de propagation de détonations dans des compositions uniformes. Le Chapitre 7 présente les simulations numériques réalisées dans le cadre de la collaboration scientifique que nous avons engagée en cours de thèse avec le Professeur AKIKO MATSUO et M. TAKUYA MATSUMOTO (Université Keio, Yokohama, Japon).

Chapitre 1

Descriptions de la détonation dans des compositions uniformes

Sommaire

1.1	Lois de bilan	7
1.2	La détonation vue comme une discontinuité totalement réactive	10
1.2.1	Le modèle Chapman–Jouguet	10
1.2.2	Écoulement des produits de détonation : détente de Taylor–Zel’dovich	13
1.3	Zone de réactions moyenne stationnaire de la détonation	16
1.3.1	Le modèle Zel’dovich–von Neumann–Döring plan	16
1.3.2	Le modèle Zel’dovich–von Neumann–Döring faiblement courbé	19
1.4	Structure réelle cellulaire de la détonation : instabilité locale et modes de propagation	20
1.4.1	Détonations multicellulaires	20
1.4.2	Détonations marginales et limites de propagation	23
1.5	Instabilités globales de la détonation : comportements dynamiques transitoires	26

Plusieurs descriptions de la détonation sont possibles selon la phénoménologie à restituer. Cependant, en moyenne, la détonation peut être vue comme une onde de combustion supersonique constituée d’un choc soutenu par une zone de réactions chimiques. Loin des limites de propagation, la détonation se propage de manière autonome. Ce régime est celui pour lequel le domaine de dépendance du choc est essentiellement limité à la zone de dégagement d’énergie chimique avec un blocage sonique vers la fin de la zone de réactions. Dans le modèle Chapman-Jouguet (CJ), l’épaisseur chimique est négligée et la détonation est donc décrite comme une discontinuité plane, totalement réactive et sonique (§1.2.1). Ce modèle donne donc la célérité D_{CJ} et les propriétés en fin de zone de réactions de la détonation autonome plane (P_{CJ} , T_{CJ} , etc.). Le modèle Taylor-Zel’dovich (TZ) inclut le précédent et décrit l’écoulement instationnaire unidimensionnel plan des produits au-delà de la zone de réactions (§1.2.2). Le modèle Zel’dovich-Von Neumann-Döring (ZND) complète celui de Chapman-Jouguet en considérant une zone de réactions stationnaire unidimensionnelle d’épaisseur non-nulle (Sect. 1.3). Il conduit donc aux profils et aux évolutions des variables de l’écoulement dans la zone de réactions et, donc, à des longueurs et temps chimiques caractéristiques. Les propriétés CJ sont obtenues par calculs thermo-chimiques, elles ne dépendent que de la composition des produits à l’équilibre chimique (du “contenu énergétique”), de la température et de la pression initiale de la composition étudiée. Les profils et les évolutions ZND de pression, de température, etc., dans la zone de réactions sont obtenus par résolution des lois de bilan unidimensionnelles stationnaires couplées à un schéma de cinétique

chimique. Cependant, la grande sensibilité des taux de réactions à de petites fluctuations de température entraînent l'instabilité de la zone de réactions du modèle ZND. Les expériences montrent ainsi que le front de détonation possède une structure tridimensionnelle complexe constituée d'ondes de choc et de combustion à propagations transversale et longitudinale (Sect. 1.4). Le mouvement des points triples, lieux d'interaction de ces ondes longitudinales et transversales, dessine des motifs en forme de losange appelés cellules dont la largeur moyenne λ est proportionnelle à une longueur chimique ℓ_c caractéristique de la zone de réactions ZND. Il est communément admis que la capacité d'un mélange à accepter le régime de détonation pour des conditions données de composition, de température et de pression initiales est déterminée par la largeur de cellule relativement à la dimension transversale représentative du système dans lequel on souhaite installer le régime de détonation. Fondamentalement, les modèles CJ et ZND décrivent les propriétés moyennes de la détonation réelle, dite multi-fronts ou multicellulaire, c'est-à-dire d'une détonation se propageant dans des conditions géométriques ou de confinement qui permettent la présence d'un nombre suffisant de cellules sur le front. Il n'existe actuellement aucune façon de déterminer par calcul ou par simulation des largeurs de cellules fiables : les résultats sont très dépendants du schéma de cinétique chimique, de la qualité des algorithmes numériques et de la finesse des maillages, et les temps de calculs pour des résolutions suffisantes restent très longs. Par ailleurs, les schémas de cinétique chimique détaillés pour les niveaux élevés de température et de pression pour les domaines de fonctionnement d'une détonation restent très mal connus. Ainsi, les longueurs chimiques caractéristiques ZND, donc les largeurs de cellules, et, de manière générale, les longueurs caractéristiques de la dynamique de la détonation, restent très sensibles au choix du schéma cinétique. Une loi globale de dégagement d'énergie de type Arrhenius avec une énergie d'activation réduite suffisamment élevée permet de restituer certains comportements dynamiques de la détonation à un moindre coût de calcul mais un étalonnage préalable des constantes de la loi à partir de résultats expérimentaux est nécessaire. Le domaine thermodynamique de validité de cet étalonnage est par ailleurs limité. À ce jour, la capacité d'un mélange à accepter le régime de détonation dans un système donné ne peut donc être appréciée qu'à partir d'expériences menées dans des conditions géométriques similaires à celles de l'application envisagée. En effet, les comportements dynamiques des détonations apparaissent auto-semblables par rapport à la largeur moyenne de la cellule. On cherche donc à réaliser des expériences dans des conditions de température et de pression initiales adaptées de manière à établir des lois d'échelle permettant d'anticiper ces comportements par extrapolation à des conditions proches de l'application.

Dans ce chapitre, nous décrivons d'abord les lois de bilan des fluides parfaits compressibles, réactifs ou non (Sect. 1.1), base commune des modélisations et des simulations de la dynamique des détonations. Nous présentons ensuite les modèles de détonation moyenne CJ (§1.2.1), TZ (§1.2.2), ZND plan (§1.3.1) et faiblement courbé (§1.3.2). Nous donnons enfin un résumé de la phénoménologie des détonations multicellulaires (§1.4.1), de leurs comportements aux limites de propagation (§1.4.2) et des dynamiques observées lors des amorçages ou des extinctions (Sect. 1.5).

1.1 Lois de bilan

Les phénomènes de détonation sont en général suffisamment rapides pour considérer que le fluide est non visqueux et non conducteur de la chaleur (fluide parfait). Les écoulements compressibles d'un tel fluide, réactif ou non, sont donc adiabatiques. Les lois du mouvement sont alors données par les équations d'Euler pour les bilans de masse (1.1) et de quantité de mouvement (1.2) et par le Premier Principe de la Thermodynamique (1.3) pour le bilan d'énergie. Ces bilans sont fermés en se donnant les formes fonctionnelles e et \mathbf{w} de l'équation d'état du fluide réactif (1.4) et des lois de cinétique chimique (1.5). Nous avons ainsi le système complet :

$$\frac{dv}{dt} - v \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + v \nabla P = 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{de}{dt} + P \frac{dv}{dt} = 0 \quad (1.3)$$

$$e = e(P, v, \mathbf{Y}) \quad (1.4)$$

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{w}(P, v, \mathbf{Y}) \quad (1.5)$$

où $dg/dt = \partial g/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla g$ désigne la dérivée matérielle d'une quantité g , t le temps, \mathbf{u} le vecteur vitesse matérielle, P la pression, v et e le volume et l'énergie interne spécifiques et $\mathbf{Y} = (Y_i)$, $i = 1, N_{\text{sp}}$ le vecteur des fractions massiques Y_i des N_{sp} espèces chimiques. Le vecteur $\mathbf{w} = (w_i = dY_i/dt)$ représente les vitesses d'évolution w_i des fractions massiques Y_i . Le lien entre les vitesses d'évolution w_i et celles habituellement employées en cinétique chimique est donné en Annexe A. Les équations (1.1) à (1.5) constituent un système de $5 + N_{\text{sp}}$ équations à $5 + N_{\text{sp}}$ inconnues indépendantes $\left(\sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} Y_i = 1\right)$.

De manière à présenter synthétiquement les bases de la détonation, il est commode de s'appuyer sur le modèle minimal classique pour lequel les lois de comportement (1.4) et (1.5) sont relatives à un mélange à deux composants, les réactifs (indice R) et les produits (indice P), liés par la réaction globale de transformation chimique :



avec comme vitesse d'évolution une loi d'Arrhenius, par exemple :

$$w = \frac{dY}{dt} = A \left(\frac{\rho}{\rho_*}\right)^n (1 - Y)^m e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (1.7)$$

où le scalaire Y , ici choisi comme la fraction massique des produits dans le mélange, est le degré d'avancement de la réaction, ρ la masse volumique du mélange ($\rho = 1/v$) et T sa température. A est une constante homogène à l'inverse d'un temps, ρ_* une masse volumique de référence, n et m des nombres sans dimension, E_a l'énergie d'activation de la réaction globale (1.6) et $R = 8.314 \text{ J/K/mol}$ la constante universelle des gaz.

Pour un mélange idéal de deux gaz parfaits à l'équilibre mécanique et thermique, la température T est donnée par :

$$T = \mathcal{M} \frac{Pv}{R} \quad (1.8)$$

$$\frac{1}{\mathcal{M}} = \frac{1-Y}{\mathcal{M}_R} + \frac{Y}{\mathcal{M}_P} \quad (1.9)$$

où \mathcal{M} est la masse molaire du mélange, \mathcal{M}_R et \mathcal{M}_P celles des réactifs et des produits. Si les deux gaz sont idéaux, leurs capacités calorifiques sont constantes, et l'intégration des différentielles thermodynamiques $de_R = c_{vR}dT$ et $de_P = c_{vP}dT$ définit l'équation d'état (1.4) de leur mélange par :

$$e(T, Y) = e_0 + c_v(T - T_0) - YQ_{v0} \quad (1.10)$$

$$c_v(Y) = Yc_{vP} + (1 - Y)c_{vR} \quad (1.11)$$

$$e(P, v, Y) = e_0 + \frac{Pv - (1 + \mu Y)P_0v_0}{\gamma - 1} - YQ_{v0} \quad (1.12)$$

soit, avec l'enthalpie spécifique $h = e + Pv$:

$$h(T, Y) = h_0 + c_p(T - T_0) - YQ_{p0} \quad (1.13)$$

$$c_p(Y) = Yc_{pP} + (1 - Y)c_{pR} \quad (1.14)$$

$$h(P, v, Y) = h_0 + \frac{\gamma(Pv - (1 + \mu Y)P_0v_0)}{\gamma - 1} - YQ_{p0} \quad (1.15)$$

où c_{vR} , c_{vP} , c_{pR} et c_{pP} sont les capacités calorifiques spécifiques à volume constant et à pression constante des réactifs et des produits, c_p et c_v celles de leur mélange, $\gamma(Y) = c_p/c_v$ leur rapport et μ l'incrément molaire. Ces deux grandeurs sont ici données par :

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{(1 - Y)c_{pR} + Yc_{pP}}{(1 - Y)c_{vR} + Yc_{vP}} \\ &= \frac{(1 - Y)\frac{\gamma_R}{\gamma_R - 1} + Y(1 + \mu)\frac{\gamma_P}{\gamma_P - 1}}{(1 - Y)\frac{1}{\gamma_R - 1} + Y(1 + \mu)\frac{1}{\gamma_P - 1}} \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\mu = \frac{\mathcal{M}_R}{\mathcal{M}_P} - 1 = \frac{n_P}{n_R} - 1 \quad (1.17)$$

où $\gamma_R = c_{pR}/c_{vR}$, $\gamma_P = c_{pP}/c_{vP}$ et n_P et n_R désignent le nombre de moles initial des réactifs et le nombre de moles final des produits. La quantité Q_{v0} (resp. Q_{p0}) est la chaleur spécifique de réaction à volume (resp. pression) constant(e), soit la différence entre l'énergie interne (resp. l'enthalpie) spécifique des réactifs et celle des produits ramenée à la pression et à la température initiales, P_0 et T_0 , des réactifs. Ces chaleurs sont liées par la relation :

$$Q_{v0} = Q_{p0} + \mu P_0v_0 \quad (1.18)$$

L'indice 0 désigne l'état initial effectif du mélange à la température T_0 et à la pression P_0 , non nécessairement l'état de référence thermodynamique conventionnel, soit 273 K et 1 atm.

Le système des équations (1.1, 1.2 et 1.3) admet des solutions continues par morceaux. Il existe trois types de discontinuités pour un fluide parfait compressible :

- la ligne de glissement : continuité de la pression et de la direction de la vitesse matérielle.
- la discontinuité faible : saut des dérivées, avec continuité des variables.
- la discontinuité forte, plus communément appelé choc : saut de toutes les variables.

Pour le cas du choc, les lois de bilan (1.1, 1.2 et 1.3) conduisent aux contraintes locales (c'est-à-dire en chaque point de la surface de discontinuité) :

$$\rho_1 (D_n - u_{n1}) = \rho_0 (D_n - u_{n0}) \quad (1.19)$$

$$P_1 + \rho_1 (D_n - u_{n1})^2 = P_0 + \rho_0 (D_n - u_{n0})^2 \quad (1.20)$$

$$e_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{1}{2} (D_n - u_{n1})^2 = e_0 + \frac{P_0}{\rho_0} + \frac{1}{2} (D_n - u_{n0})^2 \quad (1.21)$$

aussi appelées relations de saut ou relations de Rankine-Hugoniot, où l'indice n désigne la direction normale à la surface du choc, les indices 0 et 1 désignent les états limites de part et d'autre du choc de célérité normale D_n . Les composantes tangentiels de la vitesse matérielle \mathbf{u} sont continues.

1.2 La détonation vue comme une discontinuité totalement réactive

1.2.1 Le modèle Chapman–Jouguet

CHAPMAN [5] et JOUGUET [6] ont proposé indépendamment le premier modèle de front de détonation. Le front est décrit comme une discontinuité hydrodynamique, plane et totalement réactive qui sépare les gaz frais des gaz brûlés à l'équilibre chimique. La détonation de Chapman-Jouguet (CJ) est celle dont la célérité D est égale à celle des perturbations acoustiques $u + c$ dans les gaz brûlés immédiatement derrière la discontinuité, soit :

$$u_{\text{CJ}} + c_{\text{CJ}} = D_{\text{CJ}} \quad (1.22)$$

avec u la vitesse des gaz brûlés dans le repère du Laboratoire et c la vitesse du son dans les gaz brûlés. Cette condition CJ exprime l'autonomie du front, c'est-à-dire son indépendance par rapport aux perturbations remontant de l'écoulement aval vers le front.

Le modèle peut être décrit à partir des relations de Rankine-Hugoniot (eqs. 1.19, 1.20 et 1.21, Sect. 1.1) qui, pour une discontinuité, réactive ou non, se propageant dans un milieu au repos ($u_0 = 0$ m/s), sont :

$$\rho_1 (D - u_1) = \rho_0 D \quad (1.23)$$

$$P_1 + \rho_1 (D - u_1)^2 = P_0 + \rho_0 D^2 \quad (1.24)$$

$$e_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{1}{2} (D - u_1)^2 = e_0 + \frac{P_0}{\rho_0} + \frac{1}{2} D^2 \quad (1.25)$$

L'indice 0 désigne l'état initial ("amont") et l'indice 1 celui immédiatement derrière la discontinuité ("aval"). Pour simplifier les notations, nous utiliserons maintenant les indices 0 et 1 à la place des indices R et P désignant jusqu'ici les réactifs et les produits (par exemple, $\gamma_0 = \gamma_{\text{R}}$, $\gamma_1 = \gamma_{\text{P}}$). Ce système doit être complété par l'équation d'état du milieu derrière la discontinuité (Sect. 1.1) :

$$e = e(P, v) \quad (1.26)$$

Pour le gaz idéal de composition invariante ($Y = 0$), (1.26) devient :

$$e(T) = c_{v0}T, \quad e(P, v) = \frac{Pv}{\gamma_0 - 1} \quad (1.27)$$

Pour le gaz idéal ayant subi une combustion complète ($Y = 1$), par exemple derrière une discontinuité totalement réactive, (1.26) est l'équation d'état des produits à l'équilibre chimique :

$$e(T) = e_0 + c_v(T - T_0) - Q_{v0}, \quad e(P, v) = e_0 + \frac{Pv - (1 + \mu)P_0v_0}{\gamma_1 - 1} - Q_{v0} \quad (1.28)$$

Pour être fermé, le système des équations de bilan et de l'équation d'état (eqs. 1.23 à 1.26) doit être complété par une relation supplémentaire exprimant le lien entre l'état derrière la discontinuité et une condition à la limite dans l'écoulement aval. La nécessité d'une contrainte de fermeture traduit le fait que la dynamique d'une discontinuité physique résulte des contraintes imposées par l'écoulement aval et dont l'état 1 représente la limite. Aucune information sur cette dynamique ne peut être obtenue de manière

locale, c'est-à-dire indépendamment de la résolution conjointe de l'écoulement aval. Cette impossibilité de détermination locale est associée à la condition supersonique-subsonique :

$$u_0 + c_0 < D < u_1 + c_1 \quad (1.29)$$

qui exprime que toute perturbation de l'écoulement aval influera sur la dynamique de la discontinuité. En l'absence de relation supplémentaire, la solution au système (1.23) à (1.26) est une famille à un paramètre (e.g. la célérité D). L'exception est celle de la discontinuité plane et totalement réactive pour laquelle la condition de sonicité aval (1.22) peut être réalisée. L'état CJ et la célérité de l'onde associée sont ainsi calculables a priori et, de manière générale, ne dépendent que de l'état initial (P_0, T_0) et de l'équation d'état des produits. Par exemple, la célérité de détonation CJ pour le gaz idéal (1.28) est donnée par l'expression exacte :

$$D_{\text{CJ}} = D_* \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{\gamma_1}{\gamma_0} \left(\frac{c_0}{D_*} \right)^2} \right) \quad (1.30)$$

$$D_*^2 = 2(\gamma_1^2 - 1) Q_{p0} \times \left(1 + \mu \frac{\gamma_1/\gamma_0}{\gamma_1 - 1} \frac{c_0^2}{Q_{p0}} \right) \quad (1.31)$$

Nous soulignons que D_{CJ} et l'état CJ sont indépendants de γ_0 : sa présence dans (1.30) et (1.31) est artificielle puisque $c_0^2 = \gamma_0 P_0 v_0 = \gamma_0 R T_0 / \mathcal{M}_0$. Dans l'approximation commode de la discontinuité "forte" $(c_0/D_{\text{CJ}})^2 \ll 1$, la solution (CJ) s'écrit :

$$D_{\text{CJ}} \simeq \sqrt{2(\gamma_1^2 - 1) Q_{p0}}, \quad \frac{v_0 P_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}^2} \simeq \frac{u_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}} \simeq \frac{1}{\gamma_1 + 1}, \quad \frac{v_{\text{CJ}}}{v_0} \simeq \frac{c_{\text{CJ}}}{D_{\text{CJ}}} \simeq \frac{\gamma_1}{\gamma_1 + 1} \quad (1.32)$$

Les relations de Rankine-Hugoniot (1.23, 1.24 et 1.25) peuvent être réécrites sous diverses formes. Par exemple, en éliminant la vitesse matérielle u_1 entre les bilans de masse (1.23) et de quantité de mouvement (1.24), on obtient l'équation de la droite de Rayleigh-Michelson (\mathcal{RM}) (1.33), et, en éliminant u_1 et la célérité du front D du bilan d'énergie (1.25), à l'aide de (1.23) et (1.24), on obtient la relation d'Hugoniot (1.34), soit :

$$P_1 = P_{\text{R}}(v, P_0, v_0) = P_0 + \rho_0^2 D^2 (v_0 - v) \quad (1.33)$$

$$e_1(v, P_0, v_0) = e_0 + \frac{1}{2} (P_1 + P_0) (v_0 - v) \quad (1.34)$$

Puis, en éliminant l'énergie interne entre la relation d'Hugoniot (1.34) et l'équation d'état (1.26) on obtient l'équation de la polaire d'Hugoniot (\mathcal{H}) (appelée courbe de Crussard pour le cas des discontinuités totalement réactives), soit :

$$P_1 = P_{\text{H}}(v, P_0, v_0) \quad (1.35)$$

Pour le gaz idéal (eqs. 1.27 et 1.28), l'équation de la polaire (\mathcal{H}) s'écrit :

$$P_1 = P_H(v, P_0, v_0) = P_0 \times \frac{1 - \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \frac{v}{v_0}}{\frac{v}{v_0} - \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1}} \quad (1.36)$$

$$\text{ou } P_1 = P_H(v, P_0, v_0) = P_0 \times \frac{1 - \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \frac{v}{v_0} + 2 \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \frac{Q_{p0}}{P_0 v_0} \left[1 + \mu \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \frac{P_0 v_0}{Q_{p0}} \right]}{\frac{v}{v_0} - \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1}} \quad (1.37)$$

selon que la discontinuité est inerte ($Q_{p0} = 0$ et $\mu = 0$, eq. 1.36) ou totalement réactive ($Q_{p0} \neq 0$ et $\mu \neq 0$, eq. 1.37), respectivement. La solution à un paramètre (e.g. la célérité D) au système des équations (1.33) et (1.35) peut alors être représentée dans le plan ($P - v$) par l'intersection, si elle existe, de la droite de Rayleigh-Michelson ($\mathcal{R}\mathcal{M}$) et de la polaire d'Hugoniot (\mathcal{H}) (Figure 1.1).

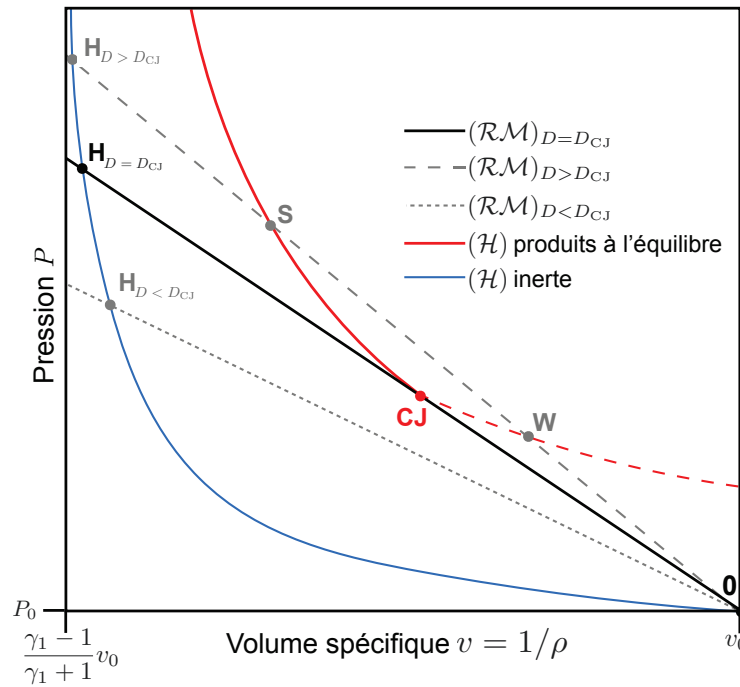


FIGURE 1.1 – Représentation dans le plan ($P-v$) des droites de Rayleigh-Michelson ($\mathcal{R}\mathcal{M}$) et des polaires d'Hugoniot (\mathcal{H}) inerte et des produits à l'équilibre (Crussard). Le pôle 0 correspond à l'état initial amont, les points H_D aux solutions dans le cas où la discontinuité est une onde de choc inerte de célérité D , les points S , W et CJ aux solutions forte, faible et de Chapman-Jouguet dans le cas où la discontinuité est totalement réactive.

Pour les discontinuités inertes ($Q_{p0} = 0$ et $\mu = 0$), il existe une solution H unique au système des équations (1.33) et (1.36), c'est-à-dire, une seule intersection de ($\mathcal{R}\mathcal{M}$) et (\mathcal{H}), quelle que soit la valeur de D . Pour le gaz idéal, cette solution H est donnée par :

$$\frac{v_0 P_H}{D^2} \simeq \frac{u_H}{D} \simeq \frac{2}{\gamma_0 + 1}, \quad \frac{v_H}{v_0} \simeq \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0 + 1} \left(1 + \frac{2M_0^{-2}}{\gamma_0 - 1} \right) \quad (1.38)$$

$$\frac{RT_H}{\mathcal{M}D^2} \simeq 2 \frac{\gamma_0 - 1}{(\gamma_0 + 1)^2} \left(1 + \frac{2M_0^{-2}}{\gamma_0 - 1} \right), \quad M_0 = \frac{D}{c_0} \quad (1.39)$$

Pour les discontinuités totalement réactives ($Q_p^0 \neq 0$ et $\mu \neq 0$), il peut exister aucune, une ou deux intersection(s) de (\mathcal{RM}) et de (\mathcal{H}) , selon la valeur de D :

- Pour $D < D_{\text{CJ}}$, il n'y a pas d'intersection de (\mathcal{RM}) et (\mathcal{H}) et donc pas de solution.
- Pour $D > D_{\text{CJ}}$, il y a deux intersections de (\mathcal{RM}) et (\mathcal{H}) et donc deux solutions, l'une S forte, subsonique aval ($D < u_S + c_S$), l'autre W faible, supersonique aval ($u_W + c_W < D$). Seule la solution S, pour laquelle la discontinuité est subsonique par rapport à l'état 1, est donc physique (1.29) :

$$\frac{v_0 P_S}{D^2} \simeq \frac{u_S}{D} \simeq \frac{1 + \Delta(D)}{\gamma_1 + 1}, \quad \frac{v_S}{v_0} \simeq \frac{\gamma_1 - \Delta(D)}{\gamma_1 + 1}, \quad \Delta(D) = \sqrt{1 - \left(\frac{D_{\text{CJ}}}{D}\right)^2} \quad (1.40)$$

où D/D_{CJ} est appelé degré de force de la détonation. On retrouve la solution CJ (1.32) pour $D \rightarrow D_{\text{CJ}}$ ($\Delta \rightarrow 0$). La situation limite pour laquelle les solutions S et W sont confondues est celle pour laquelle (\mathcal{RM}) et (\mathcal{H}) sont tangentes. La détonation associée est sonique ($u_{\text{CJ}} + c_{\text{CJ}} = D_{\text{CJ}}$). Elle est la discontinuité plane totalement réactive la plus lente. Pour des degrés de force infinis ($D_{\text{CJ}}/D \rightarrow 0, \Delta=0$), on retrouve la solution H du choc inerte ($Q_{p0} = 0$, eqs. 1.38 et 1.39). De fait les Hugoniots non-réactive (eq. 1.36) et réactive (eq. 1.37) ont la même asymptote verticale quand le rapport de compression v/v_0 approche la limite $v_{\text{lim}}/v_0 = (\gamma_1 - 1)/(\gamma_1 + 1)$ par valeurs supérieures (Figure 1.1). Ainsi, les points H et S situés sur une même droite (\mathcal{RM}) tendent à se confondre à mesure que la célérité D croît. Il y a donc peu de différence entre les propriétés d'une détonation très surcomprimée ($D \gg D_{\text{CJ}}$) et celles d'un choc inerte de même célérité D .

Il existe de nombreux codes de calcul résolvant les lois de bilan pour les transformations adiabatiques simples ($P = \text{const.}$, $v = \text{const.}$, $s = \text{const.}$, etc.) et les discontinuités inertes ou totalement réactives conjointement avec des équations d'état réalistes, prenant en particulier en compte la dépendance de c_p et c_v avec la composition et la température. Pour notre part, nous avons utilisé le code STANJAN [29] pour calculer les propriétés sous choc et CJ des compositions de cette étude (Annexe E).

1.2.2 Écoulement des produits de détonation : détente de Taylor–Zel'dovich

L'écoulement instationnaire des produits derrière un front de détonation CJ a été décrit indépendamment pour la première fois par ZEL'DOVICH [7] et TAYLOR [8]. L'écoulement derrière un front plan de célérité constante est homentropique (entropie uniforme) : toutes les trajectoires matérielles transportent la même entropie, égale à celle déterminée par l'état constant derrière le front. La méthode des caractéristiques (COURANT et FRIEDRICHS [30]) conduit alors à observer que l'écoulement est du type à ondes simples : toutes les trajectoires acoustiques issues de la détonation (les C^-) transportent le même invariant de Riemann $I^- = u - 2c/(\gamma - 1)$ et, donc, celles de même sens de propagation que la détonation (les C^+) sont des droites (Figure 1.2). Ceci implique :

- d'une part, qu'une discontinuité plane de célérité constante est nécessairement sonique ($(u + c)_{\text{CJ}} = D_{\text{CJ}}$) si elle est suivie d'un écoulement non constant ; on retrouve ainsi la condition CJ (1.22),
- d'autre part, que cet écoulement est alors auto-semblable avec pour variable de similitude :

$$\xi = \frac{x}{D_{\text{CJ}} t} \quad (1.41)$$

avec x la position dans le repère du Laboratoire et t le temps.

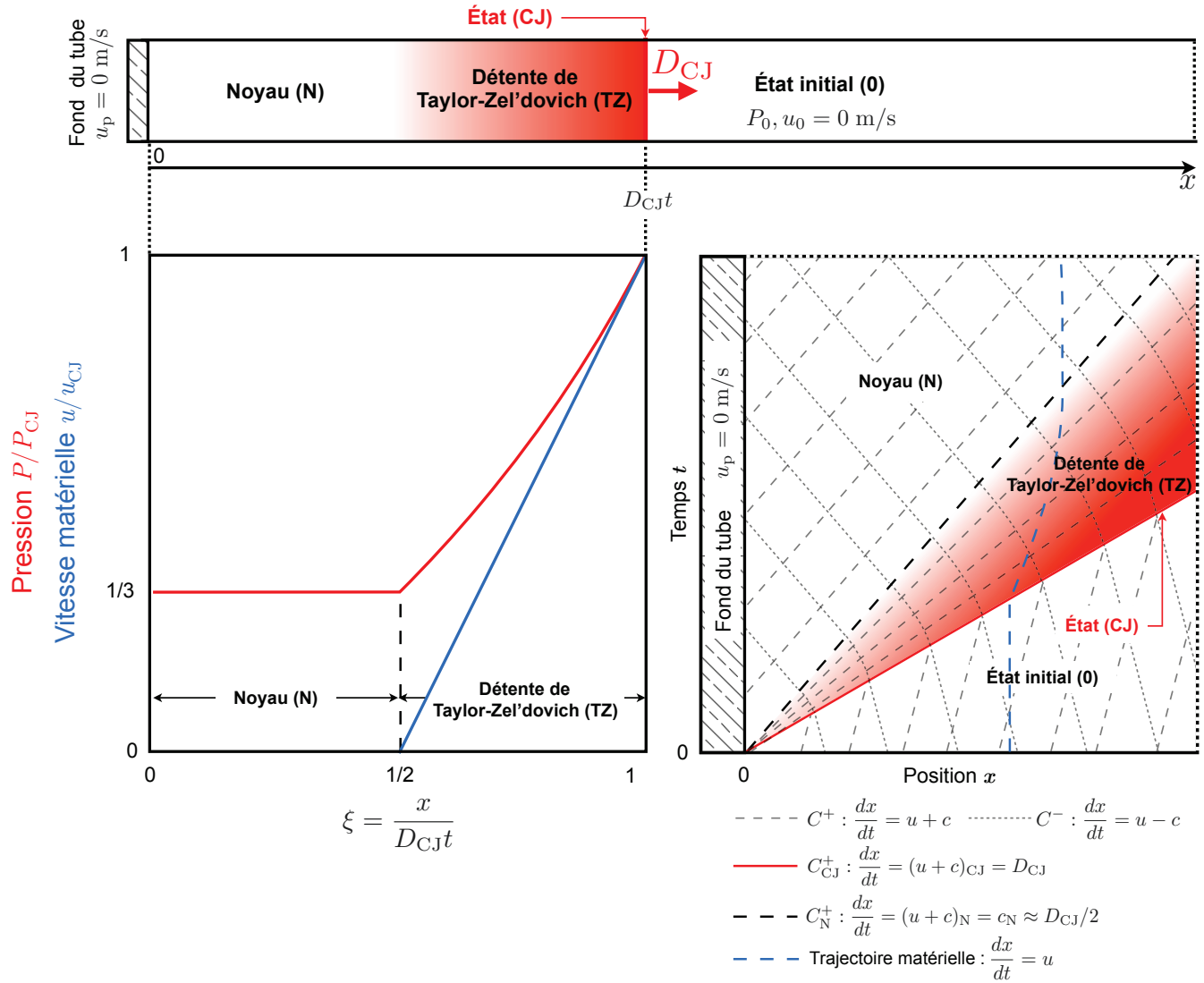


FIGURE 1.2 – Solution de Taylor-Zel'dovich de l'écoulement des produits derrière une détonation CJ dans le cas d'un tube semi-infini à fond rigide fermé.

Pour le gaz idéal, cette solution auto-semblable, dite de Taylor-Zel'dovich (TZ), s'écrit

$$\frac{u(\xi)}{D_{CJ}} = \frac{1}{\gamma_1 + 1} (2\xi - (\gamma_1 - 1) I^-), \quad \frac{c(\xi)}{D_{CJ}} = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} (\xi + I^-) \quad (1.42)$$

$$\frac{P(\xi)}{P_{CJ}} = \left(\frac{c(\xi)}{c_{CJ}} \right)^{\frac{2}{\gamma_1 - 1}}, \quad \frac{v(\xi)}{v_{CJ}} = \left(\frac{c(\xi)}{c_{CJ}} \right)^{\frac{2}{1 - \gamma_1}} \quad (1.43)$$

$$I^- = \frac{1 + \left(\frac{c_0}{D_{CJ}} \right)^2}{\gamma_1 - 1}, \quad I^+(\xi) = \frac{4\xi + (3 - \gamma_1) I^-}{\gamma_1 - 1} \quad (1.44)$$

où $I^+ = u + 2c/(\gamma - 1)$ est l'invariant de Riemann transporté par une C^+ . On observe qu'au front ($\xi = 1$), l'état est celui associé à la détonation sonique CJ ($g(\xi = 1) = g_{CJ}$, eqs. 1.32). La solution (TZ) décrit la détente des produits de la détonation CJ derrière le front. Cependant, son domaine d'application est

borné car il faut en effet la raccorder à celle imposée par les conditions aux limites avalées, équivalentes à un piston de vitesse u_p constante. Dans le cas particulier d'un tube semi-infini à fond rigide fermé ($u_p = 0$), l'équation (1.42, gauche) indique que la limite du domaine d'état constant (N, aussi appelé noyau) et du domaine auto-semblable (TZ) se trouve à l'abscisse $\xi_N \approx \frac{1}{2}$ (avec $(c_0/D_{CJ})^2 \ll 1$), c'est-à-dire à la moitié de la distance entre le fond du tube et le front de détonation. En reportant ξ_N dans (1.43, gauche), on observe que la pression constante appliquée sur le fond du tube est $P_N \approx P_{CJ}/3$ (Figure 1.2), valeur idéale de la pression appliquée sur le mur de poussée d'un PDE.

Dans le cas d'un piston de vitesse constante $u_p \geq u_{CJ}$, l'état entre le piston et la discontinuité est constant, et la célérité du front $D(u_p)$, dans l'approximation du choc fort, peut être obtenue en inversant (1.40), soit :

$$\frac{D(u_p)}{D_{CJ}} \simeq \frac{1}{2} \left(\frac{u_p}{u_{CJ}} + \frac{u_{CJ}}{u_p} \right) \quad (1.45)$$

1.3 Zone de réactions moyenne stationnaire de la détonation

Le modèle ZND est complémentaire des modèles CJ (§1.2.1) et TZ (§1.2.2). Il a été formulé indépendamment par ZEL'DOVICH [10], VON NEUMANN [11] et DÖRING [12]. Le front de détonation n'est plus considéré comme une discontinuité totalement réactive mais comme un choc inerte soutenu par une zone de réactions d'épaisseur non-nulle (VIEILLE [9]). L'hypothèse fondamentale est que l'écoulement dans la zone de réactions est stationnaire. Pour les situations à une dimension d'espace x , les variables g dans cet écoulement ne sont ainsi plus fonctions que de la seule distance au choc z :

$$\begin{cases} g(x, t) = g(z) \\ z = \int_0^t D dt - x \end{cases} \quad (1.46)$$

Les réactifs subissent une compression adiabatique par le choc, les menant de l'état initial 0 à l'état choqué H, dit de von Neumann, en $z = 0$ (e.g., eqs. 1.38 et 1.39). Ils évoluent ensuite dans la zone de réactions stationnaire jusqu'à la position où les conditions aux limites de raccordement avec l'écoulement des produits sont satisfaites, e.g., CJ (eqs. 1.32) ou S (eqs. 1.40). Dans ce modèle, la célérité D du front est déterminée comme une valeur propre.

1.3.1 Le modèle Zel'dovich–von Neumann–Döring plan

Le modèle ZND plan décrit la zone de réactions stationnaire derrière un choc plan de célérité D constante. L'hypothèse de stationnarité permet de réduire les lois du mouvement (eqs. 1.1 à 1.5) à un système d'équations différentielles ordinaires. Par exemple, en choisissant la distance au choc $z = Dt - x$ comme variable indépendante, nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{du}{dz} &= -\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}}{1 - M^2} \\ \frac{dP}{dz} &= -\frac{D - u}{v} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}}{1 - M^2} \\ \frac{dv}{dz} &= \frac{v}{D - u} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}}{1 - M^2} \\ \frac{d\mathbf{Y}}{dz} &= \frac{\mathbf{w}}{1 - M^2} \\ \frac{dt}{dz} &= \frac{1}{D - u} \end{aligned} \quad (1.47)$$

avec $\boldsymbol{\sigma} = \left(\sigma_i = -\left(v/c^2\right) \frac{\partial e}{\partial Y_i} \Big|_{P, v, Y_{j \neq i}} / \frac{\partial e}{\partial P} \Big|_{v, \mathbf{Y}} \right)$ le vecteur des coefficients de thermicité σ_i (Annexe A), $M = (D - u)/c$ le nombre de Mach de l'écoulement relatif, c la vitesse du son figée, et t le temps nécessaire à une particule fluide pour atteindre la position relative z . L'ensemble (1.47) est un système de $3 + N_{\text{sp}}$ équations à $3 + N_{\text{sp}}$ inconnues indépendantes $u, P, v, t, \mathbf{Y} = (Y_i)_{i=1, N_{\text{sp}}}$ ($\sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} Y_i = 1$) et un paramètre, la célérité D . Ainsi, comme pour les discontinuités (§1.2.1), une contrainte additionnelle est nécessaire pour fermer le système. Le système (1.47) peut être écrit plus formellement comme le problème aux valeurs

initiales :

$$\begin{cases} d\mathbf{g}/dz = \mathbf{G}(\mathbf{g}, D) \\ \mathbf{g}(z = 0) = \mathbf{g}_H(D) \end{cases} \quad (1.48)$$

où $\mathbf{g} = [u, P, v, t, \mathbf{Y}]$. L'indice H désigne l'état subsonique ($M_H < 1$) choqué (non-brûlé) : il est déterminé préalablement à l'intégration de (1.48) par résolution du système des équations (1.23 à 1.26, §1.2.1) pour une valeur arbitraire de D .

Les solutions physiques habituelles (non "pathologiques") sont telles que l'écoulement reste subsonique jusqu'à la fin de la zone de réactions ($\mathbf{w} = \mathbf{0}$) de manière à exclure les dérivées infinies. La célérité D_{CJ} est la valeur particulière de D déterminées par intégrations successives et dichotomie jusqu'à satisfaire simultanément aux deux contraintes de sonicité ($1 - M^2 = 0$, c-à-d $u + c = D$) et de thermicité ($\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w} = 0$, c-à-d fin de la zone de réactions). Seules les valeurs de $D \geq D_{CJ}$ sont donc admissibles. Une valeur de $D > D_{CJ}$ correspond à une détonation soutenue par un piston de vitesse constante $u_p > u_{CJ}$, où u_p est la valeur de u à réaliser en fin de zone de réactions, c'est-à-dire en fin d'intégration. La Figure 1.3 présente des profils de température pour des mélanges uniformes $\phi \text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$ à différentes richesses ϕ aux conditions de pression et de température initiales $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K. Les calculs ont été réalisés avec le mécanisme détaillé de cinétique chimique San Diego [31] et un code ZND résolvant le système (1.47).

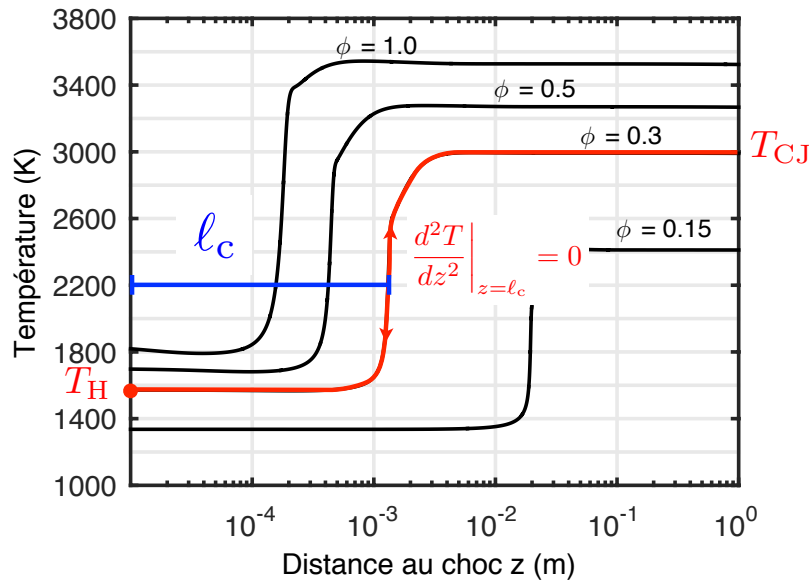


FIGURE 1.3 – Profils de température dans la zone de réactions calculés selon le modèle ZND plan pour différentes richesses du mélange $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$, avec $D = D_{CJ}$, $P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K (mécanisme détaillé de cinétique chimique San Diego [31]).

Le modèle ZND permet ainsi d'obtenir des longueurs chimiques de référence, comme la longueur d'induction ℓ_i , distance du choc au pied de la rampe du profil de température, ou la longueur caractéristique ℓ_c , distance du choc au point d'inflexion du profil de température ($d^2T/dz^2|_{z=\ell_c} = 0$).

Le système (1.47) admet des intégrales sous la forme des relations de Rankine-Hugoniot valides en tout

point $z \geq 0$ de la zone de réactions stationnaire :

$$\rho(D - u) = \rho_0 D, \quad P + \rho(D - u)^2 = P_0 + \rho_0 D^2, \quad e + \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2}(D - u)^2 = e_0 + \frac{P_0}{\rho_0} + \frac{1}{2}D^2 \quad (1.49)$$

Ainsi, pour un degré d'avancement y arbitraire, l'état au point z considéré se situera à l'intersection, dans le plan $(P - v)$, de la droite de Rayleigh-Michelson $(\mathcal{RM})_D$ (eq. 1.33, §1.2.1) relative à la célérité D choisie pour l'intégration et de la polaire d'Hugoniot $(\mathcal{H})_Y$ partielle associée à cet avancement Y (Figure 1.4).

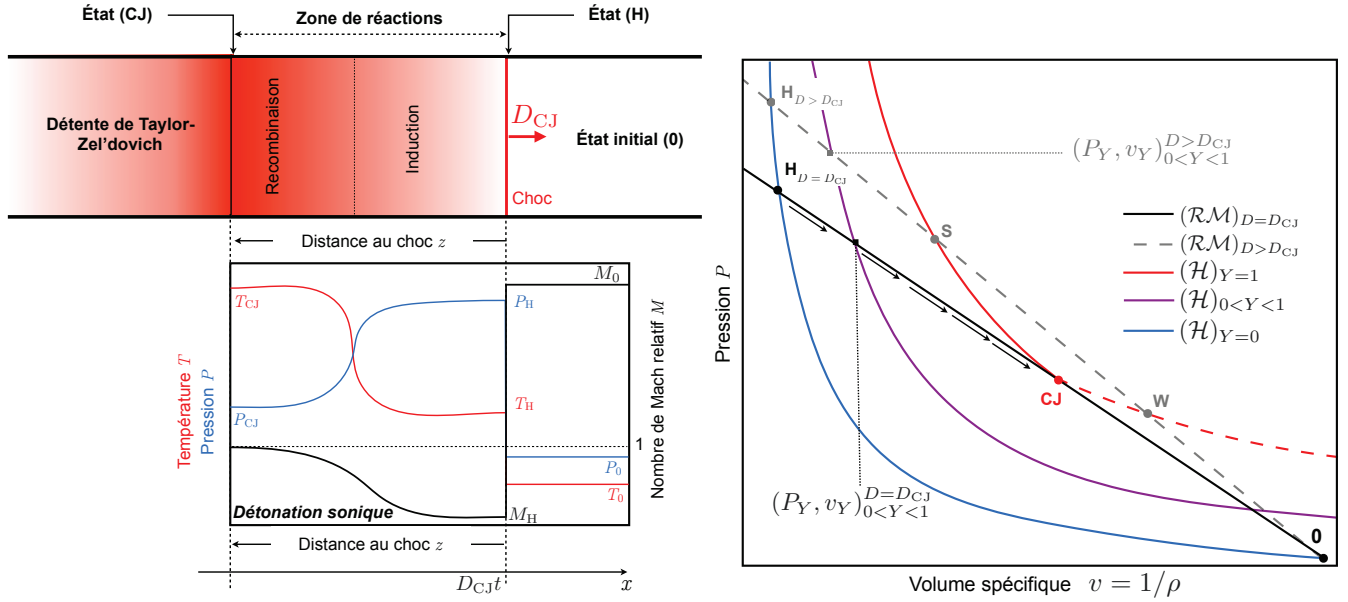


FIGURE 1.4 – À gauche : schéma de la zone de réaction du modèle ZND plan pour le cas d'une détonation sonique. À droite : représentation dans le plan $(P-v)$ des droites de Rayleigh-Michelson $(\mathcal{RM})_D$ et des polaires d'Hugoniot $(\mathcal{H})_Y$ pour différents degré d'avancement Y . Le pôle (0) correspond à l'état initial amont, les points H_D à l'état choqué non-brûlé derrière le choc de célérité D , les points S, W et CJ aux solutions forte, faible et de Chapman-Jouguet.

Par exemple, pour une réaction globale et un mélange de deux gaz idéaux (Sect. 1.1), les polaires $(\mathcal{H})_Y$ sont données par :

$$P_Y = P_H(v, Y, P_0, v_0) = P_0 \times \frac{1 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{v_Y}{v_0} + 2 \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{Y Q_{p0}}{P_0 v_0} \left[1 + \mu \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0 v_0}{Q_{p0}} \right]}{\frac{v_Y}{v_0} - \frac{\gamma-1}{\gamma+1}} \quad (1.50)$$

et la solution à l'intersection de $(\mathcal{RM})_D$ et $(\mathcal{H})_Y$ par :

$$\frac{v_0 P_Y}{D^2} \simeq \frac{u_Y}{D} \simeq \frac{1 + \Delta(Y, D)}{\gamma + 1}, \quad \frac{v_Y}{v_0} \simeq \frac{\gamma - \Delta(Y, D)}{\gamma + 1}, \quad \Delta(Y, D) = \sqrt{1 - Y (D_{CJ}/D)^2} \quad (1.51)$$

où le coefficient γ est la fonction de l'avancement Y et des coefficients γ_0 et γ_1 des réactifs et des produits donnée par (1.16). Ainsi, on retrouve l'état sous choc H (eqs. 1.38, §1.2.1) pour $Y = 0$. Les états brûlés physiques, c'est-à-dire associés aux détonations CJ (eqs. 1.32, §1.2.1) ou forte S (eqs. 1.40), sont obtenus pour $Y = 1$ et $D \geq D_{CJ}$. La droite de de Rayleigh-Michelson $(\mathcal{RM})_D$ est donc ici le chemin suivi par un élément fluide lors de sa combustion stationnaire, depuis le choc (point H_D) jusqu'à la fin de la zone

de réactions (points CJ ou S). On comprend ainsi que les détonations faibles (point W) sont ici exclues puisqu'il n'y a pas de chemin thermodynamique pour y accéder depuis le point H_D avec le mécanisme ZND.

1.3.2 Le modèle Zel'dovich–von Neumann–Döring faiblement courbé

Il s'agit d'une généralisation du modèle ZND plan, valide pour les zones de réactions de détonations faiblement courbées. Nous présentons ce modèle dans l'Annexe B sous la forme d'une reproduction de notre article publié dans l'IJEMCP (BOULAL et al. [32]). La zone de réactions est considérée stationnaire mais divergente, avec une faible expansion latérale. La célérité normale D_n de l'onde n'est plus une constante au cours du déplacement du front d'onde mais une fonction de sa courbure totale κ :

$$D_n = D_n(\kappa) \tag{1.52}$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} D_n = D_{CJ} \tag{1.53}$$

Dans les gaz, on peut en déduire une estimation du rayon minimum R_{crit} d'existence de la détonation autonome divergente (Sect. 1.5).

1.4 Structure réelle cellulaire de la détonation : instabilité locale et modes de propagation

Dans les gaz, les propriétés de la zone de réactions moyenne de la détonation sont très sensibles à des variations infinitésimales de la célérité D du front, donc de l'état post-choc (H), essentiellement, de la température. En effet, la température post-choc T_H varie comme $T_H \propto D^2$ (eq. 1.39, gauche, §1.2.1) et, en considérant une loi globale de décomposition chimique de type Arrhenius (eq. 1.7, Sect. 1.1), le temps d'induction t_i varie comme :

$$t_i = \left(\frac{1}{w} \frac{dw}{dt} \right)_H^{-1} \propto e^{\frac{E_a}{RT_H}} \quad (1.54)$$

Les variations relatives de la température T_H et du temps t_i sont donc :

$$\frac{\delta T_H}{T_H} = 2 \frac{\delta D}{D} \Rightarrow \frac{\delta t_i}{t_i} = 2 \frac{E_a}{RT_H} \frac{\delta D}{D} \quad (1.55)$$

Dès lors, compte tenu des grandes valeurs habituelles de l'énergie d'activation réduite $E_a^* = E_a/RT_H$ (typiquement $E_a^* \sim 5 - 10$ pour les mélanges C_nH_m/O_2 et $E_a^* \sim 20 - 30$ pour les mélanges C_nH_m/Air [33, 34]), une petite perturbation relative $\delta D/D \approx 1\%$ conduit à de très grandes variations relatives des temps et longueurs chimiques caractéristiques de la zone de réactions, typiquement $10\% < \delta t_i/t_i < 60\%$ selon le mélange considéré. Ainsi, cette zone de réactions ZND est instable et ne représente qu'une moyenne du processus réel, loin des limites de propagation.

Les expériences montrent de fait que le front d'une détonation n'est pas une surface lisse mais un ensemble d'ondes de chocs à propagations longitudinales et transversales organisées en cellules, concourants en des points triples (§1.4.1).

1.4.1 Détonations multicellulaires

DENISOV et TROSHIN [13] ont été les premiers à identifier la structure cellulaire des détonations. Ils ont constaté que ses instabilités étaient universelles car présentes sur tout front de détonation, autonome ou soutenu, quelle que soit la géométrie, plane, sphérique ou cylindrique, divergente ou convergente. Elles constituent ainsi la signature expérimentale du couplage choc-combustion pour les détonations dans les gaz (OPPENHEIM [35]). La structure cellulaire peut être simplement caractérisée en plaçant une plaque recouverte d'un dépôt de carbone dans un tube à détonation parallèlement à la direction de propagation de l'onde. Cette méthode permet de connaître l'historique bidimensionnel de la dynamique de la détonation. Les points triples du front de détonation, c'est-à-dire les lieux d'interactions des ondes longitudinales et transversales avec la plaque, érodent le dépôt de carbone et leurs trajectoires dessinent un maillage en forme de losange, plus ou moins régulier (Figure 1.5, gauche). Des techniques de mesure optiques comme l'ombroscopie, la strioscopie, la chimiluminescence directe, la fluorescence planaire induite par laser (PLIF) ou l'interférométrie, permettent aussi d'observer les instabilités cellulaires des détonations.

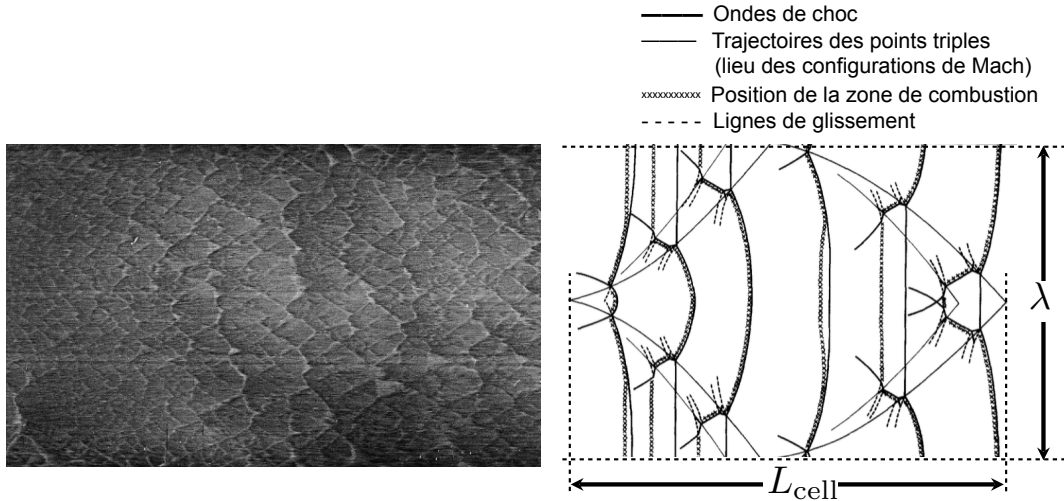


FIGURE 1.5 – À gauche : exemple d’enregistrement sur une plaque recouverte d’un dépôt de carbone. À droite : processus de formation d’une cellule de détonation 2D (STREHLOW et CROOKER [36]).

La largeur moyenne d’une cellule de détonation λ (ou sa longueur L_{cell}) constitue une mesure fondamentale pour l’étude du phénomène de détonation dans la mesure où les comportements dynamiques des détonations sont auto-semblables par rapport à λ (Sect. 1.5). Une détonation est dite multicellulaire lorsque le nombre de cellules est grand sur la section de passage du front, c’est-à-dire dans des configurations où la dimension transverse caractéristique (diamètre ou largeur du tube, diamètre d’une détonation sphérique) est grande devant la largeur λ .

Le processus de formation d’une cellule de détonation est périodique (Figure 1.5, droite). Au cours d’une période, débutant par la collision de deux points triples, l’onde de détonation induite entre les deux points triples réfléchis est initialement soutenue, avec une célérité $D \approx 1.8D_{\text{CJ}}$ [36, 37], résultant de l’explosion locale très forte générée lors de la collision des deux ondes transverses. Progressivement, la zone de réactions se découple du choc dont la célérité D diminue jusqu’à $\approx 0.6D_{\text{CJ}}$ jusqu’à la collision de deux nouveaux points triples. Toutes les observations expérimentales indiquent que les cellules des détonations multicellulaires présentent un rapport d’aspect géométrique

$$\frac{L_{\text{cell}}}{\lambda} \approx 1.5 - 2 \quad (1.56)$$

pratiquement indépendant des conditions initiales de composition, de pression et de température. Cependant, les structures cellulaires montrent une régularité très variable qui peut rendre difficile la mesure de λ . STREHLOW [38], puis LIBOUTON et al. [39], ont proposé une classification de l’irrégularité de la structure cellulaire (Figure 1.6). Le paramètre de contrôle est l’énergie d’activation réduite $E_a^* = E_a/RT_{\text{H}}$ [40, 41], l’irrégularité étant d’autant plus marquée que E_a^* est grande.

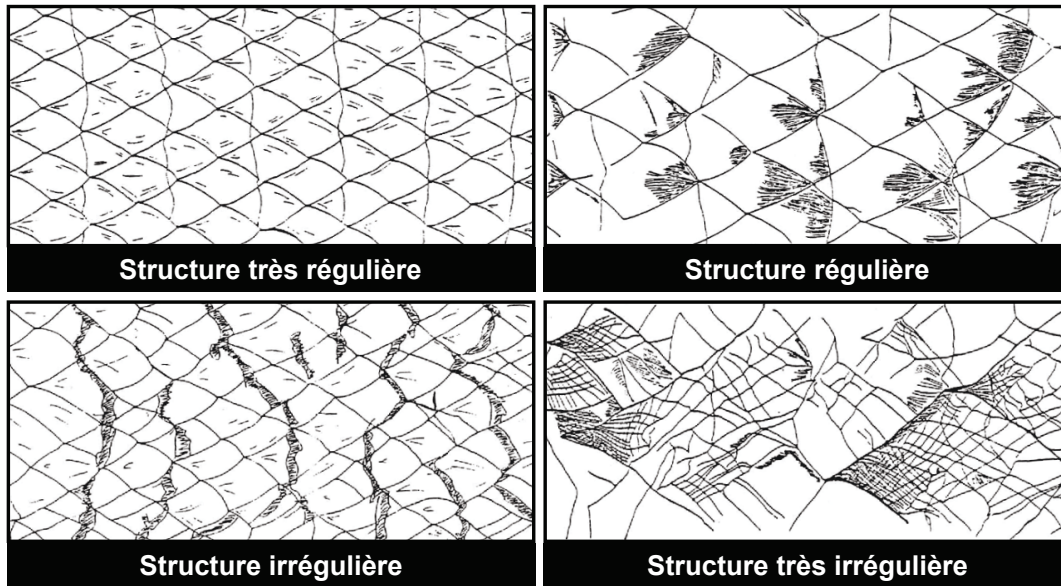


FIGURE 1.6 – Classification de l'irrégularité de la structure d'une détonation multicellulaire (LIBOUTON et al. [39]).

Dans le cas des détonations de certains mélanges fortement dilués par un gaz inerte et se propageant dans des espaces confinés, la géométrie confinement peut influencer celle de la structure cellulaire. La Figure 1.7 donne des exemples pour des tubes de sections circulaire ou rectangulaire.

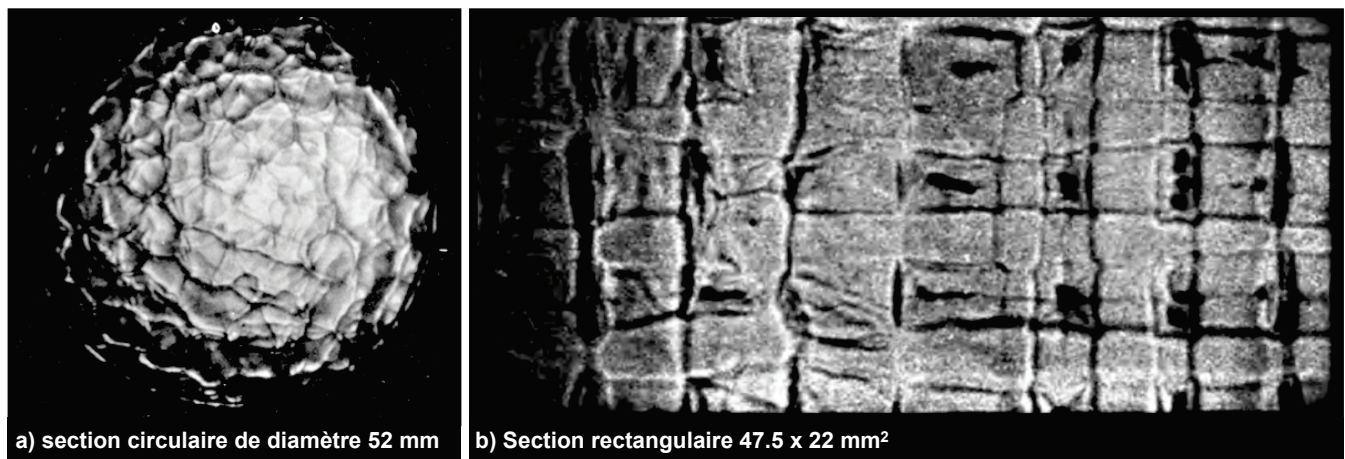


FIGURE 1.7 – Visualisations des empreintes frontales d'un front de détonation multicellulaire. a) section circulaire, diamètre 52 mm, mélange $C_2H_2+2.5O_2+10.5Ar$, $P_0 = 200$ mbar (PRESLES et al. [42]). b) section rectangulaire 47.5×22 mm², mélange $C_2H_4+3O_2+10Ar$, $P_0 = 200$ mbar (DESBORDES et PRESLES [34]).

La largeur moyenne λ des structures cellulaires constitue une bonne mesure de la sensibilité à la détonation d'un mélange réactif considéré, c'est-à-dire de sa capacité à accepter la propagation de la détonation dans une géométrie donnée. Ainsi, un mélange est considéré comme d'autant plus sensible que sa largeur de cellule est petite. La variation de λ avec la richesse ϕ d'un mélange Combustible/Oxydant présente une forme en U avec un minimum situé généralement autour de la stœchiométrie. La dépendance de λ avec la

pression initiale P_0 suit une loi :

$$\lambda = AP_0^{-n}, \quad 1.1 \lesssim n \lesssim 1.3 \quad (1.57)$$

À la suite des travaux de SHCHELKIN et TROSHIN [43], de nombreuses études ont confirmé qu'il existe une relation de proportionnalité entre λ et la longueur caractéristique ℓ_c de la zone de réactions stationnaire du modèle moyen ZND plan (§1.3.1) [34, 44] :

$$\lambda = k\ell_c \quad k \sim 15 - 50 \quad (1.58)$$

Ainsi, à conditions initiales égales, la cellule de détonation est d'autant plus petite que la détonation est soutenue (si $D \nearrow$, $T_H \nearrow$ donc $\ell_c \sim \ell_i$ et $\lambda \searrow$). Le facteur k n'est cependant pas universel car, pour un couple Combustible/Oxydant donné, il peut présenter des variations significatives selon les conditions de composition et de pression initiales [45, 46].

Les simulations numériques permettent de reproduire qualitativement les phénomènes complexes observés dans l'étude expérimentale des détonations. Cependant, la plupart des simulations procèdent à des ajustements des paramètres du calcul. Par exemple, pour le modèle de gaz réactif à deux composants décrit en Section 1.1, l'énergie d'activation E_a et la constante A de la loi d'Arrhenius globale (eq. 1.7) sont préalablement déterminées par comparaison des profils ZND issus de calculs avec cinétique détaillée [41] et souvent réajustés pour que les largeurs moyennes calculées et mesurées soient les plus proches. Pour les simulations utilisant des schémas détaillés de cinétique chimique, les largeurs moyennes calculées peuvent différer d'un ordre de grandeur des valeurs expérimentales [34, 44].

À ce jour, il n'existe pas de possibilité de prédire la largeur moyenne λ en fonction des conditions initiales de composition, de pression et de température. Les analyses théoriques les plus abouties du mécanisme de formation de la structure cellulaire sont celles de CLAVIN, e.g., [47]. On trouve dans la base de données en ligne de Caltech [48] des largeurs de cellules pour une grande variété de mélanges et de conditions initiales.

1.4.2 Détonations marginales et limites de propagation

Lorsque la dimension caractéristique du confinement (diamètre, largeur du tube) approche de la largeur moyenne λ d'une détonation multicellulaire, l'onde adapte sa structure au confinement et bifurque vers des modes de propagation dits marginaux. Le comportement de son front résulte alors non plus uniquement des propriétés chimiques du milieu, mais en grande partie d'une interaction entre les instabilités cellulaires de détonation et les modes acoustiques transverses dans les gaz derrière son front. Seul un petit nombre de structures est alors présent sur le front. Un continuum de modes de propagation est possible entre le mode multicellulaire et le mode limite à une ou deux onde(s) transverse(s), selon la géométrie du tube.

Dans les tubes de section circulaire, l'onde limite comprend un seul front longitudinal et un seul front transversal en rotation autour de l'axe du tube (Figure 1.8). La détonation est dite hélicoïdale (*spin detonation*). CAMPBELL et WOODHEAD [49] ont les premiers observé ce mode de propagation à une onde transverse à l'aide d'une technique d'enregistrement strioscopique par photographie à tambour tournant. Il a depuis fait l'objet de nombreuses études théoriques [50–52] et expérimentales [53–56]. La Figure 1.8 (SCHOTT [53]) donne un exemple de visualisation de la propagation d'une détonation hélicoïdale.

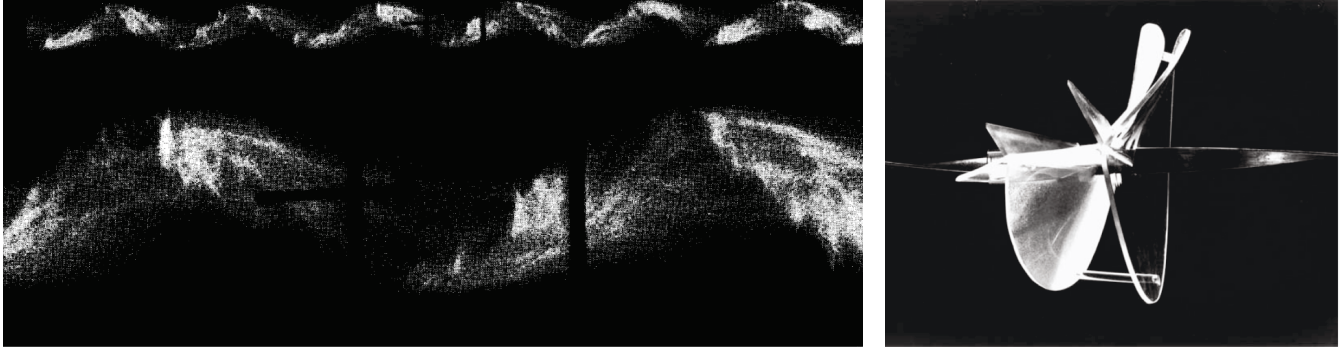


FIGURE 1.8 – Gauche : visualisation par chimiluminescence directe (SCHOTT [53]) de la propagation d’une détonation hélicoïdale dans un tube de section circulaire de diamètre 25.4 mm (mélange $6.7\text{C}_2\text{H}_2 + 10\text{O}_2 + 83.3\text{Ar}$). Droite : maquette réalisée par SCHOTT [44] du front d’une détonation hélicoïdale.

Dans les tubes de section carrée, l’onde limite comprend seulement deux fronts transverses, un pour chaque direction normale à l’axe du tube (*single-headed detonation*). Si un tube de section rectangulaire, dont une des dimensions transverses est inférieure à celle du tube de section carrée limite, est considéré, le mode transverse associé à la direction de la plus petite dimension est supprimé. La Figure 1.9 donne des exemples d’un enregistrement expérimental (LEE et al. [57]) et d’une simulation numérique (WANG et al. [58]) de la propagation d’une détonation à deux ondes transverses (une par direction normale à l’axe du tube) pour des tubes de section carrée.

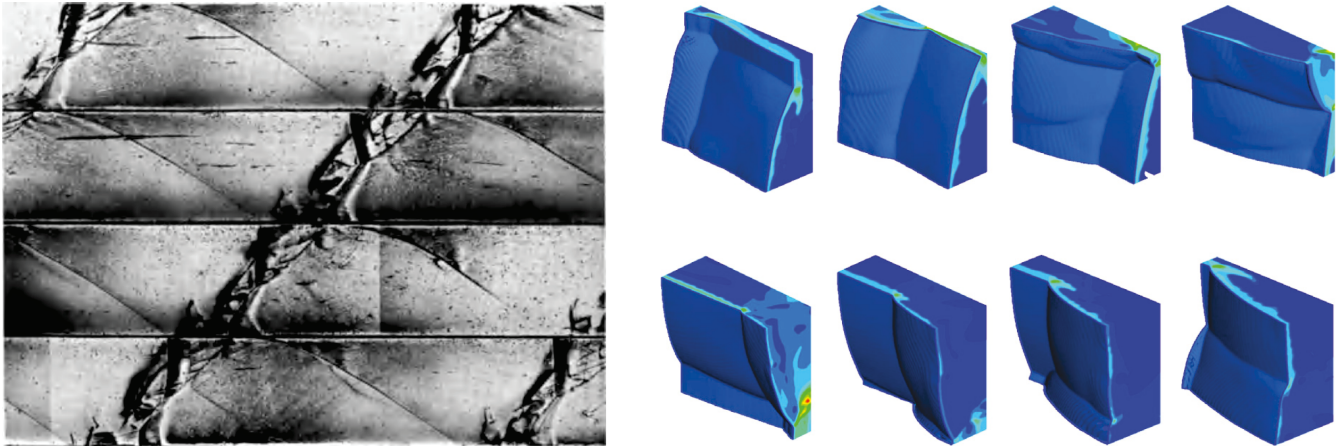


FIGURE 1.9 – Gauche : déroulé d’un enregistrement sur dépôt de carbone (LEE et al. [57]) de la dynamique de propagation de la détonation à deux ondes transverses dans un tube de section carrée de 19 mm de côté (mélange $6.7\text{C}_2\text{H}_2 + 10\text{O}_2 + 83.3\text{Ar}$). Droite : simulation numérique 3D (WANG et al. [58]) de la propagation d’une détonation à deux ondes transverses dans un tube de section carrée.

Dans un tube de section circulaire, il est souvent retenu la limite [34, 44] :

$$\pi d \approx \lambda \quad (1.59)$$

où d désigne le diamètre du tube. Dans les tubes de section rectangulaire $w \times h$, VASIL’EV [59] indique que

la limite peut s'exprimer :

$$\frac{2\pi d}{r+1} \approx \lambda \quad (1.60)$$

où $d = \min(w, h)$ désigne la plus petite dimension transverse et $r = w/h$. Ces critères permettent ainsi d'estimer les limites de propagation de la détonation en mélange uniforme pour un confinement donné selon les conditions de composition ϕ , de pression P_0 , et de température T_0 initiales.

Lorsque la dimension transverse du confinement d devient inférieure aux limites associées à ces modes marginaux, il peut être observé un autre mode de propagation fortement instationnaire, appelé régime galopant ou pulsant. Ce mode marginal est caractérisé par des successions de découplages et de recouplages des fronts de choc et de combustion. Il présente une grande longueur d'onde de pulsation, typiquement $\sim 100d$, si bien qu'il n'est possible de l'observer que dans des tubes suffisamment longs [60–63]. VASIL'EV [59] indique que la vitesse moyenne d'une détonation galopante est de l'ordre de $0.7-0.8D_{CJ}$. La violence et les successions des recouplages font que ce mode de propagation est peut être le plus dommageable pour les installations industrielles [44].

Les simulations numériques, avec les réserves déjà présentées (§1.4.1), permettent de reproduire ces situations de propagation marginale dans les tubes de sections circulaire, carrée ou rectangulaire [56, 58, 64–69].

1.5 Instabilités globales de la détonation : comportements dynamiques transitoires

Les comportements dynamiques transitoires de la détonation sont les phénomènes observés dans les situations où (i) une détonation autonome subit une perturbation de sa dynamique entraînant des instabilités à plus grandes échelles que la largeur moyenne λ de sa structure cellulaire ou à (ii) l'initiation directe d'une détonation. Ce sont par exemple les configurations de transmission d'un tube à un plus grand volume, de diffraction par des obstacles, de propagation en canal courbé ou dans un gradient de composition (i) et les initiations directes de la détonation par une source d'énergie, ponctuelle ou non (ii). Les conditions critiques de propagation et d'existence de la détonation sont généralement données par des longueurs L_{crit} ou des énergies E_{crit} caractéristiques appelées paramètres dynamiques de la détonation [59]. Elles se présentent sous formes de lois d'échelles expérimentales, bâties avec une longueur chimique caractéristique mesurable, c'est-à-dire la largeur moyenne de la structure cellulaire λ , et les propriétés des états initial (P_0, ρ_0) et CJ (D_{CJ}). Ainsi :

$$L_{\text{crit}} = k_1 \lambda \quad (1.61)$$

$$\text{et } E_{\text{crit}} = k_2 \rho_0 D_{\text{CJ}}^2 \lambda^{\alpha+1} \quad (1.62)$$

où $\alpha = 0, 1$ ou 2 selon que la configuration est plane, cylindrique ou sphérique. Les expériences montrent que les coefficients k_i sont en général de grands nombres (~ 10 - 100). En d'autres termes, l'échelle caractéristique de ces instabilités globales est bien plus grande que celle des instabilités locales cellulaires λ et donc de la longueur chimique caractéristique ℓ_c du modèle ZND (Sect. 1.3.1).

Les comportements dynamiques sont auto-semblables par rapport à λ . Une méthodologie typique est donc de réaliser des expériences dans des systèmes de taille réduite, avec des conditions initiales de composition, de pression et de température compatibles avec l'identification de la dynamique et des conditions limites de détonation. Après obtention du coefficient k_i de la loi d'échelle (eqs. 1.61 et 1.62) pour le système considéré, et compte-tenu de la dépendance de λ avec les conditions initiales ($\lambda = k\ell_c$, $\lambda = AP_0^{-n}$, §1.4.1), la loi d'échelle constitue un outil d'extrapolation pour anticiper ou estimer le comportement de la détonation dans un système similaire plus grand ou d'autres conditions initiales, avec les réserves exprimées dans §1.4.1.

On distingue deux catégories de comportements dynamiques, super-critique ou critique, selon que la transmission ou l'amorçage est réalisé(e) directement ou avec extinction temporaire puis réarmorage. La situation d'échec de la transmission ou de l'amorçage, c'est-à-dire avec extinction définitive, est qualifiée de sous-critique.

La Figure 1.10 présente des enregistrements par la méthode des traces sur dépôt de carbone de transmissions super-critique et critique de la détonation d'un tube à un plus grand volume (DESBORDES [70]). Au changement de section, la brusque détente latérale de la zone de réactions induit une onde d'extinction qui remonte vers l'axe du système et une onde de choc oblique attachée au front de détonation, soutenue par l'expansion latérale des gaz brûlés. Selon la valeur du diamètre de tube d par rapport à une valeur critique d_{crit} relative aux conditions de composition, de pression et de température du mélange considéré, on observe différentes dynamiques :

- Pour $d \gg d_{\text{crit}}$, le réamorçage survient dans le domaine compris entre le choc oblique et les gaz brûlés, avant que la détente n'ait éteint l'ensemble du front (Figure 1.10a). Il s'agit de la transmission super-critique pour laquelle on observe une continuité de la structure cellulaire.
- Pour $d \gtrsim d_{\text{crit}}$, la détente éteint l'ensemble du front (Figure 1.10b). Un réamorçage est néanmoins observé à une certaine distance R_{crit} du changement de section. Il s'agit de la transmission critique pour laquelle on observe un cône de propagation associé à la détonation multicellulaire issue du tube avant le réamorçage. Ce réamorçage se produit sous la forme d'une détonation à propagation transversale très rapide dans l'espace choqué et non-brûlé compris entre le choc oblique et les gaz brûlés en expansion latérale.
- Pour $d < d_{\text{crit}}$, on observe seulement le cône de propagation de la détonation multicellulaire initiale, sans réamorçage.

Pour cette configuration de transmission, les expériences donnent les corrélations $d_{\text{crit}} \approx 13\lambda$ et $R_{\text{crit}} \approx 20 - 50\lambda$ pour une grande variété de mélanges réactifs [70–73].

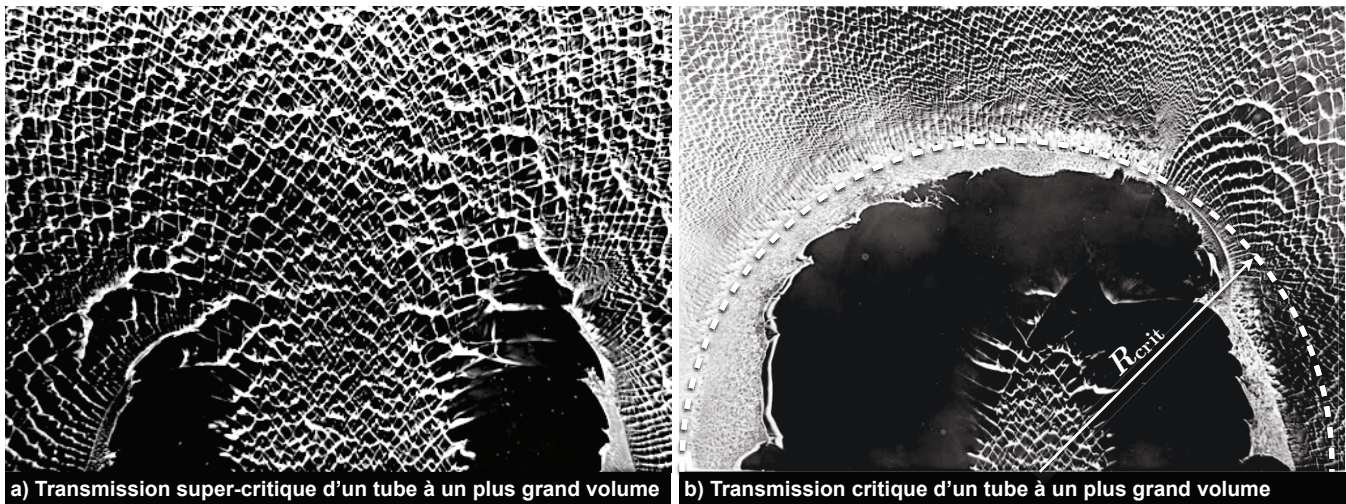


FIGURE 1.10 – Enregistrements sur dépôt de carbone des transmissions a) super-critique et b) critique d'un tube à un plus grand volume (DESBORDES [70]).

La Figure 1.11 présente des enregistrements par la méthode des traces sur dépôt de carbone et par strioscopie des initiations directes super-critique et critique d'une détonation sphérique divergente par une source localisée d'énergie (DESBORDES [70] et BACH et al. [74]). Selon la valeur de l'énergie E_s transmise par la source par rapport à une valeur critique E_{crit} relative aux conditions de composition, de pression et de température du mélange considéré, on observe différentes dynamiques :

- Pour $E_s \gg E_{\text{crit}}$, la détonation sphérique multicellulaire très forte initiée directement lors de l'amorçage relaxe continûment vers le régime multicellulaire autonome. Il s'agit de l'initiation super-critique pour laquelle on observe une continuité de la structure cellulaire depuis le point d'amorçage (Figure 1.11a).
- Pour $E_s \gtrsim E_{\text{crit}}$, la détonation multicellulaire initiale disparaît complètement. Un réamorçage est néanmoins observé à une certaine distance R_{crit} de la source. Il s'agit de l'initiation critique pour laquelle on observe la disparition de la structure cellulaire de la détonation forte initiale avant le réamorçage (Figure 1.11b). Dans cette situation, il y a découplage entre le choc et la zone de

combustion moyenne de la détonation. Le réamorçage se produit sous la forme d'une détonation très rapide qui se propage transversalement dans l'espace choqué et non brûlé compris entre le choc et la zone de réactions découplée. Pour cette configuration d'initiation directe, les expériences indiquent des rayons d'amorçage R_{crit} très voisins de ceux associés à la situation de transmission critique d'un tube à un plus grand volume.

— Pour $E_s < E_{\text{crit}}$, on n'observe pas de réamorçage après le découplage.

Il existe enfin une valeur limite $E_{\text{min}} \ll E_{\text{crit}}$, en deçà de laquelle, l'initiation directe de la détonation ne peut pas être réalisée.

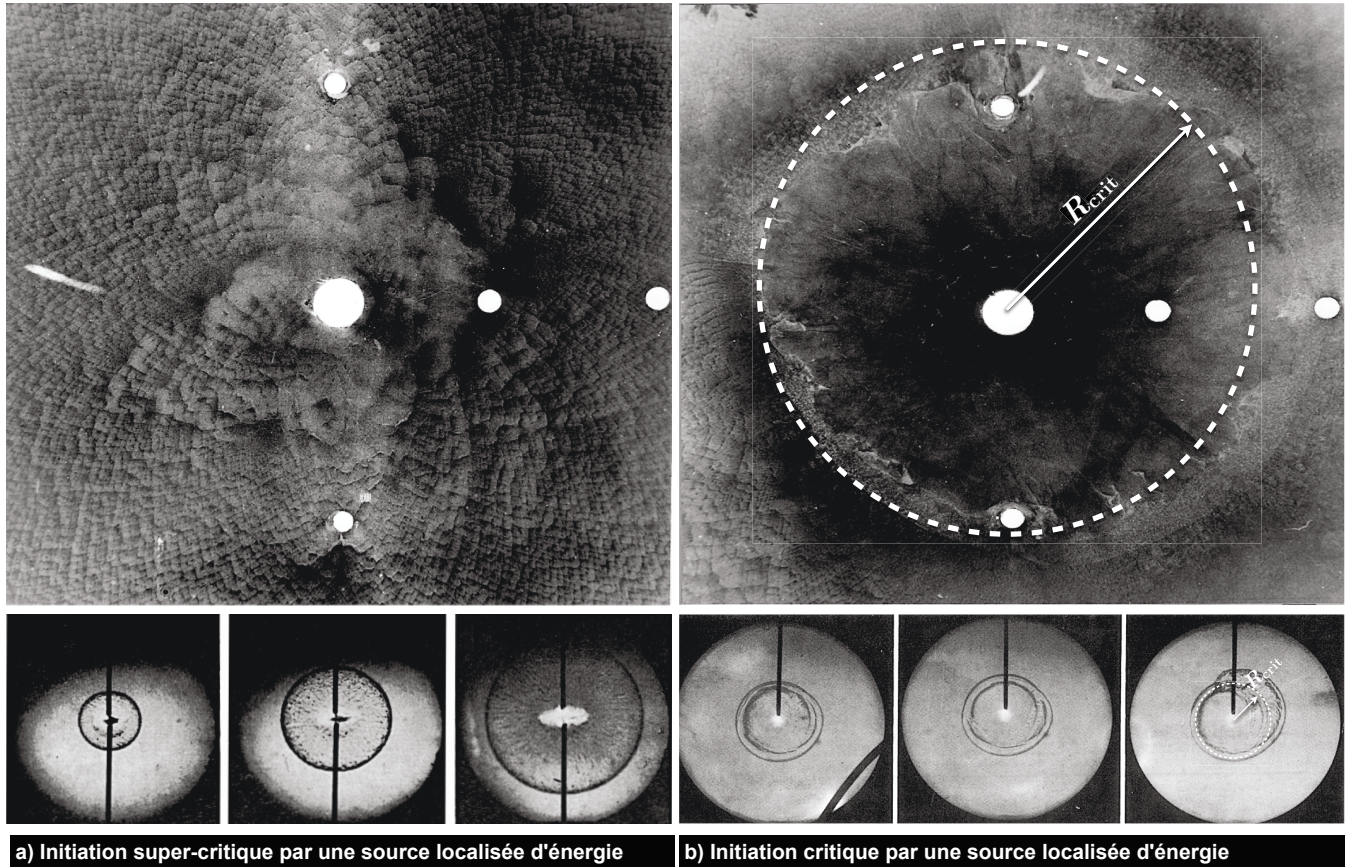


FIGURE 1.11 – Enregistrements sur dépôt de carbone (en haut, DESBORDES [70]) et séquence de strioscopie (en bas, BACH et al. [74]) des initiations directes d'une détonation sphérique divergente par une source localisée d'énergie : a) super-critique et b) critique.

La prédiction théorique ou numérique des paramètres dynamiques de la détonation (d_{crit} , R_{crit} , E_{crit} , etc.) est difficile en raison de la grande sensibilité des calculs à la cinétique chimique (§1.4.1). Nous présentons en Annexe B notre contribution à ce difficile problème sous la forme de notre publication dans l'IJEMCP (BOULAL et al. [32]). Cette contribution est une analyse de sensibilité au choix du schéma détaillé de cinétique chimique du rayon critique R_{crit} évalué par le modèle ZND faiblement courbé, lequel prend en compte la courbure du front de la détonation.

Chapitre 2

Propagation de la détonation dans des compositions non-uniformes

Sommaire

2.1	Généralités	29
2.2	L'application à la propulsion	31
2.3	Gradient de composition normal	32
2.4	Gradient de composition parallèle	35
2.5	Position et apports de notre étude	40

2.1 Généralités

De nombreuses études portant sur la propagation de chocs, de flammes ou de détonations dans des mélanges non-uniformes ont été réalisées depuis une quarantaine d'années. La plupart ont été réalisées dans le but d'étudier l'effet qu'induit la stratification d'une atmosphère gazeuse provoquée lors de fuites accidentelles de gaz combustibles dans de l'air. Dans toutes les situations où le milieu présente des non-uniformités de composition (fuites de combustibles, injection non-prémélangée et présence de gaz brûlés dans un moteur à détonations), les gradients sont tridimensionnels, et peuvent être couplés avec des gradients d'autres grandeurs essentielles de la dynamique des gaz (température, pression, etc.). Dès lors, l'analyse de leurs effets sur la dynamique de la détonation devient difficile. C'est pourquoi, il convient de séparer les effets induits par ces non-idéalités dans des situations simples en fonction de la nature de la non-uniformité (composition, température, etc.) et de l'orientation de son gradient (normal ou parallèle).

Certaines études analytiques [75–77] portent sur la propagation d'ondes de choc dans un milieu stellaire où la densité varie spatialement en raison du champ de gravitation. Les méthodes proposées permettent de traiter certains problèmes d'astrophysique tels que les explosions de supernovæ, dont l'hydrodynamique doit aussi prendre en compte les effets du rayonnement et du champ magnétique [78].

S'agissant du phénomène de déflagration, plusieurs auteurs [79–87] ont étudié les conditions de d'allumage, de propagation et d'extinction de flammes monophasiques ou diphasiques, dans des environnements confinés ou non s'apparentant à une combustion à volume constant ou à pression constante. Certaines de ces études visent à améliorer la compréhension du concept de charge stratifiée des moteurs diesel [80, 87]. ZEL'DOVICH [88], SHORT [89] et QI et al. [90] ont étudié les conditions pour lesquelles un front d'autoinflammation peut transiter vers le régime de détonation lorsque le milieu réactif est soumis à un gradient de température ou

de composition. Ce phénomène de transition est évoqué pour expliquer l'apparition du cliquetis des moteurs diesel.

La Transition Déflagration Détonation (TDD) dans des mélanges soumis à des gradients de composition orientés transversalement à la direction de propagation a été largement étudiée ces dernières années [91–95]. Les travaux indiquent en particulier que les critères de TDD énoncés dans le cas des composition uniformes ne peuvent plus être considérés comme valides lorsque la composition est non-uniforme. Les gradients de composition ont globalement pour effet d'augmenter le risque de TDD.

La synthèse bibliographique que nous proposons dans ce chapitre concerne le cas de la détonation en phase gazeuse présentant des non-uniformités de composition pour les deux contextes applicatifs de la propulsion par détonation et de la sécurité des installations.

Nous présentons d'abord les études ayant spécifiquement portées sur la détonation en milieu non-uniforme dans un contexte de moteurs à détonation (Sect. 2.2). Nous structurons ensuite la présentation des études ayant plus fondamentalement portées sur les détonations dans des milieux non-uniformes selon l'orientation du gradient de composition, normal (Sect. 2.3) ou parallèle (Sect. 2.4) à la direction de propagation de la détonation.

2.2 L'application à la propulsion

La problématique de la composition non-uniforme du mélange réactif dans le contexte des moteurs à détonations a été peu étudiée. Dans une étude expérimentale d'un PDE, BROPHY et HANSON [96] ont étudié l'influence de la présence d'un gradient de composition du mélange réactif gazeux orienté selon la direction principale de la chambre de combustion, soit celle de la propagation de la détonation. La composition variait progressivement de riche ($\phi = 1.6$) ou stœchiométrique ($\phi = 1.0$) à pauvre ($\phi = 0.44$). Ils ont montré que la présence du gradient entraîne une impulsion spécifique plus importante que pour le cas d'un mélange parfaitement uniforme dont la composition est celle de la composition moyenne du mélange non-uniforme. Dans une étude numérique d'un PDE bidimensionnel, PERKINS et SUNG [97] ont étudié différentes distributions linéaires de richesse dans les directions axiale et normale de la chambre de combustion. Ils ont observé qu'à richesse moyenne égale, la baisse de performance (calculée par l'impulsion spécifique) associée à la présence d'un gradient de composition était inférieure ou égale à 1 %. Ils en ont conclu que l'amélioration du mélange n'était pas nécessaire pour assurer les performances optimales du PDE. Toutefois, ces auteurs soulignent que les conditions de leur calcul étaient limitées à des distributions de richesse dont les gammes de variation ($0.8 \leq \phi \leq 1.2$) restaient proches de la stœchiométrie.

L'influence de non-uniformités de compositions dans la chambre de combustion d'un RDE ne semble jamais avoir été étudiée expérimentalement, vraisemblablement en raison des difficultés qu'impose une mesure in situ de la composition. Seuls des travaux de simulations ont tenté d'examiner cette influence. On distingue alors deux catégories d'étude :

1. Les simulations non-réactives reposant sur une modélisation des équations moyennes de Navier-Stokes (RANS) [98] ou aux grandes échelles (LES) [99]. Ces études ont pour but d'optimiser la géométrie et la conception de l'injection dans une chambre de RDE aérobique [98] ou anaérobique [99].
2. Les simulations réactives avec chimie simplifiée [100–103]. Ces études visent à améliorer la compréhension des effets induits sur la stabilité et la propagation d'un front de détonation dans une couche de mélange comprenant des gaz réactifs non-parfaitement mélangés et des gaz brûlés résiduels (Figure 2.1).

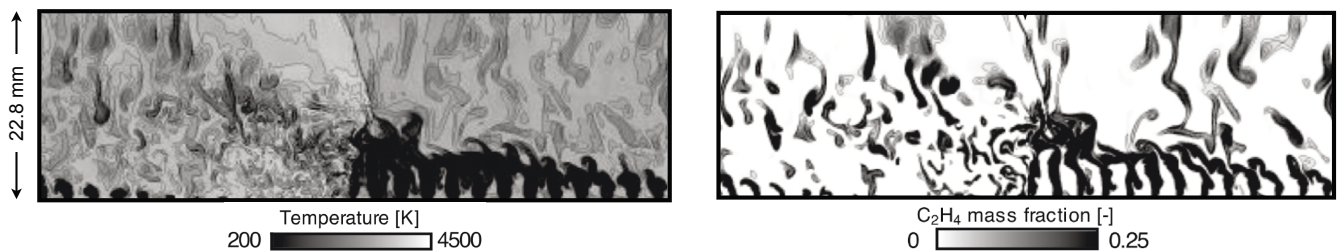


FIGURE 2.1 – Profils de température et de fraction massique de combustible (éthylène C_2H_4) au sein d'un RDE : simulation numérique bidimensionnelle avec une injection non-prémélangée du combustible et de l'oxydant (oxygène O_2) (FUJI et al. [103]).

2.3 Gradient de composition normal

Plusieurs auteurs ont expérimentalement étudié la propagation d'une détonation dans un gradient de composition normal à sa direction de propagation. Les auteurs ont constaté que le front de détonation s'adapte à la richesse locale en se courbant et avec une largeur locale λ proche des valeurs mesurées en mélange uniforme. Ils constatent globalement que la détonation a une vitesse de propagation plus faible que la célérité du mélange moyen uniforme. ISHII et al. [104] et ISHII et KOJIMA [105] constatent en particulier que la structure cellulaire est imposée par la courbure du front. Ainsi aux endroits où le gradient est le plus faible, la courbure est la plus faible et les cellules de détonation ont la forme en losange, classiquement observée (§1.4.1). Aux endroits où le gradient est le plus fort, la courbure est la plus forte et les cellules se configurent dans un motif rectangulaire. LIEBERMAN [106] a observé qu'une courbure extrême pouvait engendrer le découplage local du choc et de la flamme (Figure 2.2). Ces observations sont similaires à celles observées au cours de la propagation d'une détonation dans un milieu à deux couches séparées par une membrane déformable, typiquement une feuille de Mylar. Cette configuration particulière a d'ailleurs été étudiée car elle s'apparente à la structure de l'écoulement observée dans des chambres de moteurs à détonations rotatives ou dans des statoréacteurs [107, 108].

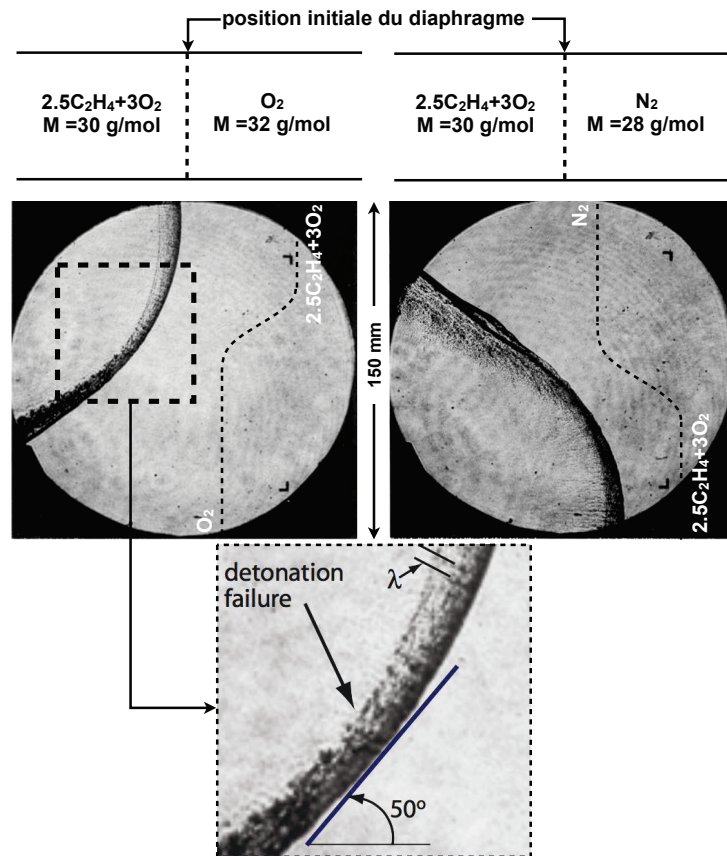


FIGURE 2.2 – Enregistrements par strioscopie (LIEBERMAN [106]) de la propagation de la détonation dans un gradient de composition normal formé à l'interface diffuse entre un mélange $2.5\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2$ et O_2 (à gauche) et entre un mélange $2.5\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2$ et N_2 (à droite).

BOECK et al. [109] ont constaté que la détonation peut adopter une propagation marginale à une onde transverse lorsque le gradient de composition est fort. Ils définissent une largeur caractéristique théorique, appelée largeur détonante h^* (*detonable layer height*) définie comme la largeur de la zone où les largeurs locales des cellules de détonation, considérées comme adaptées à la richesse locale $\lambda(y) \equiv \lambda(\phi(y))$ (avec y la direction normale à la direction de propagation), sont plus petites que la largeur h du confinement (Figure 2.3). Sur la base de la comparaison de h^* avec la largeur moyenne $\bar{\lambda} = \frac{1}{h} \int_0^h \lambda(y) dy$ des cellules intégrées le long de y , ils donnent le critère de propagation de la détonation suivant :

- si $h^* \gtrsim 2\bar{\lambda}$, la détonation est en régime de propagation multicellulaire.
- si $h^* \lesssim 2\bar{\lambda}$, la détonation est en régime de propagation marginal à une onde transverse.
- si $h^* \ll 2\bar{\lambda}$, la détonation s'éteint complètement.

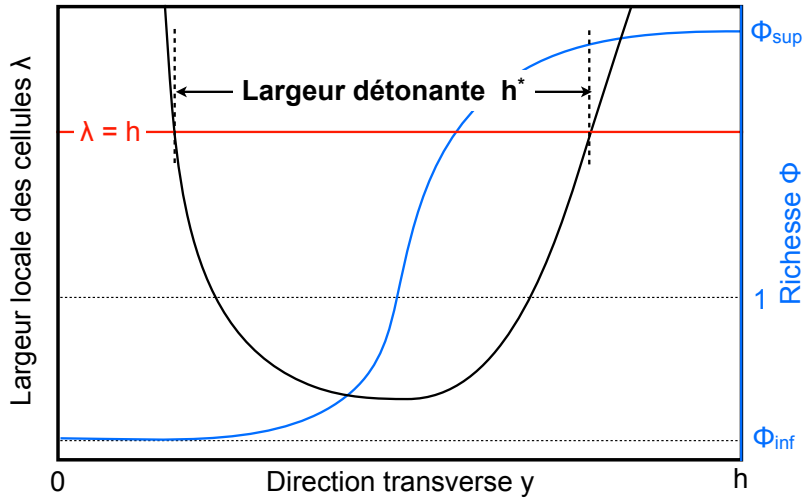


FIGURE 2.3 – Illustration du concept de largeur détonante de BOECK et al. [109].

KESSLER et al. [110] ont réalisé des simulations numériques bidimensionnelles de la propagation d'une détonation dans un gradient de composition normal à sa direction de propagation. Leurs calculs reposent sur l'emploi d'une loi globale d'avancement de la réaction (e.g., eq. 1.7, Sect. 1.1) étalonnée en fonction de la richesse ϕ . Les distributions de richesse varient de façon monotone entre une composition riche (bord supérieur) et une composition pauvre (bord inférieur). Deux types de mélanges non-uniformes sont considérés : (i) un mélange stable à faible énergie d'activation réduite E_a^* (§1.4.1) censé reproduire les conditions des mélanges réactifs fortement dilués par un gaz inerte et (ii) un mélange instable à haute activation d'énergie réduite E_a^* censé reproduire les conditions d'un mélange méthane-air. Dans le cas (i), la largeur transverse varie. Ainsi, les phénomènes observés expérimentalement ont été reproduits, en particulier la courbure du front, le découplage local du choc et de la flamme aux bords supérieur et inférieur et la propagation marginale lorsque la dimension transverse était réduite (Figure 2.4). Dans le cas (ii), l'amplitude du gradient varie. Ainsi, lorsqu'il dépasse une certaine valeur-seuil, la détonation disparaît complètement, et les collisions des points triples aux parois ne sont plus suffisantes pour entretenir la propagation de la détonation. Cette valeur-seuil, semble être en lien avec le concept de largeur détonante proposé par BOECK et al. [109].

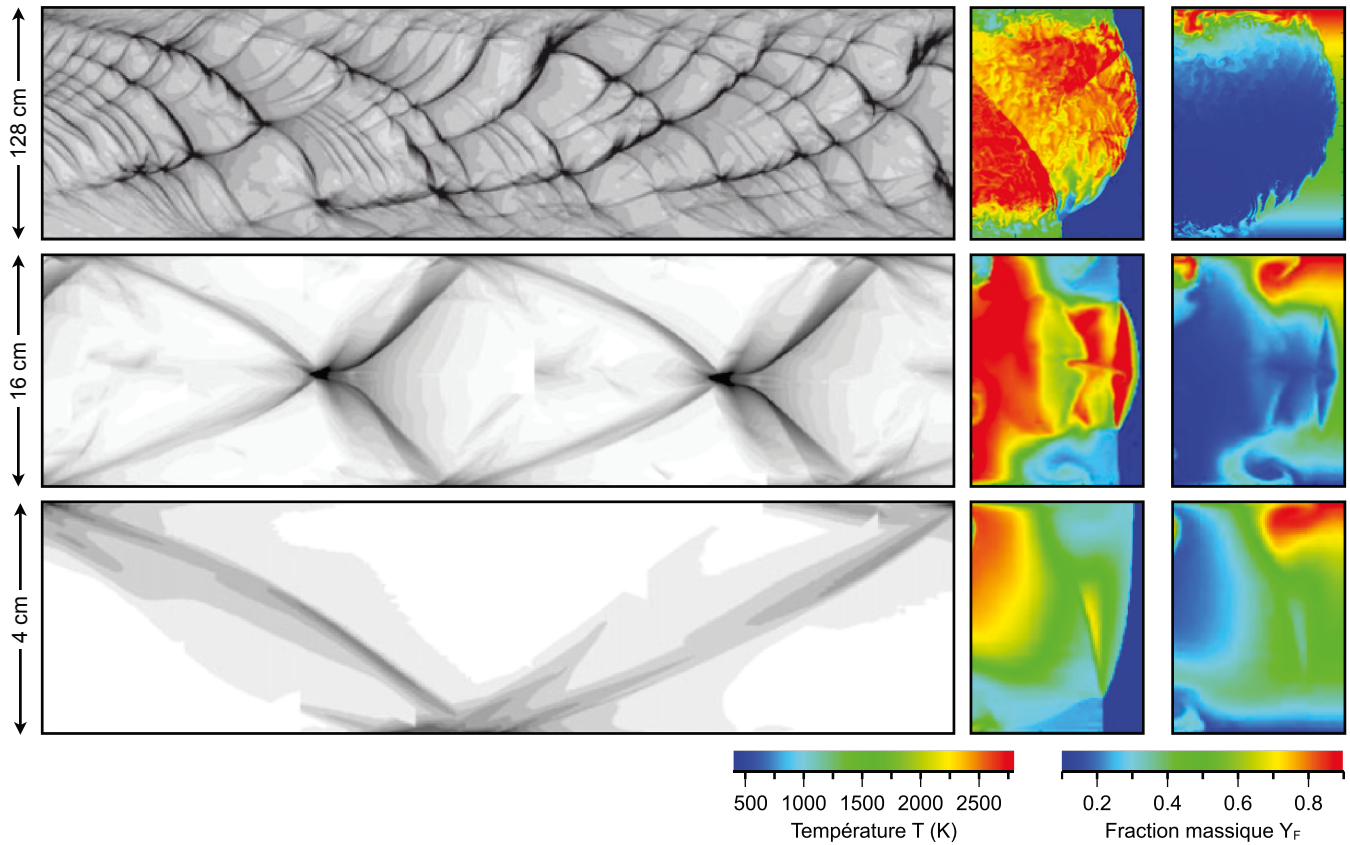


FIGURE 2.4 – Dynamique de la structure cellulaire de la détonation, champs de température T et de fraction massique de combustible Y_F obtenus par KESSLER et al. [110] pour différentes dimensions transverses. Mélange à faible activation d'énergie $E_a^*(\phi = 1) = 5$.

2.4 Gradient de composition parallèle

Le cas de la transmission d'une détonation à travers un gradient de composition parallèle à la direction de propagation a déjà fait l'objet d'études qu'il est toutefois difficile de synthétiser en raison de leur spécificité [111–120]. Dans l'ensemble de ces études, le gradient est réalisé par diffusion moléculaire après rupture ou ouverture de diaphragmes séparant des gaz de compositions uniformes. Les études antérieures peuvent être classées selon trois catégories (Figure 2.5) :

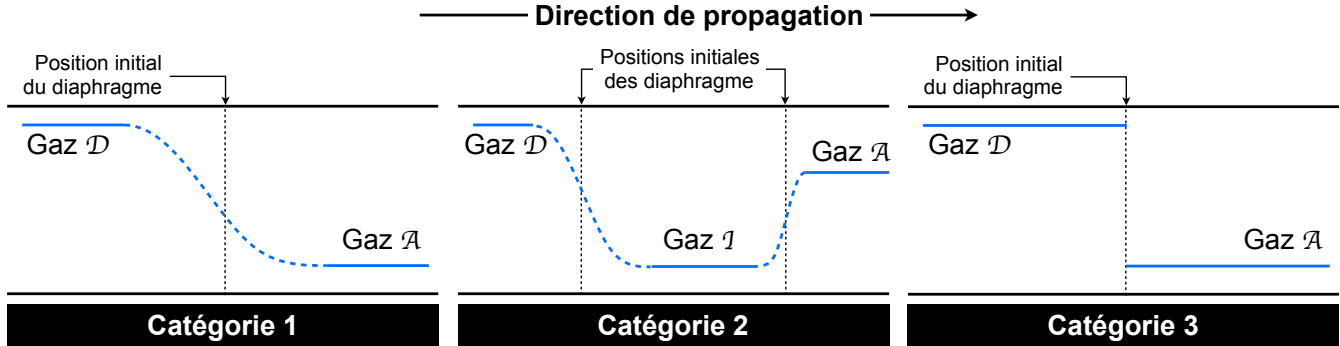


FIGURE 2.5 – Catégorisation des gradients de composition parallèles.

- **Catégorie 1** : la détonation rencontre un gradient de composition formé entre deux gaz de réactivité différente : le gaz donneur (\mathcal{D} , driver) et le gaz receveur (\mathcal{A} , accepter), $\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{A}$. Cette situation a été étudiée par DONATO et al. [111], ENGBRETSSEN et al. [114] et KUZNETSOV et al. [116, 117]
- **Catégorie 2** : la détonation rencontre un gradient de composition formé entre deux gaz réactifs et un gaz inerte (\mathcal{I}), $\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{I} \rightarrow \mathcal{A}$. Cette situation a été étudiée par BJERKEDVEDT et al. [112], THOMAS et al. [113] et TEODORCZYK et BENOAN [115].
- **Catégorie 3** : la détonation est transmise d'un gaz donneur réactif \mathcal{D} à un gaz accepteur réactif \mathcal{A} , $\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{A}$ selon un gradient infini. La transmission a lieu suite à la rupture d'un diaphragme de type feuille de Mylar séparant les deux gaz. Cette situation a été étudiée par SCHULTZ et SHEPHERD [119] et LI et al. [120].

S'agissant de la Catégorie 1, DONATO et al. [111] utilisent un mélange équimolaire $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2$ pour le gaz donneur \mathcal{D} ($\phi_{\mathcal{D}} = 2.5$) et un mélange $\phi_{\mathcal{A}}\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2$ pour le gaz receveur \mathcal{A} , avec $0.26 \leq \phi_{\mathcal{A}} \leq 2.0$ (Table 2.1 et Figure 2.6). Le tube contenant les gaz \mathcal{D} et \mathcal{A} a une section circulaire de 25.4 mm de diamètre. Une vanne à tiroir sépare le tube en deux sections (\mathcal{D} et \mathcal{A}) de même longueur 1.33 m. Les auteurs ont étudié le cas des gradients de réactivité positifs ($E_a^{\mathcal{A}} < E_a^{\mathcal{D}}$) et négatifs ($E_a^{\mathcal{A}} > E_a^{\mathcal{D}}$). Dans le premier cas, ils observent que la détonation s'adapte à la composition locale et que les propriétés de sa propagation peuvent être estimées par les conditions CJ locales. Dans le second cas, ils constatent qu'une détonation fortement soutenue (pistonée) est transmise et que la pression atteinte par l'onde peut dépasser jusqu'à 50 % de la valeur P_{CJ} locale. L'adaptation aux conditions CJ locales est beaucoup plus lent que dans le premier cas. KUZNETSOV et al. [116, 117] ont réalisé un important travail de caractérisation expérimentale des conditions dans lesquelles une détonation peut ou non être transmise à travers un gradient de composition. Dans la série d'expériences décrite dans [117], le gaz donneur \mathcal{D} est le mélange stœchiométrique $\text{H}_2 + 2.38\text{Air}$ ($\phi_{\mathcal{D}} = 1.0$). Le gaz receveur \mathcal{A} est un mélange $\phi_{\mathcal{A}}\text{H}_2 + 2.38\text{Air}$ avec $0.39 \leq \phi_{\mathcal{A}} \leq 0.56$ (Table 2.1 et Figure

2.6). Les conditions initiales de pression et de température de \mathcal{D} et \mathcal{A} sont identiques, $P_0 = 1$ bar et $T_0 = 290$ K. Le tube a une section circulaire de 174 mm de diamètre et une longueur totale $L = L_{\mathcal{D}} + L_{\mathcal{A}}$ comprise entre 6 m et 11.2 m. Les auteurs ont ainsi étudié l'influence de la longueur $L_{\mathcal{D}}$ du donneur \mathcal{D} (1.03–5.03 m) sur la transmission de la détonation dans le gaz \mathcal{A} . De manière générale, ils constatent que les gradients faibles n'atténuent jamais assez la détonation pour pouvoir observer une extinction et que les gradients forts peuvent provoquer son extinction. Toutefois, il apparaît que, pour une longueur $L_{\mathcal{D}}$ suffisamment grande, la détonation peut réapparaître plus loin dans le gaz receveur \mathcal{A} . Les auteurs proposent alors un critère basé sur deux paramètres adimensionnels issus de trois longueurs caractéristiques du problème. La première, d'origine chimique, est la largeur moyenne de la structure cellulaire de la détonation si elle était générée dans le gaz \mathcal{A} : $\lambda_{\mathcal{A}} = \lambda(\phi_{\mathcal{A}}, P_0, T_0)$. La deuxième, de nature géométrique, est la longueur $L_{\mathcal{D}}$ de la section contenant le gaz \mathcal{D} . La troisième longueur, Δx est une longueur liée au gradient de composition définie comme l'épaisseur caractéristique de la couche de mélange entre les gaz \mathcal{D} et \mathcal{A} . Plus Δx est faible plus le gradient est fort. Selon les auteurs, il est alors possible de séparer le plan $(L_{\mathcal{D}}/\lambda_{\mathcal{A}}) - (\Delta x/L_{\mathcal{D}})$ en deux domaines associés, respectivement, à la propagation et à l'extinction de la détonation à travers un gradient de composition (Figure 2.6).

Référence	DONATO et al. [111]	ENGBRETSSEN et al. [114]	KUZNETSOV et al. [116]	KUZNETSOV et al. [117]
Donneur \mathcal{D}	$\text{C}_2\text{H}_2/\text{O}_2$	$\text{C}_2\text{H}_2/\text{Air}$	$\text{C}_2\text{H}_2/\text{Air}$ ou H_2/Air	H_2/Air
Receveur \mathcal{A}	$\text{C}_2\text{H}_4/\text{O}_2$	$\text{C}_2\text{H}_2/\text{Air}$ ou $\text{C}_2\text{H}_4/\text{Air}$	H_2/Air	H_2/Air

TABLE 2.1 – Mélanges donneur \mathcal{D} et receveur \mathcal{A} utilisés par DONATO et al. [111], ENGBRETSSEN et al. [114] et KUZNETSOV et al. [116, 117]. Les richesses associées sont indiquées sur la Figure 2.6.

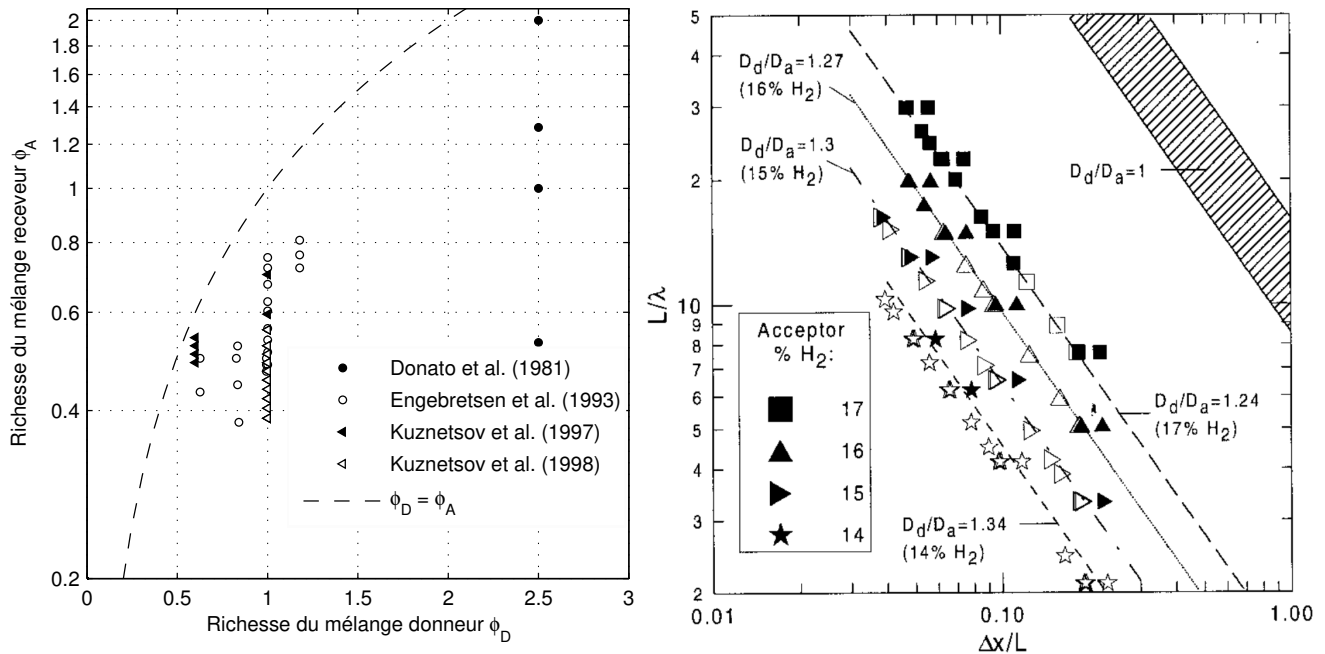


FIGURE 2.6 – À gauche : richesses des mélanges donneur \mathcal{D} et receveur \mathcal{A} utilisées par DONATO et al. [111], ENGBRETSSEN et al. [114] et KUZNETSOV et al. [116, 117] (les mélanges considérés sont indiqués sur la Table 2.1). À droite : plan $(L_{\mathcal{D}}/\lambda_{\mathcal{A}}) - (\Delta x/L_{\mathcal{D}})$ proposé par KUZNETSOV et al. [117]. Symboles noirs : transmission de la détonation. Symboles blancs : extinction de la détonation.

S'agissant de la Catégorie 2, les gaz donneur \mathcal{D} et receveur \mathcal{A} de l'étude de BJERKEDVEDT et al. [112] sont des mélanges $\text{C}_2\text{H}_2/\text{Air}$ ou $\text{C}_2\text{H}_4/\text{Air}$ et le gaz inerte \mathcal{I} est de l'air. Les conditions initiales de pression et de température des trois gaz \mathcal{D} , \mathcal{I} et \mathcal{A} sont identiques et égales à l'ambiante ($P_0 \sim 1 \text{ atm}$ et $T_0 \sim 293 \text{ K}$). Le tube a une section carrée de 125 mm de côté et une longueur totale $L = L_{\mathcal{D}} + L_{\mathcal{I}} + L_{\mathcal{A}}$ d'environ 9 m. Les auteurs utilisent trois longueurs de section inerte, $L_{\mathcal{I}} = 100, 150$ et 200 mm . Ils observent que pour des conditions de longueur $L_{\mathcal{I}}$ similaires, la détonation se réamorçait dans la section contenant le gaz receveur \mathcal{A} si $\mathcal{A} = \text{C}_2\text{H}_2/\text{Air}$ et qu'elle ne se réamorçait pas si $\mathcal{A} = \text{C}_2\text{H}_4/\text{Air}$. Ils concluent que les paramètres qui gouvernent le réamorçage de la détonation sont : les propriétés CJ du gaz donneur \mathcal{D} , la réactivité du gaz receveur \mathcal{A} et la longueur $L_{\mathcal{I}}$ de la section inerte. Ils indiquent également que les conditions aux parois imposées par le confinement (frottements, pertes de chaleur) et par la présence de suie (enregistrement de la structure cellulaire) jouent des rôles respectivement inhibiteur et promoteur sur le réamorçage de la détonation. Il soulignent toutefois que l'éventualité du processus de réamorçage est très sensible aux conditions expérimentales et que, donc, des meilleurs contrôle et caractérisation du gradient de composition sont nécessaires pour comprendre ce phénomène complexe. THOMAS et al. [113] sont les premiers à avoir utilisé une configuration de tube vertical pour éviter la déformation du gradient due aux instabilités de Rayleigh-Taylor, lorsque des gaz de masses volumiques différentes sont mis en contact. Dans une de leurs configurations, le gaz donneur \mathcal{D} est un mélange $\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2$, le gaz receveur \mathcal{A} est un mélange $\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2 + 6\text{N}_2$ et le gaz inerte \mathcal{I} est de l'air. La pression initiale est $P_0 = 133 \text{ mbar}$. Le tube est de section rectangulaire $22 \times 10 \text{ mm}^2$ ou de section circulaire de 50 mm de diamètre. Les auteurs utilisent trois longueurs de section inerte, $L_{\mathcal{I}} = 160, 260$ et 330 mm . Ils dégagent les mêmes conclusions que KUZNETSOV et al. [117], à savoir que les gradients de composition faibles facilitent la transmission de la détonation, alors que les gradients forts peuvent provoquer le découplage du choc et de la flamme et donc l'extinction de la détonation. Ils indiquent que le réamorçage de la détonation dans la section receveur, où la composition est de nouveau uniforme et réactive, est observé lorsque l'intensité du choc, mesurée par sa célérité longitudinale D , est telle que $D > 0.6D_{\text{CJ}}$. TEODORCZYK et BENOAN [115] ont étudié l'influence de la nature du gaz inerte \mathcal{I} (Ar, He, N_2 ou CO_2) situé entre un gaz donneur \mathcal{D} et un gaz accepteur \mathcal{A} de même nature, $\mathcal{D} = \mathcal{A} = \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$. Contrairement aux études précédentes, le gaz inerte \mathcal{I} est un nuage généré par injection transversale et pariétale dans un tube de section carrée de 60 mm de côté et de 3.6 m de longueur, initialement rempli du mélange $\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$ à la pression initiale $P_0 = 300$ ou 500 mbar . La pression du réservoir contenant le gaz \mathcal{I} en amont de l'injection contrôle la longueur de la section inerte. Les auteurs observent que l'efficacité d'un gaz inerte à atténuer le choc transmis par la détonation provenant du côté donneur est proportionnelle à sa masse molaire \mathcal{M} et inversement proportionnelle à son rapport des chaleurs spécifiques γ . Dès lors le CO_2 apparaît comme le gaz le plus efficace parmi ceux étudiés.

S'agissant de la Catégorie 3, SCHULTZ et SHEPHERD [119] ont étudié la transmission de la détonation à travers un changement brusque de section (Sect. 1.5) combiné à une variation brusque de composition. La géométrie employée passe d'une section circulaire de diamètre 38 mm contenant le gaz donneur \mathcal{D} ($\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$, $\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2$ ou $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$) à une section carrée de 152 mm de côté contenant le gaz receveur \mathcal{A} ($\text{H}_2 + 0.5(\text{O}_2 + \beta\text{N}_2)$, $\text{C}_2\text{H}_4 + 3(\text{O}_2 + \beta\text{N}_2)$ ou $\text{C}_3\text{H}_8 + 5(\text{O}_2 + \beta\text{N}_2)$). Les conditions initiales de pression et de température de \mathcal{D} et \mathcal{A} sont identiques, $P_0 = 1 \text{ bar}$ et $T_0 = 295 \text{ K}$. Les auteurs identifient ainsi des conditions super-critiques et sous-critiques de transmission de la détonation (Sect. 1.5) qu'ils expriment en fonction du paramètre de dilution β (Figure 2.7). La condition critique est définie comme la moyenne des

valeurs limites super-critique et sous-critique, $\beta_{\text{crit}} = \left(\beta_{\text{sup}}^{\text{super-crit}} + \beta_{\text{inf}}^{\text{sous-crit}} \right) / 2$.

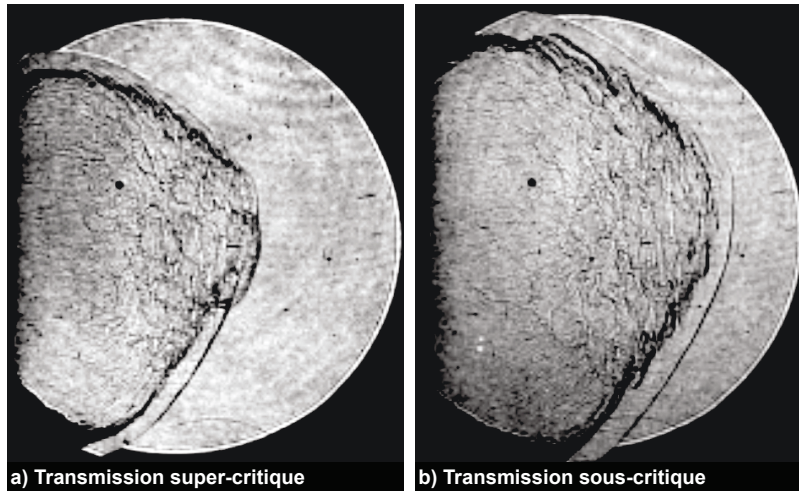


FIGURE 2.7 – Enregistrements par ombroscopie des transmissions a) super-critique et b) sous-critique consécutives aux changements brusques de section et de composition (SCHULTZ et SHEPHERD [119]). Gaz donneur $\mathcal{D} = \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$, gaz receveur $\mathcal{A} = \text{H}_2 + 0.5(\text{O}_2 + \beta\text{N}_2)$, avec $\beta = 1.25$ pour le cas super-critique et $\beta = 1.3$ pour le cas sous-critique.

Une catégorie particulière de gradient en espace non-confiné a été étudiée par SOCHET et al. [118]. Les auteurs emploient la méthode des bulles de savon [80] pour étudier la détonabilité de mélanges gazeux non-uniformes. Un mélange réactif uniforme léger ($\phi\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$) ou lourd ($\phi\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2$) est confiné aux conditions nominales de pression et de température dans une bulle de savon dont le rayon R_0 varie entre 40 mm et 80 mm. La richesse du mélange contenu dans la bulle varie entre $\phi = 0.5$ et $\phi = 1.66$. En éclatant mécaniquement la bulle, le confinement du gaz réactif est rompu et le gaz diffuse radialement avec l'air environnant. Un fil explosif, situé au centre de la bulle initiale, amorce alors une détonation sphérique divergente (Sect. 1.5) à un certain délai τ après l'éclatement de la bulle, lequel détermine la distribution de composition. Les gradients de composition ont donc une direction radiale dans les coordonnées sphériques assimilable à une direction axiale en coordonnées cartésiennes.

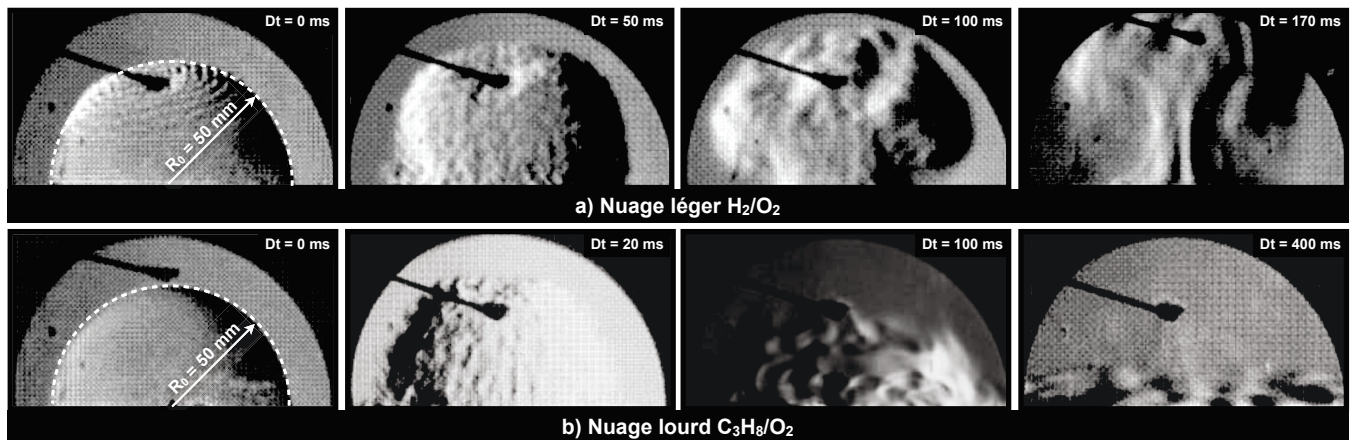


FIGURE 2.8 – Enregistrements par strioscopie du développement des gradients de composition radiaux réalisés par la méthode des bulles de savon (SOCHET et al. [73]).

Les distributions de composition ne sont pas mesurées par les auteurs. Ils observent qualitativement, par striescopie (Figure 2.8), que le nuage de C_3H_8/O_2 a tendance à s'écraser sur lui-même par effets de flottabilité alors que le nuage H_2/O_2 tend à s'élever en prenant la forme d'un champignon nucléaire (instabilités de Rayleigh-Taylor). Les auteurs déterminent l'énergie critique E_{crit} d'initiation de la détonation sphérique divergente (Sect. 1.5) et la surpression induite par cette dernière en fonction de la richesse du mélange confiné ϕ , du rayon R_0 de la bulle et du délai τ après éclatement (Figure 2.9). Ils comparent ces paramètres à ceux obtenus pour une charge uniforme ($\tau = 0$ s). Globalement, la stratification du mélange a tendance à atténuer les effets induits par la détonation.

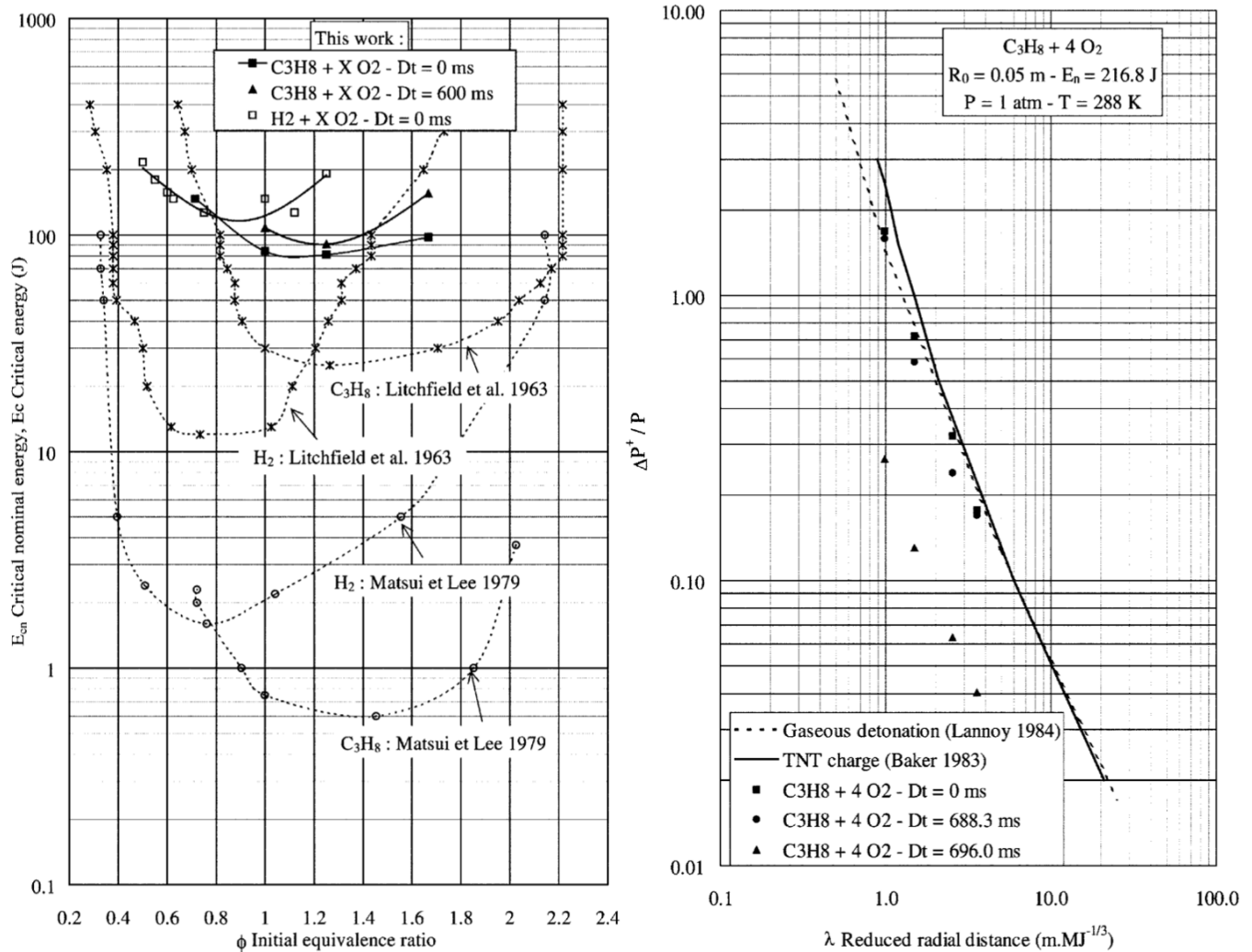


FIGURE 2.9 – Gauche : énergie critique d'initiation d'une détonation sphérique divergente en fonction de la richesse ϕ et du délai Dt après éclatement (SOCHET et al. [73]). Droite : surpression induite par l'onde de choc incidente en fonction de la distance radiale et du délai τ après éclatement (mélange initial : $1.25C_3H_8 + 5O_2$, rayon de la bulle : $R_0 = 50$ mm).

2.5 Position et apports de notre étude

Nos travaux s'intéressent aux cas des non-uniformités de composition orientées selon la direction de propagation de la détonation (gradients parallèles). Les études que nous venons de décrire dans la Section 2.4 sont peu nombreuses. Elles soulignent particulièrement la difficulté et l'importance du contrôle du gradient de la composition initiale. Elles mettent en jeu un grand nombre de paramètres (nature des composants gazeux, richesse initiale et finale, longueur caractéristique du gradient, géométrie et dimension transverse du dispositif, etc.) si bien qu'il semble difficile d'extrapoler les résultats obtenus.

Par ailleurs, elles ne donnent que des indications parcellaires sur les phénomènes associés à la dynamique de propagation ou de transmission dans la zone du gradient. En effet, dans l'ensemble de ces études, exceptée celle de TEODORCZYK et BENOAN [115], les gradients de composition sont réalisés entre des gaz séparés par des interfaces (Figure 2.10). La présence de ces interfaces limite techniquement les diagnostics de la dynamique de propagation ou de transmission. C'est pourtant dans cette zone que la dynamique est la plus riche puisque le gradient y est le plus fort. Les seules propriétés mentionnées dans les études antérieures sont celles liées aux états initial et final.

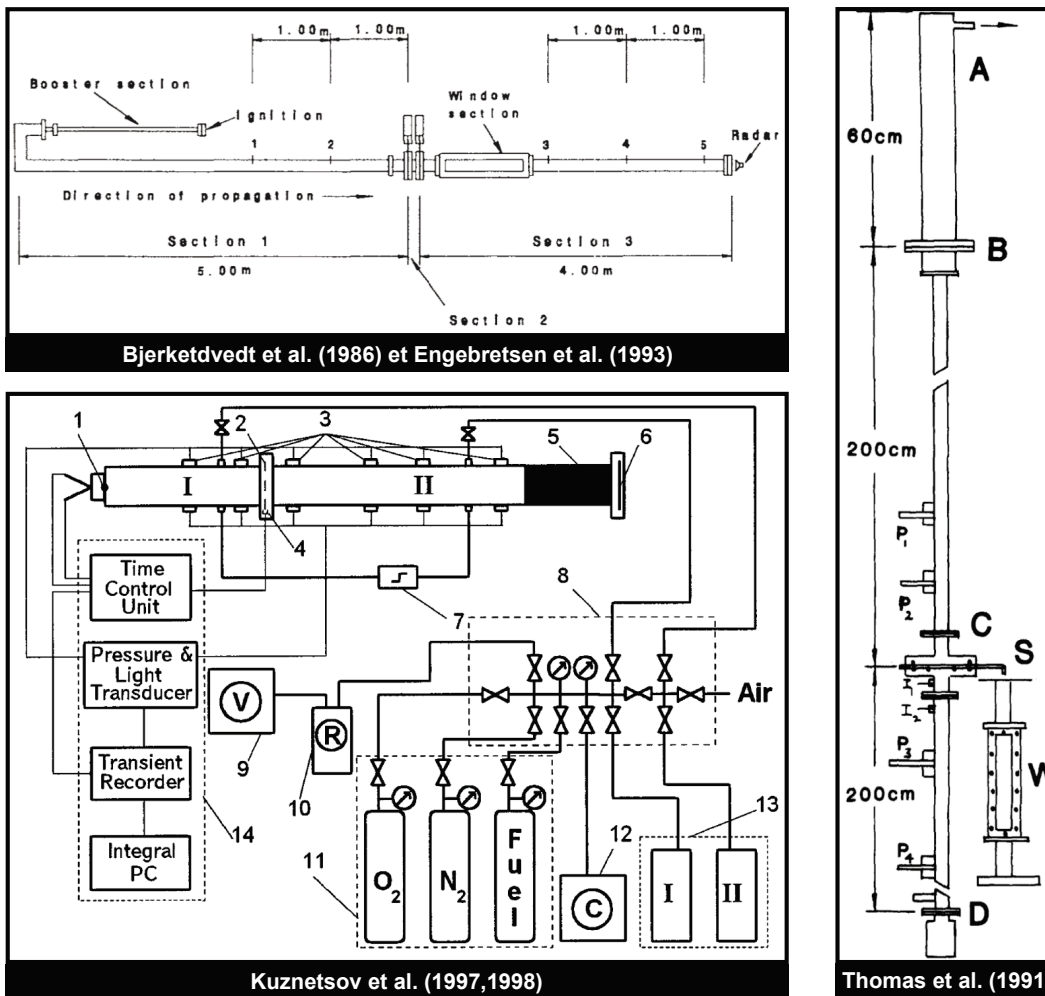


FIGURE 2.10 – Schémas des dispositifs expérimentaux des études de BJERKEDVEDT et al. [112], THOMAS et al. [113], ENGBRETSSEN et al. [114] et KUZNETSOV et al. [116, 117].

Quelle que soit la catégorie, toutes ces études, exceptée celle de THOMAS et al. [113], ont utilisé une configuration de tube horizontal. Ainsi, en raison de la différence de masse volumique des gaz de part et d'autre des interfaces, l'ouverture du (des) diaphragme(s) engendre nécessairement un écoulement vertical induit par flottabilité et donc entraîne un gradient avec une composante normale à la direction de propagation de la détonation. KUZNETSOV et al. [117] ont mesuré la différence de concentration d'hydrogène entre le centre du tube ($r = 0$ mm) et la paroi inférieure ($r = d/2 = 87$ mm, $\theta = -\pi/2$) en fonction de la distance z au diaphragme de séparation initiale et du temps de diffusion τ après son ouverture. Ainsi, à une distance $z = 310$ mm et pour un temps de diffusion $\tau = 6$ s, ils observent un écart de richesse entre le centre du tube et la paroi inférieure que nous avons estimé à 10 % de la différence de richesse entre le gaz donneur et le gaz accepteur $\phi_{\mathcal{D}} - \phi_{\mathcal{A}}$. La composante normale du gradient de composition ne peut donc pas être négligée par rapport à sa composante parallèle.

En résumé, on ne peut déduire de ces travaux que des conditions d'existence trop spécifiques. C'est donc dans un but d'améliorer la connaissance de la dynamique de la détonation, et notamment dans la zone de gradient, que nous avons conçu notre dispositif expérimental (Chapitre 3) et y avons focalisé les diagnostics (Chapitre 4). Notre approche est inductive. Nous n'avons pas essayé de constituer une base de données sur l'ensemble des gradients existants, tâche impossible. Nous avons plutôt cherché à proposer des lois générales tirées d'expériences particulières. Nous avons séparé l'étude des gradients en deux ensembles pour lesquels la distribution de richesse est, respectivement, monotone décroissante (Chapitre 5) et non-monotone, décroissante puis croissante (Chapitre 6). Nous avons également réalisé une collaboration scientifique avec le Professeur AKIKO MATSUO et M. TAKUYA MATSUMOTO (Université Keio, Yokohama, Japon) pour déterminer la capacité des simulations numériques à reproduire des cas tests issus de nos expériences (Chapitre 7).

Chapitre 3

Dispositif et protocole expérimentaux

Sommaire

3.1	Vue d'ensemble	43
3.1.1	Chambre d'étude	45
3.1.2	Tube d'amorçage	46
3.2	Génération des gradients de composition	47
3.3	Procédures d'injection et de mise à feu	49
3.4	Caractérisation des distributions de composition	51
3.4.1	Mesure de la concentration locale d'oxygène	51
3.4.2	Modélisation numérique du mécanisme de diffusion moléculaire	54

Ce chapitre décrit l'installation expérimentale réalisée pour cette étude et son fonctionnement. Le dispositif a été conçu et fabriqué à l'Institut Pprime au cours de la première année de thèse. Il est modulable de manière à pouvoir étudier différents types et orientations de gradients de composition, et mesurer et observer la dynamique de l'onde selon plusieurs directions. Il permet, en particulier, de satisfaire aux contraintes suivantes :

- assurer une unidirectionnalité des gradients de composition (élimination des effets de flottabilité) ;
- générer de manière contrôlée et reproductible des gradients de composition ;
- déterminer les distributions de richesse associées à ces gradients ;
- supprimer les effets transitoires résultant de l'initiation de la détonation ;
- supprimer les perturbations dynamiques de transmission de la détonation ;
- caractériser de manière continue le comportement dynamique de la détonation sur la totalité de l'extension spatiale du gradient de composition.

3.1 Vue d'ensemble

La Figure 3.1 donne une vue d'ensemble du banc expérimental. Il comprend deux parties principales (Figure 3.2), la chambre d'étude (1), verticale, où sont générées les non-uniformités et le tube d'amorçage (2) contenant un mélange uniforme détonable. Elles sont séparées de manière étanche par une vanne guillotine située en bas de la chambre, ouverte par un vérin pneumatique juste avant l'initiation de la détonation (Annexe D).

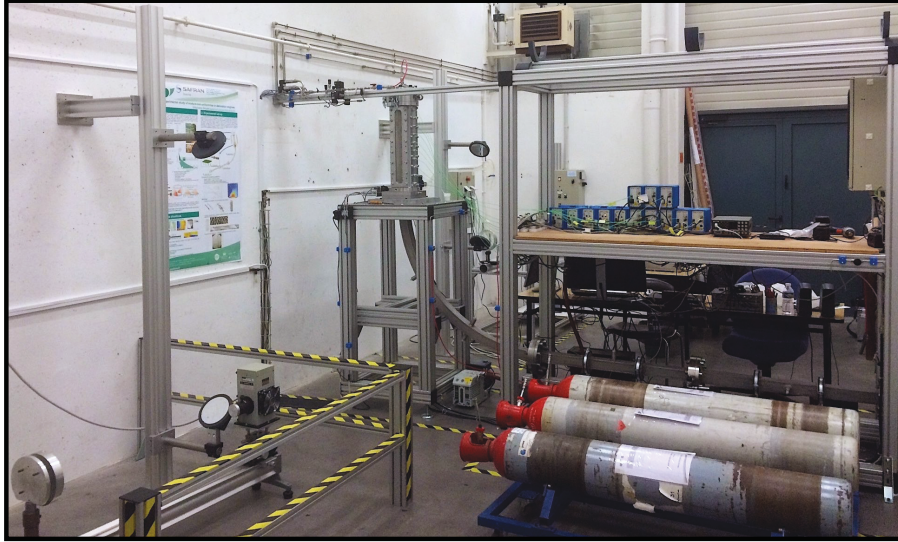


FIGURE 3.1 – Photographie du banc expérimental.

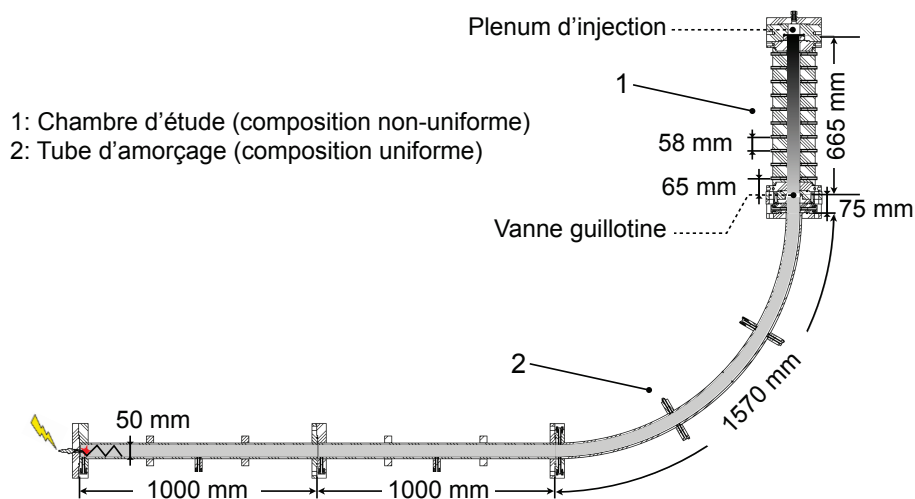


FIGURE 3.2 – Schéma du banc expérimental.

De manière à assurer une transmission continue de la détonation du tube d'amorçage à la chambre d'étude, le mélange dans le tube d'amorçage a une richesse uniforme choisie sensiblement égale à celle du mélange stratifié immédiatement en entrée de la chambre d'étude. Pour limiter le mouvement d'advection résultant de l'ouverture de la guillotine, les pressions initiales dans la chambre d'étude et dans le tube d'amorçage sont égales à au moins 5 % près. Les effets dynamiques dus au gradient de composition dans la chambre sont ainsi dissociés de ceux liés à la transmission de la détonation du tube d'amorçage à la chambre.

Le temps caractéristique de diffusion τ_{diff} est très long devant le temps d'arrivée de la détonation à l'entrée de la chambre τ_{deto} . Typiquement, pour une longueur $\delta \sim 1$ m, un coefficient de diffusion moléculaire $D_{\text{diff}} \sim 1$ cm²/s et une célérité d'onde de détonation $D \sim 1$ km/s, on obtient :

$$\frac{\tau_{\text{diff}}}{\tau_{\text{deto}}} = \frac{\delta}{D_{\text{diff}}} D \sim 10^7$$

Dès lors, nous pouvons considérer que la distribution non-uniforme générée dans la chambre d'étude est figée avant le tir, pendant le cours laps de temps qui sépare l'ouverture de la vanne guillotine (temps d'ouverture ~ 200 ms), laquelle déclenche automatiquement la mise à feu, et l'arrivée de la détonation à l'entrée de la chambre d'étude.

Les gradients de composition unidimensionnels parallèles à l'axe vertical de la chambre d'étude sont réalisés via un plenum et un circuit d'injection automatisé situés en haut de la chambre d'étude. La méthode de génération des gradients est détaillée dans la Section 3.2.

3.1.1 Chambre d'étude

La chambre d'étude est une enceinte verticale de section carrée 50×50 mm² et de longueur 665 mm réalisée en acier inoxydable. Ses quatre faces sont modulables permettant ainsi deux configurations d'étude. Dans la première, dite de visualisation (Figure 3.3), elle est munie de hublots positionnés en vis-à-vis sur deux faces opposées. Elle offre ainsi une zone de visualisation de longueur 500 mm et de largeur 50 mm. Ces hublots ont une épaisseur 25 mm et sont réalisés en BK7. Deux plaques en acier inoxydable positionnées sur les deux autres faces opposées complètent la configuration. Ces plaques peuvent recevoir sur leurs faces internes :

- des sondes à oxygène pour la caractérisation des gradients de composition (Sect. 3.4) ;
- des capteurs de pression dynamique pour la mesure de la vitesse moyenne longitudinale de l'onde en paroi (Sect. 4.1) ;
- des plaques d'acier poli-miroir pour l'enregistrement par la méthode des traces sur dépôt de carbone des dynamiques globales et locales des ondes de choc et de détonation (Sect. 4.2).

Dans la seconde configuration, dite opaque, la chambre d'étude est munie de quatre plaques en acier inoxydable identiques à celles de la configuration de visualisation.

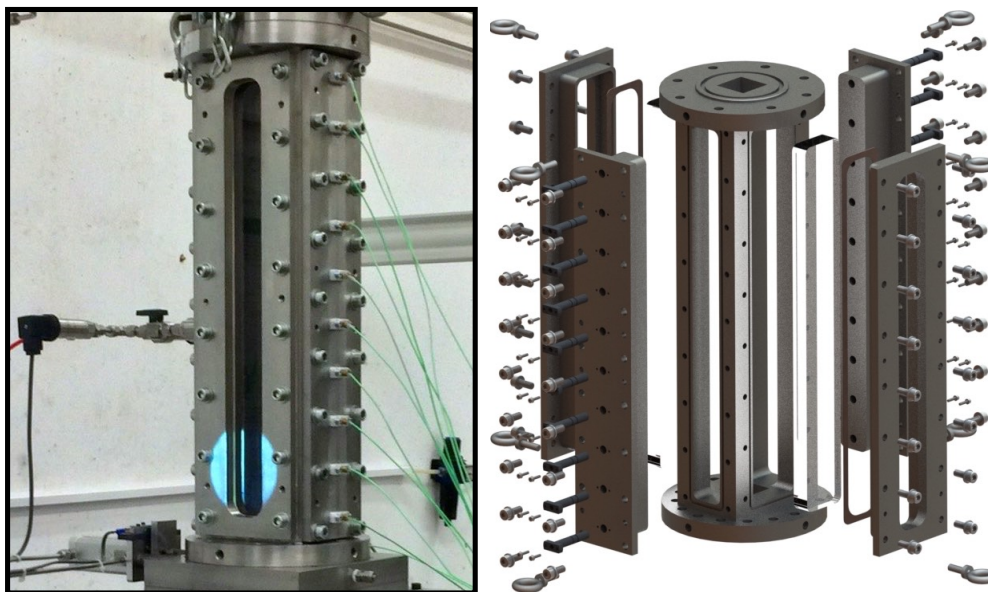


FIGURE 3.3 – Photographie et éclaté de la chambre d'étude en configuration de visualisation.

3.1.2 Tube d’amorçage

Le tube d’amorçage a une section carrée $50 \times 50 \text{ mm}^2$ identique à celle de la chambre d’étude. Il est réalisé par soudure à haute pression de quatre plaques d’acier inoxydable d’épaisseur 8 mm. Sa longueur totale, 3570 mm, est suffisante pour qu’une détonation autonome (régime CJ) soit générée avant l’entrée de la chambre. Ce tube est composé d’un tronçon droit et horizontal de longueur 2 m suivi d’un tronçon coudé à 90° de 1 m de rayon de courbure connecté à l’entrée de la chambre d’étude par la vanne guillotine (Figures 3.1, 3.2 et 3.4). Cette configuration “coudée” permet d’orienter la chambre d’étude verticalement et donc de générer des gradients de composition parallèles à la direction de propagation de la détonation, tout en permettant un positionnement de la chambre à une hauteur commode pour les utilisateurs et pour les accès optiques (Sects. 4.3 et 4.4). La courbure du tronçon coudé est suffisamment faible pour qu’elle n’influence pas la propagation de la détonation dans les mélanges d’amorçage considérés : pour s’assurer de l’autonomie de la détonation ($D = D_{CJ}$, §1.2.1) avant son entrée dans la chambre d’étude, nous mesurons sa célérité à l’aide de capteurs de pression dynamique positionnés sur les parois du tube d’amorçage (Sect. 4.1), en particulier sur les faces convexe et concave du tronçon coudé.

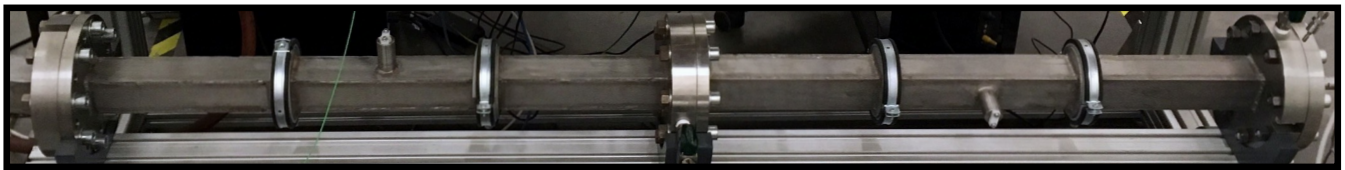


FIGURE 3.4 – Photographie du tube d’amorçage (tronçon droit).

L’initiation de la détonation est réalisée par une bougie de type automobile. L’étincelle générée dépose une énergie de l’ordre de 50 mJ qui initie une déflagration. Une “spirale de Shchelkin” de longueur 50 cm accélère rapidement cette déflagration qui transite alors vers une détonation par mécanisme de TDD [121] sur une longueur typique de l’ordre du mètre. Le tube est ensuite suffisamment long pour permettre la relaxation de la détonation très forte (célérité supérieure à la célérité CJ) résultant de la TDD vers le régime autonome CJ bien avant l’entrée de la chambre d’étude.

3.2 Génération des gradients de composition

La génération des gradients de composition repose sur l'injection séparée, séquentielle et automatisée de composants gazeux purs et sur le temps τ du processus de diffusion moléculaire entre ces composants. L'injection se fait dans un plenum de 137 cm^3 de volume situé à l'extrémité haute (avale) de la chambre d'étude, à l'opposé de la vanne guillotine (Figures 3.2 et 3.5). La chambre et le plenum ont même section droite et sont séparés par un empilement de deux disques poreux en acier fritté d'épaisseur 3 mm chacun et de porosité comprise entre 22 et 35 Darcys (Figure 3.5). Cet assemblage permet de supprimer tout effet de jet qui résulterait d'une injection ponctuelle des composants. Il assure l'injection des gaz dans la chambre d'étude sous forme de surfaces iso-composition strictement perpendiculaires à l'axe de la chambre.

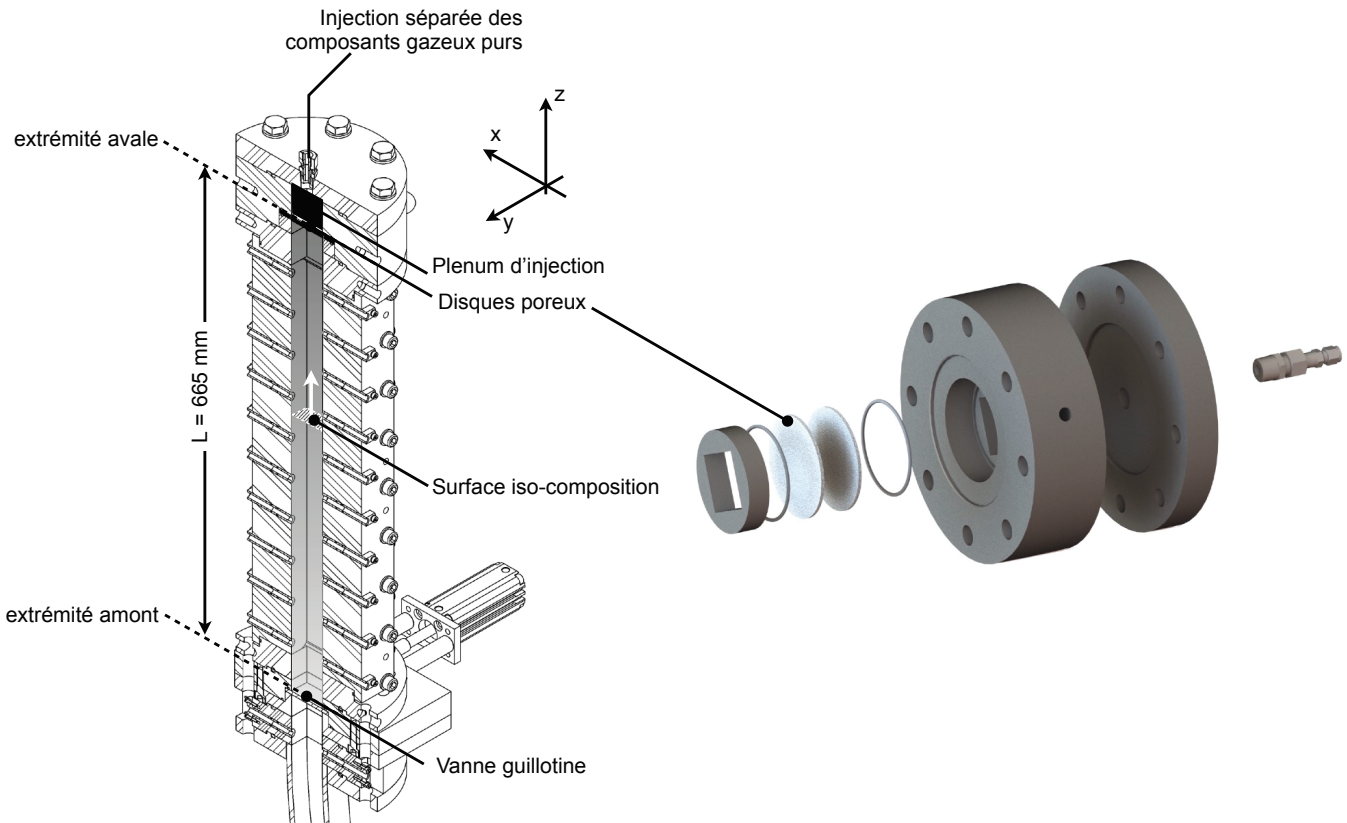


FIGURE 3.5 – Génération des gradients de composition : vue d'ensemble (gauche) et éclaté du plenum d'injection (droite).

Un circuit d'injection automatisée des composants purs, connecté au plenum d'injection, a été réalisé afin de satisfaire aux contraintes suivantes :

- les constituants gazeux du mélange stratifié (combustible, oxydant et éventuellement inerte) doivent être injectés dans la chambre d'étude en un temps le plus court possible. On limite ainsi la diffusion des gaz pendant la phase d'injection, ce qui permet d'obtenir des gradients de composition plus importants ;
- la procédure d'injection doit être reproductible ;
- les composants du mélange non-uniforme doivent être injectés par ordre décroissant de masse volu-

mique afin de supprimer les effets de flottabilité.

Ce circuit d'injection est constitué de trois lignes reliant le plenum d'injection à des bouteilles de gaz pur situées dans une alvéole à l'extérieur du hall expérimental (Figure 3.6).



FIGURE 3.6 – Photographie d'une portion du circuit d'injection automatisée.

Chaque ligne est munie de :

- un manodétendeur autopurgeant permettant la mise sous pression de la ligne entre une pression nominale maximale fixée à 10 bar et une pression minimale d'environ 2 bar ;
- un capteur de pression statique ;
- une vanne de réglage fin qui, en combinaison avec le réglage de la pression sur la ligne (par le manodétendeur), permet de moduler la vitesse d'injection ;
- une électrovanne pilotant le remplissage de la chambre ;
- un clapet anti-retour empêchant la formation d'un éventuel prémélange dans la ligne.

Le circuit comprend également une ligne de purge dédiée à l'évacuation des gaz brûlés à l'extérieur du hall expérimental et deux circuits d'injection de prémélanges connectés à la chambre d'étude et au tube d'amorçage. Un schéma de principe du circuit est donné en Annexe C.

3.3 Procédures d'injection et de mise à feu

L'injection automatisée des gaz est gérée par un automate piloté par un programme Labview proposant une interface utilisateur pour la saisie des paramètres du gradient de composition. Sa fonction principale est de gérer l'ouverture et la fermeture des électrovannes en se basant sur la comparaison (sans rétroaction) de la valeur de pression mesurée par un capteur de pression statique situé dans la chambre d'étude aux valeurs de consigne renseignées par l'utilisateur. La procédure d'injection dépend du type de distribution.

Dans le cas d'un mélange de distribution monotone de richesse décroissante, nous avons utilisé le couple propane/oxygène (C_3H_8/O_2). Le mélange non-uniforme est obtenu par :

1. injection manuelle d'un prémélange C_3H_8/O_2 dans le tube d'amorçage de la pression P_{vide} ($\lesssim 3$ mbar) à la pression initiale P_0 . Sa richesse ϕ_{tube} est déterminée de manière à être la plus proche possible de celle en entrée de la chambre d'étude pour le temps de diffusion τ considéré ;
2. injection manuelle d'un prémélange C_3H_8/O_2 de richesse $\phi_0^{chambre}$ dans la chambre d'étude de la pression P_{vide} à la pression P_{pm} , la vanne guillotine étant fermée ;
3. injection contrôlée d' O_2 dans la chambre d'étude, de la pressions P_{pm} jusqu'à atteindre la pression initiale P_0 .

Cette méthode d'injection limite à moins de 5 % les dépassements des valeurs de consigne. Ainsi, la transmission de la détonation du tube d'amorçage à la chambre d'étude au passage de la vanne guillotine est continue, sans aucune perturbation dynamique. La méthode d'injection présente l'intérêt d'être simple à mettre en œuvre et permet des temps d'injection courts $\tau_{inj} \lesssim 1$ min. Le mélange des gaz reste donc limité pendant la phase d'injection. La Figure 3.7 est un schéma de l'évolution de la pression dans la chambre d'étude au cours de la séquence d'injection. L'abscisse théorique $z = \zeta$ de la surface de séparation à la fin de l'injection, c'est-à-dire la position du front du dernier gaz injecté, peut être estimée par $\zeta \sim P_{pm}/P_0$. En considérant un coefficient de diffusion moléculaire typique $D_{diff} \sim 1$ cm²/s et un temps d'injection $\tau_{inj} \sim 60$ s, l'épaisseur de la couche de diffusion entre le prémélange et l'oxygène est donnée par :

$$\delta \sim \sqrt{D_{diff} \tau_{inj}} \quad (3.1)$$

Il vient $\delta \lesssim 8$ cm, soit 10 % de la longueur de la chambre d'étude (Figure 3.12).

Dans le cas d'un mélange de distribution non-monotone de richesse décroissante puis croissante, pour éviter l'effet de flottabilité dû à la différence de masse volumique entre le combustible et l'oxydant, nous avons utilisé le triplet propane/oxygène/éthane ($C_3H_8/O_2/C_2H_6$) : $\mathcal{M}_{C_3H_8}$ (44 g/mol) > \mathcal{M}_{O_2} (32 g/mol) > $\mathcal{M}_{C_2H_6}$ (30 g/mol). Les mélanges C_3H_8/O_2 et C_2H_6/O_2 possèdent des propriétés de détonation (Sect. 1.4) très proches (Annexe E). Ainsi, il n'y a pas d'effets dynamiques sur la propagation d'une détonation dans un mélange non-uniforme dont le combustible C_3H_8 est progressivement remplacé par le combustible C_2H_6 . Le mélange est réalisé selon la procédure décrite ci-dessus avec des injections contrôlées d' O_2 entre les pressions P_{pm} et P_{O_2} , en un temps $\tau_{inj}^{O_2}$, et de C_2H_6 entre P_{O_2} et P_0 , en un temps $\tau_{inj}^{C_2H_6}$ (Figure 3.7).

L'automate actionne la fermeture de la vanne guillotine avant le lancement de la procédure d'injection et son ouverture lorsque le temps de diffusion τ , fixé par l'utilisateur, est atteint. L'initiation de la détonation s'opère via la décharge inductive d'un courant électrique dans une bobine crayon connectée à la bougie d'allumage. Un détecteur de fin de course (Annexe D) assure que l'initiation de la détonation n'a lieu que

si la vanne guillotine est complètement ouverte afin d'éviter que l'impact de la détonation ne l'endommage. En pratique, les gradients de composition les plus forts pouvant être réalisés sont obtenus pour un temps de diffusion minimal $\tau \sim 40$ s. En deçà de ce temps, la réalisation d'une expérience de détonation (déconnexions physiques de la chambre d'étude et du tube d'amorçage des bouteilles de gaz, mise en fonctionnement des différents diagnostics, etc.) ne peut plus se faire sans mettre en danger l'utilisateur.

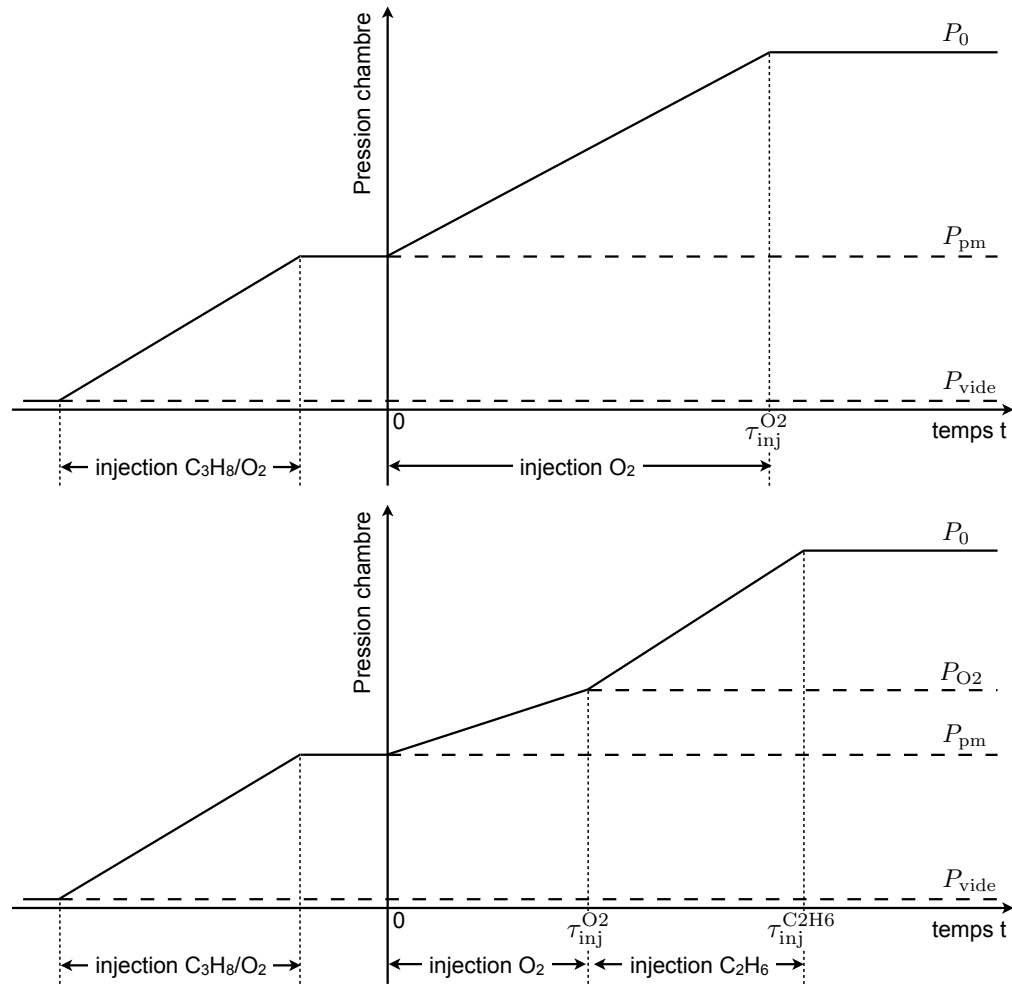


FIGURE 3.7 – Évolution schématique de la pression dans la chambre d'étude pendant la séquence d'injection dans le cas des gradients de compositions de C₃H₈/O₂ (haut) et de C₃H₈/O₂/C₂H₆ (bas).

3.4 Caractérisation des distributions de composition

Les distributions de composition ont été déterminées par la mesure de la concentration en oxygène à différentes abscisses le long de la chambre en fonction du temps de diffusion τ après injection du dernier composant. Pour effectuer cette mesure, nous avons utilisé des sondes à oxygène (§3.4.1) conçues à l'origine pour la recherche et les industries biologiques et pharmaceutiques mais pas pour les hautes pressions et températures dynamiques associées aux phénomènes de détonation. Nous avons donc été amenés à conduire nos expériences sous la forme de deux types de campagnes.

Le premier a été dédié aux mesures de concentration en oxygène (§3.4.1). L'une des parois de la chambre est alors équipée des sondes à oxygène. Les mesures ont ensuite été utilisées pour obtenir, par simulation numérique unidimensionnelle instationnaire du phénomène de diffusion, le coefficient de diffusion moléculaire effectif D_{diff} de nos compositions, selon les constituants, la pression et la température considérés (§3.4.2).

Le second a été dédié aux expériences de détonation dans des compositions non-uniformes. Les parois de la chambre sont alors dépourvues des sondes à oxygène, et équipées des moyens métrologiques habituels de détonique (Chapitre 4). Les distributions initiales de composition étaient alors contrôlées par le temps de diffusion τ après injection et déterminées par modélisation numérique du processus de diffusion et de remplissage de la chambre (§3.4.2). La mise à feu est effectuée à l'instant τ pour lequel la distribution initiale souhaitée est réalisée.

3.4.1 Mesure de la concentration locale d'oxygène

Nous avons caractérisé la distribution initiale de composition dans la chambre d'étude en mesurant la concentration locale d'oxygène à l'aide de dix sondes à oxygène Pyro Science OXF500PT-UHS positionnées le long de la chambre (Figure 3.8). Ces sondes fournissent une mesure sans prélèvement, non-intrusive, avec une résolution temporelle minimale de 0.3 s et une précision de $\pm 0.01\%$ à 1% d' O_2 et de $\pm 0.05\%$ à 20% d' O_2 (constructeur).

Une sonde est essentiellement constituée d'une fibre optique de diamètre $230\ \mu\text{m}$ à l'extrémité de laquelle se trouve un indicateur qui constitue le point de mesure, placé dans la chambre, et sur lequel est déposé une teinture fluorescente (REDFLASH dye). À l'autre extrémité, à l'extérieur ici, une source lumineuse rouge-orangée de longueur d'onde 610-630 nm et d'intensité modulée sinusoïdalement excite l'indicateur qui émet alors un signal de fluorescence dans le proche infrarouge (760-790 nm) dont le déphasage par rapport au signal incident permet de déterminer la concentration locale en oxygène selon la théorie de Stern-Vollmer [122] (Figure 3.9).

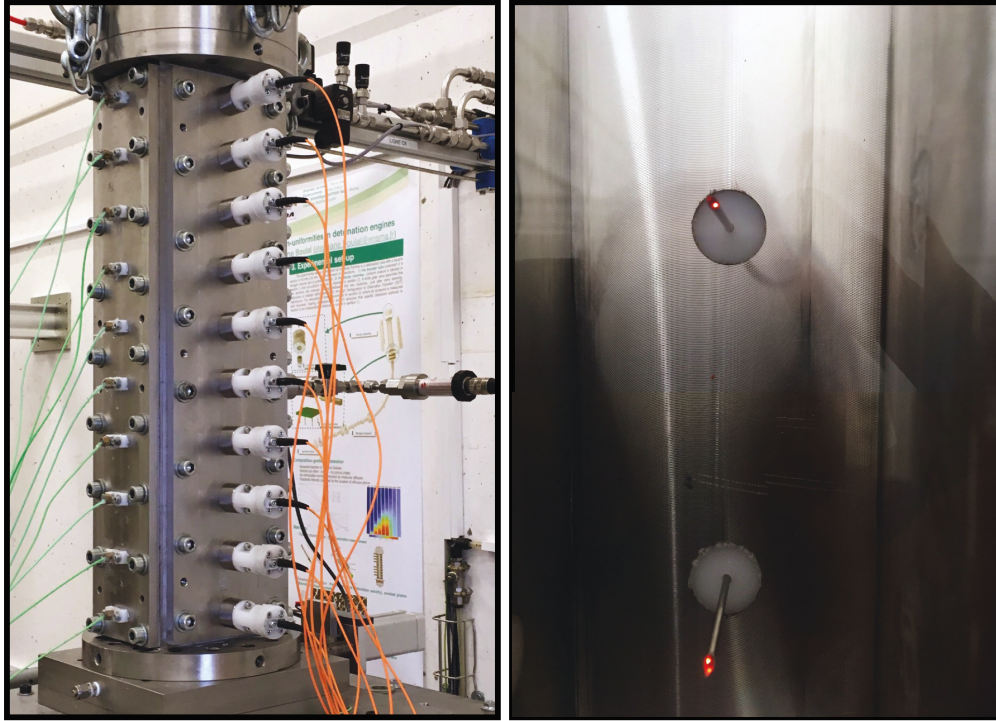


FIGURE 3.8 – Photographies des sondes à oxygène montées sur la chambre d'étude.

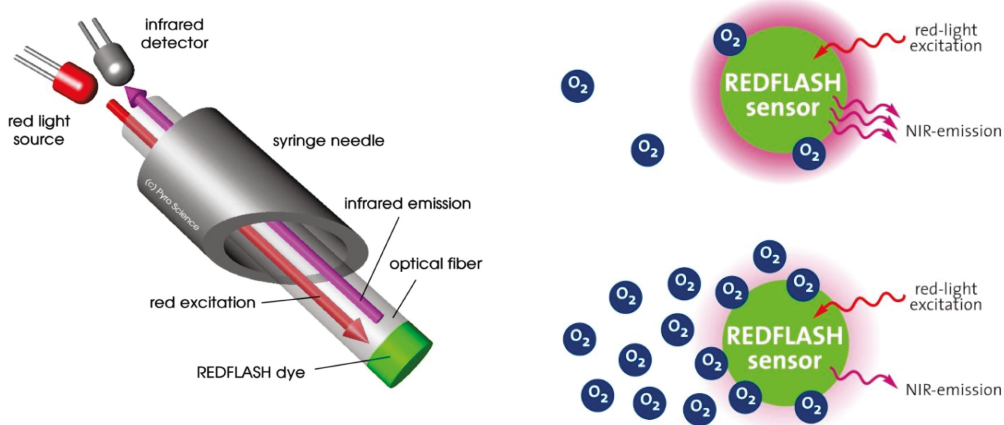


FIGURE 3.9 – Principe de fonctionnement des sondes à oxygène (©Pyroscience). Gauche : schéma de détail d'une sonde, droite, en haut : forte émission fluorescente pour une faible concentration en oxygène, en bas : faible émission fluorescente pour une forte concentration en oxygène.

Une campagne de qualification a été réalisée afin de déterminer les conditions d'utilisation des sondes à oxygène permettant une mesure fiable et précise de la composition dans la chambre d'étude. Nous avons injecté, dans une chambre de 400 cm^3 , des mélanges uniformes à différentes concentrations d'oxygène $X_{\text{O}_2}^{\text{ref}}$ connues, et réalisé pour chacun d'eux la mesure de leur concentration effective $X_{\text{O}_2}^{\text{exp}}$. Le paramètre déterminant la qualité de la mesure est l'écart χ de la concentration $X_{\text{O}_2}^{\text{ref}}$ à la concentration du mélange étalon $X_{\text{O}_2}^0$:

$$\chi = X_{\text{O}_2}^0 - X_{\text{O}_2}^{\text{ref}} \quad (3.2)$$

La Figure 3.10 donne, à gauche, la concentration mesurée $X_{O_2}^{\text{exp}}$ pour chaque concentration effective $X_{O_2}^{\text{ref}}$ et pour différentes valeurs de χ et, à droite, l'erreur absolue :

$$\delta X_{O_2} = X_{O_2}^{\text{exp}} - X_{O_2}^{\text{ref}} \quad (3.3)$$

en fonction de χ . Nous observons que plus le mélange étudié s'écarte des conditions d'étalonnage plus l'erreur de mesure est importante. Par commodité, et étant donné les mélanges considérés dans cette étude, nous avons choisi comme étalon la composition $C_3H_8 + 5O_2$ stœchiométrique des mélanges C_3H_8/O_2 , soit, $X_{O_2}^0 = 83.33\%$. Il apparaît, a posteriori, que dans l'ensemble de nos expériences, la concentration d'oxygène était comprise entre $\sim 70\%$ et 100% et donc que $|\chi| \lesssim 20\%$. À partir de la Figure 3.10, on peut donc considérer que l'erreur absolue δX_{O_2} des sondes dans nos conditions d'utilisation a toujours été inférieure à 1% .

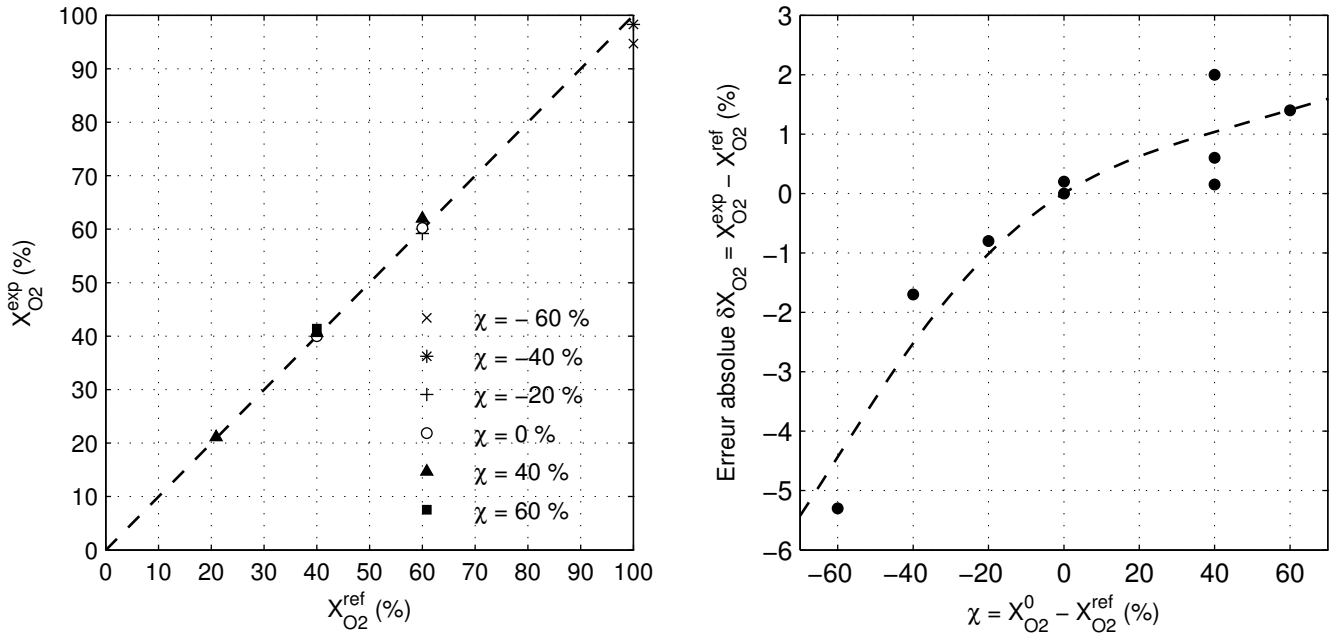


FIGURE 3.10 – Gauche : concentration d'oxygène mesurée $X_{O_2}^{\text{exp}}$ en fonction de la concentration d'oxygène effective $X_{O_2}^{\text{ref}}$ pour différents écarts à l'étalonnage χ . Droite : erreur absolue de mesure δX_{O_2} en fonction de l'écart au mélange étalon χ (symboles : mesures, ligne : meilleure tendance).

La mesure de la concentration d'oxygène X_{O_2} permet de déterminer directement l'évolution de la distribution de richesse du mélange que nous avons exprimée par la fonction $\phi(Z, \tau)$, où $Z = z/L$ est la position adimensionnée dans la chambre depuis son extrémité amont ($L = 665$ mm) et $\tau = t - \tau_{\text{inj}}$ le temps de diffusion compté à partir de la fin de la phase d'injection. De manière générale, on peut exprimer la richesse d'un mélange ϕ des compositions $\phi C_n H_m + \nu_{\text{st}} O_2$ ($n \geq 1, m \geq 4$) par :

$$\phi = \nu_{\text{st}} \frac{1 - X_{O_2}}{X_{O_2}} \quad (3.4)$$

où $\nu_{\text{st}} = n + m/4$ désigne le coefficient stœchiométrique molaire du mélange. Nous avons considéré en particulier des mélanges C_3H_8/O_2 et C_2H_6/O_2 pour lesquels ν_{st} vaut, respectivement 5 et 3.5. L'incertitude

sur la mesure de la richesse est :

$$\frac{\delta\phi}{\phi} = \frac{\delta X_{O_2}}{X_{O_2}(1 - X_{O_2})} \quad (3.5)$$

Dans le cas des gradients de composition de $C_3H_8/O_2/C_2H_6$ (Chapitre 6), la richesse locale de la distribution est définie par :

$$\phi = \begin{cases} \frac{\nu_{st}^{C_3H_8/O_2}(1-X_{O_2})}{X_{O_2}} = \frac{5(1-X_{O_2})}{X_{O_2}}, & \text{si } \frac{\partial X_{O_2}}{\partial z} \geq 0 \\ \frac{\nu_{st}^{C_2H_6/O_2}(1-X_{O_2})}{X_{O_2}} = \frac{3.5(1-X_{O_2})}{X_{O_2}}, & \text{si } \frac{\partial X_{O_2}}{\partial z} < 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

3.4.2 Modélisation numérique du mécanisme de diffusion moléculaire

La modélisation numérique du processus de diffusion repose sur l'intégration de la seconde équation de Fick, unidimensionnelle et instationnaire, par la méthode de Crank-Nicolson. Formellement, on considère un barreau de longueur $L = 665$ mm et on note $X(z, \tau)$ la concentration d'oxygène ou de combustible au point d'abscisse z et à l'instant τ . Nous avons considéré le modèle mathématique simplifié :

$$\begin{cases} \text{équation de Fick :} & \frac{\partial X}{\partial \tau} = D_{\text{diff}} \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \\ \text{conditions aux limites :} & \frac{\partial X}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial X}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0 \\ \text{conditions initiales :} & X(z, \tau = 0) = X_0(z) \end{cases} \quad (3.7)$$

L'approximation, vérifiable a posteriori (Figure 3.11), est que le coefficient de diffusion moléculaire D_{diff} est ici indépendant de l'espace et de la concentration locale. La fonction $X_0(z)$ désigne la distribution initiale dont nous décrivons ci-après la détermination. Nous avons considéré un pas d'espace $\Delta x = 6.7$ mm (soit ~ 100 points sur la longueur de la chambre) et un nombre de Fourier $Fo = D_{\text{diff}}\Delta\tau/\Delta x^2 = 2.0$. Dans un premier temps, il s'agissait de déterminer le coefficient de diffusion moléculaire D_{diff} à partir des mesures expérimentales des distributions d'oxygène. La simulation est initiée en considérant comme distribution initiale $X_0(z)$ la distribution mesurée à la fin de la phase d'injection $X_{O_2}(z = z_i, t = \tau_{\text{inj}})$ et interpolée sur le maillage par une fonction gaussienne : $X_0(z) = ae^{-bz^2}$. La Figure 3.11 compare l'évolution des distributions de richesse mesurées et calculées après l'injection (en $\tau_{\text{inj}} = 40$ s) d' O_2 dans un mélange uniforme de C_3H_8/O_2 avec le coefficient de diffusion effectif $D_{\text{diff}} = 0.7$ cm²/s. Pour cette valeur, on observe un très bon accord des simulations et des mesures. Ceci confirme également que notre méthode de génération des gradients de composition produit des distributions de composition unidimensionnelles planes. Cet accord démontre surtout que les distributions de richesse peuvent être déterminées précisément par l'utilisation du modèle numérique (3.7) – avec un coefficient de diffusion moléculaire effectif D_{diff} correctement ajusté – sans nécessité de mesures systématiques de la composition.

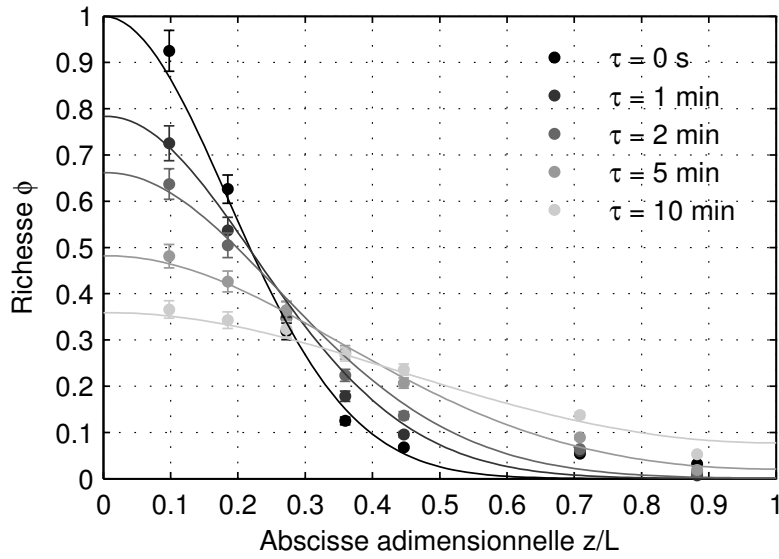


FIGURE 3.11 – Exemple d'évolution de la distribution de richesse au sein de la chambre d'étude en fonction du temps τ de diffusion pour des compositions non-uniformes de $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$ (symboles : mesures des sondes à oxygène, lignes : simulations numériques, $P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K, $L = 665$ mm).

Selon la théorie de la diffusion moléculaire (BIRD et al. [123]), le coefficient de diffusion moléculaire théorique $D_{\text{diff}}^{\text{th}}$ (cm^2/s), pour une paire de gaz A/B non polaires, par exemple la paire $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$, peut être déterminé par la corrélation :

$$D_{\text{diff}}^{\text{th}}(\text{A/B}, P, T) = 2.745 \times 10^{-4} \frac{(P_{\text{A}}^c P_{\text{B}}^c)^{1/3} \sqrt{1/\mathcal{M}_{\text{A}} + 1/\mathcal{M}_{\text{B}}}}{(T_{\text{A}}^c T_{\text{B}}^c)^{0.495}} \left(\frac{T^{1.823}}{P} \right) \quad (3.8)$$

où P est la pression du mélange (atm), T sa température (K), $P_{\text{A(B)}}^c$, $T_{\text{A(B)}}^c$ et $\mathcal{M}_{\text{A(B)}}$ sont respectivement la pression critique (atm), la température critique (K) et la masse molaire (g/mol) du gaz A (B). Pour le cas de la Figure 3.11 (paire $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$), on obtient $D_{\text{diff}}^{\text{th}}(200 \text{ mbar}, 290 \text{ K}) = 0.56 \text{ cm}^2/\text{s}$. Cette valeur théorique est 20 % plus faible que la valeur effective déterminée plus haut ($0.7 \text{ cm}^2/\text{s}$). L'écart provient peut être d'une agitation de faible amplitude du mélange, générée lors de la phase d'injection et qui intensifie la diffusion. Il existe ainsi autant de valeurs D_{diff} que de conditions d'injection (pression, durée d'injection).

Pour le cas des gradients de composition de $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$, nous avons donc inclus à notre modèle numérique (3.7) :

- la détermination du coefficient effectif de diffusion D_{diff} . On utilise la corrélation empirique (3.8) de BIRD et al. [123] et le facteur de correction η tel que :

$$D_{\text{diff}}^{\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2}(P, T) = \eta D_{\text{diff}}^{\text{th}}(\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2, P, T) \quad (3.9)$$

et dont la valeur a été déterminée précédemment à $\eta \sim 1.25$.

- la prise en compte du mélange des composants pendant le temps d'injection τ_{inj} . On estime l'épaisseur de la couche de mélange δ à l'aide de la relation (3.1) en considérant un coefficient de diffusion moyen

sur le temps d'injection (Figures 3.7 et 3.12) :

$$\begin{cases} \delta = \sqrt{D_{\text{diff}} \tau_{\text{inj}}} \\ \overline{D_{\text{diff}}} = \frac{1}{2} D_{\text{diff}}^{\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2} (P_{\text{pm}}, T_0) + \frac{1}{2} D_{\text{diff}}^{\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2} (P_0, T_0) \\ \zeta = P_{\text{pm}}/P_0 \end{cases} \quad (3.10)$$

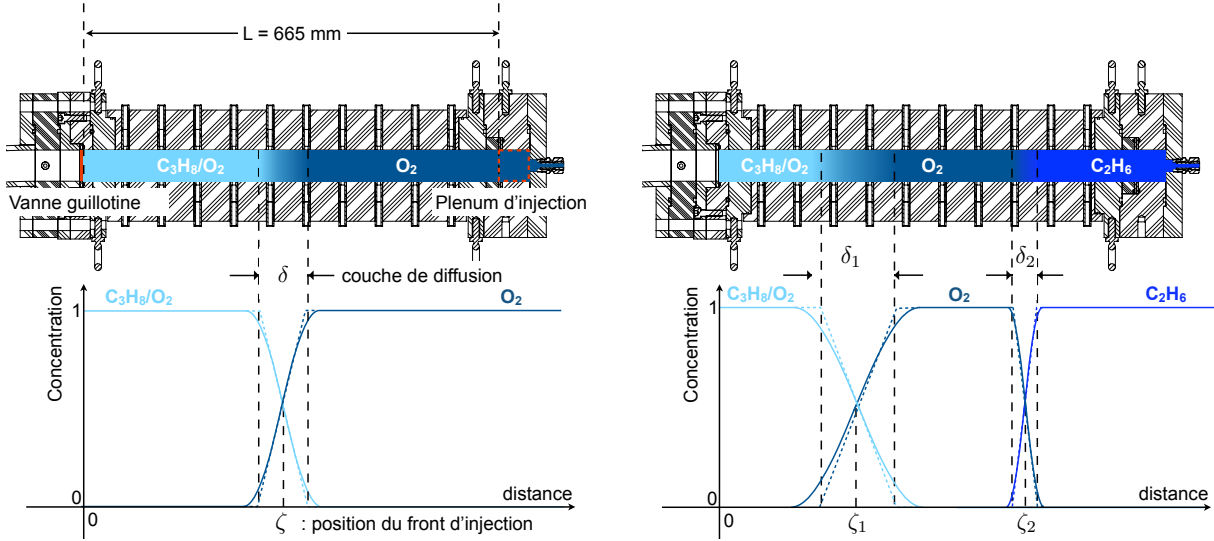


FIGURE 3.12 – Schémas des distributions de composition en fin de séquence d'injection. Gauche : compositions de $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$, droite : compositions de $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2/\text{C}_2\text{H}_6$.

La distribution de composition à la fin de la phase d'injection est définie en trois morceaux :

$$X_0(z) = \begin{cases} X_{\text{O}_2}^g = \frac{5}{5+\phi_0^{\text{chambre}}}, & \text{pour } 0 \leq z \leq \zeta - \delta/2 \\ X_{\text{O}_2}^g + \left(\frac{X_{\text{O}_2}^d - X_{\text{O}_2}^g}{\delta} \right) (z - \zeta + \frac{\delta}{2}), & \text{pour } \zeta - \delta/2 < z \leq \zeta + \delta/2 \\ X_{\text{O}_2}^d = 1, & \text{pour } \zeta + \delta/2 < z \leq L \end{cases} \quad (3.11)$$

où $X_{\text{O}_2}^g$ et $X_{\text{O}_2}^d$ sont, respectivement, les concentrations en oxygène du prémélange et injectée.

Pour le cas des gradients de compositions de $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2/\text{C}_2\text{H}_6$, le meilleur ajustement du coefficient de diffusion moléculaire global est $D_{\text{diff}} = 0.55 \text{ cm}^2/\text{s}$. En notant ζ_1 et ζ_2 , les abscisses de séparation théoriques, à la fin de l'injection, entre le prémélange et l'oxygène et entre l'oxygène et l'éthane, respectivement et δ_1 et δ_2 , les épaisseurs des couches de diffusion aux deux interfaces (Figure 3.12), nous avons :

$$\begin{cases} \delta_1 = \sqrt{D_{\text{diff},1} \tau_{\text{inj}}^{\text{C}_2\text{H}_6}} \\ \delta_2 = \sqrt{D_{\text{diff},2} (\tau_{\text{inj}}^{\text{C}_2\text{H}_6} - \tau_{\text{inj}}^{\text{O}_2})} \\ \overline{D_{\text{diff},1}} = \frac{1}{2} D_{\text{diff}}^{\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2} (P_{\text{pm}}, T_0) + \frac{1}{2} D_{\text{diff}}^{\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2} (P_0, T_0) \\ \overline{D_{\text{diff},2}} = \frac{1}{2} D_{\text{diff}}^{\text{C}_2\text{H}_6/\text{O}_2} (P_{\text{O}_2}, T_0) + \frac{1}{2} D_{\text{diff}}^{\text{C}_2\text{H}_6/\text{O}_2} (P_0, T_0) \\ \zeta_1 = P_{\text{pm}}/P_0 \\ \zeta_2 = P_{\text{O}_2}/P_0 \end{cases} \quad (3.12)$$

Le modèle (3.11) est modifié pour estimer la distribution $X_0(z)$ à la fin de la phase d'injection selon une fonction définie en cinq morceaux :

$$X_0(z) = \begin{cases} X_{O_2}^g = \frac{5}{5+\phi_0^{\text{chambre}}}, \text{ pour } 0 \leq z \leq \zeta_1 - \delta_1/2 \\ X_{O_2}^g + \left(\frac{X_{O_2}^c - X_{O_2}^g}{\delta_1} \right) \left(z - \zeta_1 + \frac{\delta_1}{2} \right), \text{ pour } \zeta_1 - \delta_1/2 < z \leq \zeta_1 + \delta_1/2 \\ X_{O_2}^c = 1, \text{ pour } \zeta_1 + \delta_1/2 < z \leq \zeta_2 - \delta_2/2 \\ X_{O_2}^c + \left(\frac{X_{O_2}^d - X_{O_2}^c}{\delta_2} \right) \left(z - \zeta_2 + \frac{\delta_2}{2} \right) \text{ pour } \zeta_2 - \delta_2/2 < z \leq \zeta_2 + \delta_2/2 \\ X_{O_2}^d = 0, \text{ pour } \zeta_2 + \delta_2/2 < z \leq L \end{cases}$$

Les modèles ci-dessus sont fondés sur des hypothèses simplificatrices a priori fortes, soit un coefficient de diffusion constant et, lors des injections à trois étapes, une épaisseur de couche de diffusion δ_1 constante. Ces modèles peuvent donc être améliorés bien que les résultats obtenus montrent que les hypothèses retenues permettent de représenter les mesures avec une précision suffisante compte-tenu des erreurs expérimentales.

Chapitre 4

Techniques de mesure

Sommaire

4.1	Capteurs de pression dynamique	59
4.2	Enregistrements sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone	62
4.3	Visualisation par strioscopie	63
4.4	Spectroscopie par chimiluminescence	65

Au cours de ce travail, nous avons utilisé plusieurs techniques de mesure pour caractériser la dynamique de l'onde de détonation dans la chambre d'étude. Nous avons mis en œuvre des techniques conventionnelles comme les capteurs de pression dynamiques et les traces sur dépôt de carbone et deux techniques de visualisation couplées à de la cinématographie ultra-rapide, l'une classique, la strioscopie et l'autre, moins utilisée en détonique, la spectroscopie par chimiluminescence du radical CH^* . Les chaînes de mesure employées possèdent des fréquences d'acquisition très élevées, de l'ordre du MHz en raison des très grandes célérités des phénomènes de détonation.

4.1 Capteurs de pression dynamique

Le passage du front de l'onde (de détonation, de choc ou de déflagration) est enregistré au moyen de capteurs de pression piézo-électriques Kistler 603B à compensation d'accélération, et de temps de réponse $1 \mu\text{s}$. Leur amplitude de mesure est de 200 bar pour des températures jusqu'à 200°C , et leur fréquence naturelle est de $\sim 300 \text{ kHz}$. Chaque capteur est couplé à un amplificateur de charge Kistler 5018A de 200 kHz de bande passante convertissant la sollicitation mécanique en signal électrique (0-10 V) dont l'acquisition est réalisée à l'aide d'un module Graphtec Hard Disk Logger GL1100 proposant jusqu'à 16 voies d'entrées. Les capteurs possèdent une surface active de 5 mm de diamètre et sont montés dans des supports en Téflon. Ceux-ci ont pour fonction d'amortir les petites vibrations parasites induites lors de la propagation de la détonation avant son arrivée sur le capteur. Ces vibrations se propagent dans les parois métalliques du tube d'amorçage et de la chambre. Elles ont une célérité de l'ordre de celle du son dans l'acier, soit $\sim 5 \text{ km/s}$, donc beaucoup plus élevée que celles des détonation habituelles dans les gaz, soit $\sim 2 \text{ km/s}$. La surface active du capteur est installée en léger retrait des faces internes de la chambre et du tube. Elle est recouverte d'une fine couche de silicone, d'épaisseur $\sim 1 \text{ mm}$, à l'arasement des faces internes, destinée à protéger les capteurs du choc thermique au passage de l'onde.

Les signaux de pression donnent une première indication sur la nature de l'onde. En particulier, une montée brusque de la pression suivie d'une détente présentant des oscillations de hautes fréquences et amplitudes sera caractéristique d'une détonation multicellulaire CJ en moyenne (Figure 4.1a).

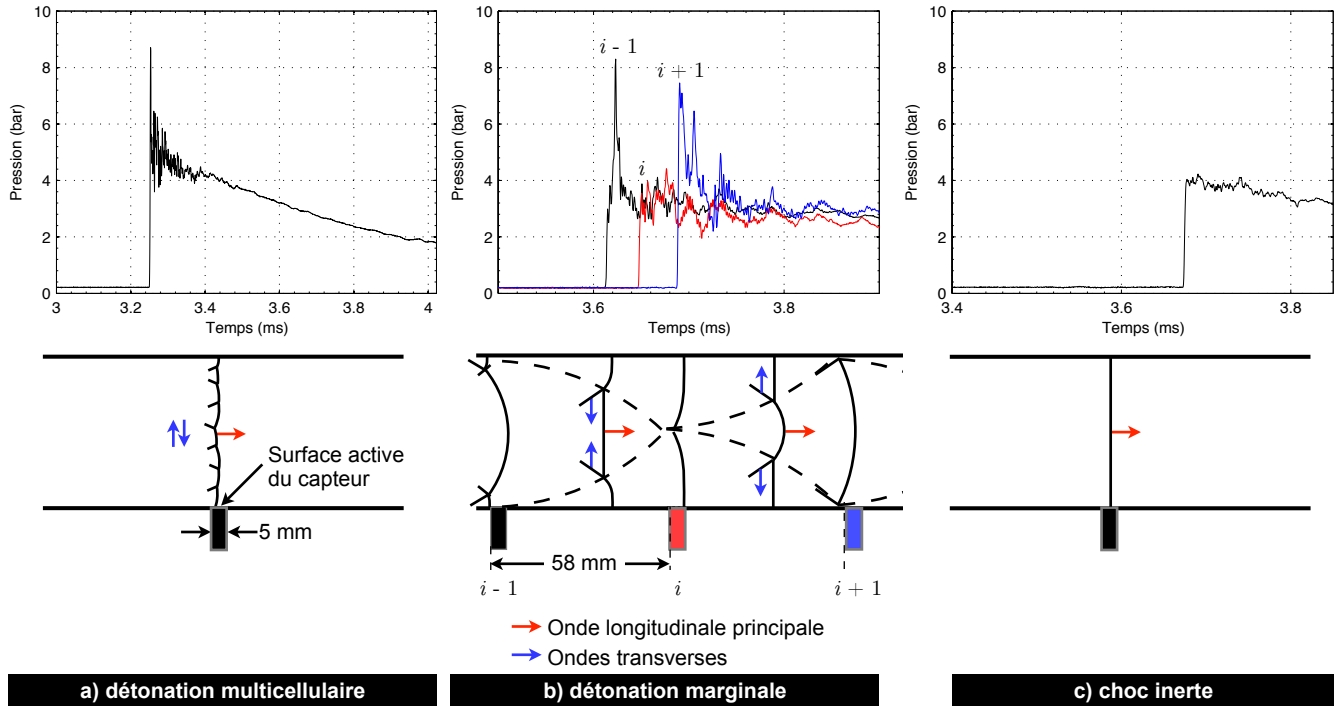


FIGURE 4.1 – Exemples de signaux de pression enregistrés pour une détonation : multicellulaire (a), marginale (b) et pour un choc inerte (c).

Le premier pic de pression résulte du passage de l'onde principale à propagation longitudinale et les oscillations à haute fréquence dans la détente des produits de détonation résultent de la combinaison de collisions d'ondes de choc transverse avec la surface du capteur et des phénomènes de vibrations parasites. Il est donc difficile de déterminer de manière quantitative le nombre n de modes transverse derrière l'onde longitudinale à partir des enregistrements de pression. Une détonation marginale présente des oscillations de pression derrière le choc longitudinal principal de fréquences plus faibles. Selon qu'une onde transverse impacte la paroi avant ou après la position du capteur, le premier pic de pression sera ainsi plus ou moins important (Figure 4.1b). La Figure 4.1c donne un signal de pression pour une onde de choc inerte, sans réaction chimique.

Nous avons positionné dix capteurs (P_i , $i = 4, 13$) espacés de 58 mm le long de la chambre d'étude (Figure 4.2). Le premier capteur est situé à 65 mm de l'entrée de la chambre d'étude ($Z = 0$). Nous avons également utilisé trois capteurs dans le tube d'amorçage (P_i , $i = 1, 3$). Le premier est positionné à l'entrée du tronçon coudé et les deux autres en vis-à-vis, à sa sortie. On peut ainsi s'assurer que l'onde de détonation se propageant dans le tube d'amorçage n'est pas perturbée par la courbure du tube pour les conditions initiales considérées, et qu'à l'entrée de la chambre d'étude la détonation se propage en régime autonome moyen CJ. La Table 4.1 fournit les positions z_i des capteurs de pressions.

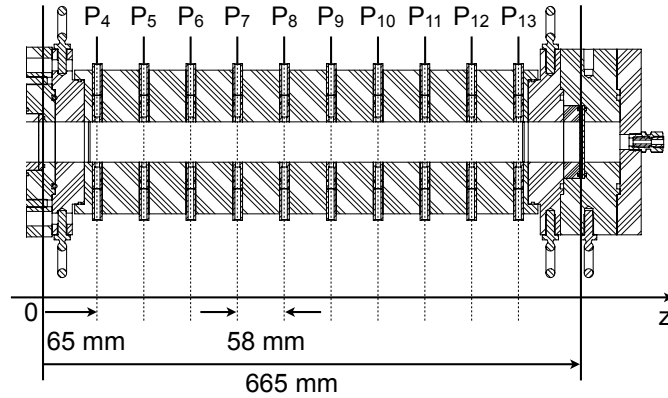


FIGURE 4.2 – Répartition des capteurs de pression dynamique dans la chambre d'étude.

Capteur	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6	P_7	P_8	P_9	P_{10}	P_{11}	P_{12}	P_{13}
z_i (mm)	-1665	-62.5	-62.5	65.5	123.5	181.5	239.5	297.5	355.5	413.5	471.5	529.5	587.5

TABLE 4.1 – Positions z_i des capteurs de pression dynamique le long du banc expérimental.

L'instant d'arrivée de l'onde est facilement repérable par la discontinuité brutale de pression engendrée au passage d'un choc droit (Figure 4.1). Il est ainsi possible d'obtenir une vitesse moyenne longitudinale de l'onde en paroi :

$$D_{i+1} = \frac{\Delta z}{\Delta t} = \frac{z_{i+1} - z_i}{t_{i+1} - t_i} \quad (4.1)$$

où t_i représente l'instant d'arrivée du choc à la position z_i . L'incertitude δD sur la mesure de la vitesse moyenne de l'onde est obtenue à partir de celles sur la localisation d'un capteur (δz) et sur l'instant d'arrivée de l'onde sur ce capteur (δt), soit :

$$\frac{\delta D}{D} = \frac{\delta z}{\Delta z} + \frac{\delta t}{\Delta t} \quad (4.2)$$

Ces incertitudes peuvent être estimées, respectivement, par la tolérance d'usinage $\delta z = \pm 0.2$ mm et par le temps de réponse du capteur, soit $\delta t = 1 \mu s$. Pour une vitesse d'onde $1000 \text{ m/s} \lesssim D \lesssim 2500 \text{ m/s}$, l'encadrement de l'incertitude sur la vitesse moyenne de l'onde est : $20 \text{ m/s} \lesssim \delta D \lesssim 115 \text{ m/s}$ et celui sur l'incertitude relative est : $2 \% \lesssim \left| \frac{\delta D}{D} \right| \lesssim 5 \%$.

4.2 Enregistrements sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone

La technique d'enregistrement sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone est une méthode classique (MACH et WOSYKA [124]) qui permet d'obtenir simplement les trajectoires des lieux d'interaction d'ondes de choc. En détonique, cette technique a été mise en œuvre par DENISOV et TROSHIN [13] pour identifier la structure cellulaire des détonations dans les gaz (§1.4.1). Les points triples du front de détonation érodent le dépôt de carbone et leurs trajectoires dessinent un maillage, plus ou moins régulier, en forme de losange et dont le motif périodique est appelé "cellule de détonation" (Figure 4.3). La largeur d'une cellule de détonation λ constitue une mesure fondamentale dans l'étude du phénomène des détonation car les comportements dynamiques de la détonation sont auto-semblables par rapport à λ (§1.4.1). Plus généralement, cette technique permet d'identifier la plupart des phénomènes de la dynamique des détonations.

Nous avons utilisé des plaques d'acier poli-miroir d'épaisseur 1 mm et de longueur 550 mm fixées sur les parois internes de la chambre d'étude. Le dépôt de carbone est réalisé au moyen d'une flamme d'acétone dont la combustion riche avec l'air ambiant recouvre la plaque d'une mince couche de suies très fines. Nous avons utilisé jusqu'à quatre plaques montées sur les quatre faces constitutives de la chambre d'étude. De cette manière, il est possible d'analyser continûment le mouvement tridimensionnel des ondes transverses, en particulier dans les situations de propagations marginales (§1.4.2) et de réamorçage (Sect. 1.5). Les plaques sont fixées de manière à perturber le moins possible la détonation au moyen de vis noyées. La largeur locale des cellules de détonation $\lambda(z)$ peut être estimée par (Figure 4.3) :

$$\lambda(z) = \frac{2h}{N(z)} \quad (4.3)$$

où h est la largeur d'une plaque et $N(z)$ le nombre d'intersection de trajectoires de points triples avec la normale à la direction de propagation, à la position z considérée.

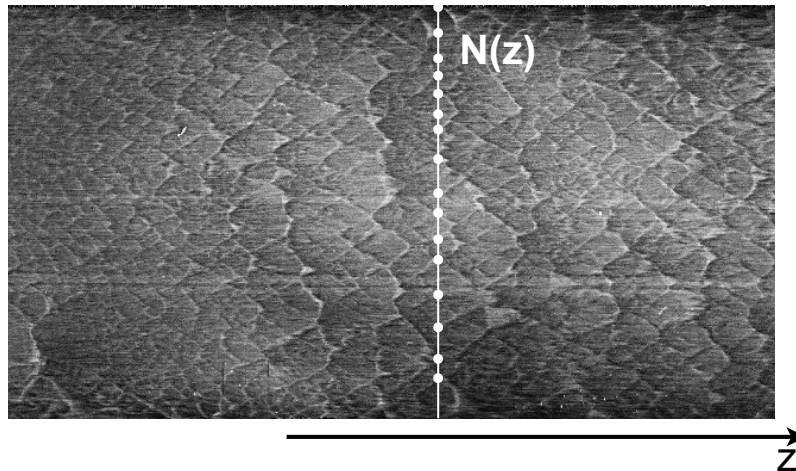


FIGURE 4.3 – Exemple d'enregistrement sur plaques recouvertes d'un dépôt de de carbone du passage d'une onde de détonation dans un mélange C_2H_6/O_2 ($P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K).

4.3 Visualisation par strioscopie

Le premier des deux diagnostics optiques que nous avons utilisé est la strioscopie couplée à une caméra ultra-rapide. Le principe de la méthode (FOUCAULT [125] et TÖPLER [126]) repose sur la déviation des rayons lumineux induite par les gradients spatiaux de masse volumique dans un écoulement. Il s'agit d'une application de la loi de Gladstone–Dale [127] selon laquelle les variations de masse volumique sont proportionnelles aux variations d'indice de réfraction (Figure 4.4). De manière plus générale, les écoulements compressibles présentent de forts gradients de masse volumique, ce qui explique l'utilisation très répandue de cette méthode strioscopique dans ces domaines de recherche.

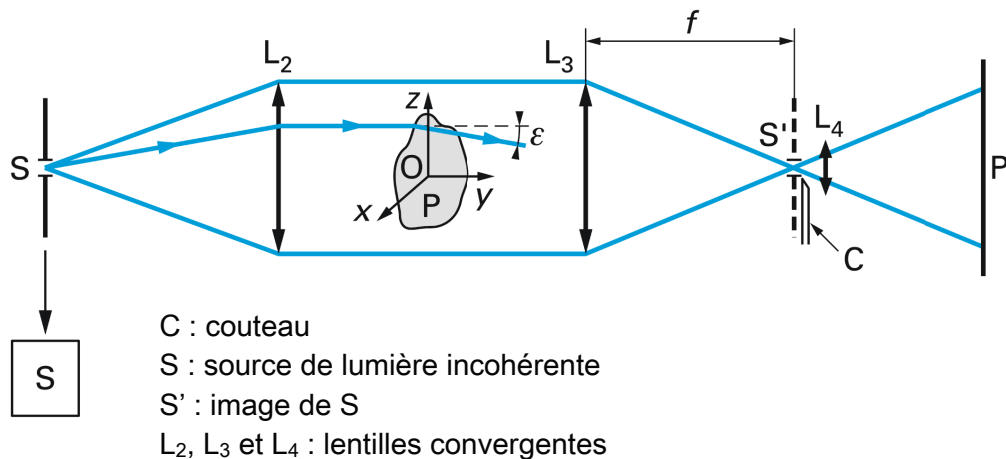


FIGURE 4.4 – Schéma de principe (PRENEL et SMIGIELSKI [127]) de l'imagerie par strioscopie en éclairage incohérent.

Le banc d'imagerie par strioscopie que nous avons conçu et mis en œuvre (Figure 4.5) est une variante du montage classique en Z. La source de lumière incohérente est une lampe à vapeur de mercure Newport Oriel 67006 50-500 W. Une source quasi-ponctuelle est obtenue à partir du faisceau de lumière issu de la lampe au moyen d'un diaphragme. Ce dernier est positionné à l'un des foyers d'un miroir sphérique de focale 2 m et de 10 cm de diamètre afin de générer un faisceau réfléchi parallèle. Deux miroirs plans inclinés à 45° renvoient alors le faisceau vers la zone de visualisation de la chambre d'étude puis deux autres vers le banc de collection. Deux de ces miroirs plans sont positionnés sur des glissières verticales permettant ainsi la visualisation de la totalité de la chambre d'étude par expériences successives (Figure 4.6).

Le banc de collection est classiquement constitué de :

- une lentille convergente de 1 m de focale qui re-focalise le faisceau parallèle
- un couteau constitué par une lame de rasoir positionné au niveau de la tache focale et dont le rôle est de bloquer le rayon dévié par l'écoulement. Il permet de régler la sensibilité du système de strioscopie.
- une lentille convergente de 20 cm de focale permettant de reconstituer l'image.
- une caméra ultra-rapide Shimadzu HPV-2 utilisée à ses capacités maximales, c'est-à-dire, une fréquence d'enregistrements de 1 MHz (10^6 images/s) et un temps d'exposition de 250 ns. La résolution du capteur CCD est de 312×260 pixels.

La longueur de la zone éclairée et reprise sur la caméra est ≈ 84 mm, soit, 13 % de la longueur totale de la chambre, ce qui donne une résolution ~ 3 pixels/mm.

La méthode strioscopique fournit une information continue et qualitative de la dynamique des fronts d'onde. Elle présente toutefois l'inconvénient d'intégrer l'information sur les 50 mm de profondeur de la chambre d'étude.

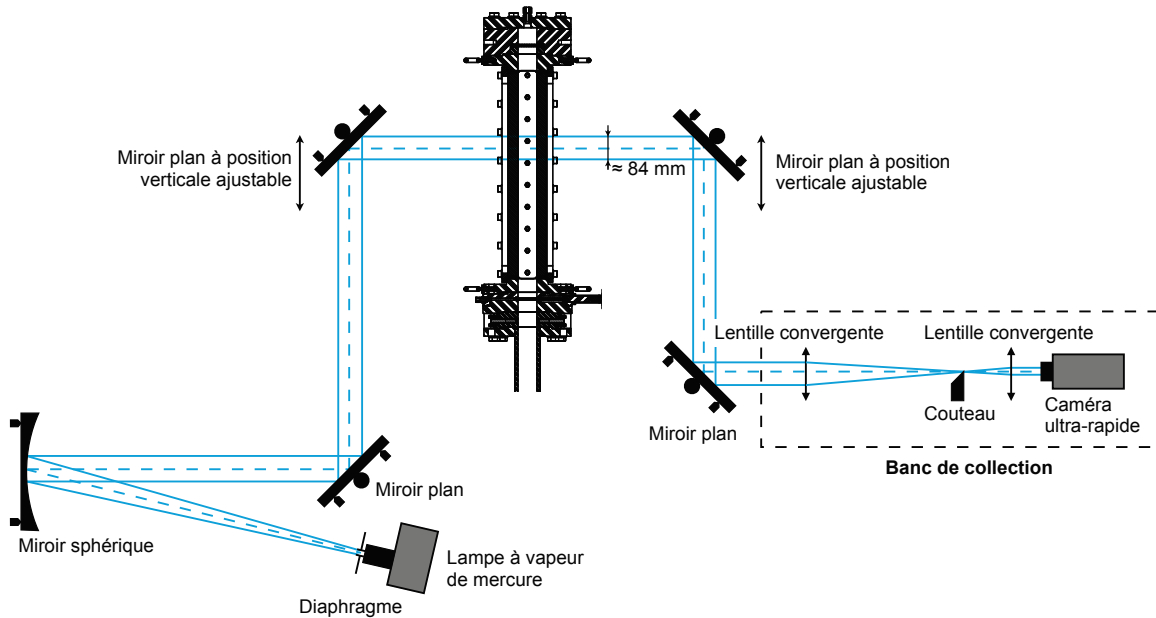


FIGURE 4.5 – Schéma de notre montage strioscopique.



FIGURE 4.6 – Photographie du banc d'imagerie strioscopique (gauche : émission, droite : collection).

4.4 Spectroscopie par chimiluminescence

L'émission de lumière par chimiluminescence se produit lorsque des molécules excitées retournent à leur état fondamental en émettant des photons à une certaine longueur d'onde λ_{R^*} . L'exemple classique pour les processus de combustion est la forte émission du spectre de bande du radical OH^* dans les zones de réactions d'hydrocarbures et d'oxygène [128] :



où le terme $h\nu_{\text{OH}^*}$ désigne le quantum d'énergie associé à l'émission d'un photon. Dans les mélanges $\text{C}_n\text{H}_m/\text{O}_2$, les principales espèces excitées sont les radicaux OH^* , CH^* , CO_2^* et C_2^* dont les bandes d'émission se situent dans le domaine ultraviolet-visible (Figure 4.7). La Figure 4.8 donne un exemple de mécanisme cinétique simplifié de l'oxydation du méthane (LAUER [129]).

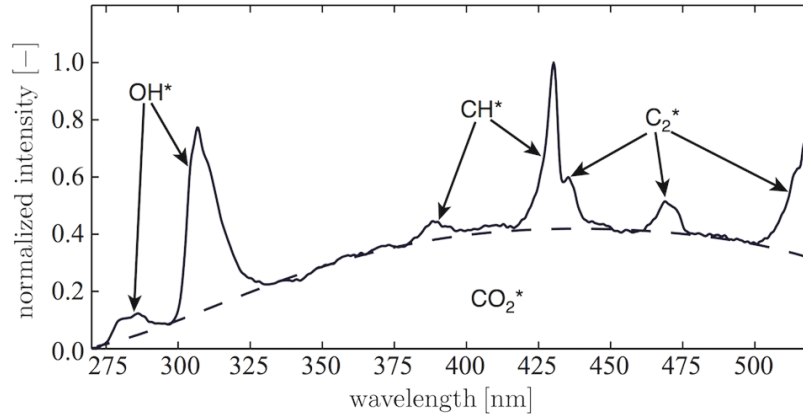


FIGURE 4.7 – Spectre de chimiluminescence (intensité normalisée en fonction de la longueur d'onde) d'une flamme méthane/air atmosphérique (LAUER [129]).

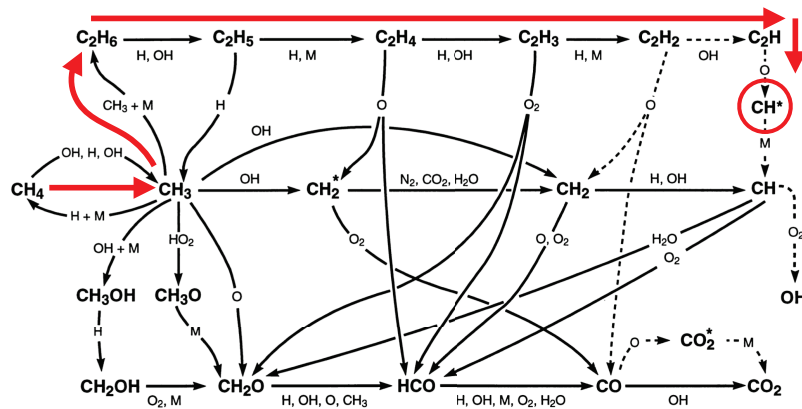


FIGURE 4.8 – Voies réactionnelles de l'oxydation du méthane (NAJM et al. [130]). Le chemin réactionnel de la production de CH^* est représenté en rouge.

L'intensité d'émission, c'est-à-dire i_{R^*} le taux de production de photons par unité de volume, d'une espèce excitée R^* donnée est proportionnelle à sa concentration $[R^*]$ selon l'expression ([131]) :

$$i_{R^*} (\text{mole de photons/cm}^3/\text{s}) = A_{R^*} (1/\text{s}) \times [R^*] (\text{mole de photons/cm}^3) \quad (4.5)$$

où A_{R^*} est le coefficient d'émission spontanée d'Einstein de l'espèce R^* . Dans la pratique, il est possible d'enregistrer l'intensité d'émission I_{R^*} , intégrée selon les épaisseurs de flamme ou de détonation, en utilisant un filtre optique passe-bande centré sur la longueur d'onde d'émission λ_{R^*} du radical considéré :

$$I_{R^*} (\text{mole de photons/cm}^2/\text{s}) = \int_0^h i_{R^*} dx = \int_0^h \int_{\lambda_{R^*} - \varepsilon/2}^{\lambda_{R^*} + \varepsilon/2} i_{\text{totale}} d\lambda dx \quad (4.6)$$

où i_{totale} désigne le signal d'intensité de l'émission chimiluminescente sur la totalité du spectre, x et h , respectivement, la direction et l'épaisseur d'intégration et ε la largeur de bande.

La chimiluminescence comme technique d'imagerie spectroscopique par visualisation directe, est une méthode simple d'emploi à faible coût d'implémentation. Pour la mettre en œuvre, nous avons employé un intensificateur Hamamatsu C10880-03C couplé à une caméra ultra-rapide Photron SA-Z et un objectif Nikon 28-70 mm d'ouverture 2.8. Nous avons utilisé une fréquence d'enregistrements de la caméra de 80 kHz (80×10^3 images/s) avec une résolution de 384×272 pixels et une fenêtre d'ouverture de l'intensificateur de 20 ns. La longueur de la zone de visualisation dépend de la distance entre la caméra et la chambre d'étude et est comprise entre ~ 140 mm et ~ 180 mm, ce qui offre des résolutions ~ 2 -3 pixels/mm. Nous avons utilisé un filtre passe bande interférentiel CVI Laser Optics F10-430-4-2.00, de longueur d'onde centrale proche de celle du radical CH^* , $\lambda_{\text{CH}^*} = 430$ nm, et de largeur de bande $\varepsilon = 10 \pm 2$ nm. Notre utilisation de la chimiluminescence a été surtout qualitative et nous a permis d'obtenir une information continue sur les positions des fronts réactifs. Nous avons utilisé un programme de post-traitement pour convertir l'intensité de chimiluminescence, enregistrée en nuances de gris, en enregistrements en fausses couleurs afin d'améliorer la visibilité (Figure 4.9).

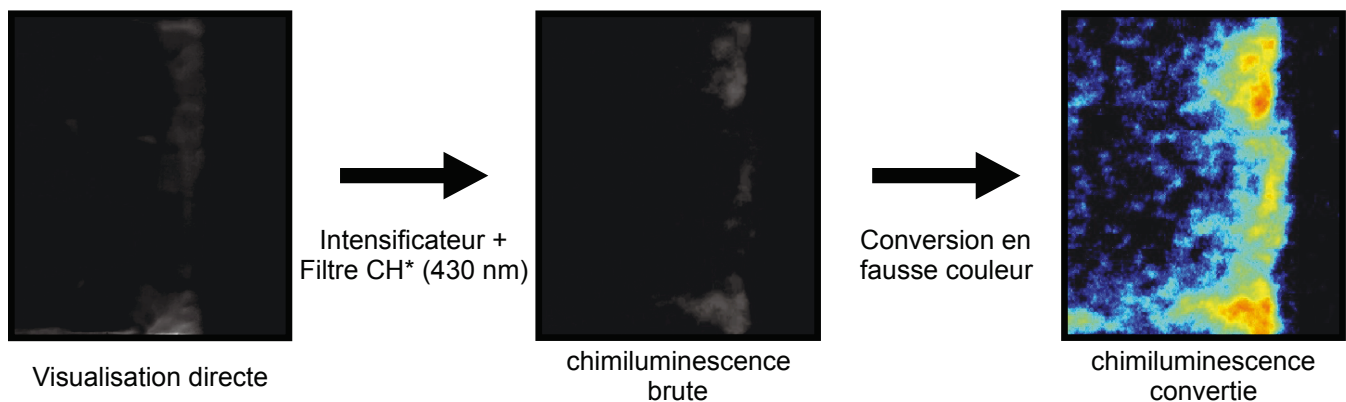


FIGURE 4.9 – Exemple d'enregistrements de la chimiluminescence du radical CH^* d'une détonation se propageant dans un mélange $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$ ($P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K). Gauche : visualisation directe, centre : visualisation de la chimiluminescence, droite : conversion en fausses couleurs.

Chapitre 5

Dynamiques de la détonation dans des distributions monotones de richesse

Sommaire

5.1	Extinction brusque par découplage choc-flamme	69
5.2	Extinction progressive marginale	75
5.3	Présence d’un maximum de réactivité	82
5.4	Modélisation : critères d’extinction de la détonation	87
5.4.1	Calculs ZND et corrélations expérimentales	87
5.4.2	Extinction marginale	89
5.4.3	Extinction par découplage choc-flamme	89
5.5	Conclusion	92

Ce chapitre décrit les résultats expérimentaux obtenus pour des cas de gradients de composition de C_3H_8/O_2 avec des distributions monotones de richesse décroissante et les conditions initiales de pression et de température $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K. Les compositions de richesses plus élevées sont ici les plus lourdes et sont donc situées dans la partie basse de la chambre. La richesse décroît à mesure que l’on s’élève dans la chambre depuis son entrée, au niveau de la vanne guillotine.

Ces expériences nous ont permis d’identifier deux mécanismes d’extinction de la détonation multicellulaire selon le gradient de composition. Dans le premier, la détonation s’éteint brusquement par découplage choc-flamme (Sect. 5.1). Cette dynamique d’extinction brusque est obtenue pour une catégorie de gradients que nous qualifions de “forts”. Dans le second, la détonation s’éteint graduellement en transitant par des modes marginaux de propagation (Sect. 5.2). Cette dynamique d’extinction graduelle est obtenue pour une catégorie de gradients que nous qualifions de “faibles”. Nous avons aussi considéré une sous-catégorie de gradients forts pour laquelle la composition varie de riche à pauvre, en passant donc par la stœchiométrie, et qui nous a permis de mieux comprendre l’influence de la composition d’origine, avant le gradient (Sect. 5.3). La Figure 5.1 présente les trois distributions monotones de richesse associées à ces gradients, désignées PPFo ou Pauvre-Pauvre-Fort, PPFa ou Pauvre-Pauvre-Faible et RPFo ou Riche-Pauvre-Fort. La Table 5.1 résume les conditions expérimentales.

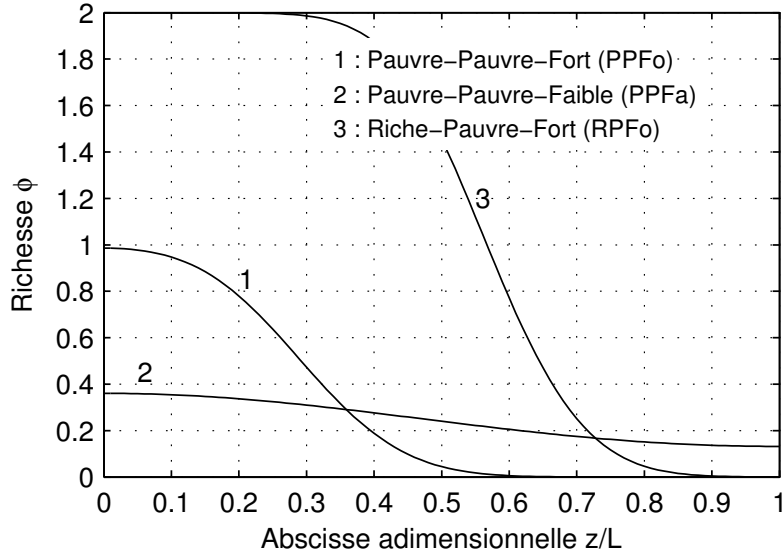


FIGURE 5.1 – Distributions monotones de C_3H_8/O_2 associées aux gradients Pauvre-Pauvre-Fort (PPFo), Pauvre-Pauvre-Faible (PPFa) et Riche-Pauvre-Fort (RPFo). $P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K, $L = 665$ mm.

Gradient	τ	ϕ_{tube}	ϕ_0^{chambre}	ϕ_0	$D_{\text{tube}}/D_{\text{CJ}}(\phi_0)$	ϕ_L	$\bar{\phi}$
1 : Pauvre-Pauvre-Fort	40 s	0.86	1.0	0.98	0.97	0.0	0.28
2 : Pauvre-Pauvre-Faible	16 min	0.36	1.0	0.36	1.0	0.13	0.28
3 : Riche-Pauvre-Fort	40 s	2.0	2.0	2.0	1.0	0.0	1.14

TABLE 5.1 – Conditions expérimentales des gradients de composition associés aux distributions monotones de richesse (τ : temps de diffusion, ϕ_{tube} : richesse du mélange d’amorçage, ϕ_0^{chambre} : richesse dans la chambre d’étude avant injection, $\phi_0 = \phi(z = 0, \tau)$: richesse en entrée de chambre, $\phi_L = \phi(z = L, \tau)$: richesse en fond de chambre, $\bar{\phi}$: richesse moyenne dans la chambre, D_{tube} : vitesse moyenne de la détonation dans le tube d’amorçage). Mélanges C_3H_8/O_2 , $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K.

Nous décrivons ci-dessous les résultats en trois sections, chacune associée à une catégorie de gradient et une dynamique, et détaillée en fonction du diagnostic utilisé. Ce chapitre présente aussi une interprétation des résultats par une modélisation des phénomènes d’extinction des détonations (Sect. 5.4).

5.1 Extinction brusque par découplage choc-flamme

La Figure 5.2 présente un exemple d'enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation par la méthode des traces sur dépôt de carbone pour le cas de la distribution monotone associée au gradient Pauvre-Pauvre-fort PPFo (Figure 5.1, courbe 1).

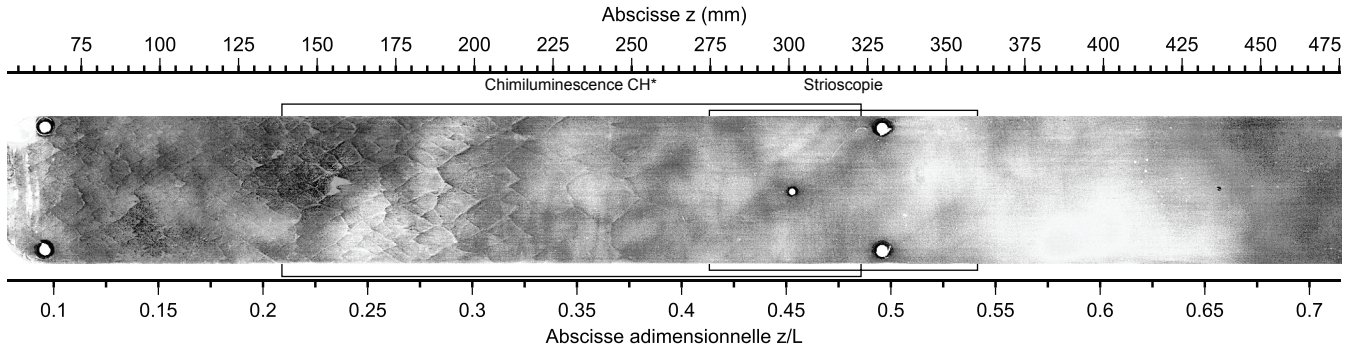


FIGURE 5.2 – Enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation sur une plaque recouverte d'un dépôt de carbone : distribution monotone du gradient PPFo. Les zones “Chimiluminescence CH*” et “Strioscopie” correspondent aux positions des enregistrements des Figures 5.4 et 5.7.

De l'extrémité gauche de la plaque à environ un tiers de la chambre, les traces observées sont typiques du mode de propagation multicellulaire de la détonation avec des largeurs moyennes de cellules de détonation λ très inférieures à la dimension transverse du tube. Nous observons que λ augmente à mesure que le front se propage vers les compositions plus pauvres. Entre 32 % et 37 % de la longueur de la chambre d'étude, la structure cellulaire disparaît soudainement, ce qui marque l'extinction de la détonation. Le reste de la plaque ne montre plus de traces d'ondes transverses, ce qui marque l'absence du couplage cellulaire choc-flamme caractérisant l'existence de la détonation dans les gaz (§1.4.1). La Figure 5.3 donne la largeur moyenne des cellules de détonation λ en fonction de la position dans la chambre d'étude.

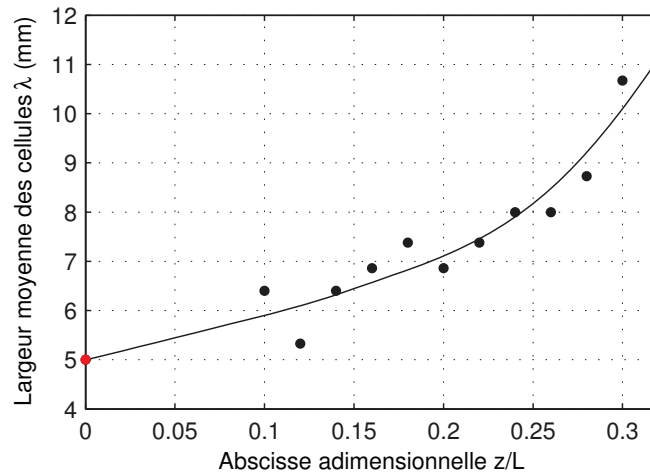


FIGURE 5.3 – Largeur moyenne λ des cellules de détonation en fonction de la position adimensionnelle dans la chambre d'étude z/L (symboles : mesures, ligne : interpolation) : distribution monotone PPFo. La largeur moyenne des cellules pour le mélange d'amorçage est indiquée par le point rouge.

La Figure 5.4 donne les enregistrements en fausses couleurs de l'intensité de chimiluminescence CH^* réalisés dans l'intervalle de position $Z \in [0.20; 0.50]$. Nous observons une zone de haute intensité (HI) locale initiale dont le niveau décroît au cours de la propagation pour disparaître complètement à l'instant $62.5 \mu\text{s}$. En comparant à l'enregistrement de la dynamique de la structure cellulaire de la Figure 5.2, nous observons que l'épaisseur de la zone HI est pratiquement égale à la largeur des structures cellulaires locales. Cette zone correspond à un mode de combustion par ondes longitudinales et transverses associées au régime multicellulaire de détonation. Nous remarquons, aux instants 0, 12.5 et $25 \mu\text{s}$, une zone de faible chimiluminescence située encore plus en amont de la zone HI. Elle provient de la distorsion du champ par l'objectif photographique utilisé et du fait que le signal de chimiluminescence est intégré le long de la profondeur de la chambre. Cet écart à la situation 2D sera donc plus important aux extrémités de la zone de visualisation où le front de la détonation présente une épaisseur apparente de combustion plus importante.

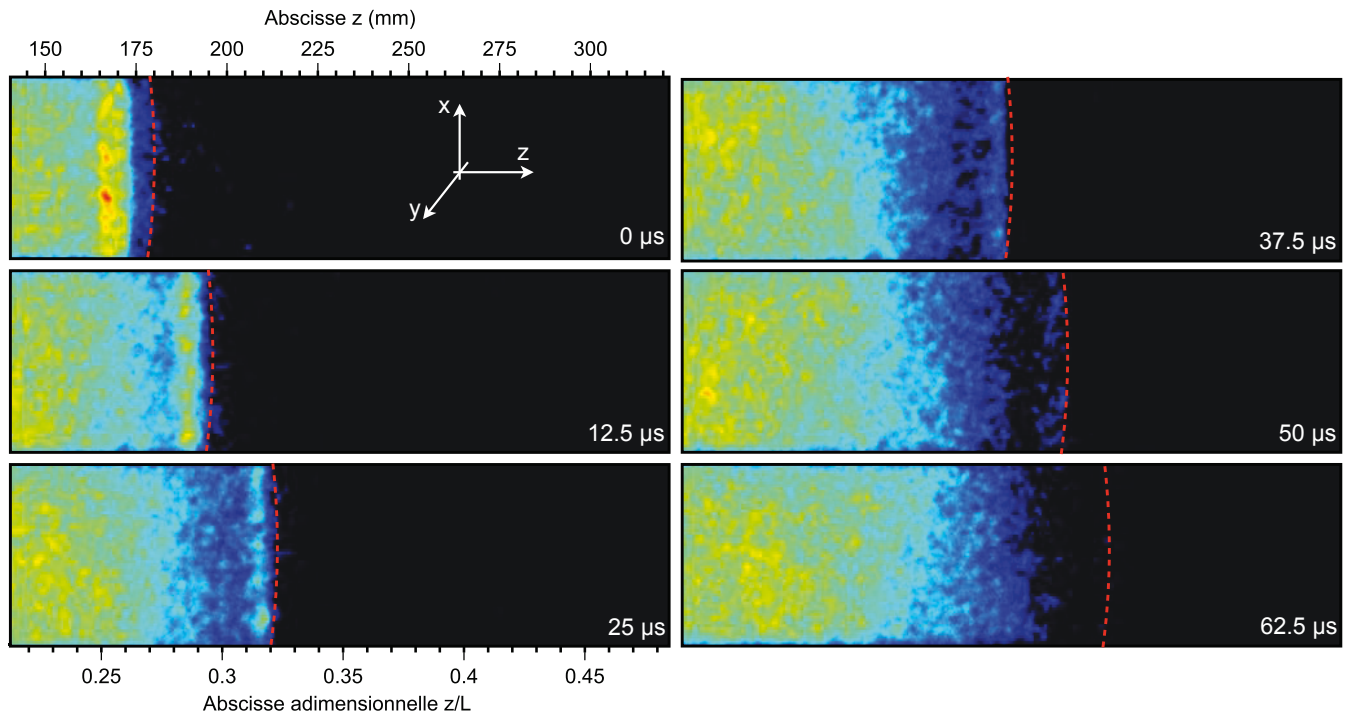


FIGURE 5.4 – Visualisation par chimiluminescence CH^* du découplage choc-flamme (intervalle de temps entre images : $12.5 \mu\text{s}$) : distribution monotone du gradient PPFo. La visualisation correspond à la zone indiquée sur la Figure 5.2.

Bien que le front de choc longitudinal ne soit pas clairement observable par chimiluminescence, sa position peut néanmoins être perçue (traits rouges) comme la frontière amont de la zone HI distordue.

La disparition de cette zone entre les instants 25 et $50 \mu\text{s}$, c'est-à-dire pour des positions du front $0.32 \lesssim Z \lesssim 0.37$, coïncide précisément avec la disparition de la structure cellulaire sur la Figure 5.2. L'extinction de la détonation se fait par mécanisme de découplage entre les ondes de choc longitudinales et transverses et leurs zones de combustion. Le découplage est un processus transitoire entre le mode détonant de combustion – où les réactifs sont essentiellement brûlés dans une cellule de détonation – et le mode déflagrant de combustion – pour lequel les temps de combustion sont beaucoup plus longs. La flamme n'est pas directement visible par chimiluminescence derrière le choc, après le découplage (instant $62.5 \mu\text{s}$), car le taux de production de

CH^* est trop faible pour générer un signal observable pendant les 20 ns d'ouverture de l'intensificateur. Nous observons une seconde zone d'intensité plus faible et constante située en aval de la zone HI. Elle correspond essentiellement aux produits de la combustion en mouvement d'advection derrière le choc. La chimiluminescence de ces produits est ici observable car elle correspond à celle du CO_2^* dont le spectre d'émission (Figure 4.7, Sect. 4.4) se superpose avec la bande d'émission du CH^* centrée autour de 430 nm. Cette interprétation est conforme aux observations faites par NORI et SEITZMAN [131] selon lesquelles le CO_2^* est le principal contributeur de la chimiluminescence, autour de longueur d'onde 430 nm, lorsque le processus de combustion atteint l'équilibre chimique.

La Figure 5.5 donne les signaux de pression enregistrés lors du passage de l'onde. Les signaux des capteurs situés aux positions $Z \leq 0.360$ ont des amplitudes de pic caractéristiques d'une détonation (Sect. 4.1). Le pic correspond à la zone moyenne de réactions. La relaxation à droite du pic correspond à la détente des produits de détonation. On peut vérifier qu'elle obéit bien au modèle de Taylor-Zel'dovich (Sect. 1.2). Aux positions $Z \geq 0.447$, nous observons que les signaux de pression mesurés sont plus représentatifs du passage d'une onde de choc, ce qui confirme les observations faites avec la méthode des traces sur dépôt de carbone (Figure 5.2) et les enregistrements par chimiluminescence (Figure 5.4).

La Figure 5.6 compare $D(Z)$, vitesse moyenne longitudinale mesurée en paroi, à $D_{\text{CJ}}(\phi(Z))$, célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale (Annexe E). La mesure de la vitesse est obtenue à partir du temps d'arrivée de l'onde de choc principale longitudinale selon la procédure décrite dans la Section 4.1. Nous constatons que la vitesse de l'onde de détonation s'ajuste à la composition rencontrée avec une célérité très proche de la célérité CJ locale. Cette adaptation est conforme avec celle du régime multicellulaire observé sur la Figure 5.2. À partir des positions où le découplage survient, pour $0.32 < Z < 0.37$ (croix rouges sur la Figure 5.6), la vitesse de l'onde devient soudainement inférieure à la célérité CJ locale. Puis, la vitesse locale de l'onde de choc devient supérieure à la célérité CJ en raison de l'effet de piston provoqué par l'expansion des gaz brûlés.

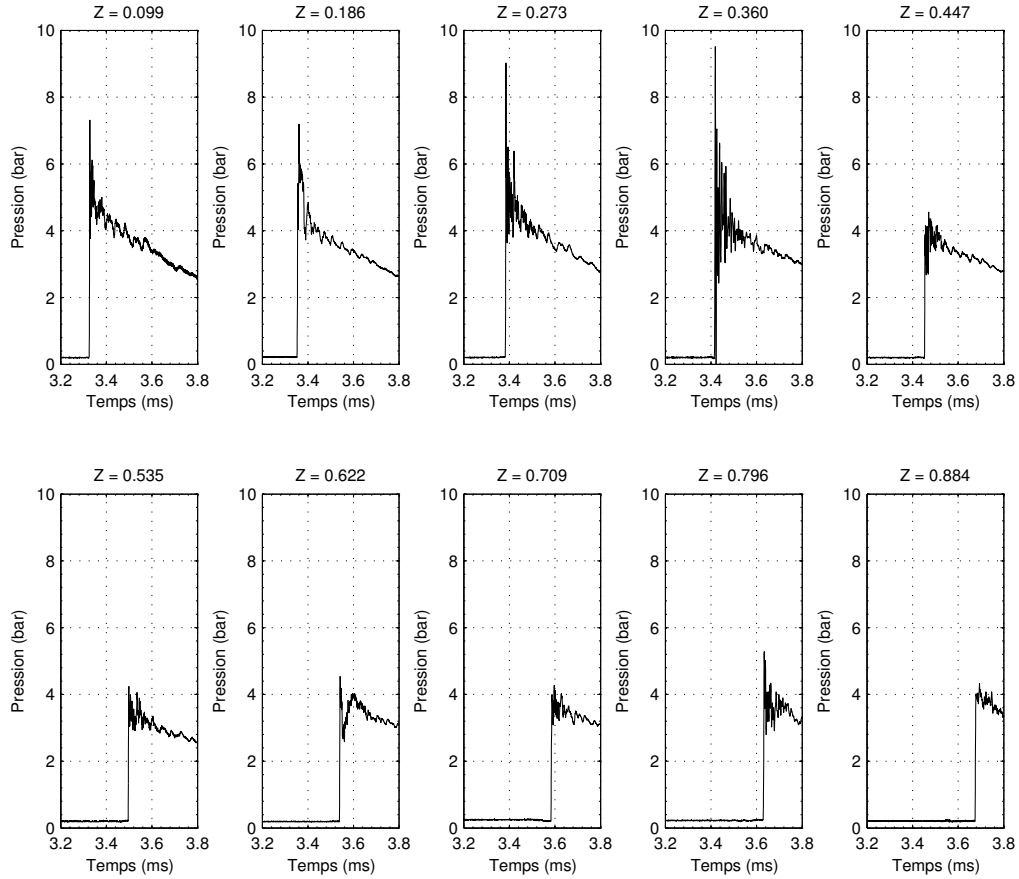


FIGURE 5.5 – Signaux de pression enregistrés en paroi de la chambre d’étude : distribution monotone du gradient PPF₀.

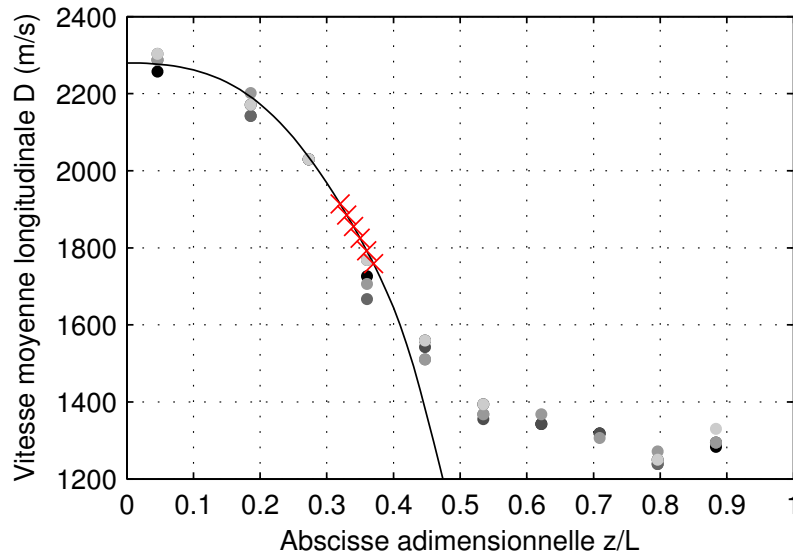


FIGURE 5.6 – Vitesse moyenne de l’onde longitudinale D , mesurée en paroi (symboles), comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale (ligne) : distribution monotone du gradient PPF₀. La zone d’extinction de la détonation est repérée par des croix rouges.

La Figure 5.7 donne les enregistrements par strioscopie du système choc-flamme découplé dans l'intervalle de position $0.42 < Z < 0.54$ sur une durée de $55 \mu\text{s}$.

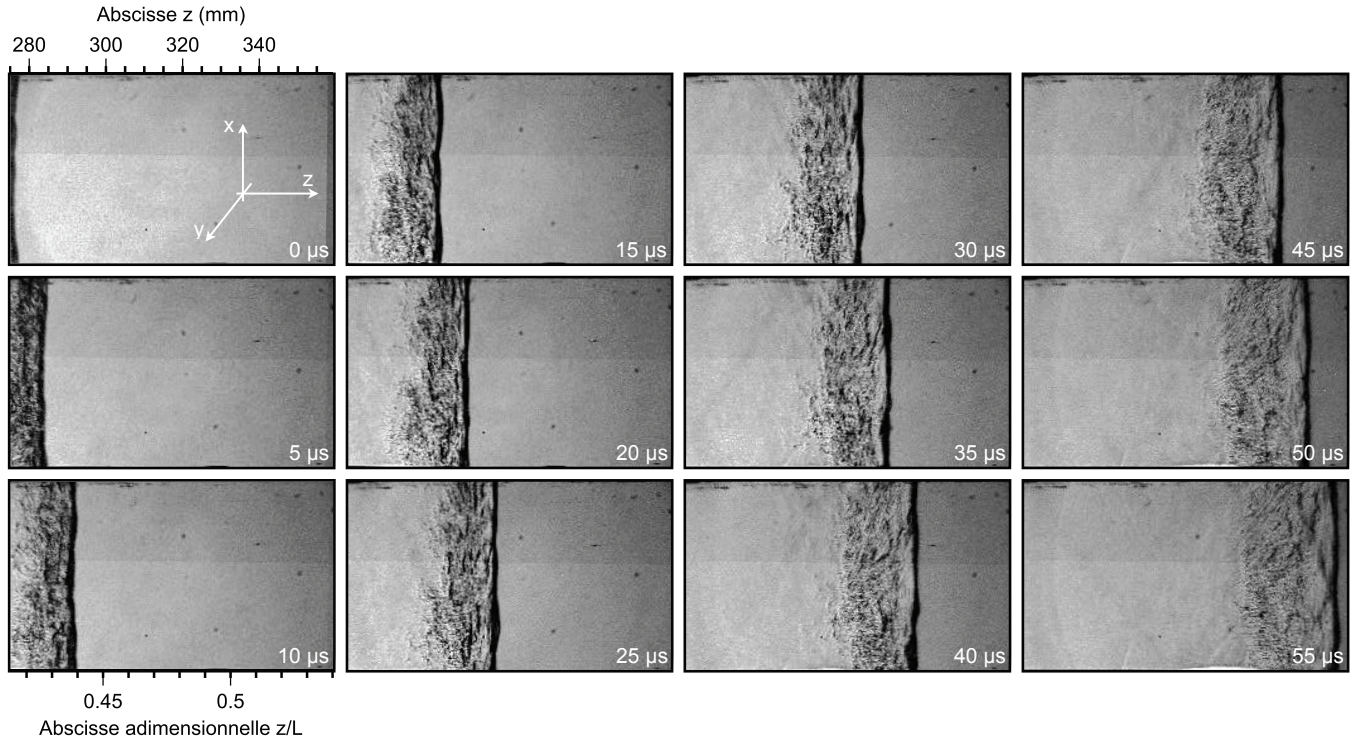


FIGURE 5.7 – Visualisation par strioscopie de la propagation du système choc-flamme découplé (intervalle de temps entre images : $5 \mu\text{s}$) : distribution monotone du gradient PPFo. La visualisation correspond à la zone indiquée sur la Figure 5.2.

La Figure 5.8 donne un cliché pris à l'instant $25 \mu\text{s}$ à la position du front de choc $Z \approx 0.47$ et un schéma du système choc-flamme découplé. L'onde de choc longitudinale (inerte) correspond à la ligne sombre très légèrement courbée.

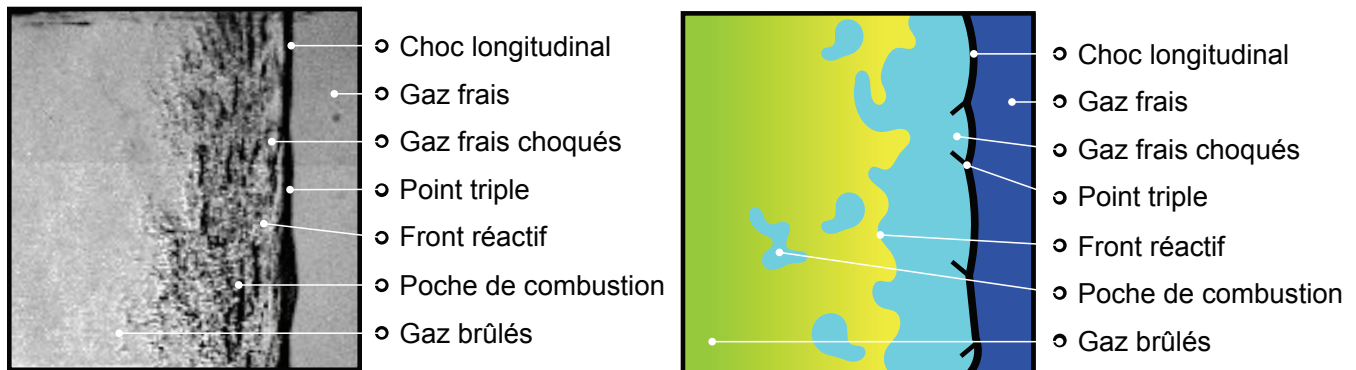


FIGURE 5.8 – Cliché strioscopique à l'instant $25 \mu\text{s}$ de la Figure 5.7 (gauche) et schéma du système choc-flamme découplé (droite) : distribution monotone du gradient PPFo.

Sur le front de choc, nous observons la présence de quelques points triples et d'ondes de choc transverses résiduelles. La zone très perturbée derrière le choc longitudinal correspond à la zone de combustion découplée

dans laquelle on observe des gaz brûlés et des poches de combustion turbulente. Les enregistrements par chimiluminescence (Figure 5.4) montrent que les produits de combustion s'étendent en réalité bien plus en aval de cette zone perturbée. La strioscopie ne permet pas leurs visualisations car la détente des gaz atténue les gradients de masse volumique. Au cours de la propagation du système, nous observons qualitativement la décroissance de l'intensité de turbulence du front réactif, du nombre de poches de gaz frais et l'éloignement relatif du choc et de la flamme. Nous attribuons ces phénomènes aux diminutions combinées de réactivité du milieu et d'intensité du choc longitudinal.

Nous venons d'observer que le découplage n'est pas nécessairement associé à l'extinction de la combustion. La position du découplage ($0.32 \lesssim Z \lesssim 0.37$) correspond à des richesses rencontrées par la flamme $\phi \in [0.25; 0.4]$ (Figure 5.1, courbe 1) supérieures à la limite d'inflammabilité pauvre des mélanges C_3H_8/O_2 (*Lower Flammability Limit*, LFL). De manière générale, la LFL est exprimée en fraction volumique de combustible dans le mélange. Elle est souvent donnée pour les conditions normales de pression et de température (P_* , T_*), soit $LFL = 2.3\%$ pour les mélanges C_3H_8/O_2 (COWARD et JONES [132]), ce qui correspond à une limite inférieure de richesse $\phi_{LFL} = 0.12$. La LFL présente une dépendance linéaire en température initiale et une très faible dépendance à la pression initiale. ZABETAKIS [133] indique que pour une grande variété d'alcanes et dans une large gamme de température initiale :

$$\frac{LFL(T)}{LFL(T_*)} = 1 - 7.84 \times 10^{-4}(T - T_*) \quad (5.1)$$

Dans notre cas, la température T est celle T_H du milieu choqué après découplage. Nous l'avons calculé par thermochimie adiabatique (Relation de Rankine-Hugoniot, §1.2.1) pour les vitesses de choc $D(Z)$ mesurées (Figure 5.6). La Figure 5.9 montre les variations de la richesse locale ϕ et de la limite inférieure de richesse ϕ_{LFL} pour les positions $Z > 0.32$, c'est-à-dire, à partir de celle où le processus de découplage a débuté. L'intersection des courbes donne la position et la richesse à la limite inférieure d'inflammabilité, soit $Z \approx 0.52$ et $\phi \approx 0.03$. L'extinction du front réactif pour ces conditions est confirmée par la quasi-disparition des zones de combustion sur le dernier cliché de la Figure 5.7.

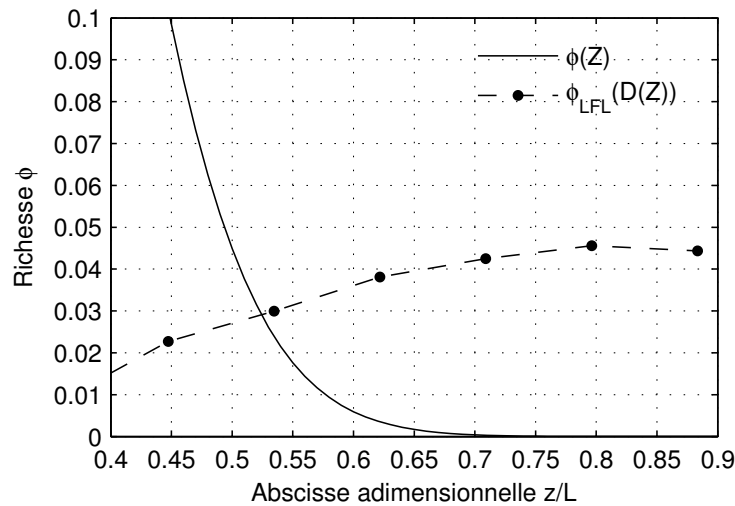


FIGURE 5.9 – Limite inférieure de richesse ϕ_{LFL} évaluée en fonction de la vitesse locale de l'onde de choc longitudinale D (symboles), comparée à la richesse locale $\phi(Z)$ (ligne) : distribution monotone du gradient PPFo.

5.2 Extinction progressive marginale

La Figure 5.10 présente un exemple d’enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation par la méthode des traces sur quatre plaques recouvertes d’un dépôt de carbone pour le cas de la distribution monotone associée au gradient Pauvre-Pauvre-faible PPFa (Figure 5.1, courbe 2). Ces plaques étaient positionnées sur chacune des quatre faces internes de la chambre d’étude. La Figure 5.10 est leur déroulé tel que la ligne supérieure de la plaque du haut correspond à la ligne inférieure de la plaque du bas. L’enregistrement montre une augmentation de la largeur moyenne des structures cellulaires à mesure que la détonation se propage vers les compositions plus pauvres.

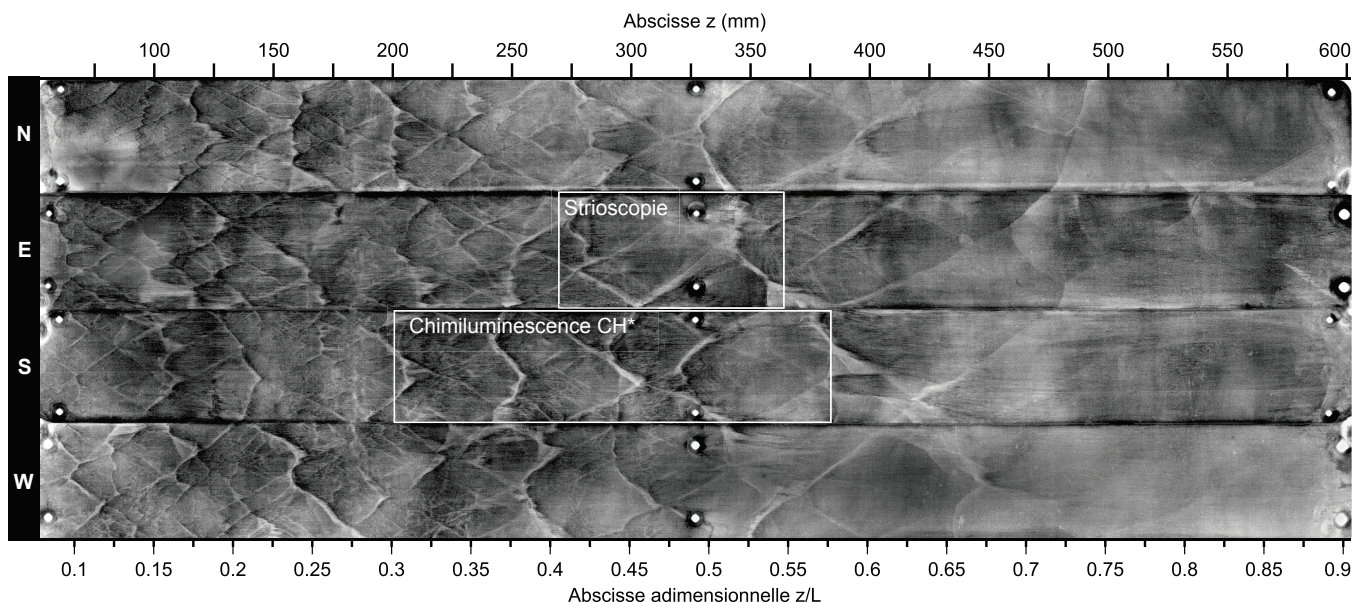


FIGURE 5.10 – Déroulé de l’enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation sur des plaques recouvertes d’un dépôt de carbone : distribution monotone du gradient PPFa. Les zones “Chimiluminescence CH*” et “Strioscopie” correspondent aux positions des enregistrements des Figures 5.13, 5.14 et 5.15.

La Figure 5.11 donne la largeur moyenne des cellules de détonation λ en fonction de la position dans la chambre d’étude. Contrairement au cas du gradient Pauvre-Pauvre-Fort (Sect. 5.1), nous observons ici une extinction progressive de la détonation. À l’entrée de la chambre d’étude, la détonation est initialement en régime de propagation multicellulaire, avec $\lambda \approx 15$ mm, soit entre 3 et 4 cellules de détonation dans la dimension transverse h du tube. Le régime de propagation multicellulaire est obtenu lorsque la dimension transverse h du confinement est grand devant λ . Lorsque λ s’approche de h , la détonation adopte un mode de propagation dit marginal (§1.4.2). Le nombre n de modes transverses est une fonction croissante du rapport h/λ . En raison du gradient de composition, la détonation se propage dans un milieu dont la réactivité décroît. Nous observons ainsi une décroissance du nombre de modes transverses couplée à une irrégularité croissante de la structure cellulaire (selon la classification de STREHLOW [38] et LIBOUTON et al. [39], §1.4.1).

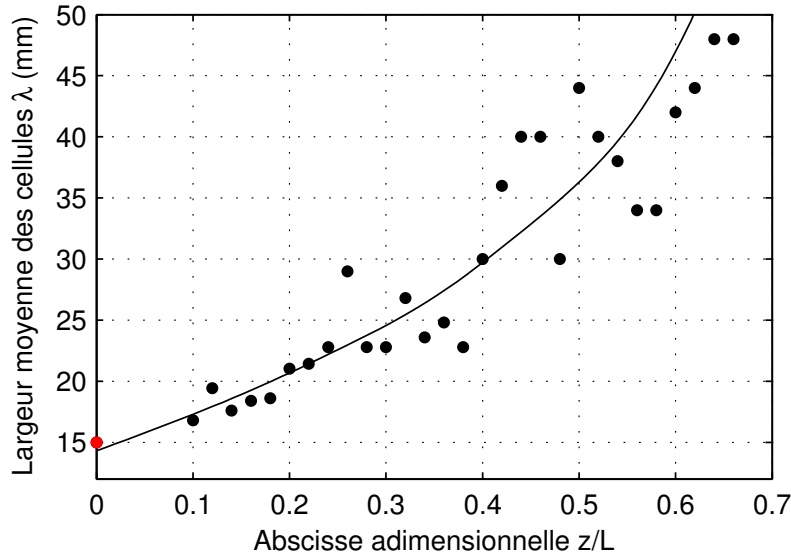


FIGURE 5.11 – Largeur moyenne λ des cellules de détonation en fonction de la position adimensionnelle dans la chambre d'étude z/L (symboles : mesures, ligne : meilleure interpolation) : distribution monotone du gradient PPFa. La largeur moyenne des cellules pour le mélange d'amorçage est indiquée par le point rouge.

Cette irrégularité croissante de la structure cellulaire s'explique par l'augmentation de l'énergie d'activation $E_a^* = E_a/RT_H$ de manière directe – par augmentation de E_a – et indirecte – par diminution globale de la célérité D du choc (Figure 5.18) qui entraîne la diminution de T_H ($T_H \propto D^2$, eq. 1.39, gauche, §1.2.1). La Figure 5.12a donne un schéma de la propagation marginale régulière à deux et une onde(s) transverse(s). La Figure 5.12b présente un schéma du mouvement des ondes transverses à deux positions de l'enregistrement sur dépôt de carbone de la Figure 5.10. L'augmentation de l'irrégularité résulte d'un nombre de modes différent entre les deux directions transverses ($n_x \neq n_y$) et par une légère orientation de la direction de propagation des ondes transverses dans le repère attaché au front de choc longitudinal. À mesure que le nombre de modes décroît, l'intensité des points triples diminue et disparaît autour d'une position $0.6 \lesssim Z \lesssim 0.8$, soit, pour une richesse $\phi \in [0.15; 0.2]$. Cette valeur est plus faible que celles de l'intervalle $[0.25; 0.4]$ dans lequel le découplage a été observé pour le cas du gradient PPFo (Sect. 5.1). Ces observations précisent celles de THOMAS et al. [113] et KUZNETSOV et al. [117], qui indiquent que, pour une richesse donnée, les gradients faibles sont plus favorables à la propagation de la détonation que les gradients forts.

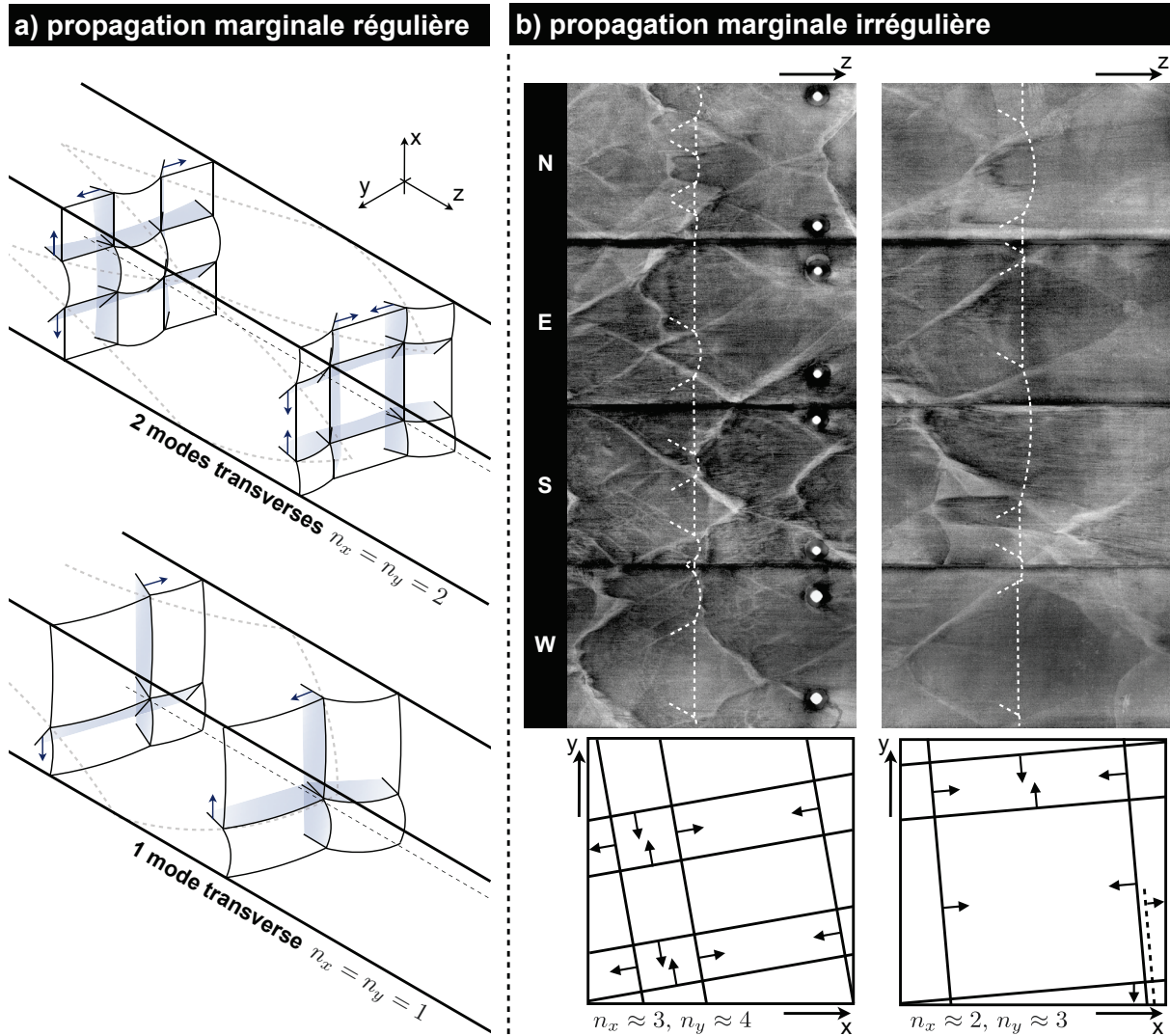


FIGURE 5.12 – Schémas de la dynamique des front d’ondes dans le cas d’une propagation marginale a) régulière à $n_x = n_y = 2$ modes transverses (en haut) et à $n_x = n_y = 1$ mode transverse (en bas) et b) irrégulière à $n_x \approx 3$ et $n_y \approx 4$ modes (à gauche) et $n_x \approx 2$ et $n_y \approx 3$ modes (à droite).

La Figure 5.13 donne les enregistrements en fausses couleurs de l’intensité de chimiluminescence CH^* dans l’intervalle de positions $Z \in [0.32; 0.56]$. Nous observons que l’émission de CH^* n’est pas constante sur une section droite. Il s’agit d’une conséquence de la nature instationnaire de la propagation marginale qui génère des régions hétérogènes derrière l’onde de choc longitudinale. La propagation marginale se manifeste par des découplages et recouplages locaux périodiques et en décalage de phase. Lorsque deux ondes transverses entrent en collision ou qu’une onde transverse impacte une paroi matérielle, une réflexion de Mach est générée, laquelle induit localement de hautes pression et température et, donc, un recouplage local du choc et de la zone de réactions. Aux instants 25, 37.5 et 50 μs , nous pouvons observer les réflexions de Mach issues des collisions de deux ondes transverses avec les parois inférieures et supérieures. Aux instants 37.5, 50 et 62.5 μs , nous observons une poche de combustion, issue d’un découplage antérieur, et convectée à l’arrière du front longitudinal.

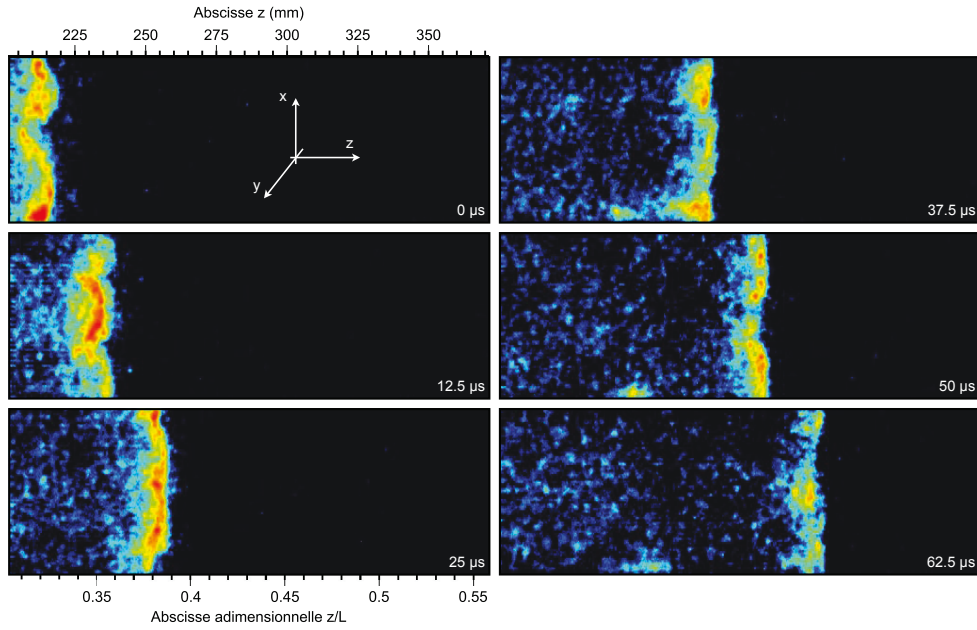


FIGURE 5.13 – Visualisation par chimiluminescence CH^* de la propagation à $n_x \approx 2$ modes transverses (intervalle de temps entre images : $12.5 \mu\text{s}$) : distribution monotone du gradient PPFa. La visualisation correspond à la zone indiquée sur la Figure 5.10.

La Figure 5.14 donne les enregistrements par strioscopie de la transition d'une propagation à $n_x \approx 2$ modes transverses vers une propagation à $n_x \approx 1$ mode transverse. Ils ont été réalisés dans l'intervalle de positions $Z \in [0.41; 0.54]$. Nous observons les collisions en décalage de phase de deux ondes transverses (points triples) à propagation verticale (x) avec les parois supérieure puis inférieure, les réflexions de Mach consécutives et les accélérations locales du choc longitudinal.

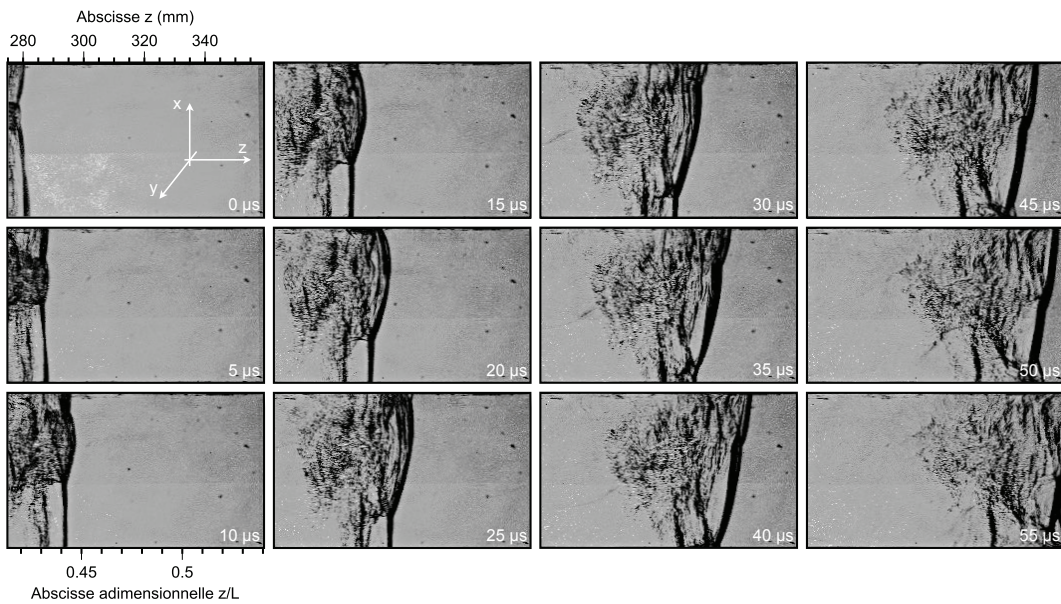


FIGURE 5.14 – Visualisation par strioscopie de la transition d'une propagation à $n_x \approx 2$ modes transverses vers une propagation à $n_x \approx 1$ mode transverse (intervalle de temps entre images : $5 \mu\text{s}$) : distribution monotone du gradient PPFa. La visualisation correspond à la zone indiquée sur la Figure 5.10.

La Figure 5.15 donne les enregistrements par strioscopie de la propagation à $n_x \approx 1$ mode transverse où nous observons la réflexion de Mach avec la paroi inférieure. Ils ont été obtenus dans la même zone de visualisation que ceux de la Figure 5.14. À l'instant $8 \mu\text{s}$, on distingue la réflexion de Mach générée lors de l'impact, avec le hublot opposé, de l'onde transverse se propageant selon la profondeur (y). En effet, nous observons le dédoublement du front de choc longitudinal résultant de l'accélération locale provoquée par la réflexion de Mach (Figure 5.12). Nous donnons en Figure 5.16 des agrandissements d'une sélection d'enregistrements des Figures 5.14 et 5.15 et les schémas de la structure complexe de ce cas de propagation marginale.

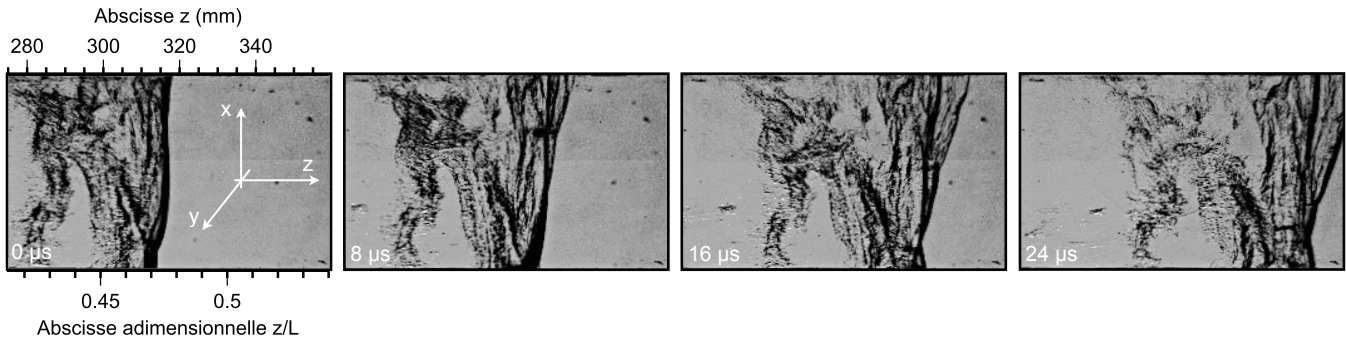


FIGURE 5.15 – Visualisation par strioscopie des réflexions de Mach avec la paroi inférieure dans la direction verticale (x) et avec le hublot opposé dans la profondeur (y) (intervalle de temps entre images : $8 \mu\text{s}$) : distribution monotone du gradient PPFa. La visualisation correspond à la zone indiquée sur la Figure 5.10.

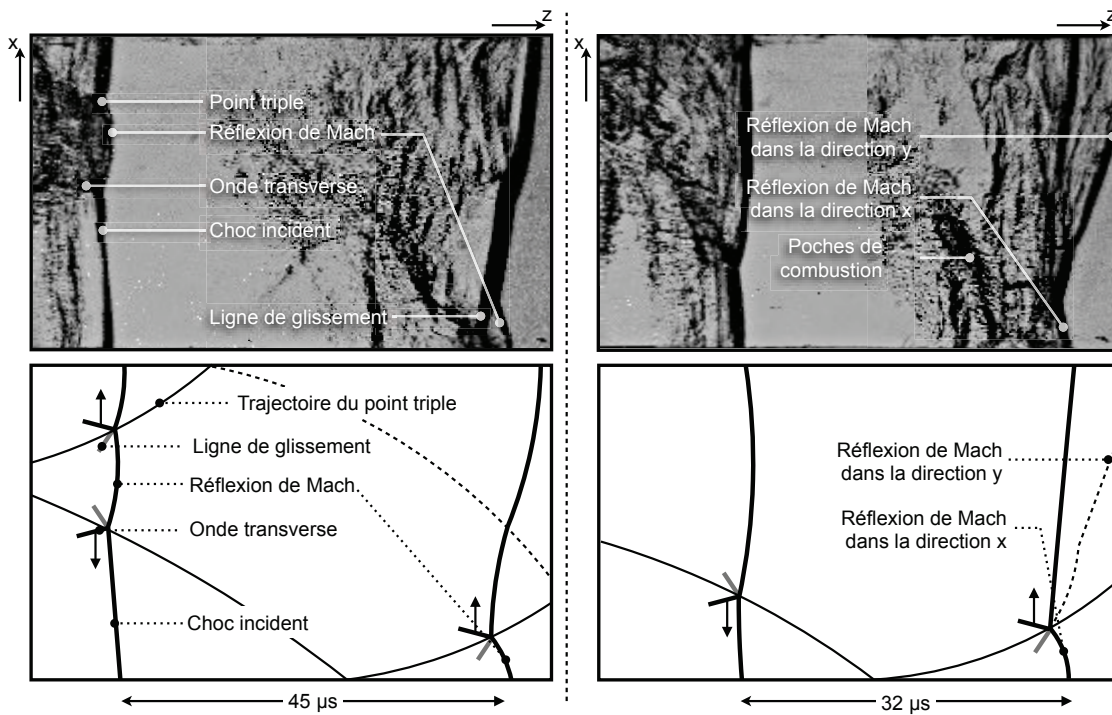


FIGURE 5.16 – Agrandissements d'enregistrements strioscopiques et schématisations des dynamiques marginales observées sur les Figures 5.14 (gauche) et 5.15 (droite) .

La Figure 5.17 donne les signaux de pression enregistrés lors du passage de l'onde. Nous observons que la forme des signaux est bien représentative du passage d'une onde de détonation (Sect. 4.1). L'intensité du pic de pression oscille entre 4 et 10 bar. Cette oscillation est due au caractère marginal de la propagation de la détonation. En effet, l'amplitude du pic de pression est plus ou moins importante selon la proximité d'un capteur de pression avec le lieu d'impact d'un point triple sur la paroi. Des signaux similaires seraient ainsi observés pour des détonations multicellulaires présentant des largeurs de cellules grandes devant celle de la surface active des capteurs (Sect. 4.1).

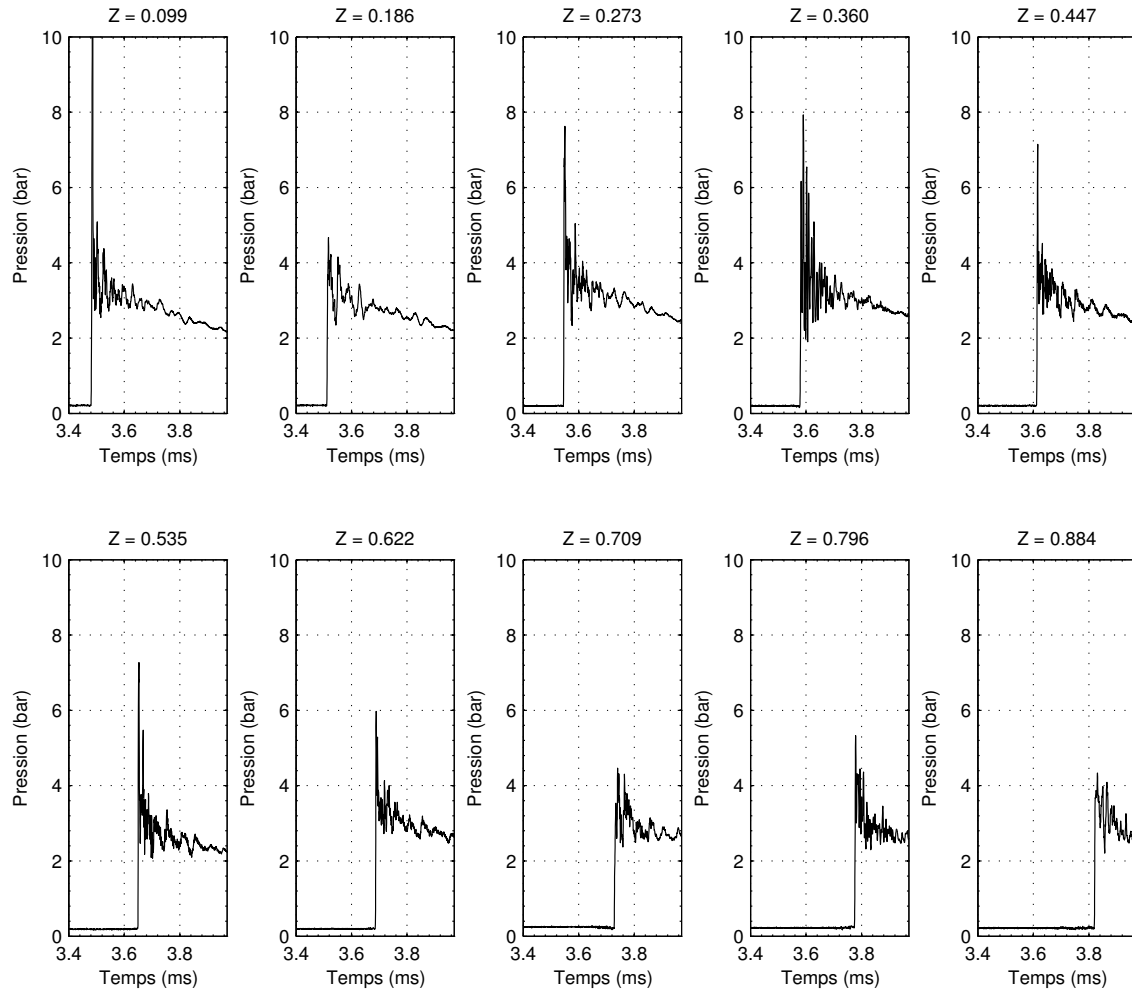


FIGURE 5.17 – Signaux de pression enregistrés en paroi de la chambre d'étude : distribution monotone du gradient PPFa.

La Figure 5.18 compare $D(Z)$, vitesse moyenne longitudinale mesurée en paroi, à $D_{CJ}(\phi(Z))$, la célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale (Annexe E). Pour chaque expérience (niveaux de gris différents), nous observons une variation importante de vitesse liée au comportement marginal de l'onde. Les accélérations de l'onde longitudinale sont dues aux collisions des ondes transverses avec la paroi, où sont installés les capteurs (Figure 5.12), et qui génèrent localement des réflexions de Mach. Le comportement marginal se manifeste également par une dispersion entre expériences bien plus importante que dans le cas du gradient PPFo (Figure 5.6). Par ailleurs, nous observons que cette dispersion a tendance à croître au cours de la propagation de l'onde dans la chambre d'étude, c'est-à-dire à mesure que le nombre de modes transverses diminue. Enfin, à partir de la position $Z \approx 0.3$, nous observons un déficit par rapport à la célérité CJ locale qui augmente très rapidement.

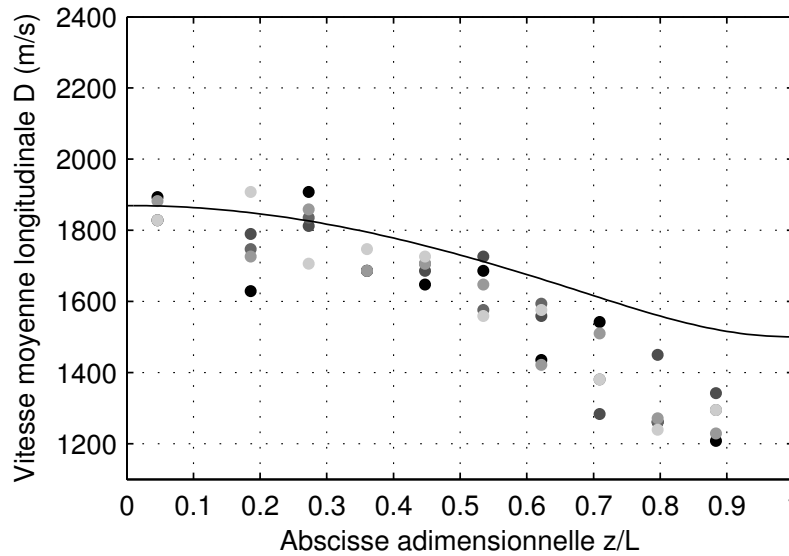


FIGURE 5.18 – Vitesse moyenne de l'onde longitudinale D , mesurée en paroi (symboles), comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale (ligne) : distribution monotone du gradient PPFa

Le modèle CJ ne permet pas de prendre en compte les phénomènes 3D caractérisant les modes marginaux de propagation de la détonation. Nous observons notamment sur les enregistrements des Figures 5.13, 5.14 et 5.15, la présence de nombreuses poches de gaz imbrûlés. En raisonnant dans le repère attaché à l'onde de choc longitudinale, le flux de gaz frais arrivant sur le choc va subir une dynamique différente selon l'intensité locale du choc. La fraction de gaz frais capturée par l'onde de Mach brûle sur des temps très courts. Au contraire, la fraction des gaz frais capturée par l'onde incidente, dont l'intensité est bien plus faible que celle de Mach, a un délai d'induction bien plus long, si bien que l'on observe localement le découplage du choc et de la flamme et la convection de poches de gaz imbrûlés vers l'aval du choc. LEE et RADULESCU [134] considèrent que ces poches de combustion retardées expliquent l'écart aux modèles CJ et ZND observé notamment dans le cas de mélanges qualifiés d'instables présentant une structure cellulaire irrégulière (§1.4.1). Si le dégagement d'énergie associé à ces poches a lieu trop loin du choc longitudinal, celui-ci est moins soutenu et un déficit de célérité apparaît.

5.3 Présence d'un maximum de réactivité

La Figure 5.19 présente un exemple d'enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation par la méthode des traces sur dépôt de carbone pour le cas de la distribution monotone associée au gradient Riche-Pauvre-Fort RPFo (Figure 5.1, courbe 3).

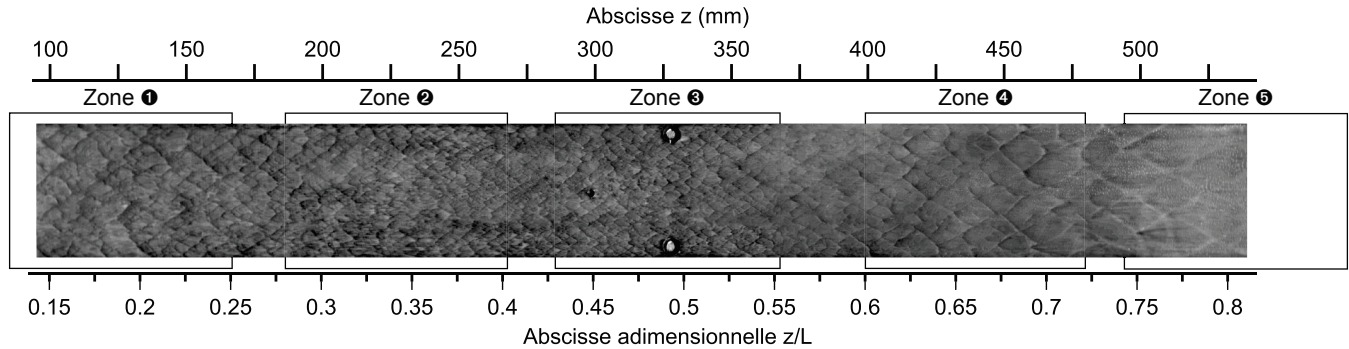


FIGURE 5.19 – Enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation sur une plaque recouverte d'un dépôt de carbone : distribution monotone du gradient RPFo. Les zones numérotées de 1 à 5 correspondent aux positions des enregistrements de la Figure 5.21.

La Figure 5.20 donne la largeur moyenne des cellules de détonation λ en fonction de la position dans la chambre d'étude.

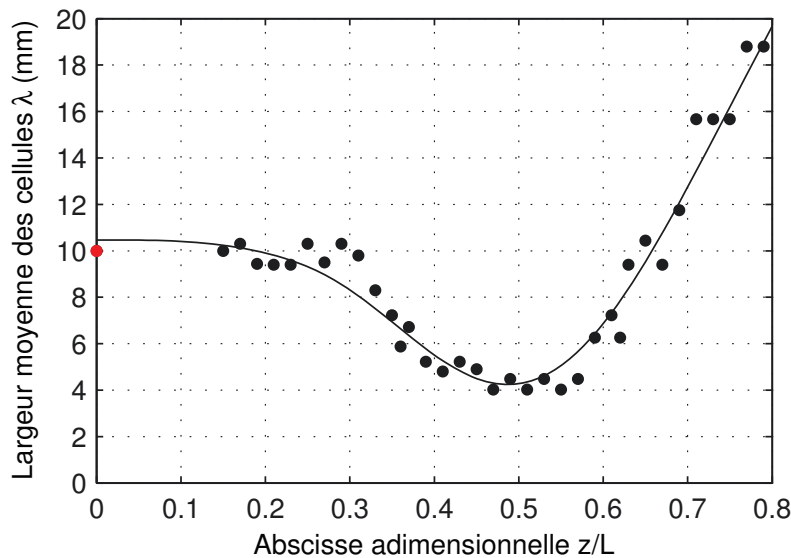


FIGURE 5.20 – Largeur moyenne λ des cellules de détonation en fonction de la position adimensionnelle dans la chambre d'étude z/L (symboles : mesures, ligne : meilleure interpolation) : distribution monotone du gradient RPFo. La largeur moyenne des cellules pour le mélange d'amorçage est indiquée par le point rouge.

Nous observons que λ reste à peu près constante et égale à 10 mm jusqu'à environ 30 % de la chambre d'étude, en accord avec le plateau de richesse $\phi \approx 2$ de la distribution de richesse du gradient RPFo (Figure 5.1, courbe 3). Nous observons ensuite que λ décroît jusqu'à un minimum autour de la position $Z \approx 0.5$,

puis augmente jusqu'à disparition de la structure cellulaire à partir de la position $Z \approx 0.75$. La variation de λ s'accorde bien avec la dépendance en U de $\lambda_{CJ}(\phi)$, des mélanges uniformes, pour lesquels, de manière générale, le minimum est obtenu pour des compositions très légèrement riches [48].

La Figure 5.21 donne les enregistrements par strioscopie de la dynamique de propagation de la détonation dans cinq zones de visualisation qui couvrent les intervalles de position $[0.13; 0.25]$, $[0.28; 0.40]$, $[0.43; 0.55]$, $[0.6; 0.72]$ et $[0.74; 0.86]$ (Figure 5.19). Chaque enregistrement résulte d'une expérience. Nous pouvons observer l'augmentation puis la diminution du nombre de modes transverses avec un maximum dans la zone 3, en accord avec la localisation du minimum de λ (Figure 5.20). Dans la zone 5, nous observons l'épaississement de la zone de réactions et la disparition associée de la structure cellulaire (Figure 5.19) qui traduisent le découplage du choc moyen et de la flamme. Cette dynamique d'extinction est similaire à celle observée pour le cas du gradient PPFo (Sect. 5.1).

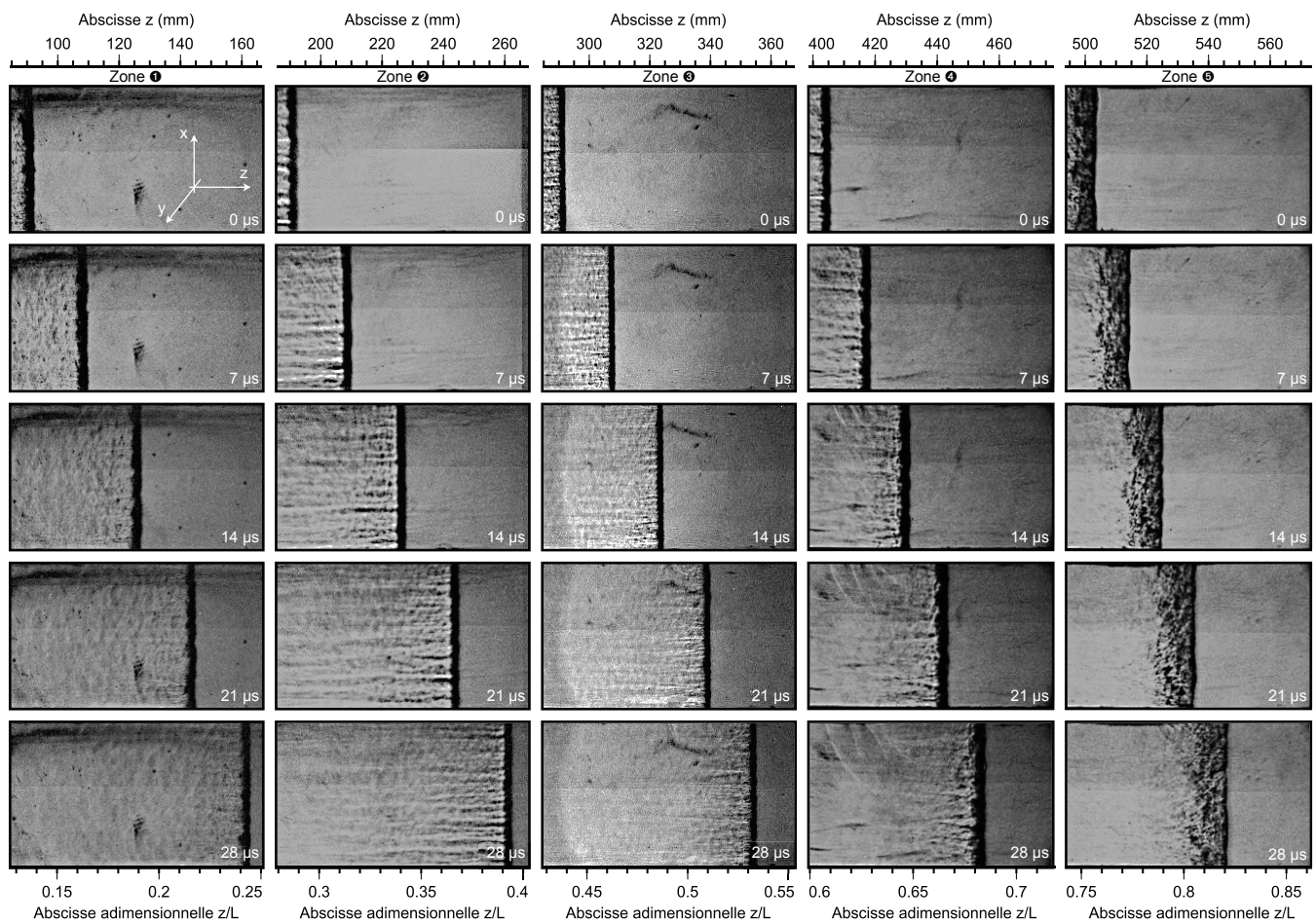


FIGURE 5.21 – Visualisation par strioscopie de la dynamique de propagation de la détonation (intervalle de temps entre images : $7 \mu\text{s}$) : distribution monotone du gradient RPFo. Les zones numérotées de 1 à 5 correspondent aux intervalles de position indiquées sur la Figure 5.19. Les temps sont relatifs à la première image de chaque zone.

La Figure 5.22 donne les signaux de pression enregistrés en paroi de la chambre, aux positions adimensionnelles $Z = \{0.186, 0.360, 0.447, 0.535, 0.622, 0.709, 0.796\}$ et, pour chaque signal, le cliché de strioscopie à l'arrivée du front de détonation sur le capteur considéré et l'enregistrement local des traces sur dépôt de

carbone de la structure cellulaire.

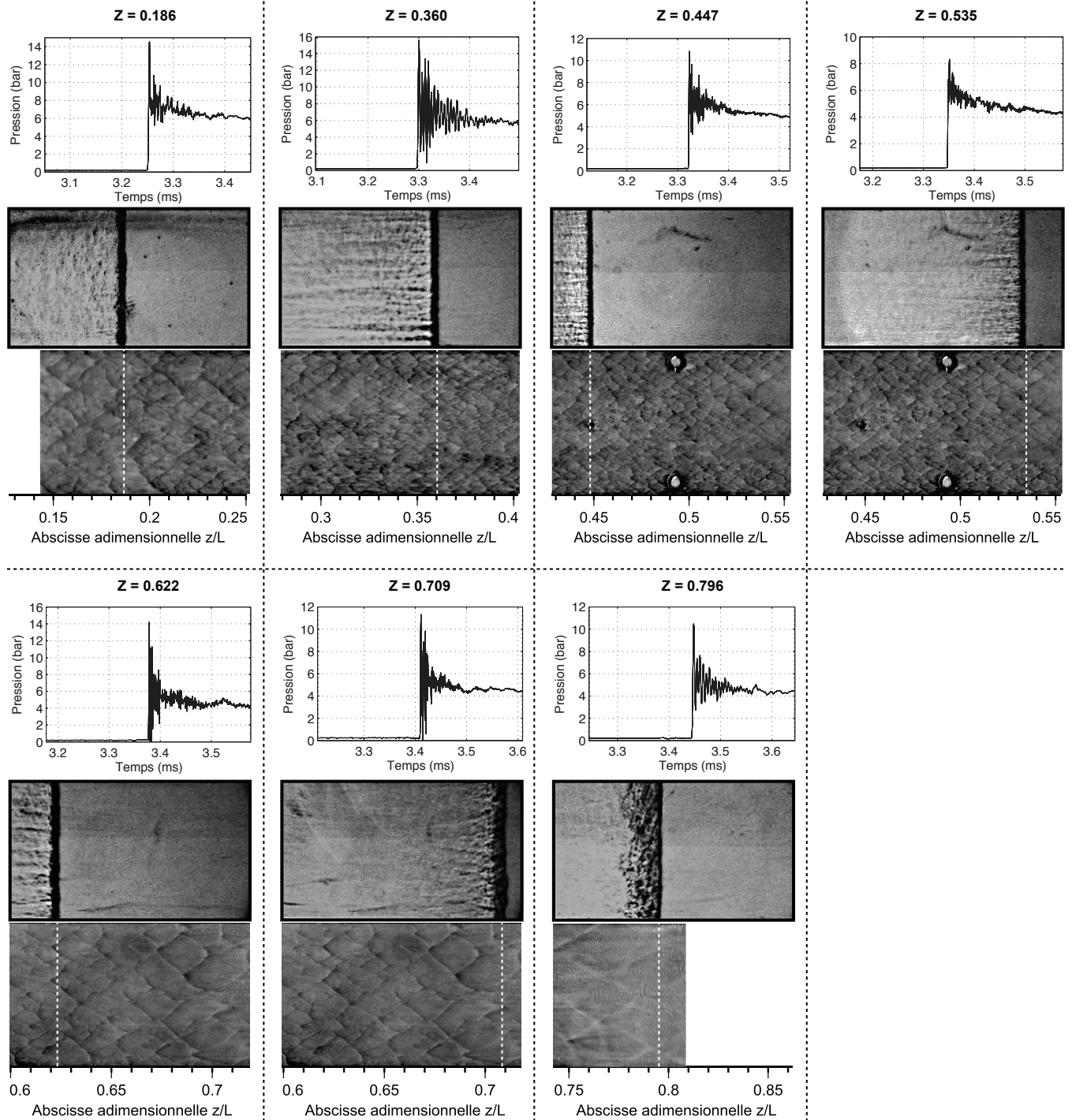


FIGURE 5.22 – Signaux de pression enregistrés en paroi de la chambre d'étude, clichés de strioscopie et enregistrements sur plaque recouverte d'un dépôt de carbone carbone de la structure cellulaire, autour des positions des capteurs : distribution monotone du gradient RPFo.

La Figure 5.23 compare $D(Z)$, vitesse moyenne longitudinale mesurée en paroi, à $D_{CJ}(\phi(Z))$, célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale (Annexe E). Nous remarquons que la vitesse de l'onde longitudinale s'adapte continûment à la célérité CJ locale depuis l'entrée de la chambre d'étude jusqu'à la position $Z \approx 0.6$ où la richesse locale est $\phi \approx 0.7$. Une onde de détonation peut être considérée comme forte (soutenue, Sect. 1.2), pour la composition locale ϕ , si $D(Z) - \delta D(Z) \geq D_{CJ}(\phi(Z))$, où δD est l'incertitude absolue sur la mesure de D (Sect. 4.1). Ici, autour de la position $Z = 0.6$ ($\phi \approx 0.7$), $\delta D \approx 50$ m/s, et donc pour $Z \geq 0.7$, la détonation peut être considérée soutenue avec un degré de force D/D_{CJ} qui augmente (Table 5.2).

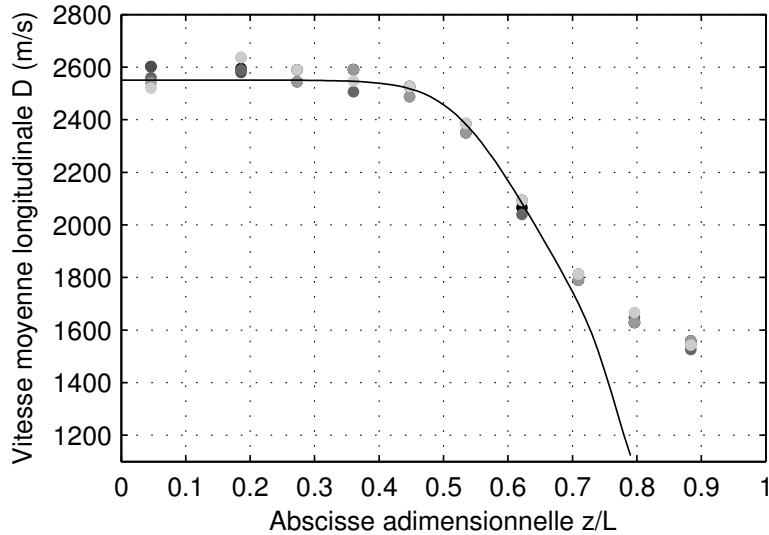


FIGURE 5.23 – Vitesse moyenne de l'onde longitudinale D , mesurée en paroi (symboles), comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale (ligne) : distribution monotone du gradient RPFo.

Z_i	0.046	0.186	0.273	0.360	0.447	0.535	0.622	0.709	0.796
D/D_{CJ}	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.99	1.07	1.49

TABLE 5.2 – Évolution du degré de force D/D_{CJ} de la détonation pour la composition locale : distribution monotone RPFo.

Ainsi, lorsque le découplage intervient à partir de la position $Z \approx 0.75$, la détonation est fortement soutenue pour la composition locale. Ce découplage est obtenu pour des richesses $0.05 \lesssim \phi \lesssim 0.12$, c'est-à-dire, inférieures à celles observées dans le cas du gradient PPFo, soit $0.25 \lesssim \phi \lesssim 0.4$ (Sect. 5.1). Le caractère soutenu de la détonation a donc pour effet de retarder le découplage du choc et de la flamme, ce qui permet à la détonation de se propager dans des compositions plus pauvres qu'en régime autonome CJ dans une composition uniforme. La Figure 5.9 donne la variation de la richesse locale ϕ et de la limite inférieure de richesse ϕ_{LFL} pour les deux gradients forts, PPFo et RPFo, à partir des positions où leurs découplages respectifs ont débuté. Pour le gradient RPFo, la position à laquelle la richesse atteint la limite inférieure est $Z \approx 0.86$ et l'extinction a lieu pour une richesse $\phi \approx 0.015$, c'est-à-dire, inférieure à celle du gradient PPFo, $\phi \approx 0.03$.

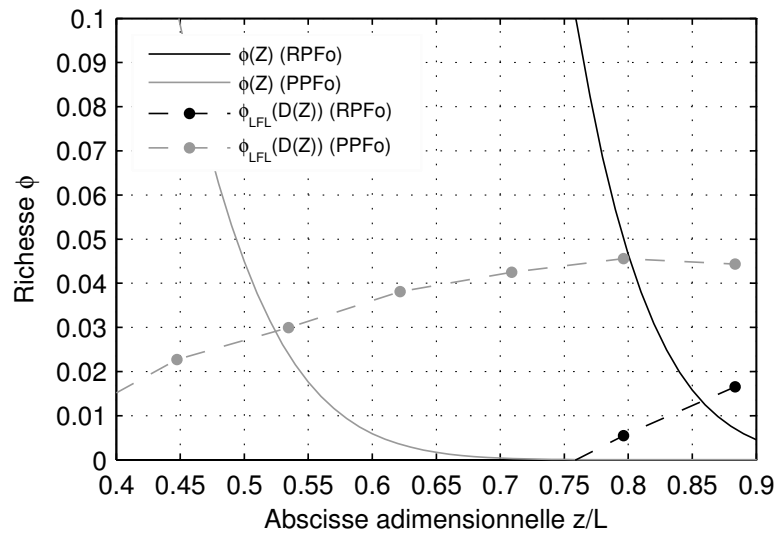


FIGURE 5.24 – Limites inférieures de richesse ϕ_{LFL} évaluées en fonction de la vitesse locale de l'onde de choc longitudinale D (symboles), comparées aux richesses locales $\phi(Z)$ (lignes) pour les deux gradients forts PPFo et RPFo.

5.4 Modélisation : critères d’extinction de la détonation

La Figure 5.25 donne la largeur moyenne λ des structures cellulaires et la vitesse moyenne longitudinale D mesurée en paroi en fonction de la richesse ϕ locale pour les trois catégories de gradient, Pauvre-Pauvre-Fort (PPFo), Pauvre-Pauvre-Faible (PPFa) et Riche-Pauvre-Fort (RPFo), étudiées dans ce chapitre. Elle a été obtenue en éliminant la position adimensionnelle Z entre les fonctions $\phi(Z)$ (Figure 5.1), $\lambda(Z)$ (Figures 5.3, 5.11 et 5.20) et $D(Z)$ (Figures 5.6, 5.18 et 5.23). Nous remarquons que, pour $\phi < 0.4$, la largeur moyenne des cellules λ de la distribution RPFo est significativement plus faible que pour les distributions PPFo et PPFa, confirmant ainsi le caractère soutenu de la détonation dans le cas du gradient RPFo.

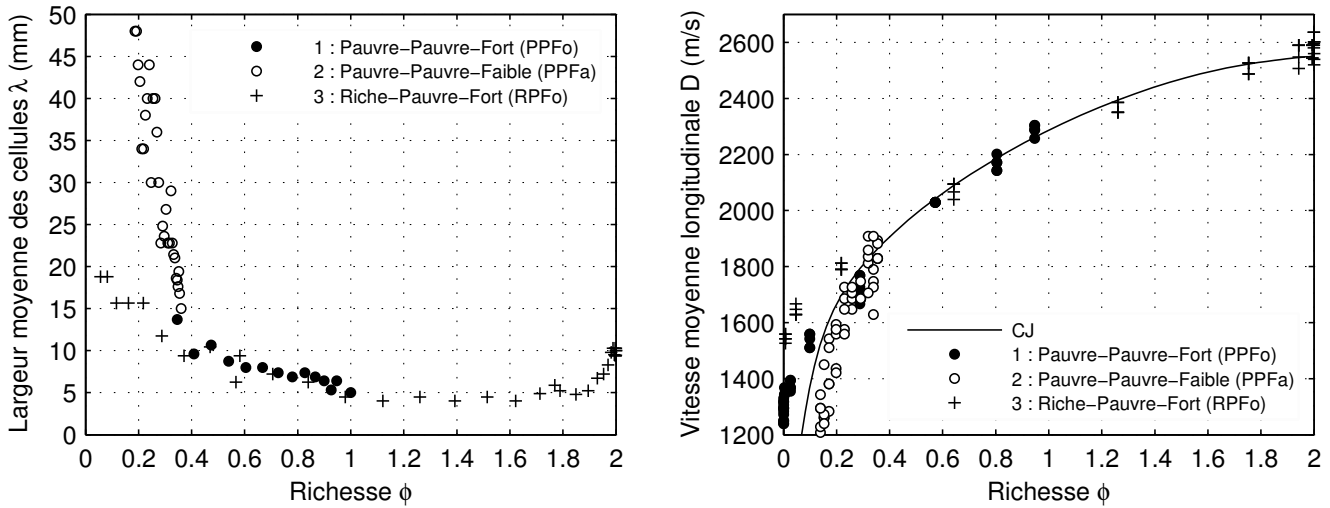


FIGURE 5.25 – Largeurs moyennes λ des cellules de détonation (à gauche) et vitesses moyennes D (à droite) de l’onde longitudinale en fonction de la richesse locale ϕ pour les trois catégories de distribution monotone considérées (compositions de C_3H_8/O_2 , $P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K).

5.4.1 Calculs ZND et corrélations expérimentales

À notre connaissance, il n’existe pas de modèles permettant de connaître a priori la valeur de λ pour des conditions initiales ϕ , P_0 et T_0 données. Pour les détonations multicellulaires, CJ ou soutenues, de nombreuses expériences ont cependant établi l’existence d’une corrélation robuste entre la largeur moyenne mesurée de la cellule λ et une longueur chimique ℓ_c caractéristique calculée selon les hypothèses du modèle ZND de la zone de réactions moyenne de la détonation (§1.3.1). Cette corrélation (§1.4.1) est la relation de proportionnalité :

$$\begin{aligned} \lambda &= k\ell_c & (5.2) \\ D &\geq D_{CJ} \end{aligned}$$

avec $k \in [15; 50]$ [34, 43, 44]. La Figure 5.26 donne des profils ZND de température 1D stationnaire calculés pour des mélanges uniformes $\phi C_3H_8 + 5O_2$ à différentes richesses ϕ et degrés de force D/D_{CJ} . Les calculs ont été réalisés pour deux mécanismes détaillés de cinétique chimique (San Diego [31] et GRI-Mech 3.0 [135]).

La Table 5.3 donne les largeurs moyennes des cellules λ mesurées dans nos expériences et les longueurs chimiques caractéristiques déduites des calculs. Les valeurs du rapport $k = \lambda/\ell_c$ sont en accord avec celles habituellement trouvées dans la littérature.

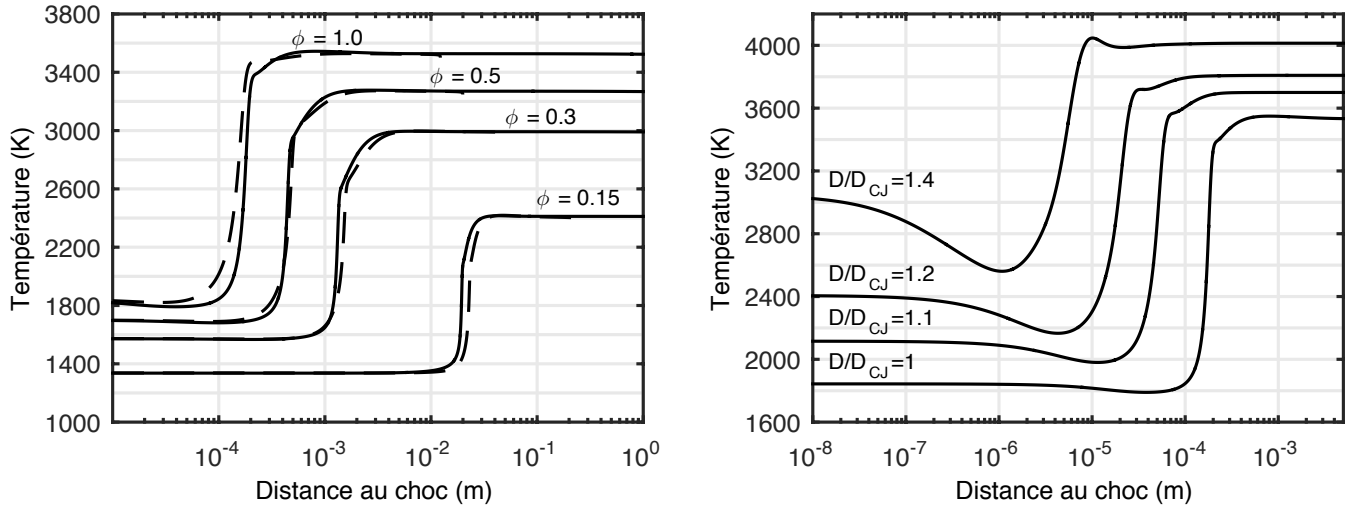


FIGURE 5.26 – Profils de température dans la zone de réactions du modèle ZND plan calculés pour différentes richesses, $D = D_{CJ}$ et deux mécanismes détaillés de cinétique chimique (gauche, traits continus : San Diego [31], traits discontinus : GRI-Mech 3.0 [135]) et différents degrés de force D/D_{CJ} pour la composition stœchiométrique (droite) des mélanges C_3H_8/O_2 , $P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K.

ϕ	λ (mm)	San Diego		Gri-Mech 3.0	
		ℓ_c (mm)	$k = \lambda/\ell_c$	ℓ_c (mm)	$k = \lambda/\ell_c$
1.0	5 ± 2	0.182	27.5	0.165	30.3
0.36	15 ± 3	0.863	17.4	0.976	15.4
2.0	10 ± 2	0.209	47.8	0.193	51.8

TABLE 5.3 – Largeur moyenne λ_{CJ} des structures cellulaires, longueur chimique caractéristique ℓ_c de la zone de réactions du modèle ZND et facteur de corrélation k pour différentes richesses et les mécanismes détaillés de cinétique chimique San Diego [31] et GRI-Mech 3.0 [135].

5.4.2 Extinction marginale

L’extinction d’une détonation multicellulaire qui vient à se propager dans une distribution de la composition où la variation de richesse est modérée (dans cette étude, le gradient PPFa, Sect. 5.2) est réalisée par transition du mode multicellulaire vers des modes marginaux où le nombre de modes transverses s’adapte à la dimension du confinement. Des considérations géométriques (propagation d’un seul point triple) sur la section carrée de la chambre d’étude conduisent au critère d’existence (eq. 1.60, §1.4.2) :

$$\lambda \lesssim \pi d \quad (5.3)$$

où d désigne le côté du carré. Dans notre configuration, un critère d’extinction de la détonation de nature acoustique reposant sur l’épaisseur caractéristique ℓ_c de la zone de réactions ZND peut être exprimé sous la forme adimensionnée :

$$\frac{k\ell_c}{\pi d} \gtrsim 1 \quad (5.4)$$

La Figure 5.27 donne les variations du nombre $k\ell_c/\pi d$ calculées avec le mécanisme cinétique San Diego [31] pour deux facteurs de proportionalité $k = 15$ et $k = 50$, en fonction de la position dans la chambre pour le cas du gradient Pauvre-Pauvre-Faible.

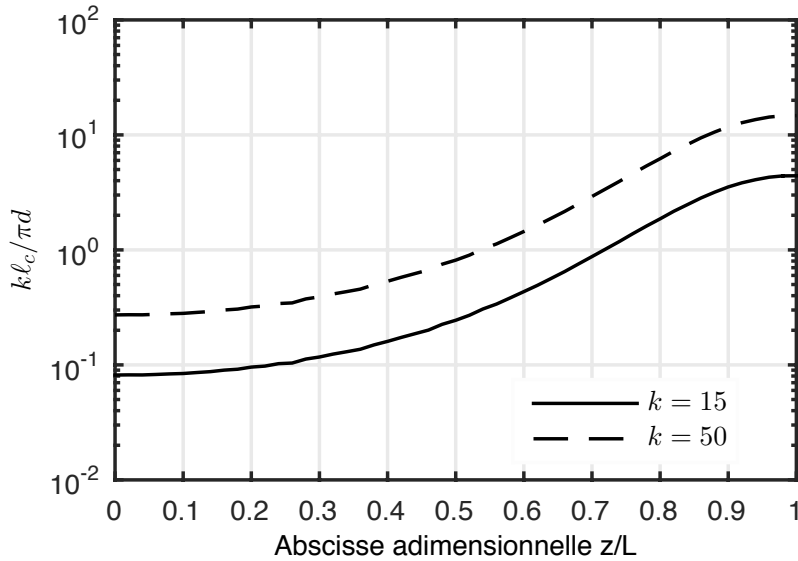


FIGURE 5.27 – Variations du nombre $k\ell_c/\pi d$, avec $k = 15$ et $k = 50$, en fonction de la position adimensionnelle dans la chambre d’étude z/L : distribution monotone PPFa.

La Figure 5.27 montre que $k\ell_c/\pi d \gtrsim 1$ pour des positions $0.52 \lesssim Z \lesssim 0.72$ en accord avec les positions où nous avons observé la disparition du dernier point triple (Sect. 5.2, Figure 5.10), c’est-à-dire l’extinction marginale de la détonation.

5.4.3 Extinction par découplage choc-flamme

L’extinction d’une détonation multicellulaire qui vient à se propager dans une distribution de la composition où la variation de richesse est rapide (dans cette étude, les gradients PPFo, Sect. 5.1 et RPFo, Sect. 5.3)

est contrôlée par les variations locales de la largeur de la structure cellulaire $\partial\lambda/\partial z$ et de la richesse $\partial\phi/\partial z$, considérées à la position z instantanée de la détonation. Notre analyse phénoménologique est qu'un temps minimal est nécessaire pour que la structure cellulaire puisse s'adapter à la composition rencontrée. Si cette composition varie trop rapidement, les points triples d'une cellule n'ont pas assez de temps pour entrer en collision avec ceux de la cellule adjacente, et la structure du front de détonation ne peut donc plus s'adapter à l'état initial local. Le découplage choc-flamme est donc le cas d'extinction pour lequel l'état initial varie plus rapidement que la taille de la cellule, et l'extinction par modes marginaux celui pour lequel cet état varie suffisamment lentement pour permettre à la structure cellulaire de s'adapter selon une propagation marginale. Contrairement à l'extinction par modes marginaux (§5.4.2), le découplage choc-flamme est indépendant de la dimension transverse du dispositif sous réserve que la détonation multicellulaire ait été installée avant le début des variations de l'état initial. Il est possible de formuler notre critère de manière plus quantitative en décrivant la phénoménologie du découplage choc-flamme. Il repose sur les relations de proportionnalités entre les grandeurs chimiques caractéristiques de la détonation (§1.3.1, eqs. 1.56 et 1.58) : longueur L_{cell} et largeur λ des cellules de détonation, longueur ℓ_c et temps t_c chimiques caractéristiques de la zone de réactions du modèle 1D stationnaire plan ZND, désignées collectivement ci-après par g . Notre critère de découplage choc-flamme exprime que les variations δg deviennent supérieure à g , soit :

$$\delta g/g \gtrsim 1 \quad (5.5)$$

Nous appliquons ce critère à la variation δt_c du temps chimique caractéristique t_c associée à un déplacement du front d'onde sur une distance représentative δz :

$$\delta z = D \times t_c \quad (5.6)$$

$$\delta t_c = \frac{\partial t_c}{\partial z} \times \delta z = D \times \frac{\partial t_c}{\partial z} \times t_c \quad (5.7)$$

En introduisant le nombre sans dimension $D\nabla t_c = D \times \partial t_c/\partial z = D \times \partial t_c/\partial\phi \times \partial\phi/\partial z$, notre critère de découplage choc-flamme (eq. 5.5) devient alors :

$$D\nabla t_c \gtrsim 1 \quad (5.8)$$

Nous en déduisons la valeur critique $\nabla\phi_C$ du gradient de composition $\nabla\phi = \partial\phi/\partial z$ au delà de laquelle le découplage survient :

$$|\nabla\phi| \gtrsim \nabla\phi_C = \left(D \left| \frac{\partial t_c}{\partial\phi} \right| \right)^{-1} \quad (5.9)$$

La Figure 5.28 donne les variations des paramètres $D\nabla t_c$ et $\nabla\phi_C$ en fonction de la position adimensionnelle z/L dans la chambre d'étude.

Pour le cas du gradient Pauvre-Pauvre-Fort, PPFo (Figure 5.28, ligne du haut) où la détonation multicellulaire est autonome ($D = D_{\text{CJ}}$), le critère de découplage, $D\nabla t_c \gtrsim 1$ ou $|\nabla\phi| \gtrsim \nabla\phi_C$, indique une position de découplage $Z = 0.38$. Cette position correspond bien à la zone où nous l'avons observé expérimentalement (Figure 5.2, Sect. 5.1).

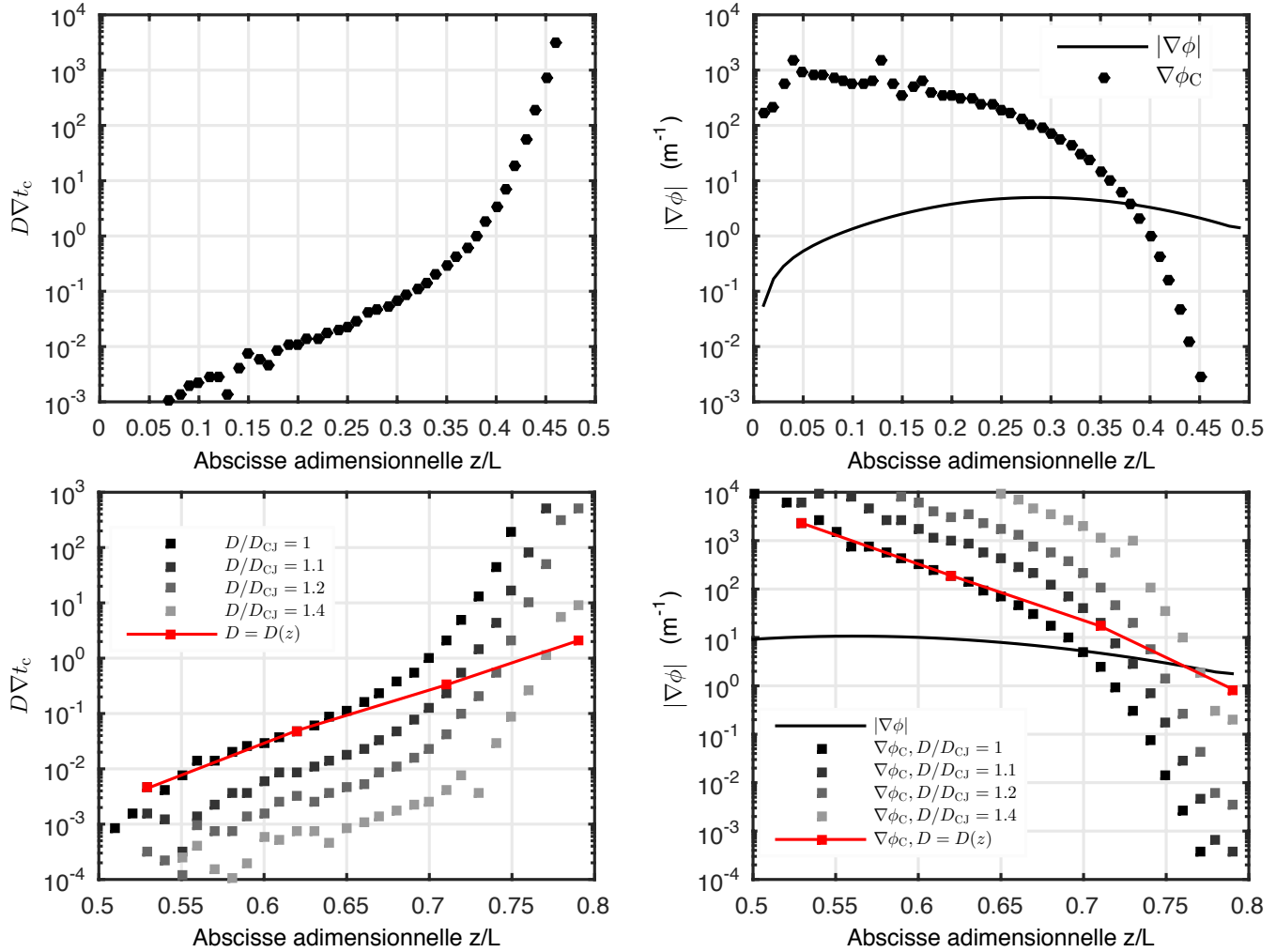


FIGURE 5.28 – Variations du nombre $D\nabla t_c$ (gauche) et du gradient de richesse critique $\nabla\phi_C$ (droite) en fonction de z/L pour les gradients Pauvre-Pauvre-Fort (haut) et Riche-Pauvre-Fort (bas).

Pour le cas du gradient Riche-Pauvre-Fort, RPFo (Figure 5.28, ligne du bas), l'utilisation du critère avec la célérité mesurée $D(z)$ prédit le découplage choc-flamme autour de la position $Z = 0.76$ qui correspond bien à celle où nous l'avons observé expérimentalement (Figure 5.19, Sect. 5.3) et à une richesse locale inférieure à celle du découplage de la détonation autonome pour le cas du gradient PPFo (Sect. 5.3). Ceci est dû au caractère soutenu de la détonation ($D/D_{CJ} > 1$) au moment de l'extinction. Les courbes sur la Figure 5.28 (ligne du bas) illustrent l'influence du comportement soutenu de la détonation. Nous avons déterminé des positions de découplage pour plusieurs degrés de force $D/D_{CJ} > 1$ arbitraires. On observe effectivement que la position du découplage augmente avec le degré de force, la position réelle ($Z = 0.76$) étant celle associée à la célérité $D(z)$ mesurée.

Néanmoins, pour les situations de détonations soutenues ($D > D_{CJ}$), ce critère ne présente qu'un intérêt relatif. En effet, nous ne connaissons pas de conditions aux limites ou initiales naturelles en tube droit conduisant à une détonation soutenue, de célérité constante et prédictible.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié expérimentalement la dynamique de propagation et d’extinction de la détonation dans des distributions monotones de richesse décroissante associées à trois gradients de composition génériques : le gradient Pauvre-Pauvre-Fort (Sect. 5.1), le gradient Pauvre-Pauvre-Faible (Sect. 5.2) et le gradient Riche-Pauvre-Fort (Sect. 5.3). Nous avons identifié deux dynamiques d’extinction de la détonation déterminée en fonction de la force du gradient de composition.

Lorsque la variation de richesse est modérée, l’extinction est contrôlée par la dimension transverse du confinement pour laquelle la détonation adapte son nombre de modes transverses. Nous avons formulé et validé un critère d’existence de la détonation. Il est fondé sur la comparaison de longueurs chimiques caractéristiques (largeur de la cellule λ ou longueur chimique ℓ_c) avec la dimension transverse d du confinement. Sa mise en œuvre requiert toutefois que ces longueurs soient connues ou calculables avec fiabilité.

Lorsque la variation de la richesse est importante, l’extinction de la détonation résulte du découplage du choc et de la flamme. Nous avons formulé et validé un critère de découplage fondé sur l’analyse de la variation du temps chimique caractéristique t_c de la zone de réactions moyenne du modèle ZND en fonction de la composition initiale.

Ces critères peuvent être utiles pour le dimensionnement de moteurs à détonations, en particulier, pour estimer la dimension transverse minimale (l’entrefer dans un RDE) nécessaire à la propagation de la détonation ou le nombre d’injecteurs et les distances optimales les séparant.

Les résultats présentés dans ce chapitre, le banc expérimental (Chapitre 3) et les techniques de mesures (Chapitre 4) ont fait l’objet d’un article (BOULAL et al. [136]) publié dans *Combustion and Flame*.

Chapitre 6

Dynamiques de la détonation dans des distributions non-monotones de richesse

Sommaire

6.1	Transmission super-critique	95
6.2	Extinction sous-critique	98
6.3	Transmission critique	102
6.4	Analyse	109
6.5	Conclusion	112

Ce chapitre décrit les résultats expérimentaux obtenus pour des cas de gradients de composition avec des distributions non-monotones de richesse, décroissante puis croissante, et les conditions initiales de pression et de température $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K. Les distributions de composition ont été réalisées avec de l'oxygène O_2 et deux combustibles, le propane C_3H_8 dans la zone à richesse décroissante et l'éthane C_2H_6 dans la zone à richesse croissante. Les compositions C_3H_8/O_2 plus lourdes sont situées dans la partie basse de la chambre. La richesse est localement définie en Section 3.4 par (3.6).

Notre objectif a été de déterminer les conditions pour lesquelles une détonation qui s'est éteinte dans la zone de richesse décroissante peut se réamorcer. Ces conditions sont réunies dans la zone de richesse croissante, lorsque la réactivité locale redevient favorable. Les conditions d'extinction de la détonation dans la zone de richesse décroissante ont été présentées dans le Chapitre 5. Le tube d'amorçage a toujours été rempli du mélange stoechiométrique $C_3H_8 + 5O_2$ à la pression et à la température initiales $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K.

Nous avons identifié trois dynamiques de transmission de la détonation selon le gradient de composition :

1. La transmission super-critique : la détonation se propage en régime autonome CJ, avec une dynamique locale multicellulaire en adaptation continu à la richesse locale.
2. L'extinction sous-critique : la détonation autonome multicellulaire s'éteint par mécanisme de découplage choc-flamme et ne se reforme pas.
3. La transmission critique : la détonation autonome multicellulaire s'éteint par mécanisme de découplage choc-flamme, puis se reforme violemment sous forme d'une détonation soutenue, divergente et multicellulaire qui relaxe vers le régime autonome et redevient plane.

La Figure 6.1 présente les trois distributions non-monotones de richesse associées à ces gradients super-critique, sous-critique et critique et la Table 6.1 en résume les conditions expérimentales. Nous présentons ci-dessous les résultats en trois sections, chacune dédiée à une dynamique de transmission et détaillée en

fonction du diagnostic employé. Dans une dernière section, nous proposons une analyse phénoménologique de ces résultats en les comparant aux situations transitoires de propagation de détonations observées dans des compositions uniformes (Sect. 1.5).

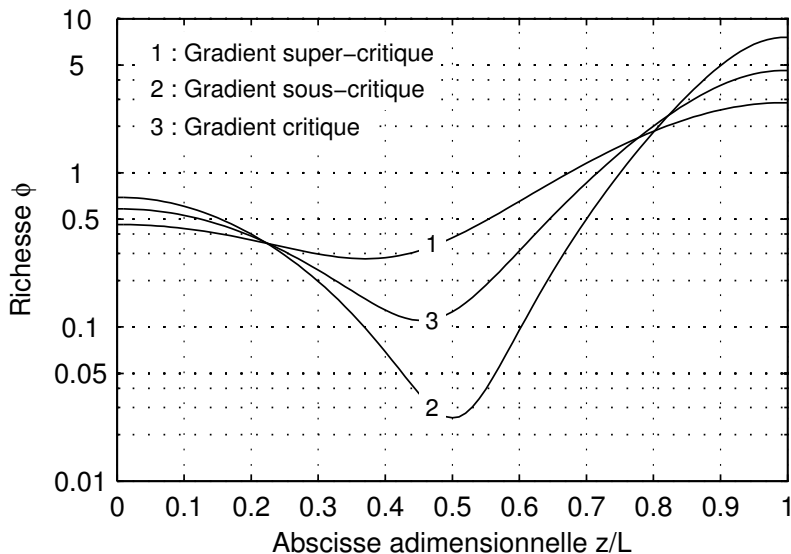


FIGURE 6.1 – Distributions non-monotones de $C_3H_8/O_2/C_2H_6$ associées aux gradients super-critique, sous-critique et critique. $P_0 = 200$ mbar, $T_0 = 290$ K, $L = 665$ mm.

Gradient	τ	ϕ_{tube}	ϕ_0	ϕ_L	$\bar{\phi}$	$D_{\text{tube}}/D_{\text{CJ}}(\phi_0)$
1 : super-critique	220 s	1.0	0.46	2.85	0.97	1.17
2 : sous-critique	55 s	1.0	0.69	7.55	1.31	1.08
3 : critique	110 s	1.0	0.58	4.61	1.10	1.12

TABLE 6.1 – Conditions expérimentales des gradients de composition associés aux distributions non-monotones de richesse (τ : temps de diffusion, ϕ_{tube} : richesse du mélange d’amorçage, $\phi_0 = \phi(z = 0, \tau)$: richesse en entrée de chambre, $\phi_L = \phi(z = L, \tau)$: richesse en fond de chambre, $\bar{\phi}$: richesse moyenne dans la chambre, D_{tube} : vitesse moyenne de la détonation dans le tube d’amorçage). Mélanges $C_3H_8/O_2/C_2H_6$, $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K.

6.1 Transmission super-critique

La Figure 6.2 présente un exemple d'enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation par la méthode des traces sur dépôt de carbone pour le cas de la distribution non-monotone associée au gradient super-critique (Figure 6.1, courbe 1).

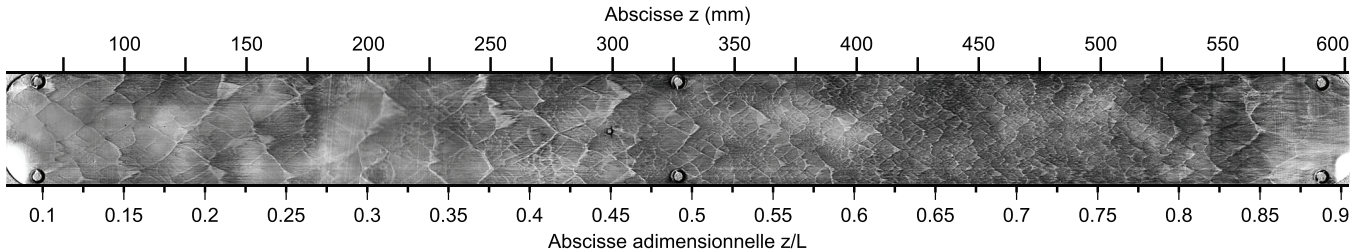


FIGURE 6.2 – Enregistrement de la dynamique de transmission de la détonation sur une plaque recouverte d'un dépôt de carbone : distribution non-monotone du gradient super-critique.

Nous observons que la détonation conserve son mode multicellulaire de propagation tout le long de la chambre d'étude. Nous observons également que l'aspect de la structure cellulaire évolue d'irrégulier en début de chambre ([38, 39], §1.4.1) à très irrégulier un peu avant le milieu de la chambre, avec apparition de sous-structure en première partie de cellule, puis redevient simplement irrégulier en deuxième moitié de chambre. La structure cellulaire de la détonation disparaît à partir de 85 % de la longueur de la chambre.

La Figure 6.3 compare $D(Z)$, vitesse moyenne longitudinale mesurée en paroi, à $D_{CJ}(\phi(Z))$, célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale. La célérité D_{tube} de la détonation se propageant dans le tube d'amorçage est repérée par le point rouge. Nous soulignons que le degré de force initial de la détonation, $D_{\text{tube}}/D_{CJ} = 1.17$, s'amortit très rapidement : la détonation est en régime CJ local dès la position $Z \approx 0.15$. Nous notons cependant l'apparition d'un déficit de vitesse à partir de la position $Z \approx 0.7$.

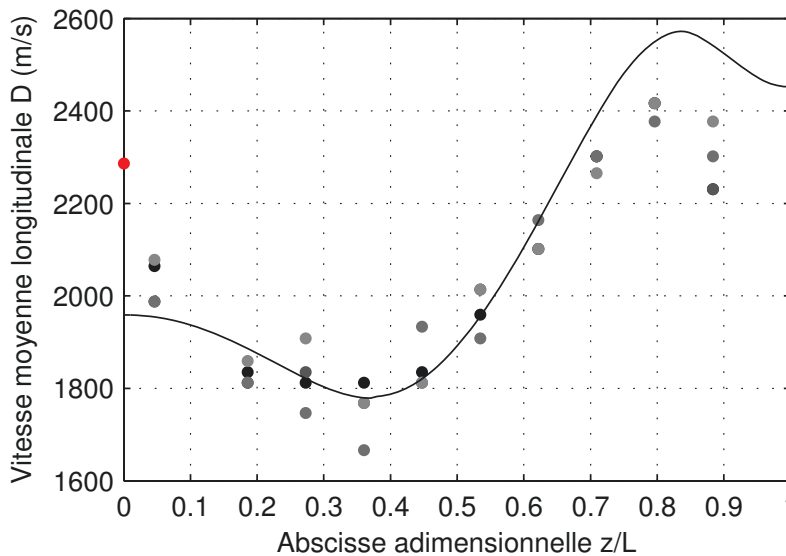


FIGURE 6.3 – Vitesse moyenne de l'onde longitudinale D , mesurée en paroi (symboles), comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale (ligne) : distribution non-monotone du gradient super-critique.

Ce déficit peut être expliqué par deux considérations :

- l’incertitude sur la mesure de la vitesse qui devient non-négligeable lorsque la vitesse de l’onde est relativement grande (Sect. 4.1, eq. 4.2) ;
- la présence d’un noyau de C_2H_6 , donc d’un niveau élevé de richesse, qui perdure en haut de chambre, en raison notamment de la présence des disques poreux. Le C_2H_6 est en effet le dernier composant injecté. Notre modélisation numérique du processus de diffusion (§3.4.2) considère des conditions à la limite de type flux-nul aux frontières de la chambre. En réalité, il peut exister un flux de C_2H_6 en provenance du plenum d’injection (Sect. 3.2) durant la phase diffusive de génération du gradient. Ce noyau pourrait expliquer l’écart de célérité observé. La disparition de la structure cellulaire sur l’enregistrement de la Figure 6.2 résulte alors probablement d’un découplage choc-flamme. D’après la relation (3.6, Sect. 3.4), la sensibilité de la richesse à une variation de la concentration de C_2H_6 est donnée par :

$$\frac{d\phi}{dX_{C_2H_6}} = \frac{3.5}{(1 - X_{C_2H_6})^2} \quad (6.1)$$

Ainsi, lorsque la concentration de C_2H_6 s’approche de 1, une erreur dans la mesure de $X_{C_2H_6} = 1 - X_{O_2}$ conduit à une erreur importante dans le calcul de la richesse. En raisonnant sur le problème inverse, et en considérant que la détonation reste en régime multicellulaire CJ local, soit $D(Z) = D_{CJ}(\phi(Z))$, il est intéressant de déterminer les valeurs $\phi(Z_i) = f^{-1}(D(Z_i))$ locales corrigées, où f^{-1} désigne la fonction inverse de la fonction $D_{CJ}(\phi) = f(\phi)$. La fonction $f(\phi)$ n’est pas strictement monotone et présente un maximum autour de la richesse $\phi = 2.15$. Pour chaque valeur $D(Z_i)$, il existe deux solutions ϕ_- et ϕ_+ au problème inverse (Table 6.2). Il apparaît alors que les solutions de ϕ , croissantes et compatibles avec l’enregistrement de la Figure 6.2 sont les valeurs $\phi = \{0.99, 1.25, 3.28\}$. La Figure 6.4 montre la distribution super-critique ainsi corrigée.

Position du capteur Z_i	ϕ	$D_{CJ}(\phi)$ (m/s)	$D(Z_i)$ (m/s)	ϕ_-	ϕ_+
0.709	1.22	2392	2293	0.99	3.26
0.796	1.86	2553	2407	1.25	2.98
0.884	2.44	2544	2285	0.97	3.28

TABLE 6.2 – Problème inverse appliqué à la détermination de la richesse locale étant donnée la mesure de la vitesse moyenne de l’onde longitudinale.

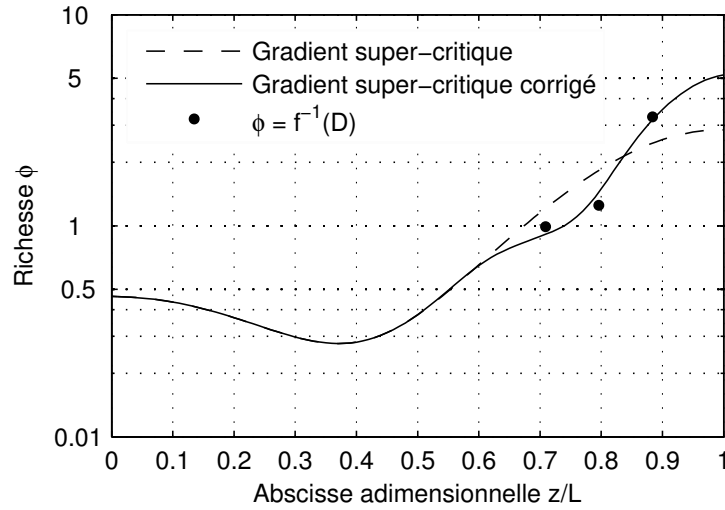


FIGURE 6.4 – Distributions de richesse des gradients super-critique et super-critique corrigée après prise en compte des solutions au problème inverse.

Dans le Chapitre 5, nous avons proposé le critère de découplage choc-flamme $D\nabla t_c \gtrsim 1$ pour les détonations multicellulaires rencontrant un gradient de composition à réactivité décroissante, où D est la célérité locale de la détonation autonome ou soutenue ($D \geq D_{CJ}$) et t_c le temps chimique caractéristique de la zone de réactions du modèle ZND plan. La Figure 6.5 donne la variation du nombre $D\nabla t_c$ calculé pour la distribution super-critique corrigée. Dans le premier intervalle, $0 \leq Z \leq 0.37$, à réactivité décroissante (écart à la stoechiométrie par valeur de richesse $\phi < 1$ décroissante), le critère prévoit bien la propagation de la détonation sans découplage choc-flamme ($D\nabla t_c < 1$). Dans le second intervalle, $0.75 \leq Z \leq 1$, à réactivité décroissante (écart à la stoechiométrie par valeur de richesse $\phi > 1$ croissante), il confirme aussi que la disparition de la structure cellulaire observée sur l’enregistrement de la Figure 6.2 est bien due à un découplage choc-flamme. En effet, nous observons que $D\nabla t_c \gtrsim 1$, à partir de la position $Z \approx 0.87$.

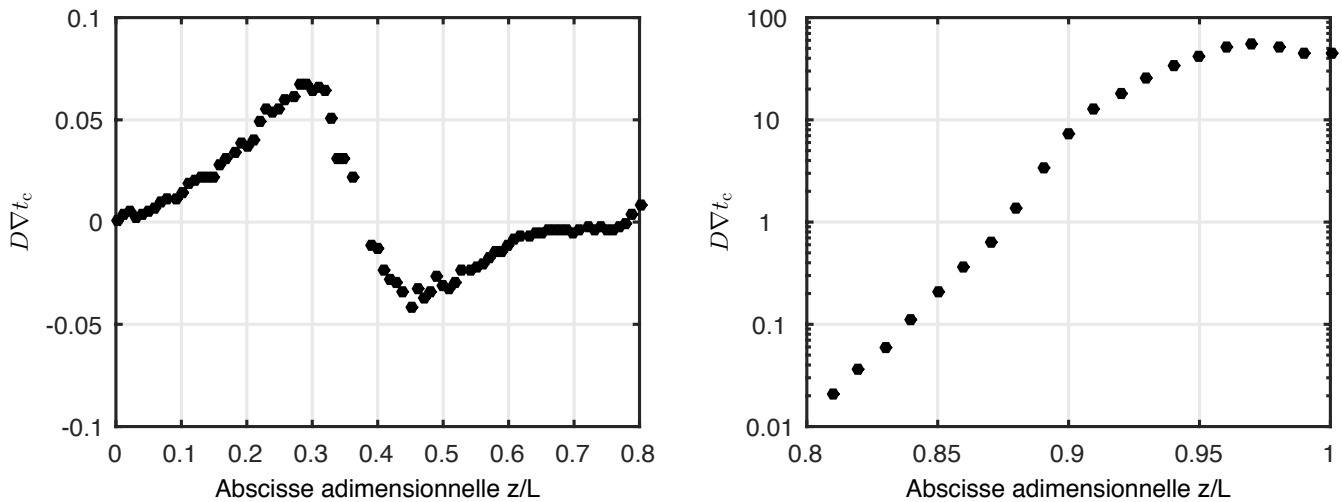


FIGURE 6.5 – Variation du paramètre $D\nabla t_c$ en fonction de z/L : distribution non-monotone du gradient super-critique “corrigé”.

6.2 Extinction sous-critique

La Figure 6.6 présente un exemple d'enregistrement de la dynamique d'extinction de la détonation par la méthode des traces sur dépôt de carbone pour le cas de la distribution non-monotone associée au gradient sous-critique (Figure 6.1, courbe 2). Entre 25 % et 30 % de la longueur de la chambre d'étude, nous observons la disparition brusque de la structure multicellulaire du front de détonation. La dynamique d'extinction est donc identique à celle du gradient associée à la distribution Pauvre-Pauvre-Fort PPFo (Sect. 5.1), c'est-à-dire résultant d'un découplage choc-flamme. Ceci est confirmé sur la Figure 6.7 qui donne la variation du nombre $D\nabla t_c$ calculé pour la distribution sous-critique. De fait, nous constatons que $D\nabla t_c \geq 1$ à partir de la position $Z \approx 0.29$.

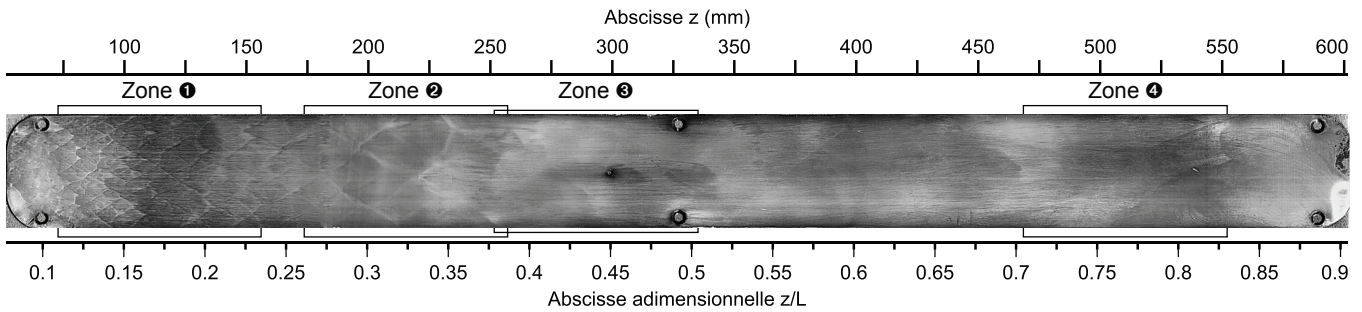


FIGURE 6.6 – Enregistrement de la dynamique d'extinction de la détonation sur une plaque recouverte d'un dépôt de carbone : distribution non-monotone sous-critique. Les zones numérotées de 1 à 4 correspondent aux positions des enregistrements indiqués de la Figure 6.8.

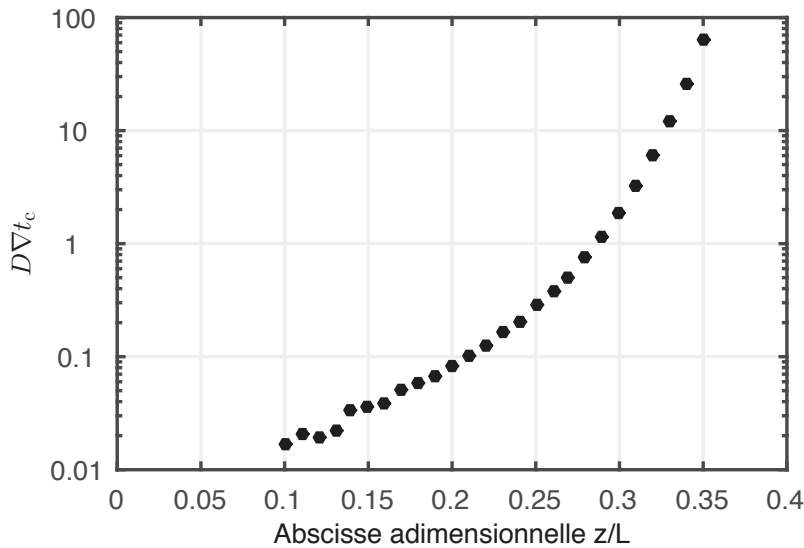


FIGURE 6.7 – Variation du paramètre $D\nabla t_c$ en fonction de z/L : distribution non-monotone du gradient sous-critique.

La Figure 6.8 donne les enregistrements par strioscopie de la dynamique d'extinction de la détonation dans quatre zones de visualisation associées aux intervalles de position $[0.11; 0.23]$, $[0.26; 0.38]$, $[0.38; 0.50]$ et $[0.71; 0.83]$ (Figure 6.6).

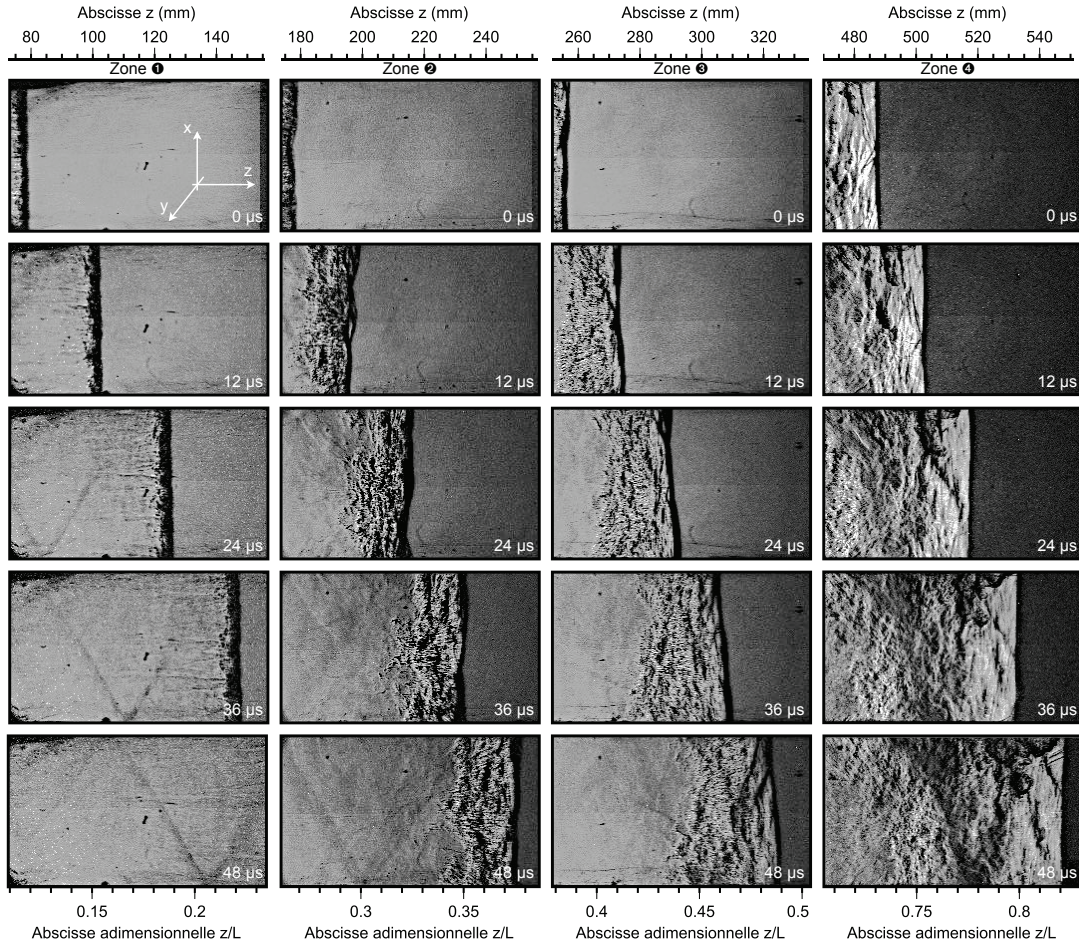


FIGURE 6.8 – Visualisation par striescopie de la dynamique d’extinction de la détonation (intervalle de temps entre images : $12 \mu\text{s}$) : distribution non-monotone du gradient sous-critique. Les zones numérotées de 1 à 4 correspondent aux intervalles de position indiquées sur la Figure 6.6. Les temps sont relatifs à la première image de chaque zone.

Les enregistrements résultent de quatre expériences différentes. Dans la zone 1, nous observons la propagation multicellulaire de la détonation. Dans la zone 2, nous observons le découplage du choc et de la flamme. Dans la zone 3, nous observons le système choc-flamme découplé. Dans la zone 4, nous notons, entre le choc et la zone des gaz brûlés, l’apparition d’un noyau de combustion émanant de la paroi supérieure qui se développe en direction de la paroi inférieure à mesure de la propagation du choc longitudinal. Ce noyau de combustion subsonique peut être vu comme un piston pour le choc qu’il va donc accélérer et amplifier par génération d’ondes de compression. En retour, la température et la pression derrière le choc seront plus élevées ce qui va accélérer le noyau de combustion (SOLOUKHIN [137]). Ce mécanisme rétroactif d’amplification est générique pour la combustion en milieu homogène compressible. Il a été formalisé par LEE et MOEN [138] sous l’appellation SWACER (*Shock Wave Amplification by Coherent Energy Release*). Il constitue une des étapes de la formation de la détonation au cours du processus de Transition Déflagration Détonation [44, 121].

Afin de mieux comprendre ces mécanismes, nous avons réalisé une série d’expériences avec un gradient de composition sous-critique que nous qualifions de sous-critique “affaibli”. Ce dernier est obtenu pour un temps de diffusion $\tau = 83 \text{ s}$, c’est-à-dire plus long que celui du cas sous-critique précédent. La Figure 6.9 donne les

distributions de richesse (gauche) et la mesure $D(Z)$ de la vitesse moyenne du choc longitudinal pour ces deux cas de gradients sous-critiques (droite). Nous remarquons que l'accélération du choc consécutive à la génération de noyaux de combustion est plus importante et que leurs apparitions ont lieu plus tôt pour le gradient sous-critique "affaibli" que pour le gradient sous-critique. Le choc précurseur bénéficie donc d'un temps supérieur d'amplification.

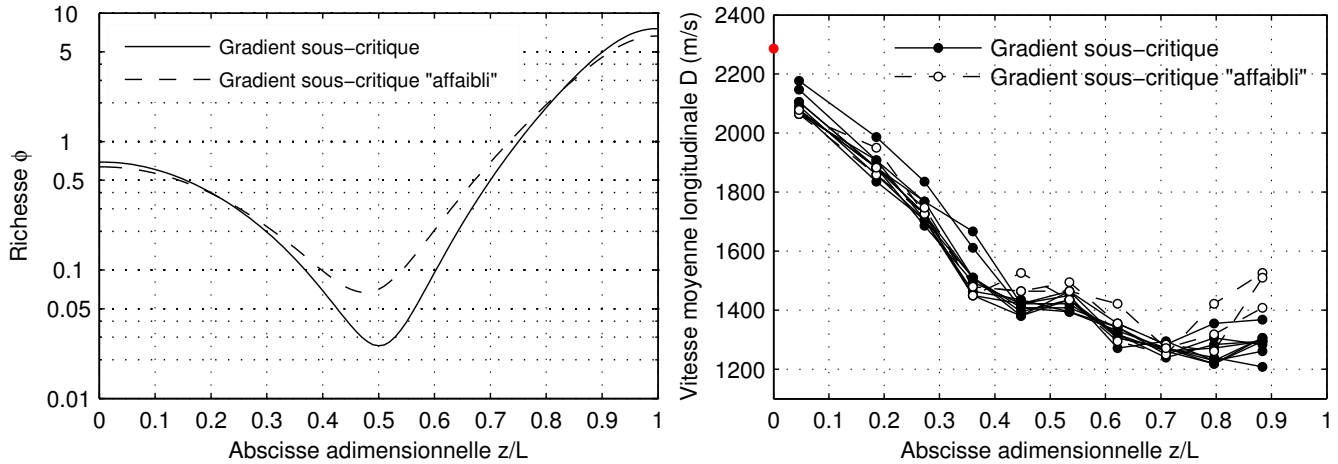


FIGURE 6.9 – Gauche : distributions de richesse des gradients sous-critiques, droite : vitesse moyenne de l'onde longitudinale D .

Ces observations sont confirmées sur les enregistrements par strioscopie donnés en Figure 6.10, réalisés dans les intervalles de position $[0.54; 0.66]$, $[0.64; 0.77]$ et $[0.74; 0.86]$. Dans la zone 1, nous notons l'apparition d'un noyau de combustion, au niveau de la paroi inférieure, entre les instants 24 et 36 μs . Ce noyau est créé après réflexion de Mach d'une onde transverse résiduelle issue de la détonation avant son découplage. La réflexion de Mach porte localement le mélange choqué à une température plus haute que celle qu'induirait l'onde de choc incidente. Ainsi, le délai d'induction local est raccourci, ce qui explique l'émergence du noyau d'allumage. Dans les zones 2 et 3, nous observons la propagation et la multiplication de ces noyaux de combustion dont l'agrégation forme peu à peu une onde de déflagration qui consomme progressivement le mélange frais et choqué par l'onde de choc longitudinale. À l'instant 48 μs , à la position du choc longitudinal $Z \approx 0.85$ (zone 3), la déflagration est proche du choc et l'ensemble est proche de la TDD. La Figure 6.11 présente des schémas de deux clichés strioscopiques des enregistrements obtenus pour les gradients sous-critique et sous-critique "affaibli". Ces clichés correspondent aux positions du front de choc $Z \approx 0.82$ et $Z \approx 0.85$, respectivement. Il est intéressant de noter que les noyaux de combustion sont, dans les deux cas, apparus à l'une des parois de la chambre. C'est en effet aux parois, en particulier aux niveaux des arêtes, que, d'une part, la concentration de points chauds est la plus importante, en raison des effets de frottements, et que, d'autre part, les réflexions de Mach sont les plus intenses (réflexions dans les angles).

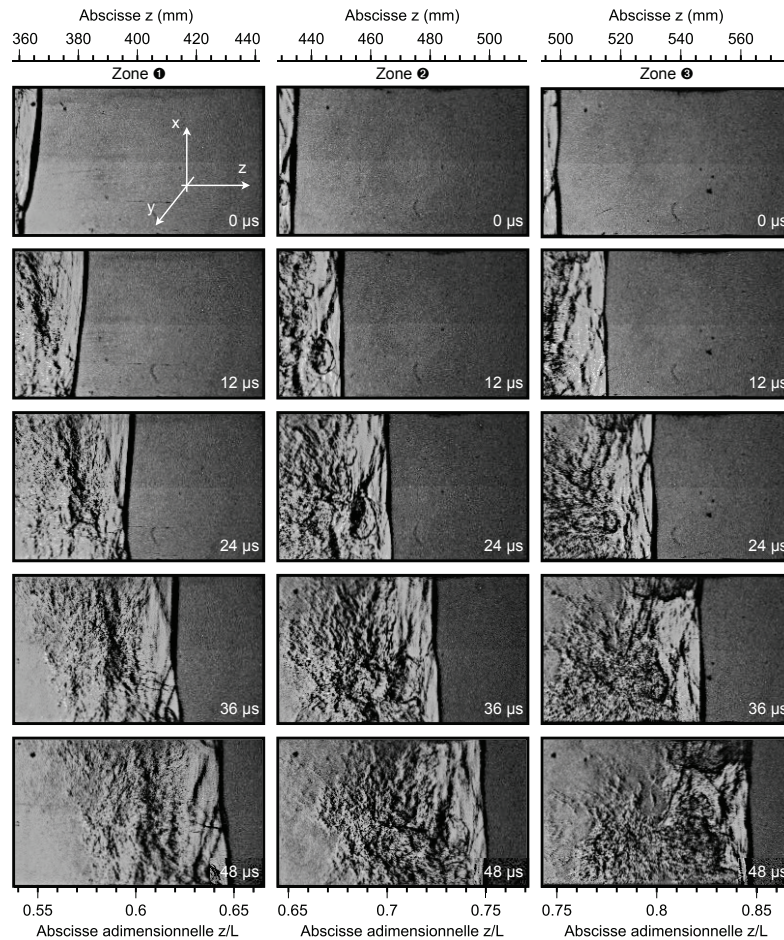


FIGURE 6.10 – Visualisation par striescopie de l'émergence et de la multiplication des noyaux de combustion (intervalle de temps entre images : 12 μs) : distribution non-monotone du gradient sous-critique "affaibli". Les temps sont relatifs à la première image de chaque zone.

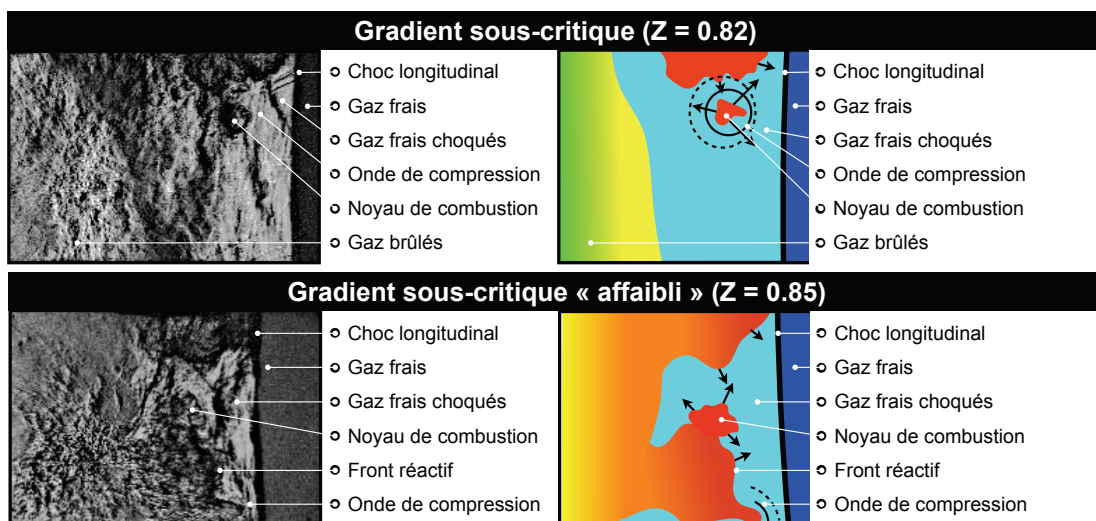


FIGURE 6.11 – Clichés striescopiques (gauche) et représentation schématique (droite) du système choc-flamme obtenu pour les gradients sous-critique (haut) et sous-critique "affaibli" (bas).

6.3 Transmission critique

La Figure 6.12 présente un exemple d'enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation par la méthode des traces sur quatre plaques recouvertes d'un dépôt de carbone pour le cas de la distribution monotone associée au gradient critique (Figure 6.1, courbe 3). Comme pour le cas de l'extinction progressive marginale dans une distribution monotone de richesse (Sect. 5.2), ces plaques étaient positionnées sur chacune des quatre faces internes de la chambre d'étude. La Figure 6.12 est leur déroulé tel que la ligne supérieure de la plaque du haut correspond à la ligne inférieure de la plaque du bas.

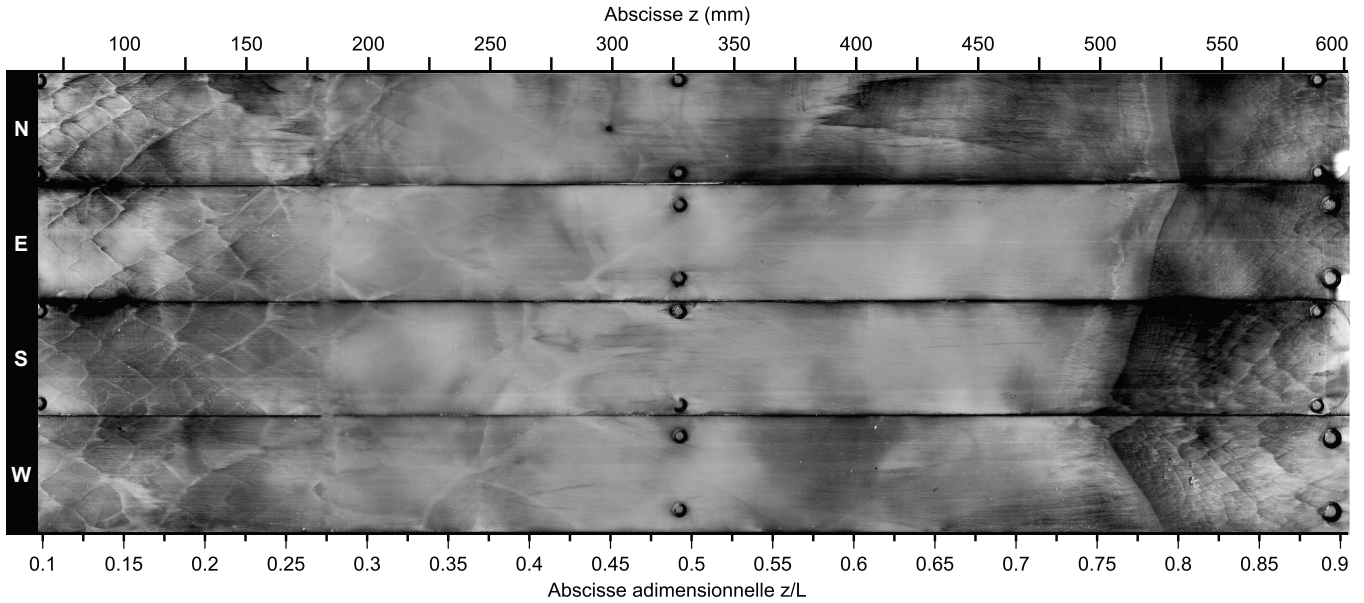


FIGURE 6.12 – Déroulé de l'enregistrement de la dynamique de transmission de la détonation sur des plaques recouvertes d'un dépôt de carbone : distribution non-monotone du gradient critique.

La dynamique de transmission critique correspond à la situation intermédiaire entre les dynamiques de transmission super-critique (Sect. 6.1) et sous-critique (Sect. 6.2). Nous observons la disparition soudaine de la structure cellulaire de la détonation entre $Z \approx 0.20$ et $Z \approx 0.30$ ce qui indique, comme pour le cas du gradient sous-critique (Sect. 6.2) et le cas du gradient Pauvre-Pauvre-Fort PPFo (Sect. 5.1), un découplage choc-flamme. Ceci est confirmé sur la Figure 6.13 qui donne la variation du nombre $D\nabla t_c$ caractérisant notre critère de découplage (§5.4.3) calculé pour la distribution critique. De fait, nous constatons que $D\nabla t_c \gtrsim 1$ à partir de la position $Z \approx 0.31$. À la position $Z \approx 0.75$, correspondant à une richesse locale $\phi \approx 1.3$, nous observons le réamorçage violent et transversal d'une détonation multicellulaire au niveau de l'arête joignant les plaques inférieures S et W.

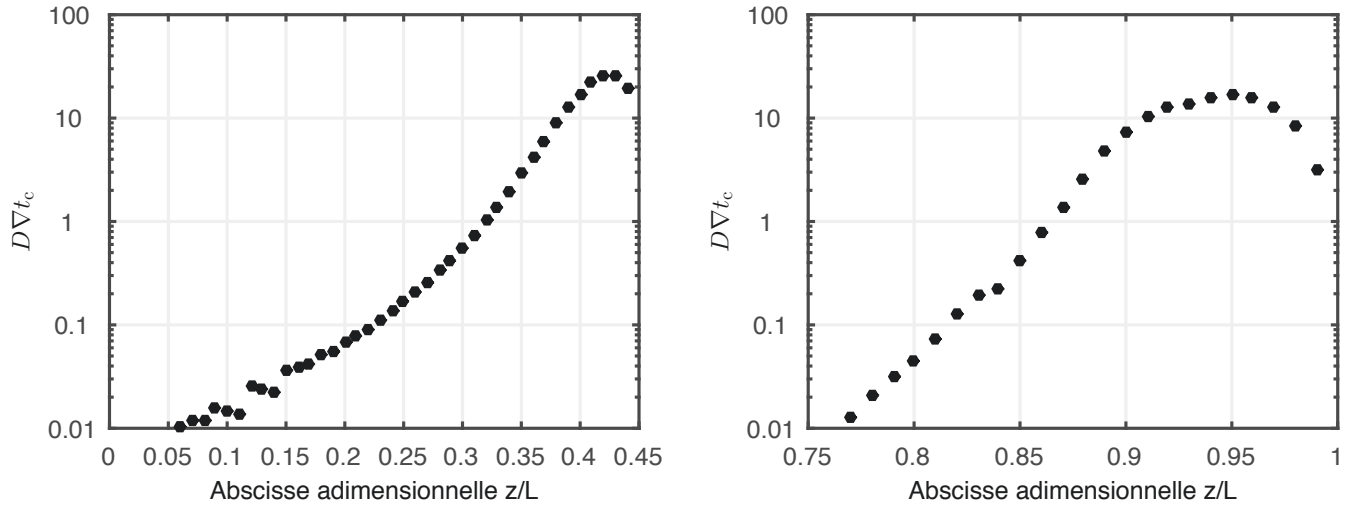


FIGURE 6.13 – Variation du paramètre $D\nabla t_c$ en fonction de z/L aux positions où $\partial t_c / \partial \phi > 0$: distribution non-monotone du gradient critique.

La Figure 6.14 donne un agrandissement des enregistrements de la Figure 6.12 aux positions $0.70 \leq Z \leq 0.90$. Elle donne également un schéma en vue de face, à quatre instants, du réamorçage de la détonation multicellulaire dans le repère lié au choc longitudinal.

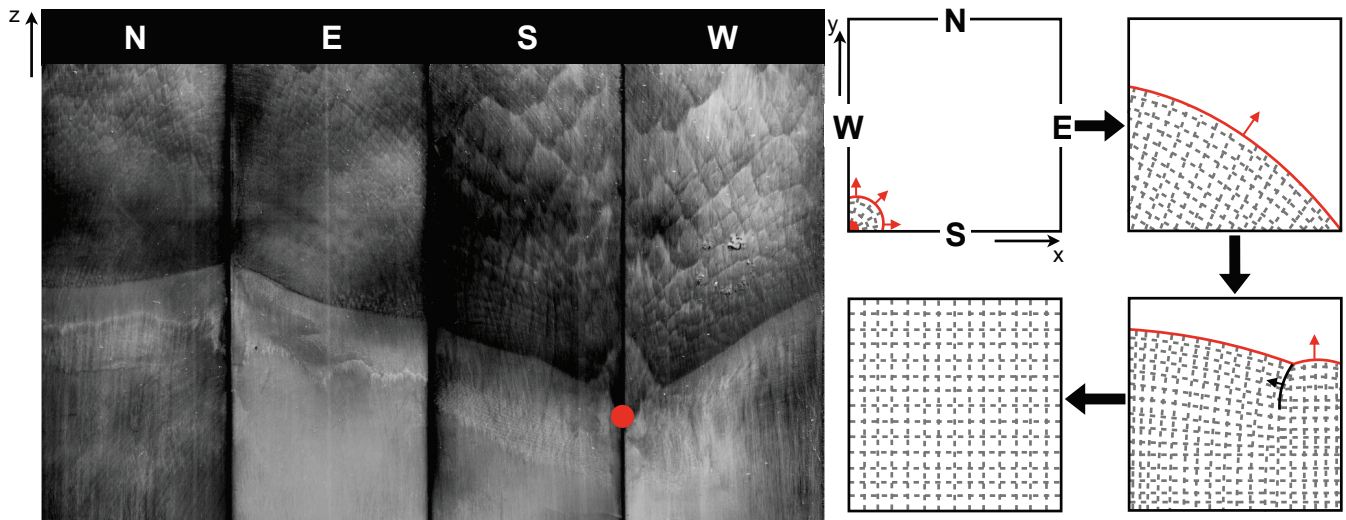


FIGURE 6.14 – Agrandissement des enregistrements de la Figure 6.12 (gauche) et schéma en suivant le front longitudinal de la dynamique de reformation de la structure cellulaire (droite).

La Figure 6.15 donne les enregistrements de la dynamique de propagation de la détonation sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone obtenus pour six expériences. Nous y observons le réamorçage de la détonation multicellulaire puis son extinction, par découplage choc-flamme, à la position $Z \approx 0.85$, également prédit par notre critère. Nous avons $D\nabla t_c \geq 1$ à partir de la position $Z \approx 0.87$ (Figure 6.13). Nous constatons que le réamorçage de la détonation est assez précisément localisé dans la chambre d'étude à la position moyenne $Z \approx 0.55$ correspondant à la richesse locale $\phi \approx 0.25$. Le réamorçage apparaît cependant plus tôt que sur l'enregistrement de la Figure 6.12 ($Z \approx 0.75$).

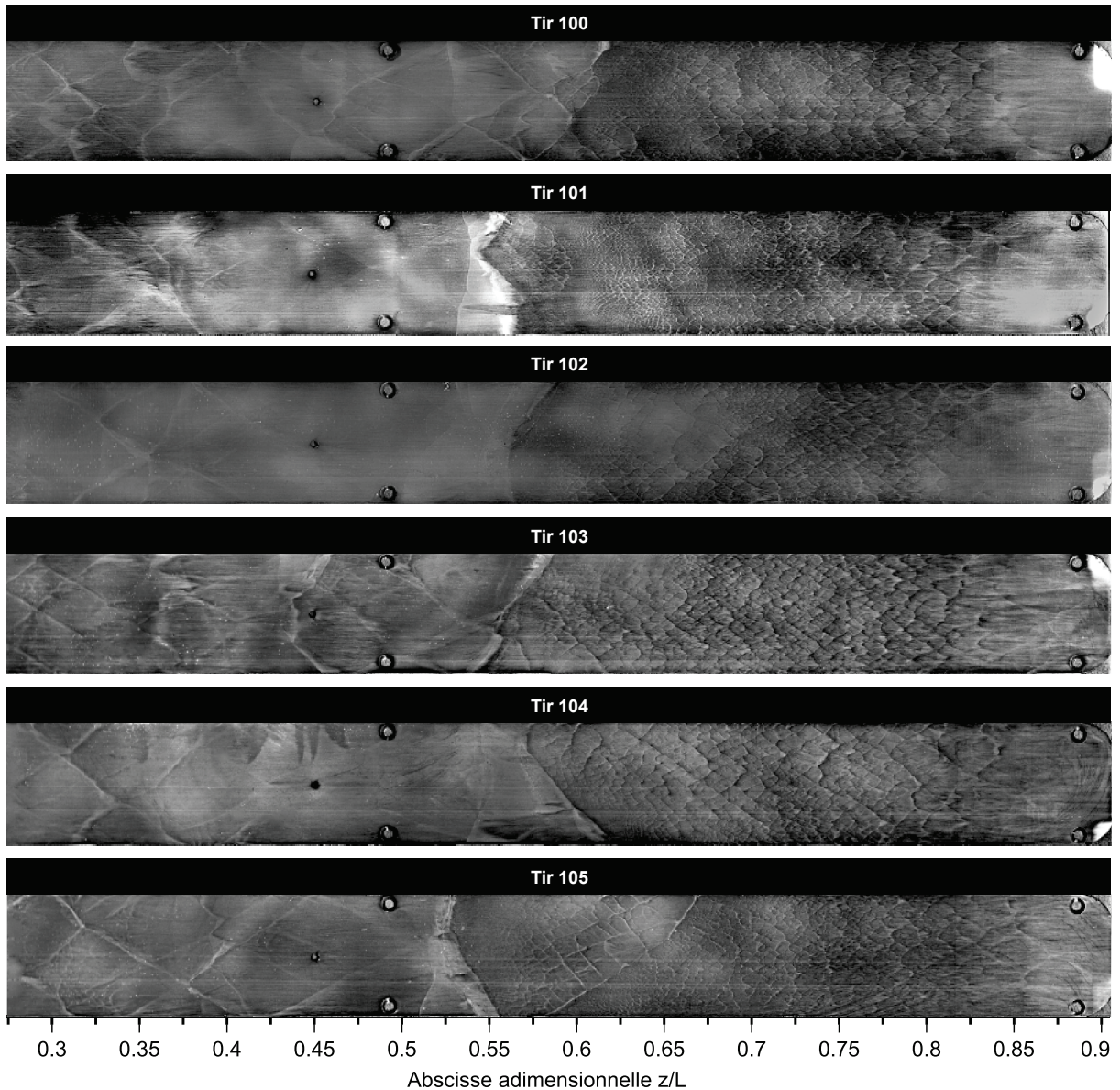


FIGURE 6.15 – Enregistrements des dynamiques de transmission de la détonation (six expériences) sur des plaques recouvertes d’un dépôt de carbone pour six expériences : distribution non-monotone du gradient critique.

La distinction entre l’enregistrement de la Figure 6.12 et ceux de la Figure 6.15 est que, pour le premier, la chambre d’étude est munie d’un jeu de quatre plaques pour l’enregistrement alors que, pour les autres, elle n’en est munie que d’une. Dans la première configuration, les jonctions entre plaques ne sont pas parfaites et présentent des jeux fonctionnels (pour le montage des plaques) aux arêtes. Les réflexions de Mach aux arêtes sont donc plus intenses dans les cas de la Figure 6.15 (cas “dur”) que dans celui de la Figure 6.12 (cas “mou”), car, pour celui-ci, les ondes de chocs transverses sont légèrement diffractées avant réflexion. Pour des conditions similaires de gradient, le réamorçage apparaît plus tard, c’est-à-dire, pour des conditions localement plus réactives, dans le cas “mou” que dans les cas “dur”. Ceci illustre l’extrême sensibilité générale des phénomènes critiques de la détonation dans les gaz pour lesquels de très faibles variations de l’état thermodynamique entraînent de très grandes variations des longueurs caractéristiques

des dynamiques (e.g., ici, la longueur où le réamorçage se produit).

Lors de son réamorçage, la détonation est localement forte. On mesure ici une largeur minimale des structures cellulaire $\lambda \sim 1$ mm. En combinant les mesures de λ_{CJ} de la détonation autonome multicellulaire CJ des mélanges $C_2H_6 + 3.5O_2$ stœchiométriques en fonction de la pression initiale P_0 ([34, 71], on peut estimer la largeur minimale λ_{CJ} associée au mélange $C_2H_6 + 3.5O_2$ uniforme à la pression initiale de notre étude ($P_0 = 0.2$ bar) avec la corrélation $\lambda_{CJ} = AP_0^{-n}$ (§1.4.1), avec $1.1 \lesssim n \lesssim 1.3$. Nous obtenons $\lambda_{CJ}(\phi = 1, P_0 = 0.2 \text{ bar}) \approx 6\text{-}7$ mm. En supposant que la largeur minimale observée dans notre cas est relative à la composition locale stœchiométrique, on constate ainsi que la variation relative $\delta\lambda/\lambda$ de λ par rapport à la détonation autonome CJ est :

$$|\delta\lambda/\lambda| \equiv |\lambda - \lambda_{CJ}|/\lambda_{CJ} \approx 0.85 \quad (6.2)$$

La Figure 6.16 compare $D(Z_i)$, vitesse moyenne longitudinale mesurée en paroi, à $D_{CJ}(\phi(Z))$, célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale. La vitesse moyenne D_{tube} de la détonation se propageant dans le tube d'amorçage est repérée par un cercle rouge. Dans la première phase de la propagation, le degré de force initial de la détonation, $D_{\text{tube}}/D_{CJ} = 1.12$, est rapidement amorti et la détonation s'adapte au régime CJ local. Après une phase transitoire à basse vitesse correspondant à la propagation découplée ou partiellement découplée de la détonation, l'onde accélère brutalement en suivant approximativement les mêmes variations que celles de la courbe $D_{CJ}(\phi(Z))$. Le réamorçage de la détonation se manifeste par un degré de force D/D_{CJ} plus ou moins marqué selon la proximité à la paroi où sont positionnés les capteurs de pression. Nous constatons ainsi que l'onde de détonation forte peut atteindre une célérité allant jusqu'à ≈ 2700 m/s ($Z \approx 0.7, \phi \approx 1$), soit un degré de force local $D/D_{CJ} \approx 1.23$. Après réamorçage, nous observons la relaxation de la célérité avec un déficit par rapport à la célérité CJ locale. Les mêmes considérations que celles présentées dans la Section 6.1 nous conduisent à proposer que ce déficit est artificiel et dû à une sous-estimation de la proportion d'éthane en haut de chambre d'étude.

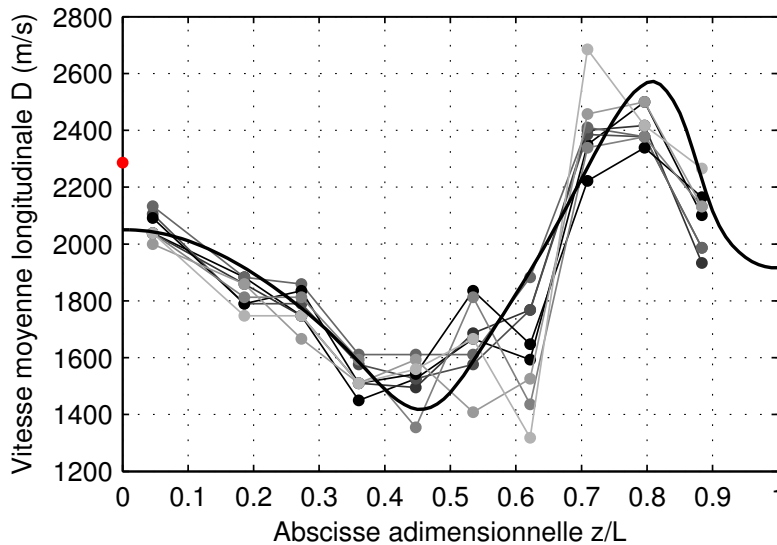


FIGURE 6.16 – Vitesse moyenne de l'onde longitudinale D , mesurée en paroi (symboles), comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale (ligne en trait fort) : distribution non-monotone du gradient critique.

La Figure 6.17 donne les enregistrements par strioscopie du réamorçage de la détonation résultant de la collision de deux ondes transverses. Les enregistrements ont été réalisés dans l'intervalle de positions $Z \in [0.52; 0.65]$. À l'instant $6 \mu\text{s}$, correspondant à une position du front de choc $Z \approx 0.56$ et à une richesse locale $\phi \approx 0.25$, deux ondes transverses entrent en collision et génèrent une réflexion de Mach qui crée localement une onde explosive se propageant radialement. Du côté des gaz frais, elle évolue rapidement vers une onde de détonation multicellulaire qui remplace progressivement le choc inerte issu du découplage de la détonation initiale. Du côté des gaz brûlés et de la flamme découplée, nous observons, notamment à partir de l'instant $16 \mu\text{s}$, une onde de compression remontant l'écoulement des gaz mis en mouvement par le choc inerte. À l'instant $22 \mu\text{s}$, le régime de détonation plane multicellulaire est quasiment rétabli.

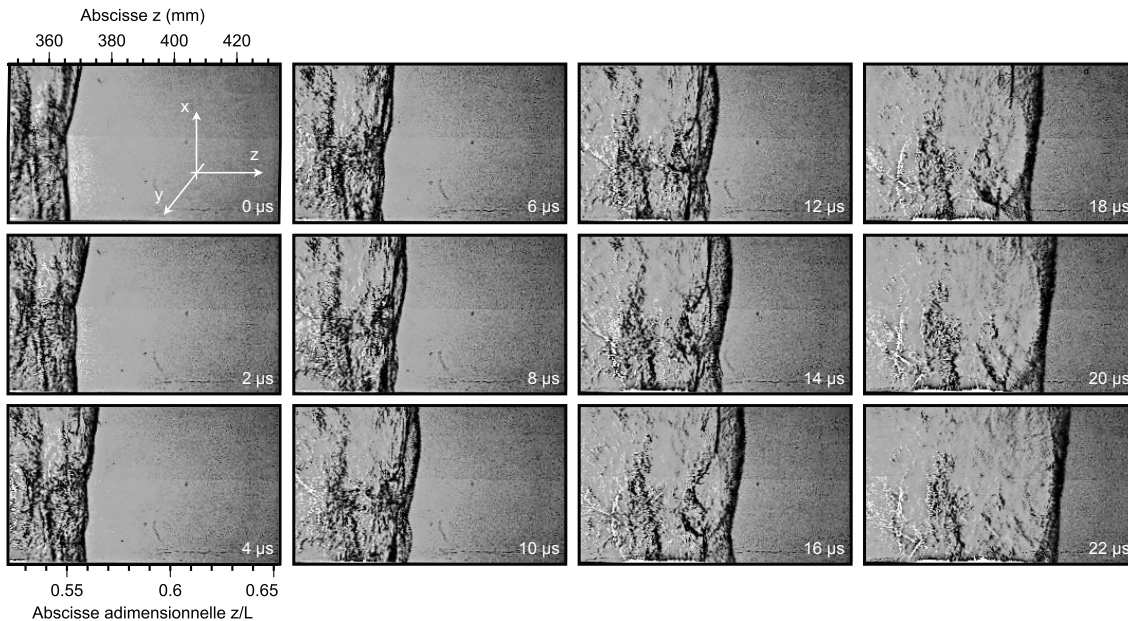


FIGURE 6.17 – Visualisation par strioscopie du réamorçage de la détonation multicellulaire (intervalle de temps entre images : $2 \mu\text{s}$) : distribution non-monotone du gradient critique.

La Figure 6.17 montre un cas où le réamorçage est survenu juste après le découplage choc-flamme. La zone de combustion et l'onde de choc longitudinale sont encore proches l'une de l'autre. Afin d'avoir une meilleure caractérisation de la dynamique de réamorçage, nous avons réalisé une série d'expériences avec un gradient de composition critique que nous qualifions de critique "renforcé". Ce dernier est obtenu pour un temps de diffusion $\tau = 95 \text{ s}$, c'est-à-dire plus court que celui du cas critique précédent.

La Figure 6.18 donne les enregistrements par strioscopie du réamorçage de la détonation dans le cas où il se produit suite à la collision d'une onde transverse avec la paroi inférieure. À l'instant $0 \mu\text{s}$, nous observons le choc longitudinal et la zone de combustion en situation de découplage. À l'instant $2 \mu\text{s}$, pour lequel la position du front de choc est $Z \approx 0.65$ et la richesse locale $\phi \approx 0.4$, nous observons l'émergence d'une onde explosive dont l'expansion radiale va reformer la détonation multicellulaire et se substituer progressivement au front de choc en cours de découplage.

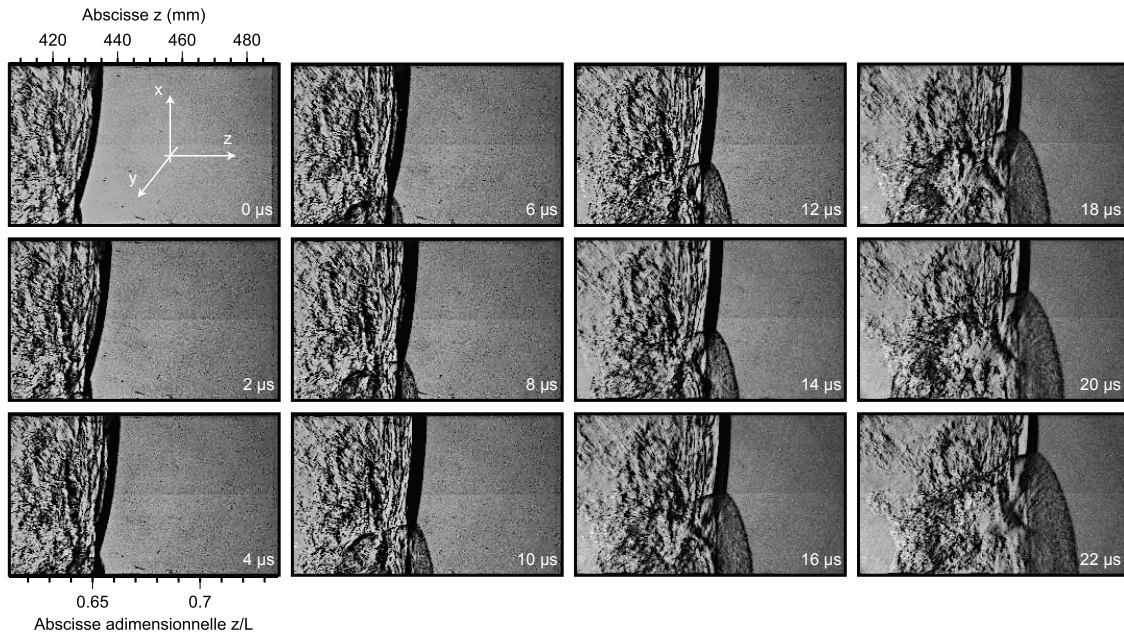


FIGURE 6.18 – Visualisation par striescopie du réamorçage de la détonation multicellulaire (intervalle de temps entre images : $2 \mu\text{s}$) : distribution non-monotone du gradient critique “renforcé”.

La configuration des ondes de choc lors du réamorçage est très complexe. Afin d’avoir plus de détails dans cette zone de l’écoulement, nous avons mis en œuvre une caméra ultra-rapide Shimadzu HPV-X2, en phase d’évaluation au Laboratoire au moment de nos expériences, et plus performante que la Shimadzu HPV-2 utilisée jusqu’ici. Elle permet, en particulier, des enregistrements avec un temps d’exposition de 110 ns et une fréquence d’acquisition de 5 MHz (contre 250 ns et 1MHz pour la Shimadzu HPV-2). La Figure 6.19 présente les enregistrements obtenus.

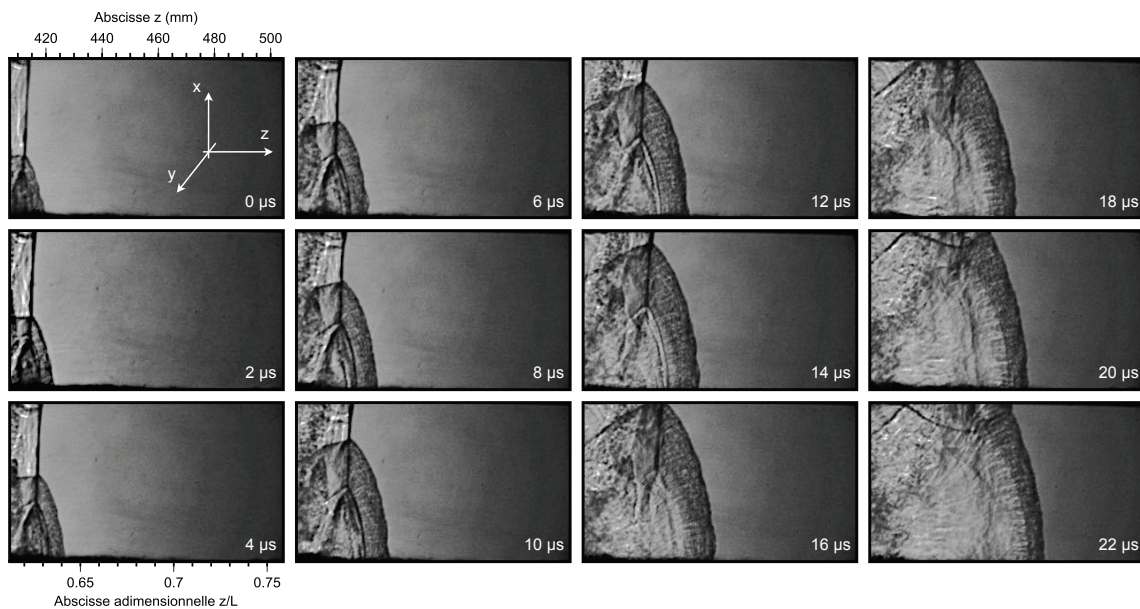


FIGURE 6.19 – Visualisation par striescopie du réamorçage de la détonation multicellulaire (intervalle de temps entre images : $2 \mu\text{s}$, caméra Shimadzu HPV-X2) : distribution non-monotone du gradient critique “renforcé”.

Le réamorçage a lieu à partir de la position $Z \approx 0.62$, soit à la richesse locale $\phi \approx 0.3$. Nous remarquons un dédoublement du front avec deux points triples apparents. Le front apparaît comme constitué de deux types d'ondes (Figure 6.20). Le premier est une onde de détonation multicellulaire réamorcée à partir de l'arête formée par la paroi inférieure et le hublot en arrière-plan. Le second est un ensemble de deux configurations de Mach non réactives jusqu'à leur réflexions sur la paroi supérieure et sur le hublot au premier-plan. À cet instant ($16 \mu s$), le front est celui d'une détonation multicellulaire courbée qui relaxe vers le régime CJ.

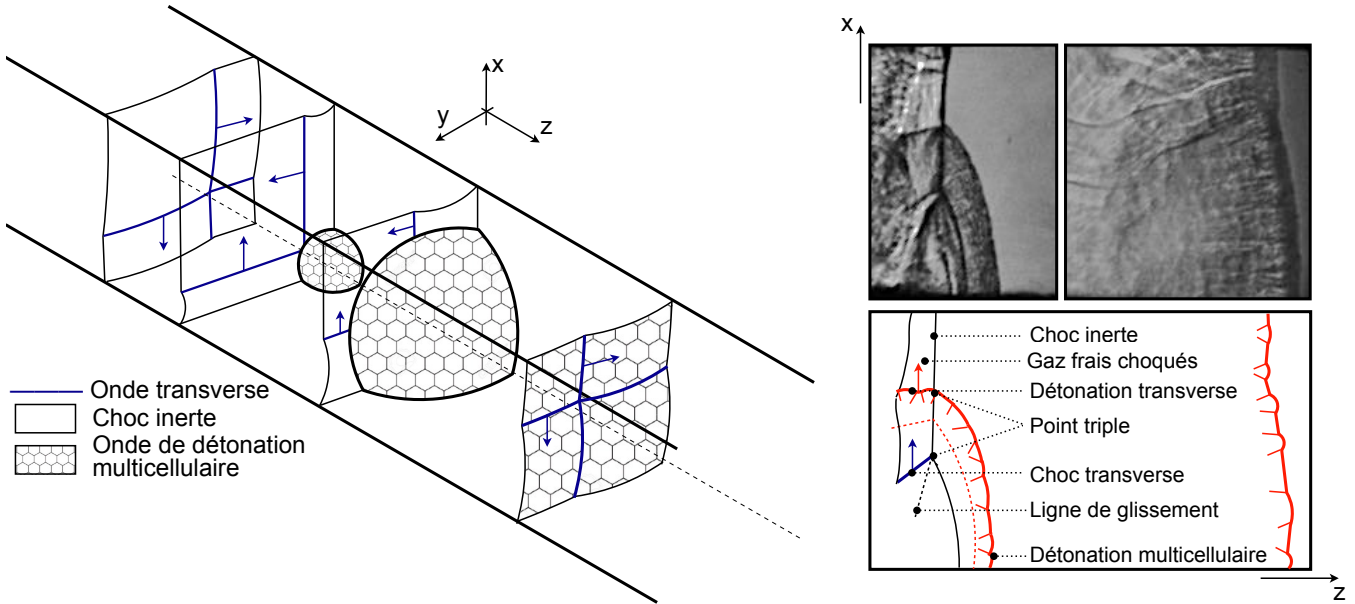


FIGURE 6.20 – Gradient critique “renforcé” : représentation schématique du processus de réamorçage.

6.4 Analyse

Les dynamiques super-critique (Sect. 6.1), sous-critique (Sect. 6.2) et critique (Sect. 6.3) identifiées dans ce Chapitre sont phénoménologiquement similaires à celles observées dans les situations transitoires génériques d’initiation ou de transmission de la détonation dans des mélanges gazeux de compositions uniformes (Sect. 1.5) :

- initiation d’une détonation par libération soudaine et localisée d’énergie ;
- transmission d’une détonation d’un tube à un plus grand volume ;
- diffraction d’une détonation par un obstacle.

Pour ces trois cas, la détonation subit un découplage choc-flamme par effet de divergence de l’écoulement dans la zone de réactions moyenne. La propagation d’une détonation autonome divergente résulte d’un équilibre entre la production d’énergie par réaction chimique et les pertes adiabatiques induites par l’expansion latérale de la zone de réactions moyenne (§1.3.2 et Annexe B). Ces pertes sont analogues à la décroissance de réactivité induite par les gradients de composition. Dans les situations où la détonation se réamorçe (initiation, transmission et diffraction critiques), les mêmes mécanismes que dans le cas de la transmission critique dans un gradient de composition sont observés : le réamorçage s’opère transversalement sous la forme d’une détonation se propageant dans l’espace choqué non-brûlé situé entre le choc et la flamme découplés. La détonation est initialement fortement soutenue.

Pour le cas de la transmission d’une détonation d’un tube à un plus grand volume, la Figure 6.21a donne un enregistrement sur dépôt de carbone du cas critique (DESBORDES [70]). La Figure 6.21b donne l’enregistrement que nous avons obtenu dans le cas de la transmission critique à travers un gradient de composition.

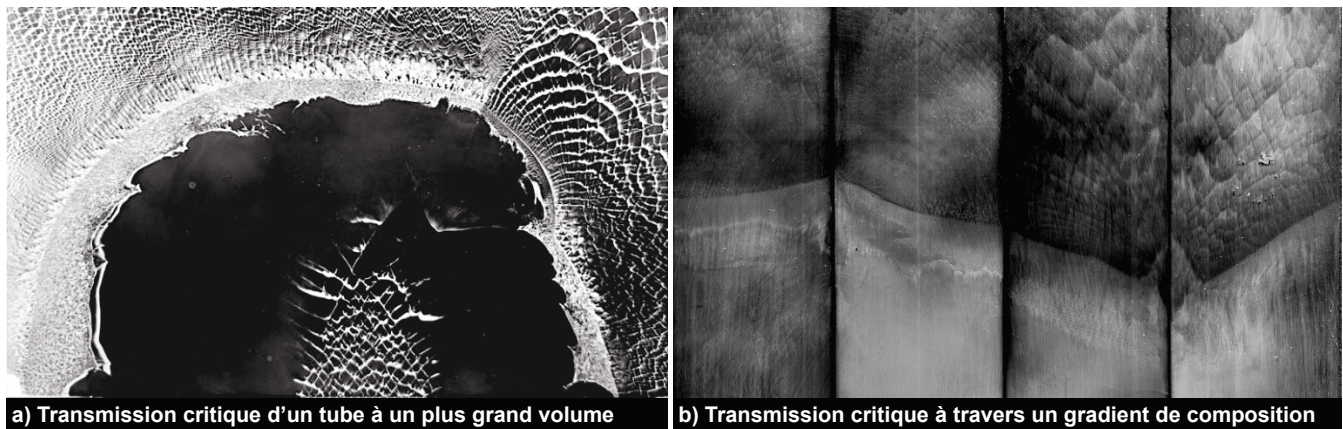


FIGURE 6.21 – Réamorçages de la détonation enregistrés sur plaques recouvertes d’un dépôt de carbone. a) transmission de la détonation d’un tube à un plus grand volume (DESBORDES [70]). b) transmission de la détonation dans un gradient de composition.

Le cas de la diffraction d’une détonation par un obstacle ou par une augmentation brusque de la section du confinement (e.g. [139–141]) est la configuration la plus proche de la nôtre. La détonation subit un découplage choc-flamme par effet de divergence suite à sa diffraction. L’onde de choc ainsi transmise est fortement courbée et sa réflexion avec la paroi va, si l’angle d’incidence est supérieur à une valeur critique, se réfléchir dans une configuration de Mach. Lorsque la réflexion de Mach est suffisamment forte, elle peut

provoquer l’auto-allumage du mélange et transiter vers une détonation fortement soutenue. La Figure 6.22 compare des clichés strioscopiques et des simulations numériques du réamorçage de la détonation suite à une diffraction critique à travers, respectivement, un obstacle (gauche, [139]) et une augmentation brusque de la section du confinement (centre, LV et IHME [141]) à des clichés strioscopiques du réamorçage de la détonation associé au cas de la transmission critique dans un gradient de composition (droite).

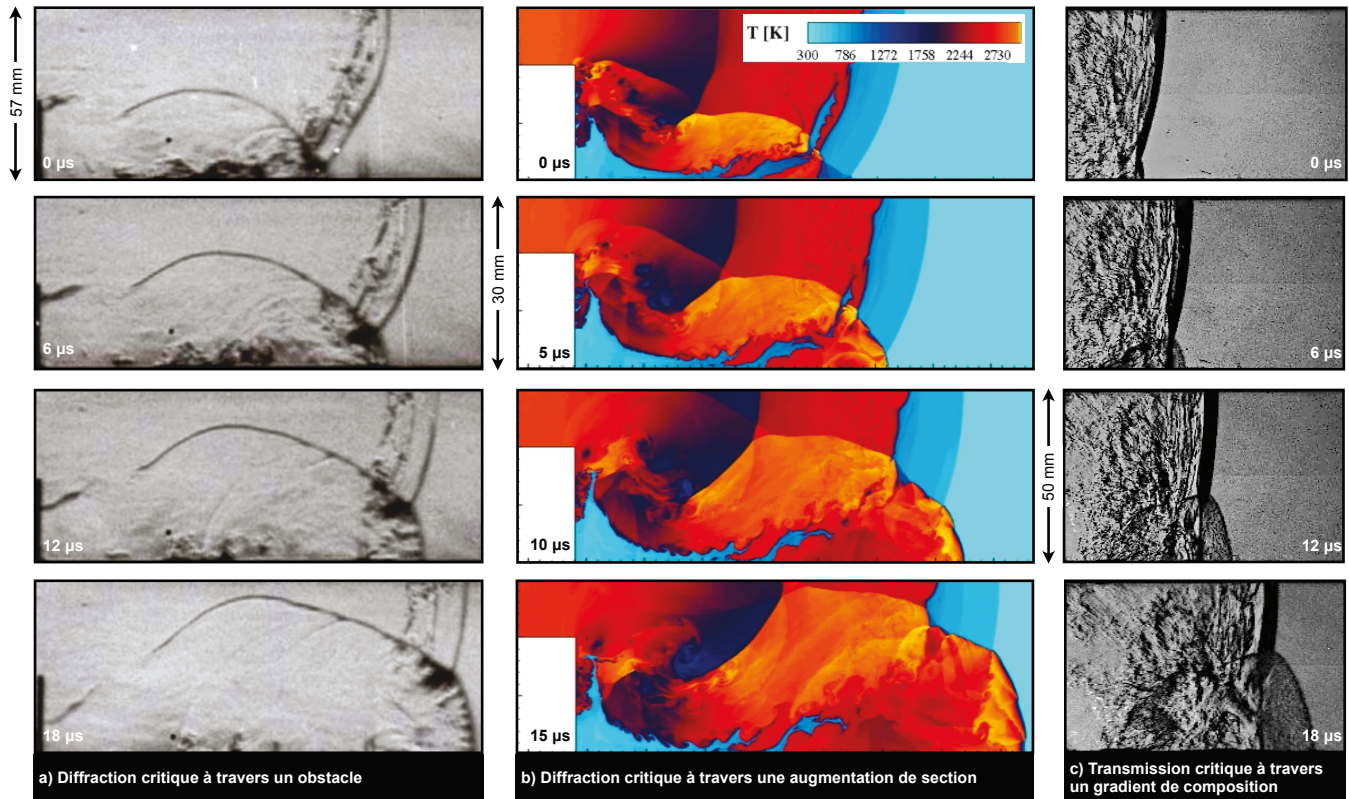


FIGURE 6.22 – Réamorçages de la détonation suite à une diffraction par a) un obstacle (strioscopie, TEODORCZYK et al. [139]), b) une augmentation brusque de la section du confinement (champ numérique de température, LV et IHME [141]) et c) un gradient de composition (strioscopie).

Nous pouvons noter que dans les cas étudiés par [139, 140], la géométrie du confinement favorise une des dimensions transverses, minimisant les effets tridimensionnels. Pour éliminer les modes transverses dans une des directions, la profondeur de la chambre (direction d’intégration de la strioscopie) est de l’ordre d’une largeur de cellule. Le réamorçage de la détonation se produit donc sous la forme d’une onde cylindrique, alors que, dans notre cas, l’onde a une forme sphérique (Figure 6.20).

Dans nos expériences, les réamorçages ne sont pas liés aux phénomènes de compétition production-perte adiabatique par divergence de la zone de réactions. La phase croissante de distribution de richesse non-monotone associée au gradient sous-critique “affaibli”, $\phi \in [0.07; 6]$ (Sect. 6.2), inclue celle associée au gradient critique “renforcé”, $\phi \in [0.08; 5]$ (Sect. 6.3). Le réamorçage est alors essentiellement contrôlé par les réflexions des ondes transverses résiduelles, issues de la détonation avant son découplage, aux parois. Dans le cas des gradients critiques, le découplage intervient plus tard. Ainsi, à position de richesse égale, les intensités des points triples qui se réfléchissent aux parois sont plus importantes que dans le cas des

gradients sous-critiques. Pour obtenir un réamorçage direct de la détonation par réflexion de Mach, deux conditions doivent être réunies :

- l'intensité de la réflexion (valeurs de température et de pression) et son temps de maintien doivent être suffisants [142] ;
- la richesse locale du mélange doit être comprise dans une gamme compatible avec l'installation du régime de détonation.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié expérimentalement la dynamique de transmission de la détonation dans des distributions non-monotones de richesse, décroissante puis croissante. Nous avons pu démontrer qu'elle obéit à la classification générique de la dynamique transitoire des phénomènes de détonation dans les gaz (Sect. 1.5), c'est-à-dire qu'elle présente des comportements super-critique (Sect. 6.1), sous-critique (6.2) et critique (6.3). Ces expériences nous ont permis d'étendre la validité du critère de découplage que nous avons proposé dans le Chapitre 5 aux situations où la réactivité décroît en raison de l'éloignement de la composition à la stœchiométrie par valeur de richesse $\phi > 1$ croissante.

Il apparaît qu'une détonation qui s'est décollée lors de sa propagation dans des compositions insuffisamment réactives peut se réamorcer lorsque les conditions de composition redeviennent favorables. Le réamorçage de la détonation dépend ici essentiellement de l'intensité des réflexions de Mach aux parois du confinement :

- lorsque les réflexions de Mach sont suffisamment intenses et que la composition locale permet d'accepter le régime de détonation, le réamorçage de la détonation est brutal et résulte d'un auto-allumage local. Une détonation multicellulaire divergente forte apparaît puis relaxe vers le régime autonome moyen CJ ;
- lorsque les réflexions de Mach sont trop faibles pour provoquer l'auto-allumage, le réamorçage de la détonation aura lieu sur de plus longues distances selon un processus de type Transition-Déflagration-Détonation. Des poches de combustion sont générées en paroi, leur multiplication au cours de la propagation va reformer une onde de déflagration entre l'onde de choc longitudinale (choc précurseur) et les gaz brûlés issus de la détonation avant son découplage. Cette déflagration peut amplifier le choc précurseur, et, localement, une "explosion au sein de l'explosion" [143] pourra être amplifiée amenant à la formation d'une détonation fortement soutenue (mécanisme SWACER [44, 121]). Nous soulignons que dans le cas des gradients sous-critiques, nous n'avons observé que partiellement ce processus. Ainsi, nous n'avons pas obtenu la formation de la détonation car la composition locale devenait trop riche. Toutefois, nous pouvons supposer qu'une TDD aurait été observée si la composition locale avait été maintenue à des niveaux de réactivité suffisants et, si la chambre avait été plus longue.

En conclusion, une détonation qui a subi un découplage choc-flamme peut réapparaître plus facilement si elle conserve des ondes transverses suffisamment intenses. Dans un cadre applicatif de type moteur à détonations, un moyen de reformer la détonation après un découplage est d'employer des parois rugueuses ou munies d'obstacles. Ces procédés permettent de créer ou d'entretenir des ondes transverses et donc de favoriser le réamorçage de la détonation.

Chapitre 7

Simulations numériques

Sommaire

7.1	Équations et schémas numériques	113
7.1.1	Systèmes d'équations	113
7.1.2	Schémas numériques	115
7.2	Représentation des conditions expérimentales	116
7.2.1	Géométrie et conditions aux limites	116
7.2.2	Conditions initiales	117
7.2.3	Reproduction des conditions d'amorçage	117
7.3	Résultats	119
7.3.1	Extinction brusque par découplage choc-flamme	120
7.3.2	Extinction progressive marginale	124
7.4	Conclusion	127

Dans le cadre d'une collaboration avec le Professeur AKIKO MATSUO et M. TAKUYA MATSUMOTO (Université Keio, Yokohama, Japon), nous avons cherché à apprécier la capacité de la simulation numérique à représenter la propagation de la détonation dans des compositions non-uniformes. Les simulations réalisées et décrites dans ce chapitre ont été obtenues à l'aide d'un code de calcul développé dans le laboratoire du Professeur MATSUO et modifié pour permettre le calcul dans des conditions initiales non-uniformes. Nous décrivons le système d'équations et les schémas numériques employés dans la première section de ce chapitre, la méthode retenue pour reproduire les conditions expérimentales dans la deuxième et les résultats obtenus dans la troisième.

7.1 Équations et schémas numériques

7.1.1 Systèmes d'équations

Le modèle retenu est celui de l'écoulement adiabatique de fluide parfait, compressible et réactif, décrit par les équations d'Euler fermées par les lois de conservations des espèces chimiques et une équation d'état (Sect. 1.1). Les simulations sont restreintes à des écoulements bidimensionnels. Les équations d'Euler 2D compressibles d'un fluide réactif composé de N_{sp} espèces chimiques peuvent être écrites sous la forme vectorielle conservative :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial z} = \mathbf{S}(\mathbf{U}) \quad (7.1)$$

où \mathbf{U} représente le vecteur des variables conservatives, \mathbf{F} et \mathbf{G} les vecteurs des flux dans les directions x et y , et \mathbf{S} le vecteur des termes sources chimiques (Annexe A). Nous avons :

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_z \\ E \\ \rho_i \end{bmatrix}, \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u_x \\ \rho u_x^2 + P \\ \rho u_x u_z \\ (E + P) u_x \\ \rho_i u_x \end{bmatrix}, \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho u_z \\ \rho u_x u_z \\ \rho u_z^2 + P \\ (E + P) u_z \\ \rho_i u_z \end{bmatrix}, \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathcal{M}_i \dot{\omega}_i \end{bmatrix} \quad (7.2)$$

où P désigne la pression, u_x et u_y les composantes selon les directions x et y du vecteur \mathbf{u} , ρ la masse volumique du mélange, ρ_i la masse volumique de la $i^{\text{ème}}$ espèce chimique telle que $\rho_i = \rho Y_i$ et $\dot{\omega}_i$ le taux de production molaire de l'espèce i . La quantité E est l'énergie totale par unité de volume. Elle est définie par :

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right) = \left(\sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} \rho_i h_i \right) - P + \frac{1}{2} \rho (u_x^2 + u_z^2) \quad (7.3)$$

où h_i désigne l'enthalpie spécifique de la $i^{\text{ème}}$ espèce, soit :

$$h_i(T) = h_{i*} + \int_{T_*}^T c_{pi}(T) dT \quad (7.4)$$

avec h_{i*} l'enthalpie spécifique de formation de la $i^{\text{ème}}$ espèce à la température de référence T_* et c_{pi} sa capacité calorifique à pression constante, déterminée à l'aide des polynômes de la JANNAF [144]. Le système d'équations (7.1) est complété par l'équation d'état des gaz parfaits (1.8) :

$$P = \rho r T = \sum \rho_i \frac{R}{\mathcal{M}_i} T \quad (7.5)$$

Nous avons choisi de simuler nos configurations de gradients en utilisant une cinétique chimique détaillée et en l'employant avec des mélanges H_2/Air . En effet, les schémas détaillés qui incluent la cinétique du C_3H_8 sont trop lourds pour être implémentés. Par ailleurs, s'agissant ici, plus de réaliser une étude de faisabilité que de restitution quantitative, nous avons retenu pour nos simulations le même point de vue que pour nos expériences, c'est-à-dire celui selon lequel les comportements dynamiques de la détonation sont auto-semblables par rapport à la largeur moyenne λ de la structure cellulaire (Chapitre 1, §1.4.1, §1.5). Le facteur de similitude est ici le rapport de la dimension transverse caractéristique d à la largeur moyenne λ de la cellule de détonation de référence. Nous avons ainsi réalisé nos simulations dans un canal dont la largeur d normée par λ était à peu près identique à celle de nos expériences.

Le schéma détaillé retenu est celui de HONG et al. [145]. Il comprend $N_{\text{sp}} = 9$ espèces (H_2 , O_2 , O , H , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O et N_2) et $N_r = 19$ réactions élémentaires. Le formalisme relatif à la cinétique chimique détaillée est donné en Annexe A.

7.1.2 Schémas numériques

La discrétisation du système d'équations différentielles (7.1) est réalisée par la méthode des volumes finis. Les termes convectifs sont intégrés par un schéma WENO d'ordre 5 [146]. Les écoulements réactifs présentent des échelles de temps très différentes, essentiellement celle du système et celle liée aux réactions chimiques. L'emploi d'une cinétique chimique détaillée impose des pas de temps très faibles, coûteux en temps de calcul. L'intégration temporelle est séparée en deux étapes. La première étape, consacrée aux termes convectifs, est réalisée par la méthode TVD-Runge-Kutta d'ordre 3 [147]. La seconde, dédiée au terme source chimique plus raide, est accomplie par une méthode de type *Multi-TimeScale* (MTS) [148].

7.2 Représentation des conditions expérimentales

Un des paramètres essentiels dans l'étude des détonations est la largeur λ des structures cellulaires. Les simulations numériques ne sont pas, à ce jour, capable de fournir des prédictions quantitatives de λ_{exp} [34, 44]. La plupart des expériences numériques sont ajustées de telle sorte que les largeurs simulée, λ_{num} et expérimentale, λ_{exp} , soient identiques, par exemple, en jouant sur l'énergie d'activation réduite E_a^* , lorsqu'une cinétique simplifiée est employée [41, 45, 116, 134].

De nombreux auteurs ont étudié l'influence de la finesse du maillage sur la structure des ondes de détonation (e.g., SHARPE [149]). Il semble ainsi qu'une résolution inférieure à $\ell_{1/2}/\Delta \approx 15$ points par longueur de demi-réaction. Les quantités $\ell_{1/2}$ et Δ sont, respectivement, la distance du choc à la position dans la zone de réactions stationnaire du modèle ZND où l'avancement global Y (Sect. 1.1) du processus de réaction est égal à 1/2 (longueur de demi-réaction) et Δ le pas de la grille considérée – est insuffisante pour capturer les structures complexes observées expérimentalement, en particulier lors des collisions de points triples. Dans nos expériences, la largeur minimale des structures cellulaires est obtenue pour le mélange $\text{C}_3\text{H}_8/\text{O}_2$ stœchiométrique : $\lambda_{\text{exp}}^{\text{min}} = \lambda(\phi = 1, P_0, T_0) \approx 5$ mm. Un calcul de la zone de réactions stationnaire ZND pour ce mélange indique $\ell_{1/2}^{\text{min}} = \ell_{1/2}(\phi = 1, P_0, T_0) = 142$ μm , ce qui donne alors un pas maximal $\Delta \approx 10$ μm . Une estimation du nombre de points de la grille 2D maillant la chambre d'étude de largeur 50 mm est alors $N_{\text{pts}} = \frac{50 \times 665}{0.01^2} \approx 0.33$ milliard de points. Ce nombre est bien trop important pour que des résultats puissent être obtenus dans la durée impartie à nos travaux compte tenu, d'une part, des capacités de calculs à disposition n'utilisant pas de traitement massivement parallèle, et, d'autre part, du temps consacré à la partie expérimentale de notre étude.

7.2.1 Géométrie et conditions aux limites

La Figure 7.1 présente le domaine de calcul et les conditions aux limites.

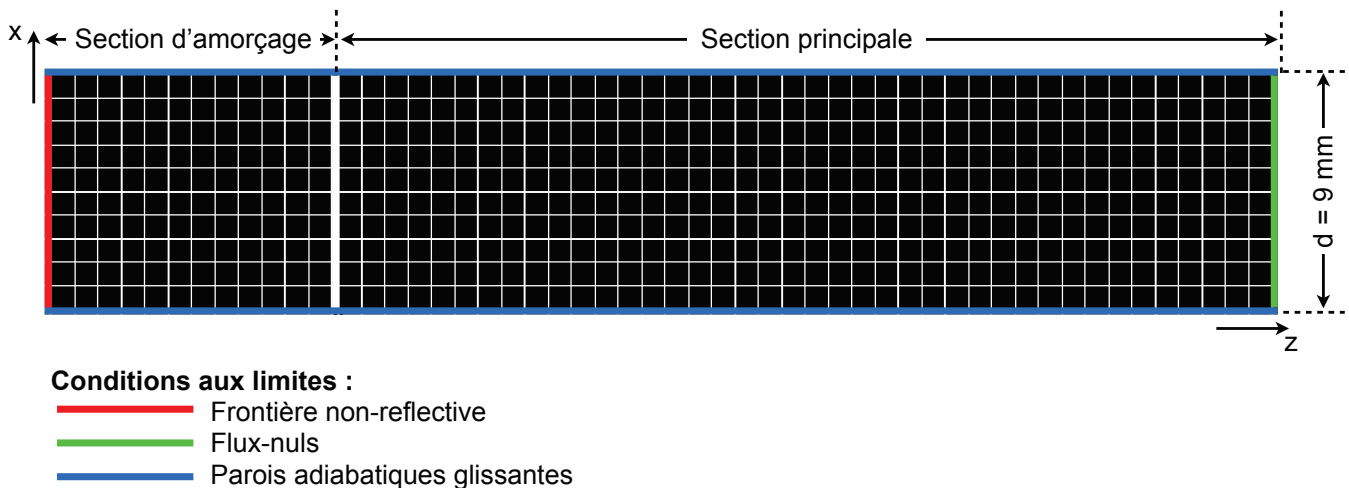


FIGURE 7.1 – Domaine de calcul et conditions aux limites.

Il est composé d'une section d'amorçage et d'une section principale de longueur L contenant un mélange non-uniforme. La largeur d du tube est fixée à 9 mm et la longueur L de la section principale varie en fonction

du gradient considéré La détonation se propage de la gauche vers la droite. Nous employons une grille 2D cartésienne régulière. Dans la section contenant le mélange non-uniforme, le problème est intrinsèquement instationnaire en raison du gradient de composition, ce qui impose l'utilisation d'une grille liée au repère du laboratoire. La condition limite en extrémité amont de la section principale est de type flux nul. Les parois inférieure et supérieure sont considérées adiabatiques et glissantes. Enfin, la condition limite en extrémité aval de la section d'amorçage est du type non-réflexive (GAMEZO et al. [41]).

7.2.2 Conditions initiales

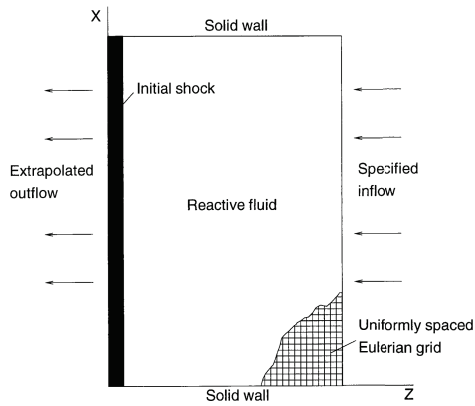
Les conditions initiales en entrée de la section principale sont les résultats d'une simulation préalable dans un mélange de richesse uniforme ϕ_0 . Cette simulation est conduite dans un repère relatif, lié au front moyen de détonation selon la procédure décrite par GAMEZO et al. [41]. Ainsi, les gaz frais entrent dans le domaine de calcul à la vitesse $D_{CJ}(\phi_0)$. Lorsque la largeur moyenne λ_i de la structure cellulaire a convergé, la solution instantanée dans un certain domaine de part et d'autre du front cellulaire constitue la condition initiale dans la section d'amorçage. Afin de maximiser le nombre de mailles de calcul dans la section principale, le maillage dans la section d'amorçage est déraffiné depuis la position moyenne de la ligne sonique en remontant la détente de Taylor-Zel'dovich (§1.2.2). La Figure 7.2a reprend la schématisation de GAMEZO et al. [41] du domaine de calcul de la condition initiale dans la section d'amorçage. La Figure 7.2b donne un exemple d'évolution de la structure cellulaire de la détonation, repérée par le contour du maximum de pression. Elle a été obtenue dans un mélange H_2 /Air stœchiométrique de pression et température initiales $P_0 = 2$ atm et $T_0 = 300$ K. La Figure 7.2c donne le profil initial de pression dans la section d'amorçage associée et la Figure 7.2d donne la variation du nombre de Mach \overline{M} – moyenné selon la direction transverse x – en fonction de la position longitudinale z : $\overline{M}(z) = \frac{1}{d} \int_0^d M(z, x) dx$.

Nous constatons que la position de la ligne sonique se situe à une distance δ comprise entre 5.36 et 8.62 mm de la position moyenne du choc longitudinal. Cette longueur, appelée épaisseur hydrodynamique [134, 150], représente la position au delà de laquelle l'onde de détonation ne subit plus les perturbations dues au dégagement de chaleur. La largeur moyenne des structures cellulaires convergée de la Figure 7.2b est estimée à $\lambda_i \approx 1$ mm. Notre détermination numérique de δ est en accord avec les observations expérimentales, qui donnent $\delta \approx 4\lambda$ (SOLOUKHIN [151]) et $4\lambda \lesssim \delta \lesssim 10\lambda$ (EDWARDS et al. [152]).

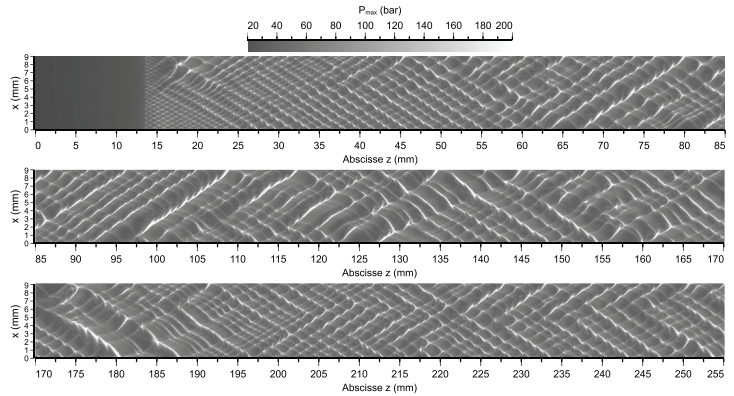
7.2.3 Reproduction des conditions d'amorçage

Afin de reproduire les phénomènes observés avec des coûts de calcul raisonnables, nous avons conditionné les simulations numériques de manière à conserver le rapport d/λ_i entre expériences et simulations, λ_i étant la largeur moyenne des structures cellulaires de la détonation dans la section (tube) d'amorçage avant qu'elle ne rencontre la distribution non-uniforme. La température initiale est fixée à $T_0 = 300$ K. En pratique, le rapport d/λ_i est conservé en utilisant la dépendance de la largeur des cellules de détonation avec la pression initiale : $\lambda = AP_0^{-n}$, avec $1.1 \lesssim n \lesssim 1.3$ (§1.4.1).

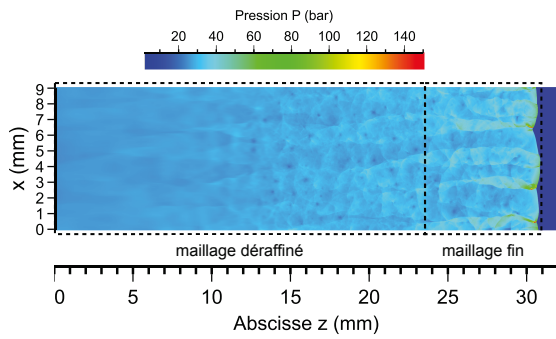
a) Domaine de calcul dans des conditions stationnaires



b) Historique du maximum de pression



c) Profil initial de pression dans la section d'amorçage



d) Profil initial du nombre de Mach dans la section d'amorçage

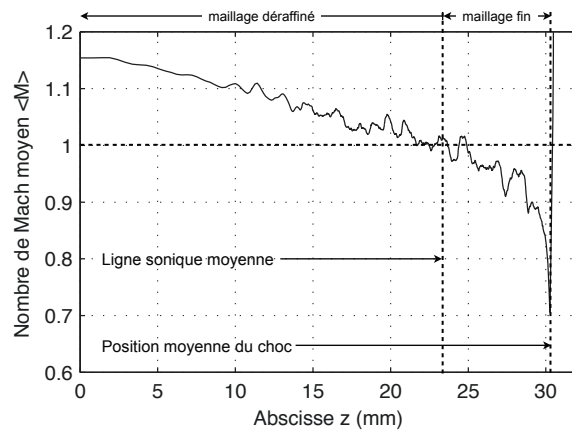


FIGURE 7.2 – a) domaine de calcul de la condition initiale dans la section d’amorçage [41], b) exemple d’évolution de la structure cellulaire de la détonation (mélange H_2 /Air stœchiométrique, $P_0 = 2$ atm et $T_0 = 300$ K), c) exemple de champ initial de pression dans la section d’amorçage, d) variation du nombre de Mach \overline{M} – moyenné selon la direction transverse x – en fonction de la position longitudinale z .

7.3 Résultats

Les simulations numériques conduites dans les conditions que nous venons de décrire nous ont permis de restituer avec un bon accord les dynamiques identifiées dans nos expériences dans les deux cas de distributions monotones de richesse décroissante (Chapitre 5). En particulier, nous avons pu simuler leurs dynamiques d’extinction respectives, le découplage choc-flamme pour le gradient Pauvre-Pauvre-Fort (PPFo) et la transition vers des modes marginaux pour le gradient Pauvre-Pauvre-Faible (PPFa).

La Figure 7.3 donne les distributions de richesse associées à ces gradients PPFo et PPFa numériques et la Table 7.1 résume les conditions de calcul associées. L’ensemble des simulations présente une résolution initiale $\ell_{1/2}/\Delta \geq 16$ points par longueur de demi-réaction suffisante pour capturer les structures complexes observées expérimentalement [149]. Cette résolution aura tendance à augmenter dans la zone contenant les non-uniformités car $\ell_{1/2}$ augmente à mesure que la composition devient moins réactive. Nous présentons ces résultats numériques dans les sous-sections suivantes, chacune dédiée à une dynamique d’extinction.

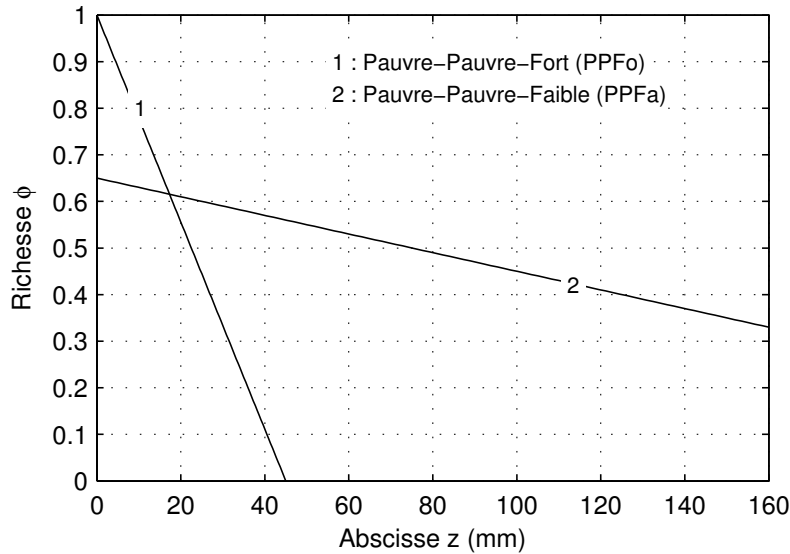


FIGURE 7.3 – Distributions monotones de H_2/Air associées aux gradients PPFo et PPFa.

Gradients	P_0 (atm)	ϕ_0	ϕ_L	L (mm)	L_{driver} (mm)	Δ (μm)	N_{pts}	$D_{\text{amor.}}$ (m/s)	D_{CJ}^0 (m/s)
1 : PPFo	2	1.0	0.0	45	32	8	8.5×10^6	1992	1989
2 : PPFa	1.2	0.65	0.33	160	32	20	4.4×10^6	1752	1755

TABLE 7.1 – Paramètres des simulations numériques, P_0 : pression initiale, $\phi_0 = \phi(z = 0)$: richesse du mélange d’amorçage et en entrée de la section principale, $\phi_L = \phi(z = L)$: richesse en fond de la section principale, L : longueur de la section principale, L_{driver} : longueur de la section d’amorçage, Δ : pas de la grille dans la section principale, N_{pts} : nombre de points du domaine, $D_{\text{amor.}}$: célérité moyenne de l’onde de détonation dans la section d’amorçage, $D_{\text{CJ}}^0 = D_{\text{CJ}}(\phi = \phi_0)$: célérité CJ associée à la composition du mélange d’amorçage.

7.3.1 Extinction brusque par découplage choc-flamme

La Figure 7.4 donne l'historique de la dynamique de la structure cellulaire de la détonation repérée par les contours de la pression maximale $P_{\max}(z_i, x_k) = \max(P(z = z_i, x = x_k, t))$ pour le cas de la distribution monotone associée au gradient PPFo numérique (Figure 7.3, courbe 1). Il est comparé à l'enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation sur dépôt de carbone obtenu pour ce cas de gradient PPFo expérimental (Sect. 5.1).

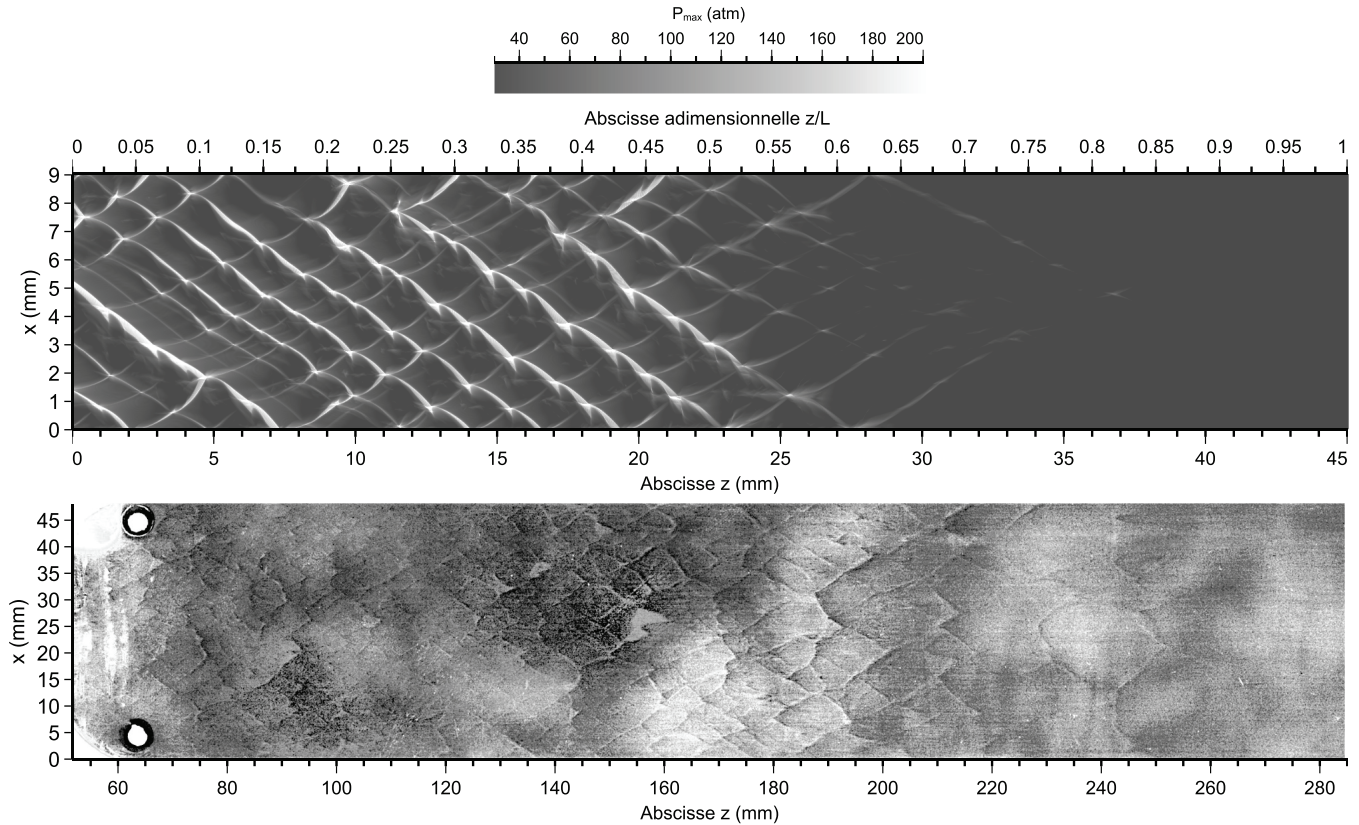


FIGURE 7.4 – Haut : historique de la dynamique de la structure cellulaire de la détonation repérée par les contours de la pression maximale P_{\max} (gradient PPFo numérique), bas : enregistrement de la dynamique de propagation sur dépôt de carbone (gradient PPFo expérimental).

Nous constatons que l'intensité des points triples diminue et à partir de la position $Z \approx 0.45$, la structure cellulaire disparaît brusquement. Qualitativement, le mode de disparition de la structure cellulaire numérique est similaire à celui obtenu dans les expériences. Cependant, et contrairement aux observations expérimentales, la largeur λ des structures cellulaires numériques reste à peu près constante au cours de la propagation, pratiquement jusqu'à leurs disparitions. Nous interprétons cela sur la base d'une spécificité des mélanges H_2 /Air, lesquels ont la particularité connue d'avoir une faible sensibilité de la largeur λ à la richesse ϕ , dans l'intervalle $0.5 \lesssim \phi < 1$ [34, 153].

La Figure 7.5 (gauche) donne l'évolution de la pression maximale P_{\max}^{centre} sur la ligne centrale : $P_{\max}^{\text{centre}}(z) = P_{\max}(z, x = d/2)$ et moyennée selon la direction transverse x : $P_{\max}^{\text{moy.}}(z) = \frac{1}{d} \int_0^d P_{\max}(z, x) dx$. Chaque pic de la courbe $P_{\max}^{\text{centre}}(z)$ correspond à une intersection de la droite $x = 4.5$ mm avec une trajectoire d'un point triple de la Figure 5.2. Nous remarquons qu'à partir de la position $Z \approx 0.45$, l'amplitude de

pression maximale chute brusquement, ce qui indique la soudaine atténuation des chocs transverses, c'est-à-dire la disparition des points triples, conformément aux observations de la Figure 5.2. La richesse locale correspondante est $\phi = 0.55$.

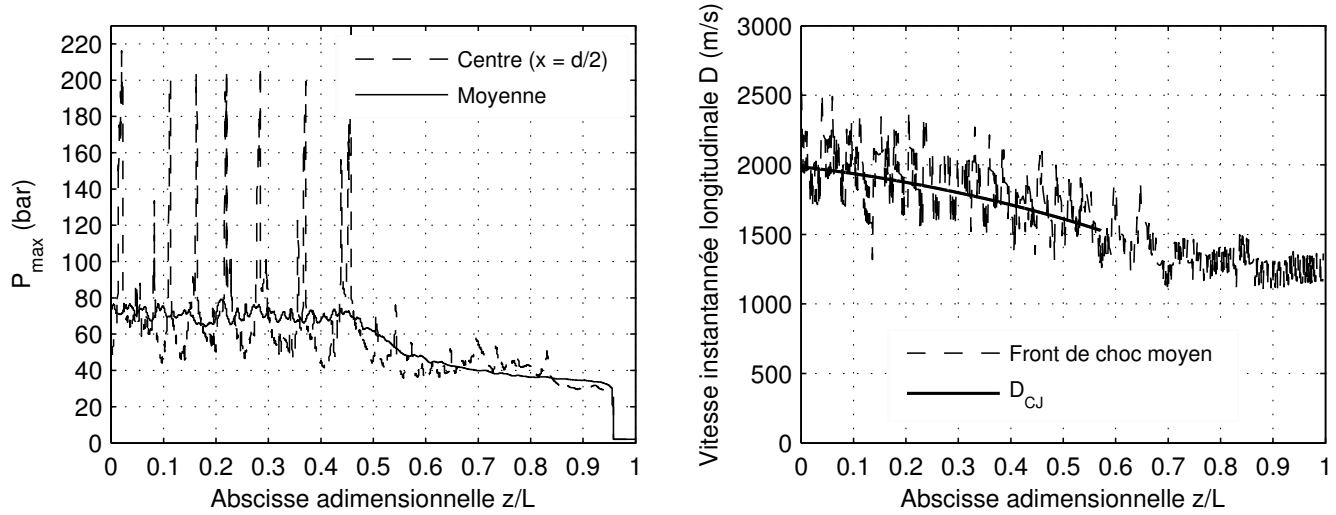


FIGURE 7.5 – Gauche : évolution de la pression maximale sur la ligne centrale et moyennée selon x , droite : vitesse instantanée longitudinale du front de choc moyen, comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale (gradient PPFo numérique).

La Figure 7.5 (droite) compare $D(Z)$, vitesse instantanée longitudinale du front de choc moyen, à $D_{CJ}(\phi(Z))$, célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale. Le calcul de D est fait en repérant l'avancement de la position du front de choc moyen entre deux pas de temps consécutifs, soit :

$$D^n = \frac{z_s^n - z_s^{n-1}}{\Delta t} \quad (7.6)$$

où $\Delta t = t^n - t^{n-1}$ représente le pas de temps du calcul, et z_s^n et z_s^{n-1} les positions du front de choc moyen aux instants t^n et t^{n-1} . La position z_s^n est donnée par :

$$z_s^n = \frac{1}{d} \int_0^d z_s(x, t = t^n) dx \quad (7.7)$$

avec $z_s(x, t)$ la fonction décrivant la position du front de choc. Nous constatons qu'en moyenne la vitesse de l'onde de détonation s'ajuste à la célérité CJ locale. Nous observons d'importantes fluctuations de D autour de la valeur moyenne D_{CJ} . Celles-ci sont dues aux instabilités cellulaires du front de détonation. Au cours de la propagation, l'onde longitudinale est alternativement et localement une réflexion de Mach ou une onde de choc incidente. STREHLOW et CROOKER [36] indiquent que la célérité du choc mesurée sur l'axe d'une cellule de détonation varie entre $0.6 \lesssim D/D_{CJ} \lesssim 1.8$. GAMEZO et al. [41] indiquent que l'amplitude des oscillations est d'autant plus forte que la structure cellulaire est irrégulière, c'est-à-dire que l'énergie d'activation de la réaction globale équivalente est importante. Dans notre simulation, l'amplitude des oscillations est bornée : $0.7 \lesssim D/D_{CJ} \lesssim 1.3$. En raison de la disparition progressive des ondes transverses et des réflexions de Mach qu'elles engendrent, nous remarquons, qu'aux positions $Z_s \gtrsim 0.60$, l'amplitude

des oscillations devient notablement moins importante.

La Figure 7.6 donne les champs de température T , de fraction massique Y_{OH} du radical OH et de la norme du gradient de masse volumique (strioscopie numérique) $\|\nabla\rho\| = \sqrt{\left(\frac{\partial\rho}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2}$, à différentes positions z_s/L du front de choc moyen.

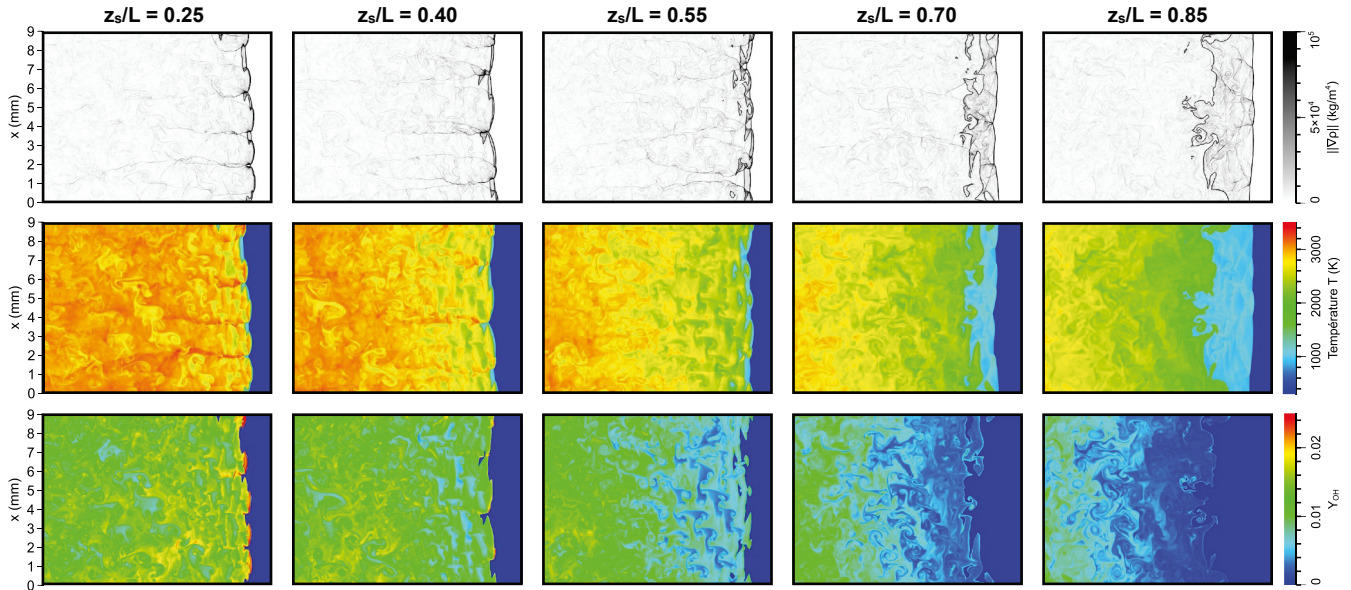


FIGURE 7.6 – Champs de $\|\nabla\rho\|$, T et Y_{OH} à différentes positions z_s/L du front de choc moyen : gradient PPFo numérique.

Nous observons l'accroissement progressif de l'épaisseur moyenne de la zone de réactions et l'augmentation du nombre de poches de combustion convectées vers l'aval. Entre les positions du choc $z_s/L = 0.40$ et $z_s/L = 0.55$, nous constatons la disparition de la combustion induite par les ondes transverses. Cette dernière coïncide bien avec la disparition de la structure cellulaire sur la Figure 7.4.

La Figure 7.7 compare les profils du gradient de masse volumique et de température à la position du choc $z_s/L = 0.85$, à un cliché obtenu par strioscopie (Figure 5.7, Sect. 5.1).

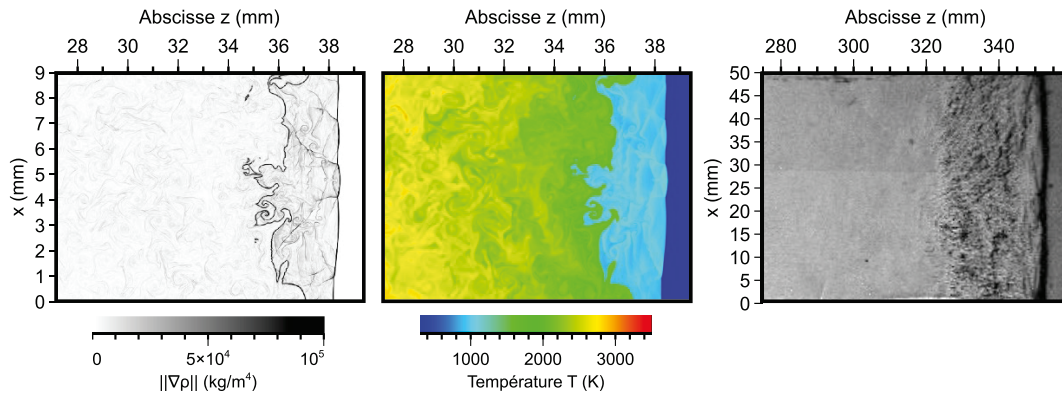


FIGURE 7.7 – Champs de $\|\nabla\rho\|$ et T à la position $z_s/L = 0.85$ du front de choc moyen (gauche, gradient PPFo numérique) et cliché du système choc-flamme découplé obtenu par strioscopie (droite, gradient PPFo expérimental).

Nous constatons que la simulation numérique reproduit qualitativement les zones observées expérimentalement. En raison des différences d'échelles entre la simulation et l'expérience (rapport 50/9), la zone de réactions apparaît dans le premier cas comme plus longue que la zone expérimentale. Les gradients de masse volumique dans la zone de réactions semblent par ailleurs être sous-estimés par les simulations numériques. LEE [154] indique que, du point de vue formel de la cinétique chimique, la disparition de la détonation survient lorsque les réactions de terminaison deviennent prédominantes sur les réactions radicalaires (*chain-branching reaction*). Nous résumons ci-dessous son argumentation.

Soit Ω_{OH} (s^{-1}), le taux d'évolution nette de la masse de OH produite au cours de la propagation du choc, défini par :

$$\Omega_{\text{OH}} = \Omega_{\text{OH}}(z = z_s^n) = \frac{1}{m_{\text{OH}}^{n-1}} \frac{m_{\text{OH}}^n - m_{\text{OH}}^{n-1}}{\Delta t} \quad (7.8)$$

où m_{OH}^n (kg/m) est la masse instantanée de OH dans le domaine, à la position du front de choc moyen $z = z_s^n$ donnée par :

$$m_{\text{OH}}^n = \int_0^d \int_{-L_{\text{driver}}}^{z_s^n} \rho(z, x, t = t^n) Y_{\text{OH}}(z, x, t = t^n) dz dx \quad (7.9)$$

La Figure 7.8 donne l'évolution de Ω_{OH} et du nombre $D\nabla t_c$ associé à notre critère de découplage choc-flamme ($D\nabla t_c \gtrsim 1$, §5.4.3) appliqué au cas de notre simulation numérique. Nous observons que Ω_{OH} devient négatif à partir de la position $Z \approx 0.4$, ce qui indique que la masse de OH est en train de décroître.

C'est de fait à cette position que nous constatons que $D\nabla t_c > 1$, ce qui indique l'apparition du découplage choc-flamme. Le taux d'évolution Ω_{OH} semble donc être la bonne grandeur quantitative permettant de repérer le découplage de la détonation.

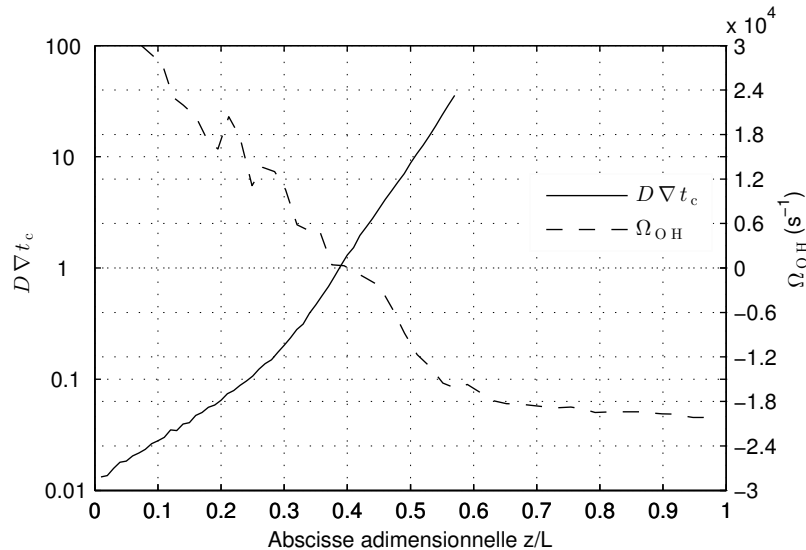


FIGURE 7.8 – Variations des paramètres $D\nabla t_c$ et Ω_{OH} en fonction de z/L : gradient PPFo numérique.

7.3.2 Extinction progressive marginale

La Figure 7.9 donne l'historique de la dynamique de la structure cellulaire de la détonation repérée par les contours de la pression maximale $P_{\max}(z_i, x_k) = \max(P(z = z_i, x = x_k, t))$ pour le cas de la distribution monotone associée au gradient PPFa numérique (Figure 7.3, courbe 2). Il est comparé à l'enregistrement de la dynamique de propagation de la détonation sur dépôt de carbone obtenu pour ce cas du gradient PPFa expérimental (Sect. 5.2).

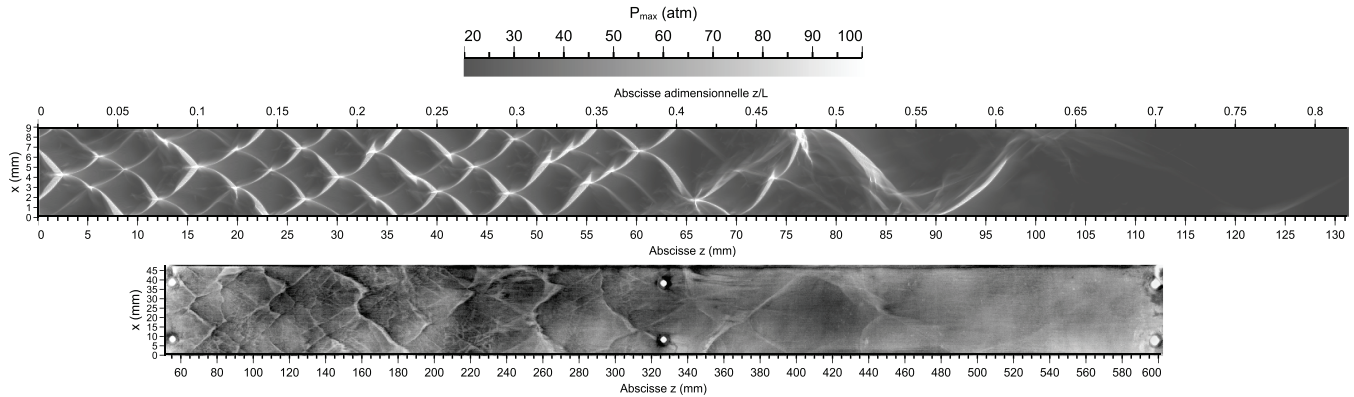


FIGURE 7.9 – En haut : historique de la dynamique de la structure cellulaire de la détonation repérée par les contours de la pression maximale P_{\max} (gradient PPFa numérique). En bas : enregistrement de la dynamique de propagation sur dépôt de carbone (gradient PPFa expérimental).

Nous constatons que la détonation maintient sa propagation en adaptant son nombre de modes transverses, contrairement au cas du gradient PPFo numérique. La dynamique de transition vers les modes marginaux de propagation observée expérimentalement est donc ici remarquablement bien reproduite numériquement. La détonation marginale à une onde transverse (§1.4.2) disparaît entre les positions $Z \approx 0.6$ et $Z \approx 0.65$, c'est-à-dire pour une richesse locale $\phi \approx 0.45$, inférieure à la valeur de richesse $\phi \approx 0.55 - 0.6$ à laquelle le découplage a été observé dans le cas du gradient PPFo numérique.

La Figure 7.10 compare $D(Z)$, vitesse instantanée longitudinale du front de choc moyen, à $D_{CJ}(\phi(Z))$, célérité Chapman-Jouguet calculée pour la richesse locale.

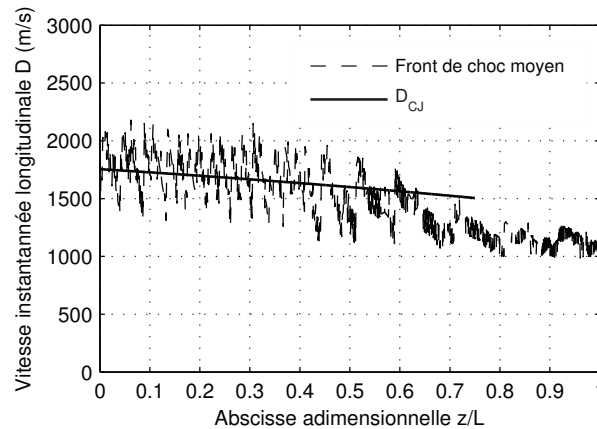


FIGURE 7.10 – Vitesse instantanée longitudinale du front de choc moyen, comparée à la célérité D_{CJ} de la détonation CJ calculée pour la richesse locale : gradient PPFa numérique.

Nous observons qu'en moyenne la vitesse de l'onde de détonation s'ajuste à la célérité CJ locale. Progressivement, les phases pour lesquelles $D/D_{CJ} > 1$ sont moins nombreuses en raison de la décroissance de la fréquence de collision des ondes transverses.

La Figure 7.11 donne les champs de température T , de fraction massique Y_{OH} du radical OH et de la norme du gradient de masse volumique (strioscopie numérique) $\|\nabla\rho\| = \sqrt{\left(\frac{\partial\rho}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2}$, à différentes positions z_s/L du front de choc moyen. Nous observons que la propagation marginale se manifeste par une diminution de l'intensité de la combustion transversale et par l'augmentation des zones de réactions découplées derrière l'onde de choc longitudinale. Ainsi, le nombre de poches de gaz frais choqués convectées vers l'arrière du choc, qui n'ont pas pu être brûlées par le passage d'une onde transverse, va en augmentant. Ces poches de gaz en combustion ne participent plus à l'entretien de la détonation si le dégagement de chaleur qu'elles produisent a lieu après la localisation de la surface sonique [44].

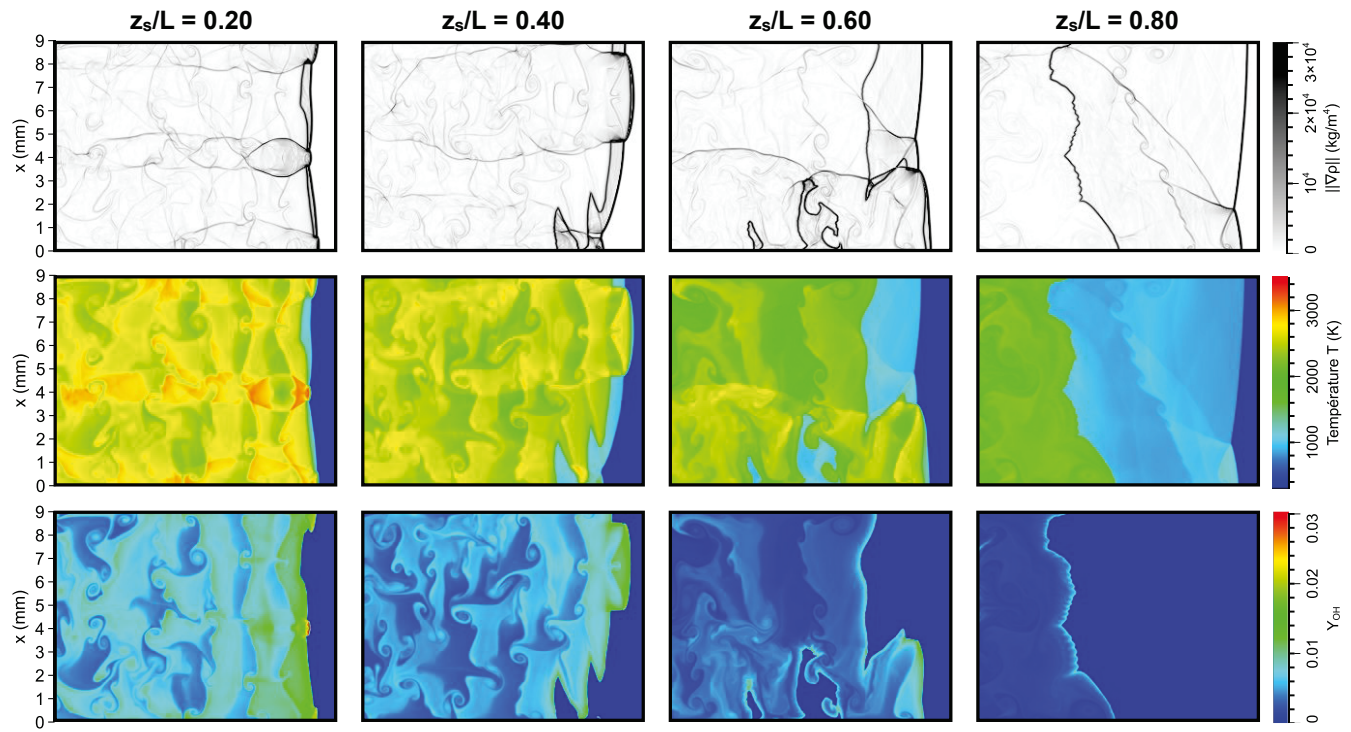


FIGURE 7.11 – Champs de $\|\nabla\rho\|$, T et Y_{OH} à différentes positions z_s/L du front de choc moyen : gradient PPFa numérique.

La Figure 7.12 compare les champs du gradient de masse volumique à des clichés expérimentaux obtenus par strioscopie (Figure 5.15, Sect. 5.2) au cours de la réflexion de Mach consécutive à l'impact d'une onde transverse avec la paroi inférieure. L'intervalle de temps entre clichés expérimentaux est $\Delta t_{\text{exp}} = 8 \mu\text{s}$. En supposant une loi de similitude fondée sur le rapport des dimensions transverses, $d_{\text{exp}}/d_{\text{num}} = 50/9$, nous avons utilisé comme intervalle de temps entre nos clichés numériques $\Delta t_{\text{num}} = (d_{\text{num}}/d_{\text{exp}}) \Delta t_{\text{exp}} \approx 1.4 \mu\text{s}$. Les vitesses longitudinales étant sensiblement les mêmes, nous constatons un très bon accord simulation-expérience pour la dynamique de la réflexion de Mach, mais aussi de légères différences. Les poches de combustion détachées sont moins nombreuses dans la simulation. Nous attribuons cette différence au fait que l'expérience est 3D. Le nombre de ces poches est alors plus important que dans la situation 2D de

la simulation. Les poches sont par ailleurs beaucoup plus plissées dans l'expérience. Une explication peut être que la résolution numérique est insuffisante pour capturer des instabilités de très petites échelles. Finalement, le dédoublement du front de choc longitudinal observé dans l'expérience n'est pas obtenu dans la simulation numérique toujours car cette dernière repose sur une modélisation 2D.

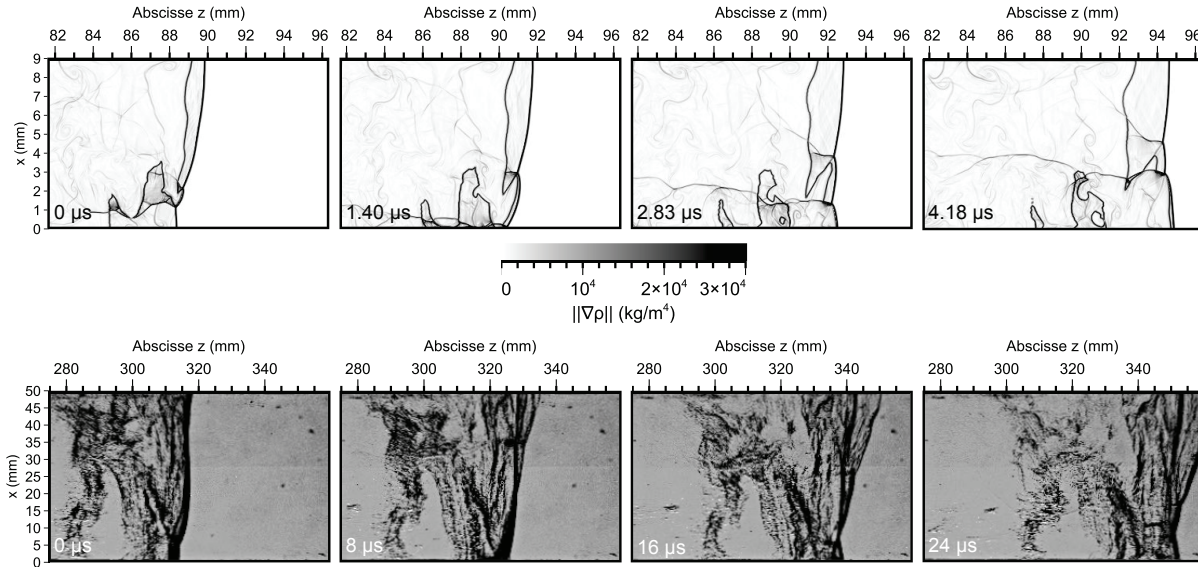


FIGURE 7.12 – Dynamique de la réflexion de Mach avec la paroi inférieure, haut : champs de $\|\nabla\rho\|$ (gradient PPFa numérique), bas : clichés obtenus par strioscopie (gradient PPFa expérimental).

Afin de confirmer l'origine géométrique de l'extinction de la détonation dans la situation du gradient PPFa, nous avons réalisé, pour la même distribution de richesse, une simulation numérique dans un canal de largeur deux fois plus grande. La Figure 7.13 donne l'historique de la dynamique de la structure cellulaire de la détonation repérée par les contours de la pression maximale pour les deux largeurs $d = 18$ mm et $d = 9$ mm.

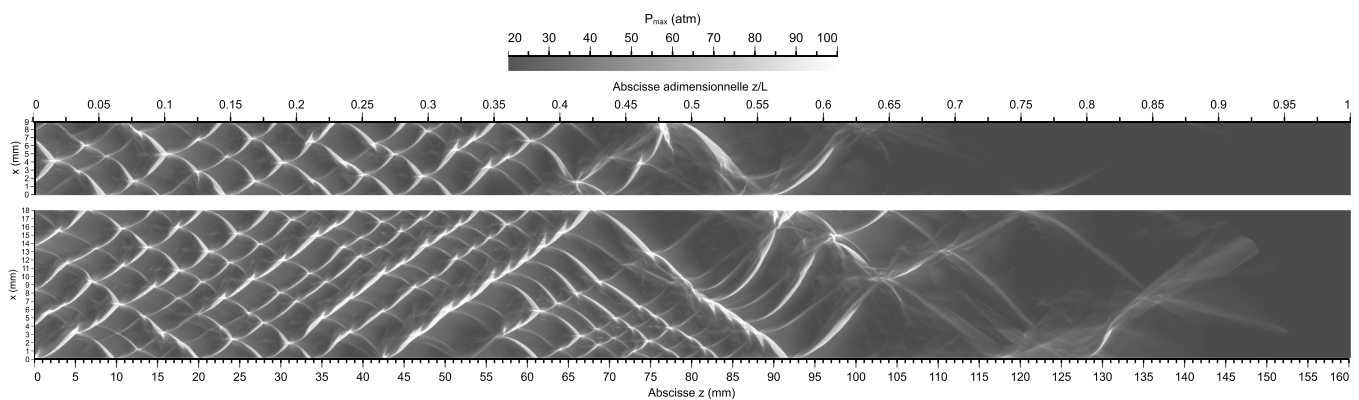


FIGURE 7.13 – Historiques de la dynamique de la structure cellulaire de la détonation repérée par les contours de la pression maximale P_{\max} , haut : largeur de tube $d = 9$ mm, bas : largeur de tube $d = 18$ mm (gradient PPFa numérique).

Comme attendu, nous observons que la détonation marginale se propage plus loin dans le tube de plus grande largeur, et donc, en particulier, dans des compositions plus pauvres.

7.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un travail de simulations numériques réalisé en collaboration avec le Professeur AKIKO MATSUO et M. TAKUYA MATSUMOTO (Université Keio, Yokohama, Japon). Nous avons pu montrer que l'outil numérique pouvait reproduire avec une bonne fidélité les dynamiques de propagation et d'extinction observées expérimentalement, dans le cas des distributions monotones de richesse décroissante. La reproduction des phénomènes observés expérimentalement repose essentiellement sur l'utilisation d'une loi d'échelle liant la largeur λ des structures cellulaires et la dimension transverse d du confinement. Ces simulations ont ainsi permis d'obtenir les mêmes tendances que celles observées dans nos expériences. Cependant, à ce jour, elles restent qualitatives car la largeur λ demeure quasi-systématiquement sous-estimée par les simulations [34, 44]. Il est ici difficile de déterminer si cet écart est lié à l'approximation bidimensionnelle de nos simulations ou à un schéma de cinétique chimique non adapté aux conditions de température et de pression caractéristiques des phénomènes de la dynamique des détonations.

Conclusion

Cette thèse est consacrée à la caractérisation de la dynamique de la détonation dans des compositions gazeuses non-uniformément distribuées. Notre contribution repose sur des expériences réalisées dans un banc original, des modèles et des simulations numériques de cas tests fondés sur nos observations. Nous avons considéré des gradients de composition de direction parallèle à celle de la propagation de la détonation. Il s'agit d'une simplification des conditions de non-uniformités rencontrées dans plusieurs situations de grande importance pratique, par exemple lors d'une fuite de gaz dans une installation industrielle ou dans la chambre de combustion d'un moteur à détonations.

Les diagnostics mis en œuvre pour caractériser les phénomènes dynamiques de la détonation sont la méthode des traces sur dépôt de carbone, la strioscopie et la spectroscopie par chimiluminescence couplées à de la cinématographie ultra-rapide. La génération de gradients de composition parallèles reproductibles et contrôlés a été réalisée par un dispositif d'injection planaire automatisé de composants séparés. Les gradients d'état initial résulte alors du processus de diffusion moléculaire. Nous les avons caractérisés au moyen de sondes optiques couplées à la simulation du phénomène de diffusion.

L'étude expérimentale a été séparée en deux ensembles pour lesquels la distribution de richesse est, respectivement, monotone décroissante et non-monotone, décroissante puis croissante.

S'agissant du premier ensemble, nous avons montré que la dynamique d'extinction de la détonation dépend de la force du gradient. Lorsque la variation de richesse est modérée, l'extinction est contrôlée par la dimension transverse du confinement à laquelle la détonation adapte son nombre de modes transverses au cours de sa propagation. Nous avons formulé et validé un critère d'existence fondé sur la comparaison de longueurs chimiques caractéristiques (largeur de la cellule λ ou longueur chimique ℓ_c) avec la dimension transverse d du confinement. Sa capacité prédictive requiert toutefois que ces longueurs soient connues ou calculables avec fiabilité. Lorsque la variation de la richesse est importante, l'extinction de la détonation résulte du découplage du choc et de la flamme. Nous avons formulé et validé un critère de découplage fondé sur l'analyse de la variation du temps chimique caractéristique t_c de la zone de réactions moyenne du modèle ZND en fonction de la composition initiale. Ces critères peuvent être utiles pour le dimensionnement de moteurs à détonations, en particulier, pour estimer la dimension transverse minimale (l'entrefer dans un RDE) nécessaire à la propagation de la détonation ou le nombre d'injecteurs et les distances optimales les séparant.

S'agissant du second ensemble, nous avons montré que la dynamique de transmission de la détonation à travers un gradient de composition obéit à la classification générique des phénomènes transitoires de la détonation dans les gaz, c'est-à-dire qu'elle présente des comportements super-critique, critique et sous-critique. Ainsi, une détonation qui s'est découplée lors de sa propagation dans des compositions insuffisamment réactives peut se réamorcer lorsque les conditions de composition redeviennent favorables. Le réamorçage de la détonation dépend alors essentiellement de l'intensité des réflexions de Mach aux parois du confinement. Une détonation qui a subi un découplage choc-flamme peut réapparaître plus facilement si elle conserve des ondes transverses suffisamment intenses. Dans un cadre applicatif de type moteur à détonations, un moyen de reformer la détonation après un découplage est d'employer des parois rugueuses ou munies d'obstacles.

Ces procédés permettent de créer ou d'entretenir des ondes transverses et donc de favoriser le réamorçage de la détonation. Dans ce même cadre, ce phénomène de réamorçage peut constituer une explication aux régimes contra-rotatifs de détonation quelquefois installés dans des chambres annulaires de type RDE. En effet, dans des situations de réamorçage confiné et localisé, l'onde générée sera constituée de deux fronts se propageant dans des sens opposés. De fait, dans un RDE, ces fronts de réamorçage trouveraient chacun potentiellement du mélange frais, puisque l'injection est continue, et peuvent donc évoluer en fronts de détonation contra-rotatifs.

Nos simulations numériques ont été conduites dans le cadre d'une collaboration avec le Professeur AKIKO MATSUO et M. TAKUYA MATSUMOTO (Université Keio, Yokohama, Japon). Bien que seulement bidimensionnelles, elles montrent la capacité de l'outil numérique à simuler la détonation en milieu non-uniforme. Nous avons en effet pu restituer avec une bonne fidélité les principaux aspects des dynamiques de propagation et d'extinction observées dans nos expériences pour le cas des distributions monotones de richesse décroissante. Nos simulations reposent sur le principe d'autosimilarité des comportements dynamiques de la détonation par rapport à la largeur de la structure cellulaire, c'est-à-dire sur une loi d'échelle liant la largeur λ de la cellule et la dimension transverse d du confinement. De fait, nos simulations numériques montrent alors les mêmes tendances que nos expériences. Cependant, à ce jour, elles n'ont pas de caractère prédictif car elles sous-estiment quasi-systématiquement λ . Deux explications, vraisemblablement combinées, peuvent être avancées. La première est la simplification bidimensionnelle de nos simulations, la seconde est la qualité du schéma de cinétique chimique. Nos simulations numériques ne nous ont également pas permis de reproduire les dynamiques de réamorçage observées dans le cas des distributions non-monotones de richesse (gradient critique). Nous imputons ceci au fait que, d'une part, la dynamique de réamorçage est fortement tridimensionnelle et, que, d'autre part, les conditions imposées par cette dynamique sont très intenses. Les longueurs chimiques locales sont ainsi très petites et les résolutions employées dans notre étude ne nous ont pas permis de capter cette dynamique tridimensionnelle complexe.

Le critère de découplage choc-flamme proposé peut en particulier être vu comme un outil de validation des simulations numériques. Son emploi, dans un contexte de propulsion par détonation, avec des chambres de géométrie tridimensionnelle, une cinétique chimique détaillée et des gradients réalistes, peut alors s'avérer très utile à la compréhension du fonctionnement et au dimensionnement des chambres.

Cette étude pourrait être complétée par des expériences sur des distributions non-monotones de richesse en positionnant des obstacles le long des parois de la chambre d'étude. Il serait ainsi intéressant d'étudier les configurations géométriques optimales d'obstacles (hauteur, longueur et espacement) permettant le réamorçage de la détonation, pour des conditions de gradients sous-critiques. Pour une configuration d'injection et des conditions de composition, de température et de pression initiales données, il s'agirait de comprendre comment élargir les domaines critique et super-critique de transmission de la détonation à travers un gradient de composition, par une étude paramétrique sur la géométrie des obstacles.

Une autre voie à explorer serait celle de milieux non-uniformes formés de gaz brûlés et de gaz frais, laquelle se rapproche plus des conditions rencontrées dans les chambres de moteurs à détonations. Ici, deux contributions interagissent, celles dues aux gradients de composition (i) et celles dues aux gradients de température (ii). La première (i) est fondamentalement équivalente à celle que nous avons étudiée ici en admettant qu'une dilution par un gaz inerte, de même température que les réactifs, est analogue à une décroissance de la richesse, l'une et l'autre équivalent à une baisse de la réactivité. Dès lors, les dynamiques

et critères que nous avons présentés dans ce manuscrit peuvent être vraisemblablement étendus à ces situations de dilution par un inerte. Pour la seconde contribution (ii), les expériences nous apparaissent à ce jour plus compliquées à réaliser en raison de la difficulté à générer des non-uniformités de température à des niveaux représentatifs de celle des gaz brûlés dans la chambre d'un moteur à détonations tout en empêchant l'initiation spontanée, indésirée, d'une combustion dans le mélange à étudier.

En conclusion, cette thèse a permis d'identifier et de caractériser les phénomènes génériques à l'œuvre lors de la propagation d'une onde de détonation dans un gaz de composition non-uniformément distribuée. Elle souligne aussi la nécessité de disposer d'outils de diagnostics optiques et cinématographiques performants et de capacités de calcul améliorées, tant du point de vue des algorithmes que de celui des schémas détaillés de cinétique chimique. Beaucoup d'études restent ainsi à réaliser pour mieux comprendre la richesse de la dynamique des détonations dans des situations de gradient d'état initial ou de configurations géométriques plus complexes que celles que nous avons considérées.

Annexe A

Cinétique chimique détaillée

Nous donnons ici les relations habituelles de la cinétique chimique détaillée, en particulier celles liant les vitesses d'évolution $\dot{\omega}_i$ (ou taux de production molaires, mol/m³/s) des concentrations molaires C_i (mol/m³), grandeurs habituelles de la cinétique chimique, et les vitesses d'évolution w_i (s⁻¹) des fractions massiques Y_i , plus adaptées à la dynamique des fluides compressibles. Nous considérons d'abord les expressions :

$$\frac{dP}{dt} + \left(\frac{c_f}{v}\right)^2 \frac{dv}{dt} = \frac{c_f^2}{v} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}, \quad T = \frac{\mathcal{M}Pv}{R}, \quad Y_i = \frac{\mathcal{M}_i C_i}{\sum_i^{N_{\text{sp}}} \mathcal{M}_i C_i} = v \mathcal{M}_i C_i \quad (\text{A.1})$$

$$c_f^2(T, \mathbf{Y}) = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{s, \mathbf{Y}} = \frac{c_p T}{\frac{\mathcal{M} c_p}{R} - 1}, \quad c_p(T, \mathbf{Y}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} Y_i c_{pi}(T), \quad \frac{1}{\mathcal{M}(\mathbf{Y})} = \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \quad (\text{A.2})$$

$$\boldsymbol{\sigma}(T, \mathbf{Y}) = (\sigma_i), \quad \sigma_i(T, \mathbf{Y}) = \frac{h_i}{c_p T} - \frac{\mathcal{M}}{\mathcal{M}_i}, \quad h_i(T) = h_i^* + \int_{T_*}^T c_{pi}(T) dT \quad (\text{A.3})$$

où (A.1a) est une réécriture du premier principe de la thermodynamique pour un fluide parfait réactif en évolution adiabatique et $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}$ est la thermicité, σ_i le coefficient de thermicité de l'espèce i , \mathcal{M} et \mathcal{M}_i les masses molaires du mélange et de l'espèce i , c_f la célérité du son pour la composition figée, c_p et c_{pi} les capacités calorifiques à pression constante du mélange et de l'espèce i , h_i l'enthalpie spécifique de l'espèce i et h_i^* son enthalpie spécifique de formation à la température de référence T_* .

Nous considérons ensuite, pour un schéma détaillé de cinétique chimique relatif à un ensemble de N_r réactions chimiques élémentaires combinant N_{sp} espèces chimiques i , l'expression du taux de production molaire $\dot{\omega}_i$ de l'espèce i :

$$\dot{\omega}_i = \frac{dC_i}{dt} = \sum_{k=1}^{N_r} (\nu_{ik}'' - \nu_{ik}') q_k \quad (\text{A.4})$$

où ν_{ik}' et ν_{ik}'' représentent les coefficients stoechiométriques molaires des réactifs et des produits, respectivement, de la $k^{\text{ème}}$ réaction élémentaire et q_k son taux net d'évolution, donné par :

$$q_k = k_{f,k} \prod_{i=1}^{N_{\text{sp}}} C_i^{\nu_{ik}'} - k_{b,k} \prod_{i=1}^{N_{\text{sp}}} C_i^{\nu_{ik}''} \quad (\text{A.5})$$

Les termes $k_{f,k}$ et $k_{b,k}$ sont les constantes de vitesse de réaction directe ("forward") et indirecte ("backward") de la $k^{\text{ème}}$ réaction. La première est souvent donnée par la loi d'Arrhenius :

$$k_{f,k} = A_k T^{n_k} e^{-\frac{E_{a,k}}{RT}} \quad (\text{A.6})$$

où A_k est un facteur homogène à l'inverse d'un temps, n_k l'exposant en température et E_{a_k} l'énergie d'activation de la réaction directe. Les données thermo-physiques sont en général trouvées dans les tables de la JANNAF [144] sous forme de développements polynomiaux. Les données cinétiques dépendent du schéma considéré. Souvent les seules données tabulées sont les constantes A_k , n_k et E_{a_k} de chaque réaction directe et k_{bk} , la vitesse dans le sens indirect, est déduite à partir de la constante d'équilibre K_{c_k} de la $k^{\text{ème}}$ réaction :

$$\frac{k_{fk}}{k_{bk}} = K_{c_k} = K_{p_k} \left(\frac{P_{\text{atm}}}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} \nu''_{ik} - \nu'_{ik}} \quad (\text{A.7})$$

$$K_{p_k} = \prod_{i=1}^{N_{\text{sp}}} \left(\frac{P_i}{P_{\text{atm}}} \right)^{\nu''_{ik} - \nu'_{ik}} = \exp \left[\frac{-\sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) g_i^{\text{mol}}}{RT} \right] \quad (\text{A.8})$$

où K_{p_k} est la constante d'équilibre relative aux pressions partielles et g_i^{mol} la fonction de Gibbs molaire de l'espèce i définie par :

$$g_i^{\text{mol}} = h_i^{\text{mol}} - T s_i^{\text{mol}}$$

avec h_i^{mol} et s_i^{mol} l'enthalpie et l'entropie molaire de l'espèce i .

Compte-tenu de l'expression $Y_i = v \mathcal{M}_i C_i$ liant la concentration C_i et la fraction massique Y_i de l'espèce i (eq. A.1), la relation entre la vitesse d'évolution $w_i = dY_i/dt$ et le taux de production molaire $\dot{\omega}_i$ est :

$$w_i = \mathcal{M}_i \frac{d}{dt} (v C_i) = \mathcal{M}_i (v \dot{\omega}_i + C_i \dot{v}) \quad (\text{A.9})$$

Annexe B

Détonation ZND faiblement courbée et sensibilité à la cinétique chimique

Nous présentons dans cette annexe le modèle Zel'dovich-Von Neumann-Döring étendu à une détonation faiblement courbée sous la forme de la reproduction de notre article publié dans l'IJEMCP (BOULAL et al. [32]). Ce modèle permet d'estimer le rayon minimum R_{crit} d'existence de la détonation autonome divergente. L'article contient également une analyse de sensibilité à la cinétique chimique de cette estimation de R_{crit} .

THE SENSITIVITY OF CHEMICAL KINETICS WITH TWO CHARACTERISTIC LENGTHS OF DETONATION DYNAMICS IN HOMOGENEOUS GASES

Stéphane Boulal^{1,2,*} *Pierre Vidal*¹ *Ratiba Zitoun*¹ & *Jocelyn Luche*¹

¹*Institute Pprime (UPR 3346 CNRS) Fluid, Thermal and Combustion Sciences Department ENSMA, BP 40109, 86960 Futuroscope-Chasseneuil, France*

²*SAFRAN-SNECMA, Établissement de Villaroche, 77550 Moissy Cramayel, France*

*Address all correspondence to: Stéphane Boulal,
E-mail: stephane.boulal@ensma.fr

This work discusses the sensitivity of chemical kinetics with two characteristic lengths of detonation dynamics calculated with a steady, weakly diverging, reaction-zone model. These are the chemical lengths defined as the distance from the detonation leading shock to the inflection point of the temperature profile and the minimum radius for the existence of a self-sustained, spherically diverging detonation. Two detailed chemical kinetic mechanisms are implemented in the model to estimate the characteristic lengths for H₂/O₂ and H₂/air mixtures at different equivalence ratios and initial pressures. A high sensitivity to the chemical kinetic scheme is obtained, with discrepancies ranging from 20% to 80%. Calculated and measured critical radii are found to be of the same order, which supports the premise of this work to assess sensitivity from a hydrodynamic model rather than from unsteady 3D simulations. Nevertheless, the differences are very important, especially at higher initial pressures. Importantly, these large differences from one scheme to the other are of the same order as between experimental data themselves. The same high sensitivity should thus be expected from numerical simulations and, therefore, chemical kinetics requires proper calibration in a large range of initial pressures to reproduce experimentally observed detonation dynamics. The predictive ability of simulations should be considered with caution, especially if detailed chemical kinetic schemes are implemented. Detonation studies should remain driven by experiments and sound dimensional analysis. More fundamental work aimed at improving high-pressure, high-temperature chemical kinetics is necessary before simulation can be used as an effective design tool for detonation-based propulsive devices such as pulsed or rotating detonation engines.

KEY WORDS: *detonation, homogeneous gas, chemical kinetics, chemical length, critical radius*

NOMENCLATURE

<p>c frozen sound velocity, m/s ($c^2 = \partial p / \partial v)_{s,y} = v^2(p + \partial e / \partial v)_{p,y} / \partial e / \partial p)_{v,y}$)</p> <p>$d/dt = \partial / \partial t)_r + u \partial / \partial r)_t$, material derivative in the laboratory frame coordinates (t, r)</p> <p>$d/dt = \partial / \partial t)_z + (D - u) \partial / \partial z)_t$, material derivative in the shock-fixed frame coordinates (t, z)</p> <p>D detonation velocity, m/s</p> <p>E source energy, J</p> <p>e specific internal energy, J/kg</p> <p>ℓ_c chemical length, m</p> <p>M $(D - u) / c$, relative-flow Mach number</p> <p>p pressure, Pa (atm)</p> <p>R shock position, m</p> <p>R_g universal gas constant (8.32 J/mole/K)</p> <p>r position in the laboratory frame, m</p> <p>T temperature, K</p> <p>t time, s</p> <p>\mathbf{u} velocity vector in the laboratory frame, m/s</p>	<p>u velocity component normal to the shock front in the laboratory frame, m/s</p> <p>\mathbf{w} reaction rate vector, 1/s</p> <p>\mathbf{y} (y_k) mass fraction vector</p> <p>z $R(t) - r$ position in the shock frame, m</p> <p>Greek Symbols</p> <p>α geometry index ($\alpha = 0, 1$, or 2 for planar, cylindrical, or spherical coordinate, resp.)</p> <p>κ shock total curvature, 1/m</p> <p>λ detonation cell width, m</p> <p>v specific volume, m³/kg</p> <p>ρ density, kg/m³</p> <p>σ (σ_k) thermicity vector ($\sigma_k = \partial e / \partial y_k)_{p,v,y_j \neq k}$)</p> <p>$\sigma \mathbf{w}$ thermicity</p> <p>Φ equivalence ratio</p> <p>Subscripts and superscripts</p> <p>k kth chemical species</p> <p>0 preshock state</p> <p>H postshock state</p> <p>CJ CJ state or property</p> <p>CRIT critical or minimum condition</p>
---	---

1. INTRODUCTION

Detonation is a high-pressure supersonic combustion wave that has long been studied for defense and safety purposes. Also, it is now being studied as a combustion process for propulsion devices such as pulsed or rotating detonation engines, e.g., Canteins (2006), Kailasanath (2000), and Roy et al. (2004). All applications actually share a common phenomenology, of which an important component is the high sensitivity of detonation dynamics to chemical kinetics. This difficulty makes it a challenge to develop reliable high-pressure, high-temperature chemical kinetic schemes and calls for specific

numerical and experimental studies. This work presents a sensitivity analysis of two characteristic lengths of detonation dynamics to chemical kinetics.

Detonation dynamics refers to strongly unsteady behaviors such as those resulting from sudden changes in the propagation conditions (Mitrofanov and Soloukhin, 1964) or from direct initiation attempts (Bach et al., 1971). Examples of this are the transmission of detonation from a tube to a large volume, the interaction of the detonation wave with boundaries or obstacles, the propagation in curved channels or in nonuniform compositions, and the initiation by an energy source. Critical conditions for detonation existence or propagation are usually described by characteristic lengths or energies referred to as dynamic parameters of detonation. These are defined by means of dimensional analysis that uses the natural variables of the system such as the initial density ρ_0 or pressure p_0 , the Chapman-Jouguet (CJ) ideal detonation velocity D_{CJ} , and a well-chosen representative chemical length. Two examples are the minimum diameter d_{CRIT} for detonation transmission and the minimum radius R_{CRIT} for the existence of a spherically diverging self-sustained detonation.

In gases, the detonation reaction zone is unstable because of the high sensitivity of the chemical induction length to infinitesimal changes in the postshock state, e.g., Stewart and Kasimov (2006). As a consequence, the detonation front is not a smooth surface but a set of longitudinal and transverse shock waves that continuously interact during detonation propagation. These interactions draw diamond-shaped patterns—designated as detonation cells—along a plane parallel to the propagation direction (Denisov and Troshin, 1959). The cell mean width λ_{CJ} for the self-sustained detonation turns out to be an adequate representative length for scaling detonation dynamic parameters. For most H_2 and C_nH_m fuels, experiments thus show that the critical transmission diameter is $d_{CRIT} = k\lambda_{CJ}$ with $k \sim 10\text{--}20$ (Desbordes, 1995), and the critical radius of diverging self-sustained detonation is $R_{CRIT} = k\lambda_{CJ}$ with $k \sim 20\text{--}50$, (Desbordes, 1995; Sochet et al., 1999; Zhang et al., 2012).

The Zel'dovich-von Neuman-Döring (ZND) model defines average properties of the unstable detonation reaction zone. The original ZND model considers detonation as a one-dimensional planar steady reaction zone induced by a constant-velocity planar shock (Higgins, 2012). The ZND model has been extended to weakly curved detonation with diverging steady reaction zone in order to estimate conditions for the existence of self-sustained detonation such as the minimum radius R_{CRIT} (Higgins, 2012). Most reactive mixtures release their heat in one energetic step. Reaction profiles of planar or curved ZND detonations show two domains, induction and reaction, each characterized by its own length that depends on the leading shock dynamic. A classical choice of chemical length representative of the reaction zone thickness, which is adopted in the present work, is an intermediate between the end of induction and the end of reaction defined as the distance ℓ_c from the shock to the inflexion point of the temperature profile. The physical pertinence of this choice is addressed in Section 4. The cell mean width λ_{CJ} of a self-sustained cellular detonation correlates well with the representative chemical

thickness ℓ_c^{CJ} of the reaction zone of the self-sustained ZND planar detonation, e.g., $\lambda_{\text{CJ}} = k\ell_c^{\text{CJ}}$ with $k \sim 15\text{--}40$ (Schelkin and Troshin, 1963).

Only numerical simulations can model the complex flow features of detonation dynamic behaviors. However, their predictive abilities are limited by three combined difficulties. One is the uncertainty of detailed chemical kinetics at high pressures and temperatures in the detonation reaction zone. The other two are high numerical precisions required to capture simultaneously the very disparate lengths of detonation dynamics and the long computation time that results from implementing detailed kinetic schemes in the unsteady 3D reactive balance equations.

The present analysis is based on the hypothesis that the sensitivity to chemical kinetics of detonation characteristic lengths can be correctly assessed by using a simple hydrodynamic model rather than unsteady 3D numerical simulations. This model, described in Section 2 below, is the extension of the planar ZND model to weakly curved, diverging, detonation. Two detailed chemical kinetic mechanisms, Konnov (2000) and DMGD (Dagaut et al., 1991; Djebaïli-Chaumeix et al., 1997; Guirguis et al., 1985; Miller and Bowman, 1989), are implemented in a steady one-dimensional, planar or diverging, reaction zone model to estimate characteristic lengths for H_2/O_2 and H_2/air mixtures. The considered lengths are the representative chemical thicknesses ℓ_c of the reaction zone of self-sustained, planar or curved, detonations and the minimum radius R_{CRIT} for the existence of a spherically diverging self-sustained detonation.

2. STEADY, PLANAR OR CURVED, DETONATION MODEL

The cell mean width λ_{CJ} and, therefore, the representative thickness of the reaction zone ℓ_c^{CJ} for the on-average planar self-sustained detonation (i.e., CJ) are small compared with the detonation characteristic size, e.g., the radius of a spherically diverging detonation. Thus, within the propagation limits, the wave front can be modeled as a smooth surface, and the flow in the reaction zone can be considered as steady. This steady curved detonation model has often been implemented, and is the cornerstone of the detonation-shock-dynamics method for modeling propagation of detonation fronts (Stewart and Bdzil, 1988) and estimating critical conditions of propagation (He, 1996; Vidal et al., 2012).

The expansion wave front behind a self-sustained detonation propagates at the local velocity of acoustic perturbations. This sonic expansion front stands at the end of the reaction zone for the planar detonation and inside the reaction zone for curved detonations, usually slightly before chemical equilibrium is achieved. Self-sustained propagation requires that the expansion front does not penetrate too deeply into the reaction zone so the amount of released energy is large enough to maintain the shock strength sufficient to initiate chemical decomposition. Expansion acts as an adiabatic-cooling process that counteracts the exothermic decomposition process. Regarding diverging detonations, expansion comprises a lateral component [see Eqs. (4)–(8) below]. The larger the lateral

expansion (i.e., the smaller the detonation wave radius), the deeper its front penetrates into the reaction zone, and the weaker the shock. Expansions that are too strong can cause failure of the decomposition process. From the physical standpoint, this implies that a diverging detonation should have a minimum radius in order to propagate in a self-sustained way.

For steady diverging reaction zones, the adiabatic-cooling and exothermic decomposition processes are measured by the shock total curvature κ and the thermicity $\sigma\mathbf{w}$, respectively [see Eq. (8) below]. Analysis then shows that the shock normal velocity D depends on the shock total curvature κ . If the reaction rate \mathbf{w} is sufficiently dependent on the thermodynamic state, the $D(\kappa)$ relation shows a minimum velocity and a minimum radius that model critical conditions for self-sustained detonation existence. Above these values, the detonation velocity increases up to the CJ value as the radius increases to infinity.

The Euler equations and the adiabatic first principle (1) are the relevant equations that express mass, momentum, and energy balances for the flow in the reaction zone of detonations. A closed system is formally obtained with the functional forms (2) of the equation of state of the reactive fluid and the vector of chemical reaction rates:

$$\frac{dv}{dt} - \text{div}\mathbf{u} = 0, \quad \frac{d\mathbf{u}}{dt} + v \mathbf{grad}p = \mathbf{0}, \quad \frac{de}{dt} + p \frac{dv}{dt} = 0, \quad (1)$$

$$e = e(p, v, \mathbf{y}), \quad \frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{w}(p, v, \mathbf{y}), \quad (2)$$

where p , v , and e denote the pressure, the specific volume, and the specific internal energy. The vectors $\mathbf{u} = d\mathbf{r}/dt$ and \mathbf{r} are the material velocity vector and the position in the laboratory-fixed frame. The operator $d()/dt$ (3) is the material derivative. The vector $\mathbf{y} = (y_k)$ comprises the mass fractions y_k of the k th species ($\sum y_k = 1$) and $\mathbf{w} = (w_k) = d\mathbf{y}/dt$ is the vector of chemical reaction rates. In gases, the chemical rates are strongly dependent on the temperature T , and the $pv = R_g T/\mathcal{M}$ equation of state (R_g the universal gas constant, \mathcal{M} the molecular weight of the reactive mixture) is used to construct the $e(p, v, \mathbf{y})$ equation of state.

The distance ℓ_S from the shock front to the sonic locus is usually small compared with the shock local position $R(t)$. Therefore, denoting by R the shock position in a laboratory frame and by $z = R - r$ the distance in the shock-fixed frame, any position z relative to the shock front in the reaction zone will be even smaller, i.e., $0 \leq z \leq \ell_S \ll R$. A first consequence is that the flow and the shock front can be considered as unidirectional with planar ($\alpha = 0$), cylindrical ($\alpha = 1$), or spherical symmetry ($\alpha = 2$). The material derivative and the flow divergence thus writes

$$\frac{d}{dt} = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right)_r + u \left. \frac{\partial}{\partial r} \right)_t \quad (3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)_t + u \frac{\alpha}{r} \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)_t + u \kappa_m, \quad (4)$$

$$\kappa_m = \frac{\alpha}{r} \equiv \frac{\alpha}{R - z}, \quad (5)$$

where u is the component of the material velocity normal to the shock front in the laboratory frame. The quantities $\kappa = \alpha/R$ and $\kappa_m = \kappa/(1 - z/R)$ denote the total curvatures of the shock and of a material surface. Since $\ell_S/R \equiv \varepsilon \ll 1$, the curvature of a material surface is $\kappa_m = \kappa[1 + O(\varepsilon)] \approx \kappa$, with $r \approx R$ at the reaction zone scale. Another consequence is that the residence time of a fluid element in the reactive domain between the shock and the sonic locus is very small compared with the time necessary for the shock to reach position R . The flow in this domain as viewed from an observer moving with the shock front can thus be considered as steady, i.e., $\partial(\cdot)/\partial t)_z = 0$. Denoting by $D(t) = dR/dt$ the shock velocity, the material derivative operator (3) rewritten in the shock-fixed frame of coordinates (t, z) as (6) simplifies to (7)

$$\frac{d}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_z + (D - u) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)_t, \quad (6)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_z = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} = (D - u) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)_t. \quad (7)$$

The balance laws (1) and the constitutive equations (2) then reduce to the system of ordinary first-order differential equations

$$\begin{aligned} \frac{du}{dz} &= - \frac{\sigma \mathbf{w} - u \kappa}{1 - M^2}, \\ \frac{dp}{dz} &= - \frac{D - u}{v} \frac{\sigma \mathbf{w} - u \kappa}{1 - M^2}, \\ \frac{dv}{dz} &= \frac{v}{D - u} \frac{\sigma \mathbf{w} - M^2 u \kappa}{1 - M^2}, \\ \frac{d\mathbf{y}}{dz} &= \frac{\mathbf{w}}{D - u}, \\ \frac{dt}{dz} &= \frac{1}{D - u}, \end{aligned} \quad (8)$$

where $d(\cdot)/dz$ is used for $\partial(\cdot)/\partial z)_t$ since the flow is steady. The quantity $M = (D - u)/c$ is the Mach number of the relative flow and c is the frozen sound velocity. The quantity $\sigma \mathbf{w}$ is the thermicity, and the vector $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_k = \partial e / \partial y_k)_{p,v,y_j \neq k}$ comprises the dimensionless thermicity coefficients. For the simplest reactive mixture made of two polytropic gases with the same heat capacity and the same molecular weight, the thermicity vector reduces to the coefficient $\sigma = (\gamma - 1) Q/c^2$ where Q is the heat of reaction and γ the ratio of the specific heats (Fickett and Davis, 1979). The last equation in the system

of ODEs (8) is an identity that defines the time $t(z)$ a fluid element takes to reach position z from the shock [the Lagrangian evolutions could be obtained from the system $d()/dt = (D - u) d()/dz$, cf. Eq.(7)]. For planar flows ($\alpha = 0$), these equations have integrals in the form of the Rankine-Hugoniot relations (RH),

$$\begin{aligned} \rho(D - u) &= \rho_0 D, & p + \rho(D - u)^2 &= p_0 + \rho_0 D^2, \\ e + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}(D - u)^2 &= e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{1}{2}D^2, \end{aligned} \quad (9)$$

which relate the preshock state (subscript 0) and the state at any point $z \geq 0$ in the steady reaction zone. For diverging flows ($\alpha = 1, 2$), they relate the preshock state and the postshock state ($z = 0$) only.

The profiles in the reaction zone of a steady, self-sustained (i.e., sonic) quasi-1D detonation are obtained by integrating the system of ODEs in Eq. (8) from the shock ($z = 0$) towards the reaction-zone end. The postshock state (subscript H , $z = 0$, $y_H = 0$) defines initial conditions for beginning integration. These are deduced from the preshock state (subscript 0, $z < 0$) by means of the RH relations given in Eq. (9) and a specified shock velocity D , i.e., $f(z = 0) = f_H(D)$, where f stands for u , p , or v . The celerity D and the total curvature κ thus appear as the arbitrary parameters of the integration. The behavior of the integral curves solution to Eq. (8) depends on the values of D and κ chosen when beginning integration. Determining the sonic solutions to Eq. (8) amounts to requiring these integral curves to go through the saddle point ($M = 1$, $\sigma w = u\kappa$) in order to rule out nonphysical infinite derivatives. This implies the existence of an eigenvalue compatibility constraint $D(\kappa)$. In this work a numerical shooting procedure was used (Stewart and Bdzil, 1988). Equation (8) was iteratively integrated with the same value of D and different κ 's until the eigenvalue $\kappa(D)$ was framed with sufficient precision. Repeating the procedure for several values of D defines the evolution law $D(\kappa)$ of the steady, sonic, quasi-1D detonation. The (frozen) planar detonation velocity D_{CJ} is the limiting value $D(\kappa \rightarrow 0)$ for which the sonic state ($M = 1$) is reached at the end of the reaction zone.

Examples of $D(\kappa)$ curves are given in Figs. 3(c) and 3(f). Each curve has a critical point (D_{CRIT} , $R_{CRIT} = \alpha/\kappa_{CRIT}$) that represents the minimum velocity and the minimum radius of the self-sustained diverging detonation. The lower part of the $D(\kappa)$ curve below the critical point is nonphysical because a diverging detonation propagates with a radius R that increases with time (i.e., a curvature $\kappa = \alpha/R$ that decreases). Only the upper part of the $D(\kappa)$ can describe the physical self-sustained diverging detonation that evolves towards the limit of the self-sustained planar detonation represented by infinite radii of curvature ($\kappa = 0$) and the maximum velocity D_{CJ} . The minimum radius R_{CRIT} can be used as an estimate of the radius at which a self-sustained diverging detonation reappears in critical conditions of initiation by a sudden point-source energy release, or of transmission from a tube to a larger volume.

3. SENSITIVITY ANALYSIS

Two characteristic lengths are considered in this study. The first one is the chemical length ℓ_c defined as the distance from the shock front to the maximum-slope point on the temperature profiles (see Section 1). The second one is the minimum radius of a self-sustained, spherically diverging detonation R_{CRIT} (see Section 2). The chemical length ℓ_c is calculated for two cases of self-sustained detonations, the planar one (CJ) with the chemical length ℓ_c^{CJ} , and the critically curved one with the chemical length ℓ_c^{CRIT} . Their sensitivity to chemical kinetics is assessed by means of the 1D, planar or curved, ZND calculations described in the previous section, with two chemical kinetic mechanisms here referred to as Konnov (2000) and DMGD (Dagaut et al., 1991; Djebaili–Chaumeix et al., 1997; Guirguis et al., 1985; Miller and Bowman, 1989). Both schemes have been used for the mixtures considered in this study, specifically H_2/O_2 and H_2/air , e.g., (Zhang et al., 2012). Here, for the H_2/O_2 mixtures, the equivalence ratio was varied in the range of 0.4–4 and initial pressure was set to 1 atm. For the H_2/air mixtures, the equivalence ratio Φ was varied in the range of 0.4–6 and initial pressure p_0 was set to 1 or 5 atm. The initial temperature T_0 was 298 K for all calculations.

As for H_2/O_2 mixtures, the temperature profiles are presented in Fig. 1, left column. The dependencies of the chemical lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} and of the ratios $R_{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CJ}}$ and $R_{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CRIT}}$ on the equivalence ratio Φ are shown in Figs. 1(d) and 1(e). The curvature-celerity relation $D(\kappa)$ is shown in Fig. 1(f). Tables 1 and 2 display the CJ and critical velocities, the critical curvatures and radii and the chemical lengths as a function of the equivalence ratio and chemical schemes.

As for H_2/air mixtures, the temperature profiles are presented in Fig. 2. The dependencies of the chemical lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} and of the ratios $R_{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CJ}}$ and $R_{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CRIT}}$ on the equivalence ratio Φ and initial pressure p_0 are shown in Figs. 3(a), 3(b), 3(d), and 3(e). The curvature-celerity relation $D(\kappa)$ is shown in Figs. 3(c) and 3(f), depending on initial pressure. Tables 3 and 4 for $p_0 = 1$ atm. and Tables 5 and 6 for $p_0 = 5$ atm. display the CJ and critical velocities, the critical curvatures and radii and the chemical lengths as a function of the equivalence ratio and chemical schemes.

The smaller values of ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} are obtained for the stoichiometric compositions ($\Phi = 1$) as shown by the classical U-shaped curves in Figs. 1(d), 3(a), and 3(d) that simply express that fuel or oxydant excesses slow down chemical reactions. Similarly, the lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} for the H_2/air mixtures are larger than for the H_2/O_2 mixtures because of the dilution by N_2 . As expected, ℓ_c^{CRIT} is always larger than ℓ_c^{CJ} since lateral expansion acts as an endothermal chemical reaction (see Section 2). However, the lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} for the H_2/O_2 lean mixtures are only slightly dependent on equivalence ratio, in contrast to the H_2/air lean mixtures. This result is consistent with the experimental observation that the detonation cell width of H_2/O_2 compositions weakly depends on equivalence ratio (Kaneshige and Shepherd, 1997). Also, the ratio $\ell_c^{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CJ}}$ is about quasi constant, 2.5–3, for most mixtures, regardless of the chemical kinetic scheme and the composition (Tables 1 and 3).

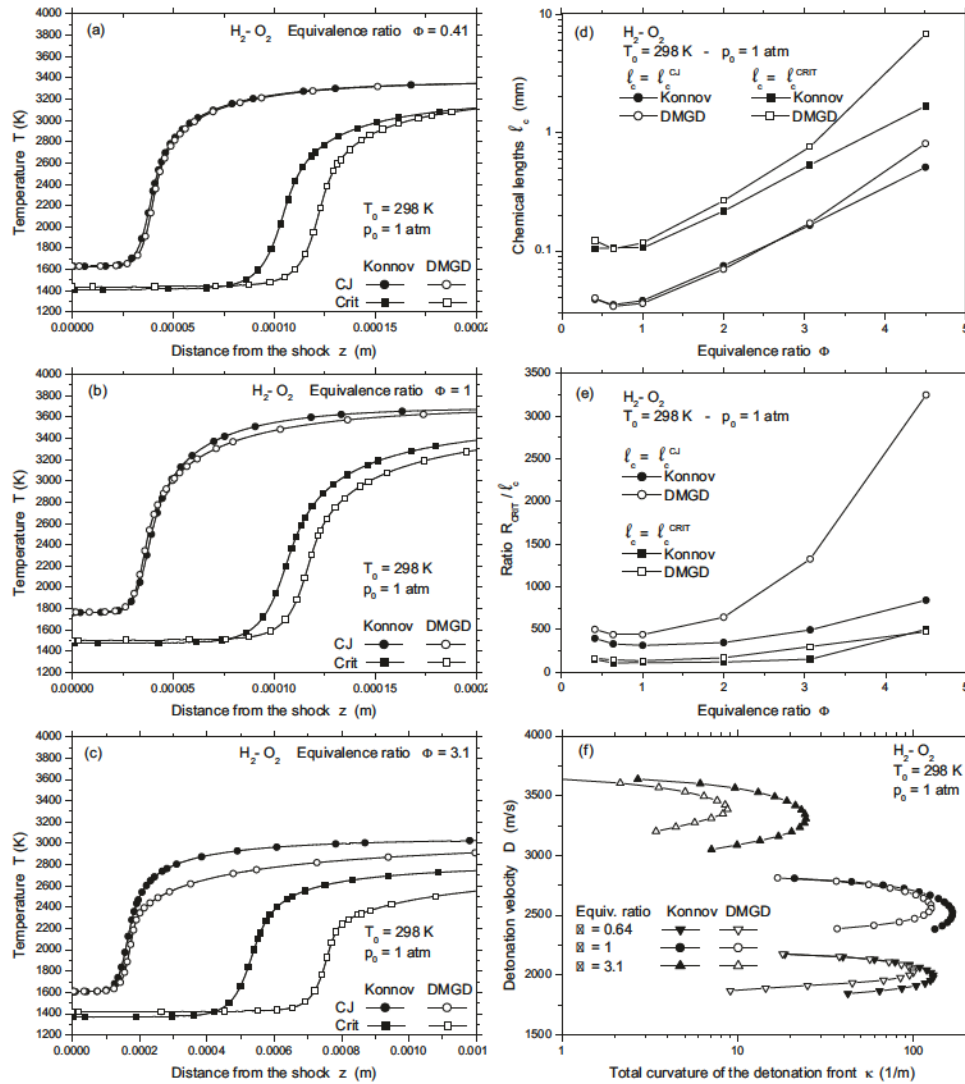


FIG. 1: H_2/O_2 mixtures ($p_0 = 1$ atm, $T_0 = 298$ K). Left column: temperature profiles as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme for the self-sustained, planar (CJ) and critically curved (CRIT) detonations. Right column: chemical lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} for the self-sustained, planar (CJ), and critically curved (CRIT) detonations, ratios R_{CRIT}/ℓ_c^{CJ} and R_{CRIT}/ℓ_c^{CRIT} and curvature-celerity relations $D-\kappa$ as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme.

For H_2/O_2 mixtures, the choice of the chemical scheme does not significantly affect the CJ chemical length ℓ_c^{CJ} [Table 1, Fig. 1(d)] except at very large equivalence ratios

TABLE 1: H₂/O₂ mixtures ($p_0 = 1$ atm, $T_0 = 298$ K): velocity D_{CJ} and chemical length ℓ_c^{CJ} for the self-sustained planar detonation, minimum velocity D_{CRIT} , maximum curvature κ_{CRIT} and chemical length ℓ_c^{CRIT} for the self-sustained critically curved detonation, and ratio $\ell_c^{CRIT} / \ell_c^{CJ}$ as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme

H ₂ /O ₂ $p_0 = 1$ atm $T_0 = 298$ K	Scheme	D_{CJ} (m/s)	D_{CRIT} (m/s)	κ_{CRIT} (m ⁻¹)	ℓ_c^{CJ} (mm)	ℓ_c^{CRIT} (mm)	$\ell_c^{CJ} / \ell_c^{CRIT}$
$\Phi = 0.41$	Konnov	2196	1998	129	0.039	0.105	2.69
	DMGD	2198	2022	99.7	0.040 3%	0.122 14%	3.05
$\Phi = 0.64$	Konnov	2484	2211	170	0.035	0.106	3.03
	DMGD	2487	2263	133	0.034 3%	0.104 2%	3.06
$\Phi = 1$	Konnov	2837	2525	167	0.038	0.106	2.79
	DMGD	2841	2556	126	0.036 6%	0.117 9%	3.25
$\Phi = 2$	Konnov	3403	3029	76.5	0.075	0.217	2.89
	DMGD	3408	3067	44.3	0.070 7%	0.266 18%	3.80
$\Phi = 3.1$	Konnov	3675	3308	24.4	0.165	0.533	3.23
	DMGD	3680	3385	8.76	0.172 4%	0.758 30%	4.41
$\Phi = 4.5$	Konnov	3801	3535	4.64	0.510	1.680	3.29
	DMGD	3805	3576	0.76	0.810 37%	6.820 75%	8.42

TABLE 2: H₂/O₂ mixtures ($p_0 = 1$ atm, $T_0 = 298$ K): minimum radius R_{CRIT} for the self-sustained critically curved detonation, ratios R_{CRIT} / ℓ_c^{CJ} and R_{CRIT} / ℓ_c^{CRIT} as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme

H ₂ /O ₂ $p_0 = 1$ atm. $T_0 = 298$ K	Scheme	$R_{CRIT} = 2 / \kappa_{CRIT}$ (mm)	R_{CRIT} / ℓ_c^{CJ}	R_{CRIT} / ℓ_c^{CRIT}
$\Phi = 0.41$	Konnov	15.50	398	148
	DMGD	20.06 23%	502	164
$\Phi = 0.64$	Konnov	11.76	336	111
	DMGD	15.04 22%	442	145
$\Phi = 1$	Konnov	11.98	315	113
	DMGD	15.87 25%	441	136
$\Phi = 2$	Konnov	25.76	343	119
	DMGD	45.15 43%	645	170
$\Phi = 3.1$	Konnov	81.97	497	154
	DMGD	228.3 64%	1327	301
$\Phi = 4.5$	Konnov	431.0	845	257
	DMGD	2630 84%	3249	386

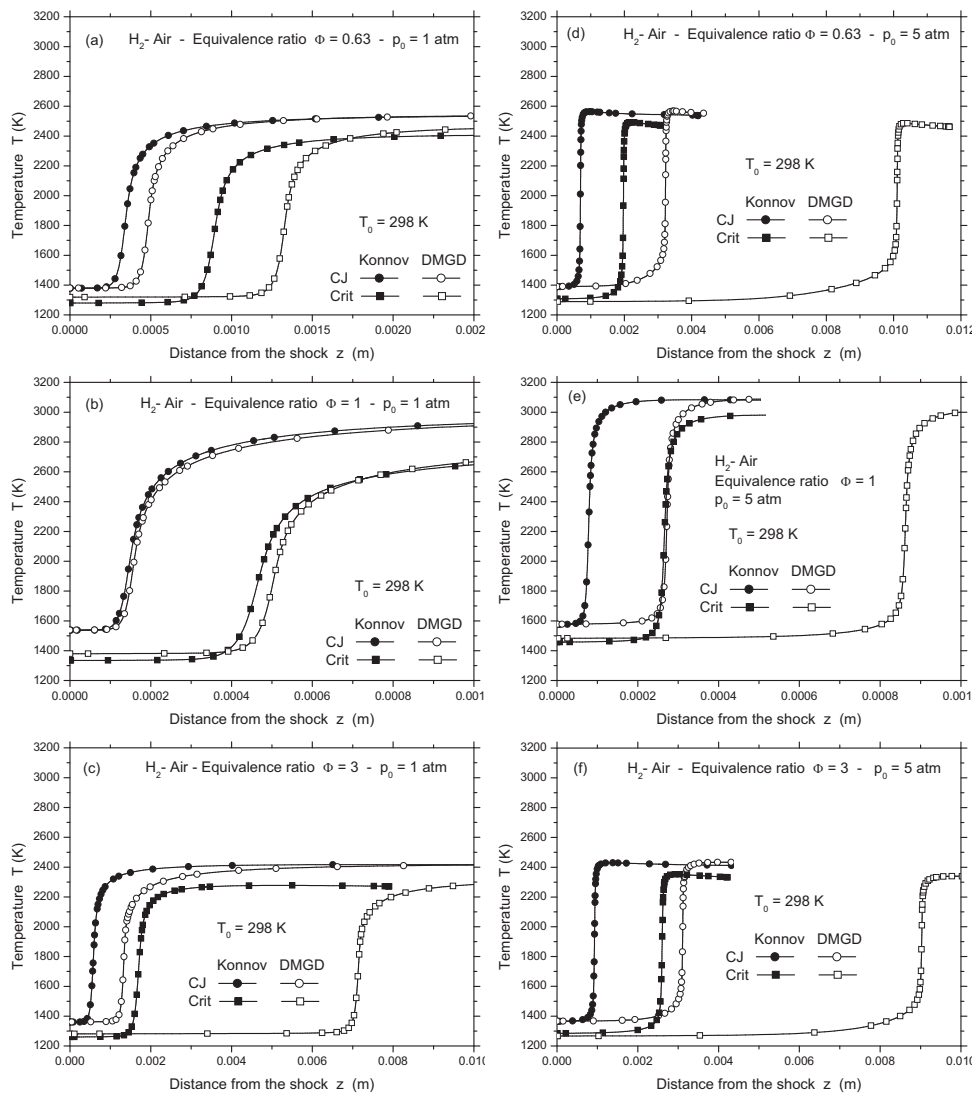


FIG. 2: H_2/air mixtures ($T_0 = 298 \text{ K}$). Temperature profiles as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme for the self-sustained, planar (CJ) and critically curved (CRIT) detonations. Left column: $p_0 = 1 \text{ atm}$, right column: $p_0 = 5 \text{ atm}$.

($\Phi \gtrsim 3$), and has only a moderate influence on the critical chemical length ℓ_c^{CRIT} . The interpretation is that the considered chemical schemes considered in the present work include similar equations for H_2/O_2 combustion about stoichiometry.

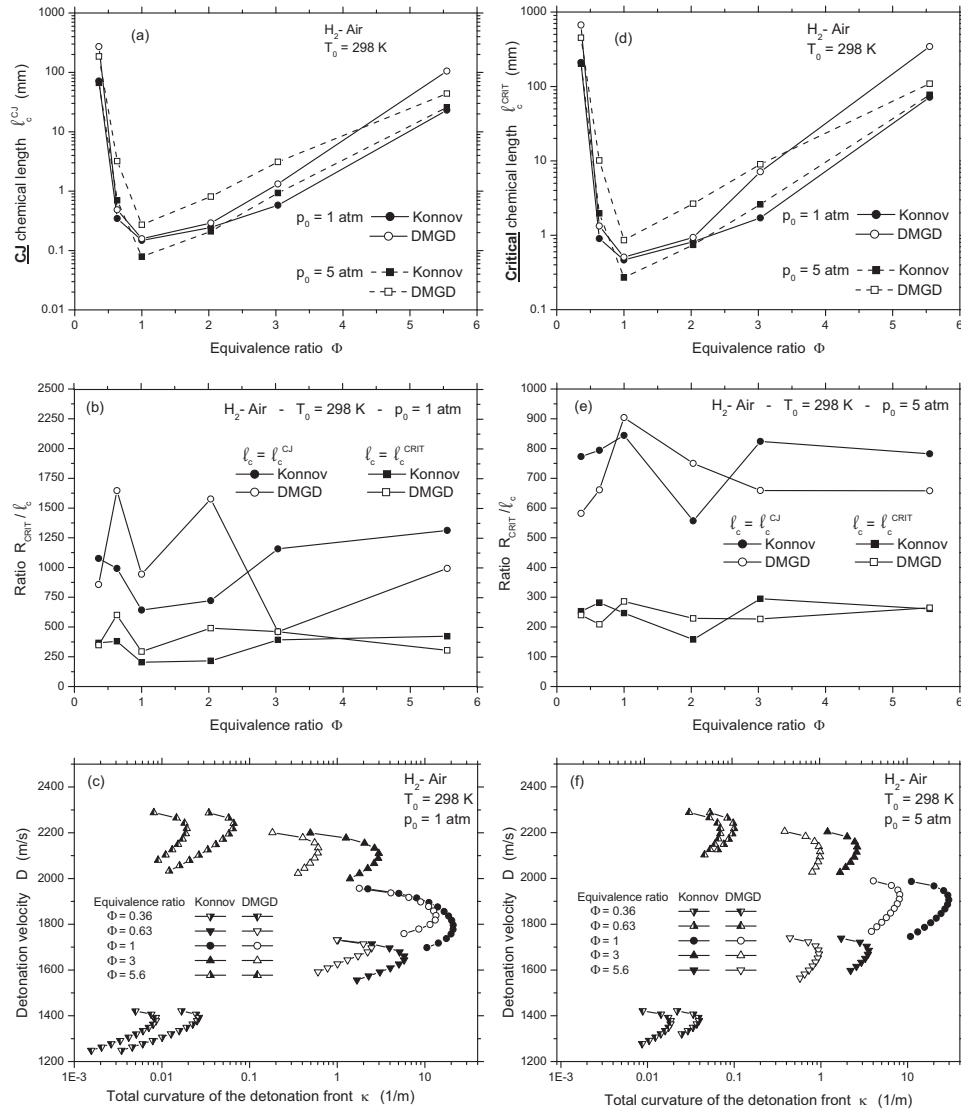


FIG. 3: H₂/air mixtures ($T_0 = 298$ K). Top line: chemical lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} for the self-sustained, planar (CJ, left) and critically-curved (CRIT, right) detonations as functions of the equivalence ratio Φ , the initial pressure p_0 and the chemical kinetic scheme. Middle line: ratios R_{CRIT}/ℓ_c^{CJ} and R_{CRIT}/ℓ_c^{CRIT} as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme (left column: $p_0 = 1$ atm, right column: $p_0 = 5$ atm). Bottom line: curvature-celerity relations D - κ as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme (left column: $p_0 = 1$ atm, right column: $p_0 = 5$ atm).

TABLE 3: H₂/air mixtures ($p_0 = 1$ atm, $T_0 = 298$ K): velocity D_{CJ} and chemical length ℓ_c^{CJ} for the self-sustained planar detonation, minimum velocity D_{CRIT} , maximum curvature κ_{CRIT} and chemical length ℓ_c^{CRIT} for the self-sustained critically curved detonation, and ratio $\ell_c^{CRIT}/\ell_c^{CJ}$ as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme

H ₂ /air $p_0 = 1$ atm $T_0 = 298$ K	Scheme	D_{CJ} (m/s)	D_{CRIT} (m/s)	κ_{CRIT} (m ⁻¹)	ℓ_c^{CJ} (mm)	ℓ_c^{CRIT} (mm)	$\ell_c^{CJ}/\ell_c^{CRIT}$
$\Phi = 0.36$	Konnov	1436	1393	0.026	71.50	209.5	2.93
	DMGD	1436	1392	0.009	272.0 ^{74%}	668.8 ^{69%}	2.46
$\Phi = 0.63$	Konnov	1748	1661	5.830	0.346	0.902	2.61
	DMGD	1749	1697	2.500	0.486 ^{29%}	1.330 ^{32%}	2.74
$\Phi = 1$	Konnov	1975	1797	21.00	0.148	0.466	3.15
	DMGD	1977	1838	13.40	0.158 ^{6%}	0.508 ^{8%}	3.22
$\Phi = 2$	Konnov	2147	1976	11.30	0.245	0.818	3.34
	DMGD	2150	2042	4.360	0.291 ^{16%}	0.934 ^{12%}	3.21
$\Phi = 3$	Konnov	2221	2110	2.980	0.580	1.710	2.95
	DMGD	2223	2134	0.610	1.320 ^{56%}	7.140 ^{76%}	5.41
$\Phi = 5.6$	Konnov	2310	2241	0.066	23.10	71.60	3.10
	DMGD	2311	2219	0.019	105.0 ^{78%}	343.1 ^{79%}	3.27

TABLE 4: H₂/air mixtures ($p_0 = 1$ atm, $T_0 = 298$ K): minimum radius R_{CRIT} for the self-sustained critically curved detonation, ratios R_{CRIT}/ℓ_c^{CJ} and R_{CRIT}/ℓ_c^{CRIT} as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme

H ₂ /air $p_0 = 1$ atm $T_0 = 298$ K	Scheme	$R_{CRIT} = 2/\kappa_{CRIT}$ (mm)	R_{CRIT}/ℓ_c^{CJ}	R_{CRIT}/ℓ_c^{CRIT}
$\Phi = 0.36$	Konnov	76.9×10^3	1076	367
	DMGD	233×10^3 ^{67%}	855	348
$\Phi = 0.63$	Konnov	343	991	380
	DMGD	800 ^{57%}	1646	602
$\Phi = 1$	Konnov	95.2	644	204
	DMGD	149 ^{36%}	945	294
$\Phi = 2$	Konnov	177	722	216
	DMGD	459 ^{61%}	1576	491
$\Phi = 3$	Konnov	671	1157	392
	DMGD	3290 ^{80%}	2492	461
$\Phi = 5.6$	Konnov	30.3×10^3	1312	423
	DMGD	104.2×10^3 ^{71%}	992	304

TABLE 5: H₂/air mixtures ($p_0 = 5$ atm, $T_0 = 298$ K): velocity D_{CJ} and chemical length ℓ_c^{CJ} for the self-sustained planar detonation, minimum velocity D_{CRIT} , maximum curvature κ_{CRIT} and chemical length ℓ_c^{CRIT} for the self-sustained critically curved detonation, and ratio $\ell_c^{CRIT}/\ell_c^{CJ}$ as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme

H ₂ /air $p_0 = 5$ atm $T_0 = 298$ K	Scheme	D_{CJ} (m/s)	D_{CRIT} (m/s)	κ_{CRIT} (m ⁻¹)	ℓ_c^{CJ} (mm)	ℓ_c^{CRIT} (mm)	$\ell_c^{CJ}/\ell_c^{CRIT}$
$\Phi = 0.36$	Konnov	1436	1379	0.039	66.40	202.8	3.05
	DMGD	1436	1379	0.019	186.0	451.7	2.43
$\Phi = 0.63$	Konnov	1756	1686	3.600	0.700	1.970	2.81
	DMGD	1758	1670	0.946	3.200	1.330	3.16
$\Phi = 1$	Konnov	2007	1907	30.00	0.079	0.270	3.42
	DMGD	2010	1929	8.130	0.272	0.860	3.16
$\Phi = 2$	Konnov	2161	2053	11.30	0.210	0.740	3.52
	DMGD	2163	2055	3.290	0.810	2.650	3.27
$\Phi = 3$	Konnov	2227	2138	2.610	0.930	2.600	2.80
	DMGD	2229	2117	0.979	3.100	9.000	2.90
$\Phi = 5.6$	Konnov	2311	2218	0.100	25.70	77.10	3.00
	DMGD	2312	2219	0.069	43.90	108.9	2.48

TABLE 6: H₂/air mixtures ($p_0 = 5$ atm, $T_0 = 298$ K): minimum radius R_{CRIT} for the self-sustained critically curved detonation, ratios R_{CRIT}/ℓ_c^{CJ} and R_{CRIT}/ℓ_c^{CRIT} as functions of the equivalence ratio Φ and the chemical kinetic scheme

H ₂ /air $p_0 = 5$ atm $T_0 = 298$ K	Scheme	$R_{CRIT} = 2/\kappa_{CRIT}$ (mm)	R_{CRIT}/ℓ_c^{CJ}	R_{CRIT}/ℓ_c^{CRIT}
$\Phi = 0.36$	Konnov	51.3×10^3	772	253
	DMGD	108×10^3	581	239
$\Phi = 0.63$	Konnov	556	794	282
	DMGD	2114	661	209
$\Phi = 1$	Konnov	66.7	844	247
	DMGD	246	904	286
$\Phi = 2$	Konnov	177	843	239
	DMGD	608	750	229
$\Phi = 3$	Konnov	766	824	295
	DMGD	2043	659	227
$\Phi = 5.6$	Konnov	20.1×10^3	781	260
	DMGD	28.9×10^3	658	265

For H₂/air mixtures initially at 1 atm, the choice of the chemical scheme does not practically modify the CJ and critical chemical lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} of the stoichiometric composition. However, a stronger influence is obtained for lean and rich compositions, with relative differences in ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} that range from 20% to 80% [Tables 3 and 5, Figs. 3(a) and 3(d)]. Importantly, increasing the initial pressure to 5 atm results in a stronger influence of the chemical scheme on all chemical lengths of H₂/air mixtures, regardless of the equivalence ratio Φ . The smaller values are obtained with the Konnov mechanism, regardless of the initial pressure p_0 . The larger the initial pressure and the farther the equivalence ratio from stoichiometry, the higher the sensitivity. Also, sensitivity is higher for ℓ_c^{CRIT} than for ℓ_c^{CJ} . The interpretation is that the considered schemes implement different N–O chemical kinetics but have been calibrated about stoichiometry to match the same data in a narrow range of initial pressures close to ambient.

The smallest minimum radii R_{CRIT} (the largest curvatures κ_{CRIT}) are obtained for the stoichiometric mixtures. Given the initial pressure and the equivalence ratio, H₂/air mixtures have larger R_{CRIT} than H₂/O₂ mixtures due to dilution by N₂. The H₂/air minimum radii decrease when initial pressure increases. The chemical scheme strongly influences the R_{CRIT} values, regardless of the composition, the equivalence ratio, and the initial pressure. Typical relative differences range is from 20% to 80%, for all mixtures. Sensitivity of R_{CRIT} to chemical kinetics for H₂/O₂ mixtures is thus observed to be larger by an order of magnitude than that of ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} . The critical detonation velocity D_{CRIT} is also sensitive to the chemical scheme but to a lesser extent than the critical radius and the chemical lengths. Smaller R_{CRIT} are obtained with the Konnov mechanism. The trends, therefore the interpretations, for R_{CRIT} are similar to those for the chemical lengths ℓ_c^{CJ} and ℓ_c^{CRIT} because the inviscid reactive fluid model and the boundary conditions implemented in the calculations (see Section 2) do not provide any other reference length than those relating to chemical kinetics that could be used to scale the dynamic parameters of detonation such as the critical radius. The critical chemical length ℓ_c^{CRIT} is observed to be a better choice for nondimensionalizing the critical radius R_{CRIT} [Tables 1, 3, and 5, Figs. 1(e), 3(b), and 3(e)]. Indeed, the ratio $R_{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CRIT}}$ shows little sensitivity to equivalence ratio, regardless of the chemical scheme. This observation is consistent with that above relating to the ratio $\ell_c^{\text{CRIT}}/\ell_c^{\text{CJ}}$.

4. CONCLUSION

This analysis is based on the hypothesis that sensitivity to chemical kinetics can be more simply assessed by using simple hydrodynamics instead of unsteady 3D numerical simulations. In this work, a ZND reaction-zone description that includes weak divergence effects was used to calculate two characteristic lengths of detonation dynamics, the chemical length of the one-dimensional, planar (ℓ_c^{CJ}) or critically curved (ℓ_c^{CRIT}), self-sustained detonation, and the minimum (critical) radius R_{CRIT} of the spherically diverging self-sustained detonation. Their importance lies in the experimental correlations

between these lengths and the mean width λ_{CJ} of the cellular instability observed on the self-sustained detonation fronts in gases, i.e., $\lambda_{CJ}/\ell_c^{CJ} \approx 15\text{--}30$ (Schelkin and Troshin, 1963) and $R_{CRIT}/\lambda_{CJ} \approx 20\text{--}25$ for slightly diluted or nondiluted mixtures (e.g., C_2H_2/O_2 , H_2/air , C_3H_8/air) and $R_{CRIT}/\lambda_{CJ} \approx 40\text{--}50$ for strongly diluted mixtures (i.e., Ar, He, Kr) (Desbordes, 1995; Sochet et al., 1999; Zhang et al., 2012). Two chemical kinetic mechanisms were implemented, Konnov (2000) and DMGD (Dagaut et al., 1991; Djebaili-Chaumeix et al., 1997; Guirguis et al., 1985; Miller and Bowman, 1989), to estimate the characteristic lengths ℓ_c^{CJ} , ℓ_c^{CRIT} and R_{CRIT} for H_2/O_2 and H_2/air mixtures at different equivalence ratios and initial pressures.

- The calculations show that these characteristic lengths are very sensitive to the choice of the chemical kinetics network, with discrepancies ranging from 20% to 80%.
- Calculated and measured values of R_{CRIT} are found to be of the same order (Table 7), regardless of the chemical kinetic mechanism, despite the large dispersion on experimental cell sizes (Kaneshige and Shepherd, 1997) and some variations in the critical radius definition (Sochet et al., 1999; Zhang et al., 2012), with typically 50% to 100% discrepancies. This supports the premise of the present work to assess sensitivity from a hydrodynamic model rather than detailed numerical simulations. Nevertheless, differences between experiments and calculations are very important.
- These large differences on R_{CRIT} are of the same order as those between chemical kinetic schemes and those between experimental data themselves. Consequently, the same high sensitivity should be expected from numerical simulations, and chemical kinetics should require proper calibration to reproduce experimental detonation dynamics.
- The choice of the chemical kinetic scheme is found to have a stronger influence on the chemical lengths of H_2/air compositions when initial pressure is increased,

TABLE 7: Stoichiometric H_2/O_2 and H_2/air mixtures ($p_0 = 1$ atm, $T_0 = 298$ K): comparisons of calculated and measured (or correlated) critical radius R_{CRIT} of the self-sustained critically curved detonation ([D], Desbordes (1995), [S], Sochet et al. (1999), and [Z], Zhang et al. (2012))

$p_0 = 1$ atm $\Phi_0 = 1$	Scheme	R_{CRIT} (mm)	$R_{CRIT}^{[D]}$	Error	$R_{CRIT}^{[S]}$	Error	$R_{CRIT}^{[Z]}$	Error
H_2/O_2	Konnov	12.0	/	/	~30	60%	~40	70%
	DMGD	15.9 (25%)				47%		60%
H_2/air	Konnov	95.2	~160	41%	~370	74%	/	/
	DMGD	149 (36%)				7%		

regardless of equivalence ratio. Special attention should thus be paid to the extent of the initial-state domain in which a chemical kinetic scheme is calibrated, particularly in the context of detonation-based propulsive devices (pulsed or rotating detonation engines) for which precompression of the fresh gas can be used to improve efficiency.

- This sensitivity can also be emphasized by serving as a reminder that small changes in the initial state are sufficient to induce large changes in the chemical lengths, associated with a given chemical kinetic scheme. Indeed, the order of the relative change in the chemical lengths is the large number E_a/R_gT_H (typically 15 to 30) where E_a is the activation energy of the energy release rate representative of the chemical kinetic scheme, R_g the universal gas constant and T_H the postshock temperature.

As indicated in Section 1, most reactive mixtures release their heat in one energetic step, and their ZND reaction profiles show two domains, induction and reaction, each characterized by its own length. The chemical length ℓ_c considered in this work is taken at the inflexion point of the temperature profiles and is intermediate between the end of induction and the end of reaction. This choice of ℓ_c is indeed a convenient tool for analyzing experiments. However, the correlation factor $k = \lambda_{CJ}/\ell_c^{CJ}$ is calibrated by fitting cell measurements to calculated ℓ_c 's for only some initial conditions of a given mixture or some equivalence ratios at a given set of initial conditions. The correlation is thus useful for estimating cell widths for initial conditions more difficult to generate but is restricted to the mixture in question and to a limited range of initial conditions about the calibration point. A better approach would be to analyze experiments and numerical simulations by means of two chemical lengths, representative of induction and reaction, respectively (Ng and Zhang, 2012), rather than a single chemical length. Similarly, chemical scheme calibrations of global or simplified chemical kinetics should also account for these two lengths (Vidal et al., 2012).

The predictive ability of simulation should thus be considered with caution, especially if detailed chemical schemes are implemented, and detonation studies should remain driven by experiments and sound dimensional analysis. More fundamental work aimed at improving high-pressure, high-temperature chemical kinetics is necessary before numerical simulation can be used as an effective design tool for detonation-based propulsive devices such as pulsed or rotating detonation engines.

ACKNOWLEDGMENTS

This work is part of the CAPA research program on Alternative Combustion Mode for Air-breathing Propulsion supported by SAFRAN, MBDA Missiles systems and the French National Research Agency (ANR).

REFERENCES

- Bach, G. G., Knystautas, R., and Lee, J. H. S., Initiation criteria for diverging gaseous detonations, *Proc. of the 13th Symp. (Int.) on Comb.*, pp. 1097–1110, 1971.
- Canteins, G., *Etude de la détonation continue rotative: Application à la propulsion*, Ph.D. Thesis, University of Poitiers, 2006.
- Dagaut, P., Boettner, J. C., and Cathonet, M., Methane oxidation: Experimental and kinetic modeling study, *Combust. Sci. Tech.*, vol. **77**, pp. 127–148, 1991.
- Denisov, Y. N. and Troshin, Y. K., Pulsating and spinning detonation of gaseous mixtures in tubes, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, vol. **125**, pp. 110–113, 1959.
- Desbordes, D., Critical initiation conditions for gaseous diverging spherical detonations, *J. Phys.*, vol. **4**, no. 5, pp. 155–162, 1995.
- Djebaïli-Chaumeix, N., Abid, S., and Paillard, C. E., Shock-tube study of the nitromethane decomposition and oxidation, *Proc. of 21st Int. Symp. on Shock Waves*, vol. **1**, pp. 121–126, 1997.
- Fickett, W. A. and Davis, W. C., *Detonation*, University of California Press, 1979.
- Guirguis, R., Hsu, D., Bogan, D., and Oran, E., A mechanism for ignition of high-temperature gaseous nitromethane. The key role for nitro group in chemical explosives, *Combust. Flame*, vol. **61**, pp. 51–62, 1985.
- He, L. T., Theoretical determination of the critical conditions for the direct initiation of detonations in hydrogen-oxygen mixtures, *Combust. Flame*, vol. **104**, no. 4, pp. 401–418, 1996.
- Higgins, A., Steady one-dimensional detonation, In *Shock Wave Science and Technology Library: Detonation Dynamics*, F. Zhang, Ed., Vol. 6, Springer-Verlag, Berlin, pp. 33–105, 2012.
- Kailasanath, K., Review of propulsion applications of detonation waves, *AIAA J.*, vol. **38**, no. 9, pp. 1698–1708, 2000.
- Kaneshige, M. and Shepherd, J. E., Detonation database, http://www2.galcit.caltech.edu/detn_db/html/db.html, 1997.
- Konnov, A. A., Development and validation of a detailed reaction mechanism for the combustion of small hydrocarbons, *Proc. of the 28th Symp. (Int.) on Comb.*, p. 317, 2000.
- Miller, J. A. and Bowman, C. T., Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion, *Prog. Energy Comb. Sci.*, vol. **15**, pp. 287–338, 1989.
- Mitrofanov, V. V. and Soloukhin, R. I., On the instantaneous diffraction of detonation, *Soviet Phys. Dokl.*, vol. **159**, no. 5, pp. 1003–1006, 1964.
- Ng, H. D. and Zhang, F., Detonation instability, In *Shock Wave Science and Technology Library: Detonation Dynamics*, F. Zhang, Ed., Vol. 6, Springer-Verlag, Berlin, pp. 107–212, 2012.
- Oran, E. S. and Gamezo, V. N., Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion, *Combust. Flame*, vol. **148**, no. 1-2, pp. 4–47, 2007.
- Roy, G. D., Frolov, S. M., Borisov, A. A., and Netzer, D. W., Pulse detonation propulsion: Challenges, current status, and future perspective, *Prog. Energy Comb. Sci.*, vol. **30**, no. 6, pp. 546–672, 2004.
- Schelkin, K. I. and Troshin, Y. K., *Gazodinamika Goreniya*, Izdatel'stvo Akademii Nauk SSSR,

Moscow, 1963.

Sochet, I., Lamy, T., Brossard, J., Vaglio, C., and Cayzac, R., Critical tube diameter for detonation transmission and critical initiation energy of spherical detonation, *Shock Waves*, vol. **9**, no. 2, pp. 113–123, 1999.

Stewart, D. S. and Bdzil, J. B., A lecture on detonation shock dynamics, in *Mathematical Modeling in Combustion Science*, Lecture Notes in Physics, Vol. 299, J. D. Buckmaster and T. Takeno, Eds., Springer-Verlag, Berlin, pp. 17–30, 1988.

Stewart, D. S. and Kasimov, A. R., State of detonation stability theory and its application to propulsion, *J. Prop. Power*, vol. **22**, no. 6, pp. 1230–1244, 2006.

Vidal, P., Bouton, E., and Pagnanini, L., Modeling detonation in liquid explosives: The effect of the inter-component transfer hypothesis on chemical lengths and critical diameters, *Combust. Flame*, vol. **159**, no. 1, pp. 396–408, 2012.

Zhang, B., Ng, H. D., and Lee, J. H. S., Measurement and scaling analysis of critical energy for direct initiation of gaseous detonations, *Shock Waves*, vol. **22**, no. 3, pp. 275–279, 2012.

Annexe C

Circuit d'injection

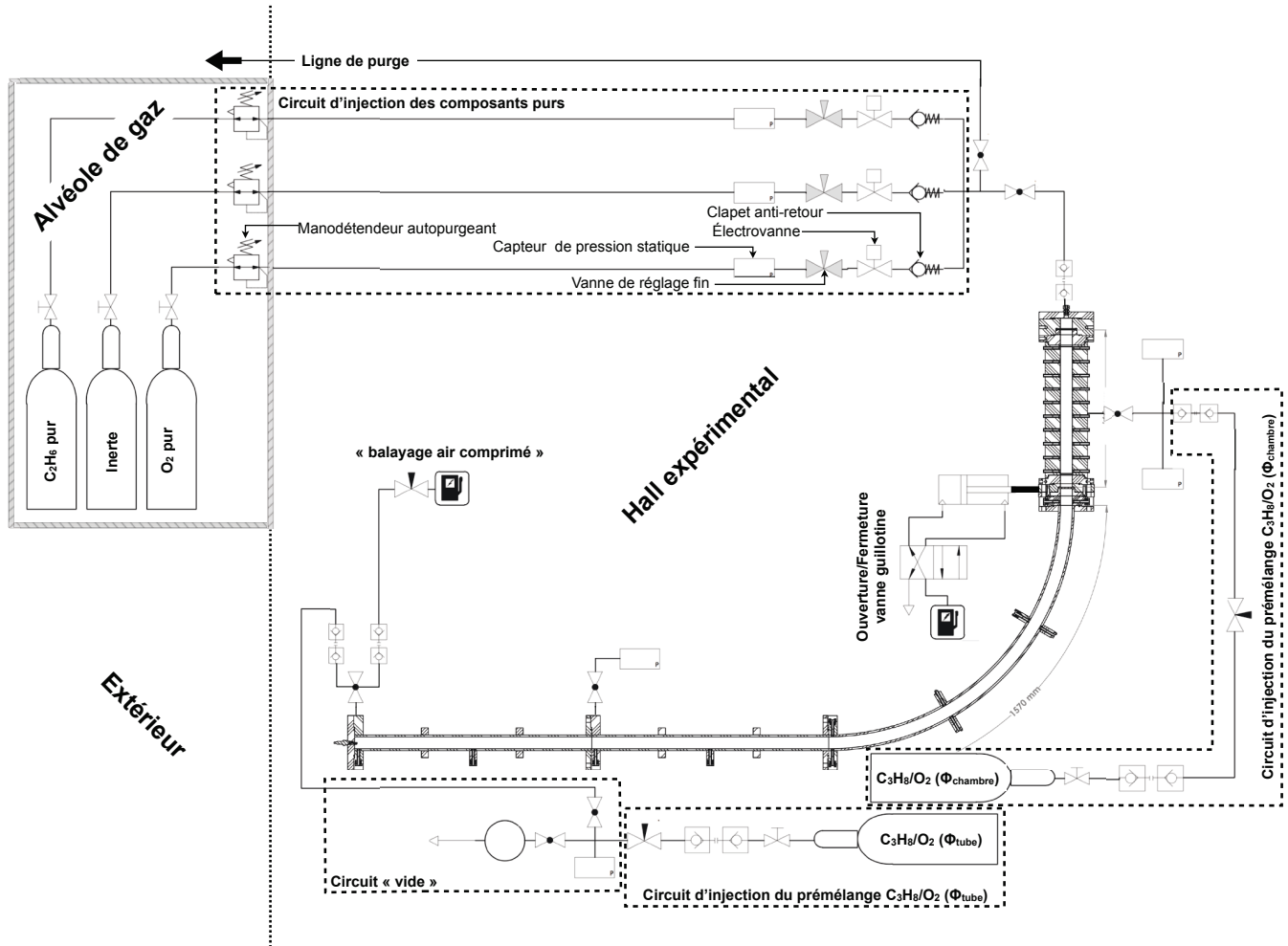


FIGURE C.1 – Circuit pneumatique d'injection automatisée.

Annexe D

Séquence de mise à feu

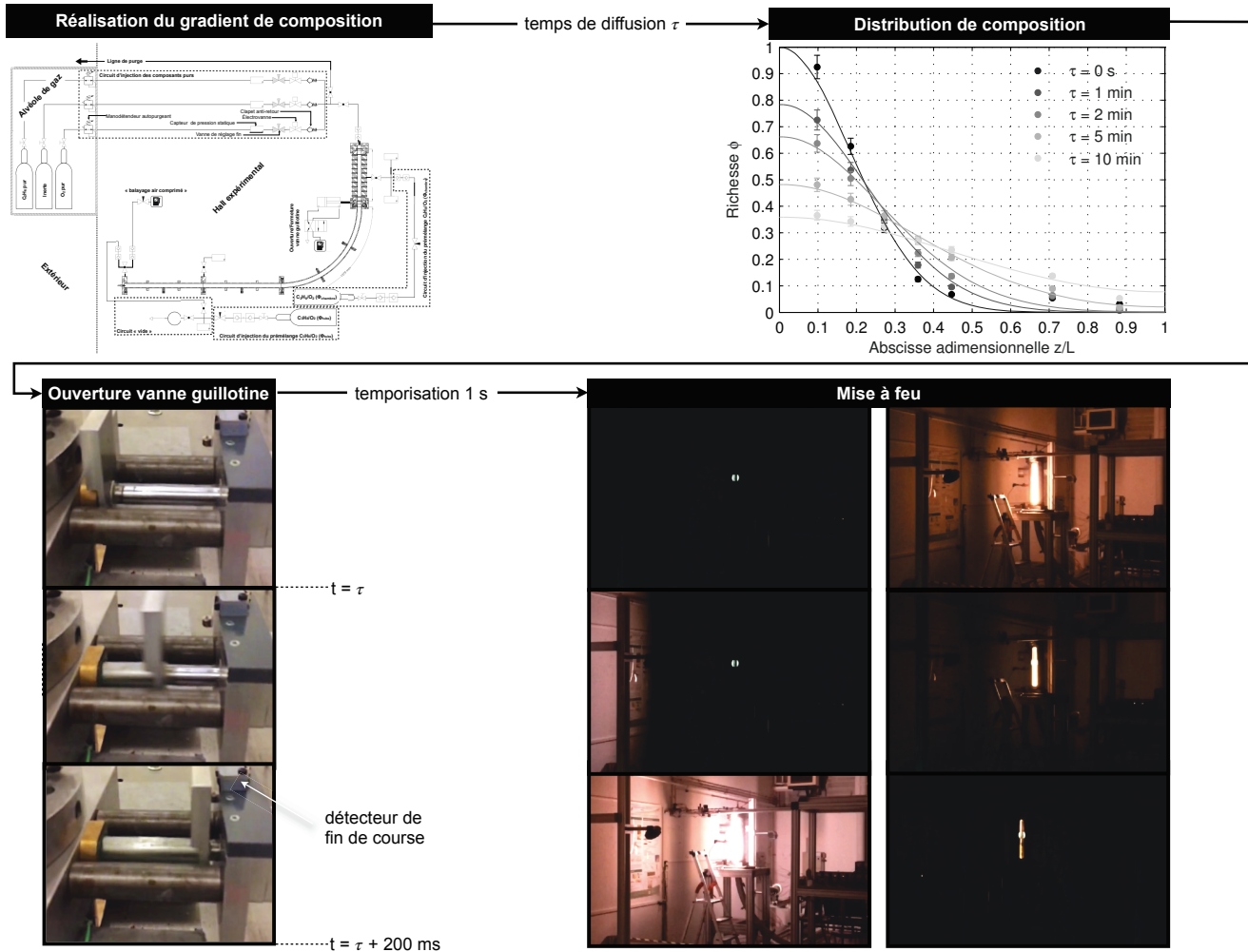


FIGURE D.1 – Séquence de mise à feu.

Annexe E

Propriétés de détonation des mélanges étudiés

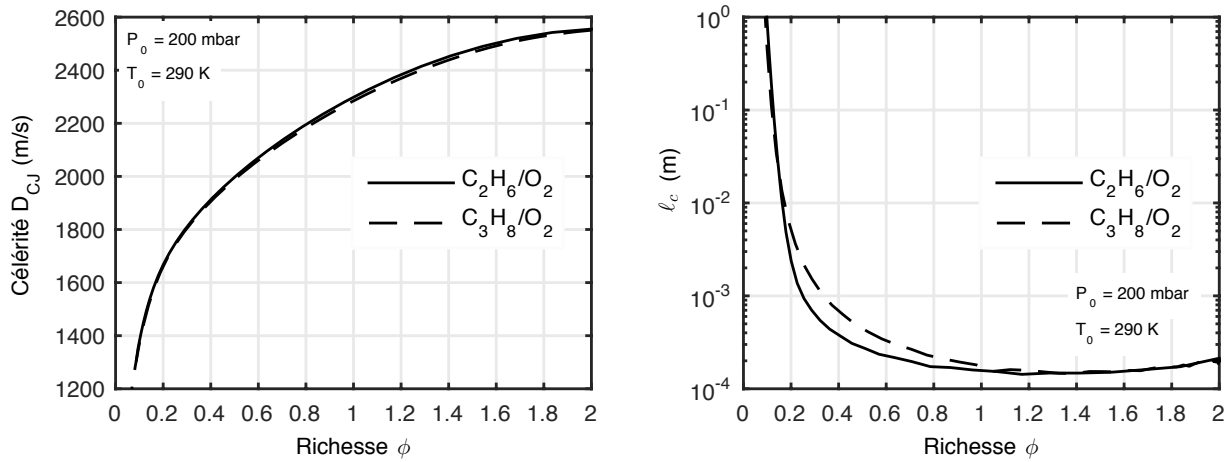


FIGURE E.1 – Célérité D_{CJ} de la détonation CJ (gauche) et longueur caractéristique l_c de la zone de réactions du modèle ZND stationnaire plan (droite) – calculé avec le mécanisme cinétique de San Diego [31] – en fonction de la richesse ϕ des mélanges C_2H_6/O_2 et C_3H_8/O_2 aux conditions initiales de pression et de température $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K.

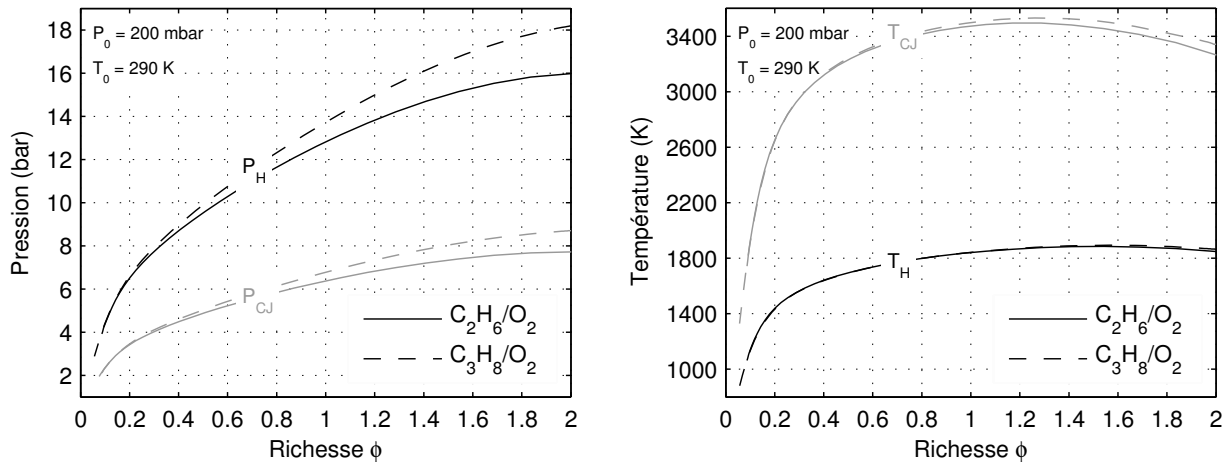


FIGURE E.2 – Pressions P_H , P_{CJ} (gauche) et températures T_H , T_{CJ} (droite) des états choqué (H) et brûlé (CJ) du modèle ZND stationnaire plan pour la détonation autonome ($D = D_{CJ}$) – calculées avec le mécanisme cinétique de San Diego [31] – en fonction de la richesse ϕ des mélanges C_2H_6/O_2 et C_3H_8/O_2 aux conditions initiales de pression et de température $P_0 = 200$ mbar et $T_0 = 290$ K.

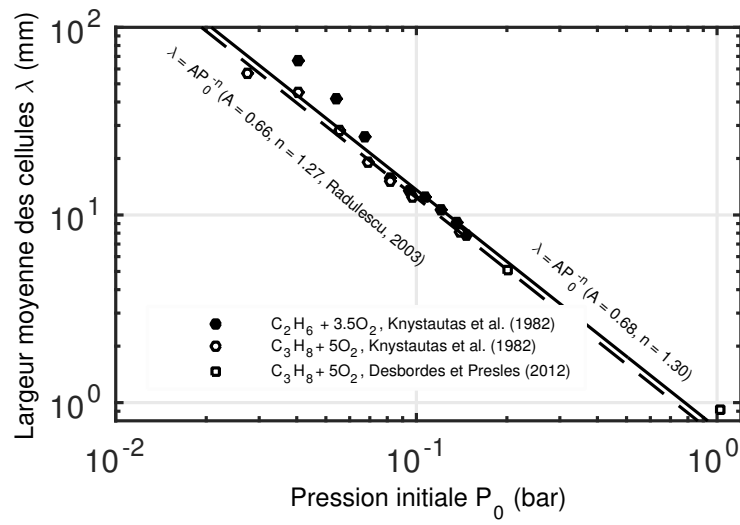


FIGURE E.3 – Largeur moyenne λ des cellules de détonation des mélanges C_2H_6/O_2 et C_3H_8/O_2 stœchiométriques en fonction de la pression initiale P_0 (DESBORDES et PRESLES [34] et KNYSTAUTAS et al. [71]).

Bibliographie

- [1] F. E. MALLARD et H. LE CHATELIER. Recherches expérimentales et théoriques sur la combustion des mélanges gazeux explosifs. *Annales des Mines série 8 4* (1883), 274–376.
- [2] F.A. ABEL. Nouvelles études sur les propriétés des corps explosibles. *C.R. Acad. Sci.* 69 (1869), 105–121.
- [3] M. BERTHELOT et P. VIEILLE. L'onde explosive. *Ann. Chim. Phys.* 5 28 (1883), 289–332.
- [4] H.B. DIXON. The Rate of Explosion in Gases. *Phil. Trans. R. Soc. A* 184 (1893), 97–188.
- [5] D.L. CHAPMAN. On the Rate of Explosion in Gases. *Philos. Mag.* 5 47 (1899), 90–104.
- [6] E. JOUGUET. Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz. *J. Math. Pures Appl.* 1 (1905), 337–425.
- [7] Y. B. ZEL'DOVICH. Pressure and velocity distributions in the detonation products of a divergent spherical wave. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 12 (1942), 389–406.
- [8] G.I. TAYLOR. The dynamics of the combustion products behind plane and spherical detonation fronts in explosives. *Proc. Royal Society A* 200 (1950), 235–247.
- [9] P. VIEILLE. Rôle des discontinuités dans la propagation des phénomènes explosifs. *C.R. Acad. Sci.* 131 (1900), 413–416.
- [10] Y. B. ZEL'DOVICH. K Teorii Rasprostraneniya Detonatsii v Gasoobraznykh Sistemakh (De la théorie de la propagation des détonations dans un système gazeux). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 10 (1940), 542–568.
- [11] J. von NEUMANN. Theory of Detonation Waves. Rapp. tech. Institute for Advanced Study, Princeton, NJ, USA (1942).
- [12] W. DÖRING. Über den Detonationsvorgang in Gasen (Sur le processus de détonation dans les gaz). *Ann. Phys.* 43 (1943), 421–436.
- [13] Y.N. DENISOV et Y.K. TROSHIN. Pulsating and spinning detonation of gaseous mixtures in tubes. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 125 (1959), 110–113.
- [14] K. ISHIHARA, Y. KATO, K. MATSUOKA, J. KASAHARA, A. MATSUO et I. FUNAKI. Performance Evaluation of a Rotating Detonation Engine with Conical-Shape Tail. *AIAA SciTech* (630) (2015).
- [15] J.A. NICHOLLS, H.R. WILKINSON et R.B. MORRISON. Intermittent Detonation as a Thrust-Producing Mechanism. *J. Jet Prop.* 27(5) (1957), 534–541.
- [16] J.A. NICHOLLS, R.E. CULLEN, G.L. COSENS, M. SICHEL, E. KURATH, F. CHESLAK, G. OLSSON, J. FU, T. DAVID, J. BROWN et K. RAGLAND. The feasibility of a rotating detonation wave rocket engine motor. Rapp. tech. University of Michigan, Aircraft Propulsion Laboratory, Ann Arbor, MI, USA (1962).
- [17] B.V. VOITSEKHOVSKII. Stationary spin detonation. *Zh. Prikl. Mekh. Tekh. Fiz.* 3 (1960), 157–164.

- [18] G.D. ROY, S.M. FROLOV, A.A. BORISOV et D.W. NETZER. Pulse detonation propulsion : challenges, current status, and future perspective. *Prog. Energy Combust. Sci.* 30(6) (2004), 545–672.
- [19] F. FALEMPIN et B. LE NAOUR. R&T Effort on Pulsed and Continuous Detonations Wave Engines. AIAA (7294) (2009).
- [20] M. BELLENOUE, B. BOUST, P. VIDAL, R. ZITOUN, T. GAILLARD, D. DAVIDENKO, M. LEYKO et B. LE NAOUR. New combustion concepts to enhance the thermodynamic efficiency of propulsion engines. *J. AerospaceLab* 11 (2016), AL11–12.
- [21] M.L. COLEMAN. Overview of Pulse Detonation Propulsion Technology, Report CPTR 70. Rapp. tech. Chemical Propulsion Information Agency, Columbia, MD, USA (2001).
- [22] A. LENTSCH, R. BEC, L. SERRE, F. FALEMPIN, E. DANIAU, D. PITON, A. PRIGENT, G. CANTEINS, R. ZITOUN, D. DESBORDES, F. JOUOT et I. GÖKALP. Overview of Current French Activities on PDRE and Continuous Detonation Wave Rocket Engines. AIAA (3232) (2005).
- [23] K. KAILASANATH. The Rotating-Detonation-Wave Engine Concept : A Brief Status report. 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. Orlando, FL, USA (2011).
- [24] D.R. WILSON et F.K. LU. Summary of Recent Research on Detonation Wave Engines at UTA. Int. Workshop on Detonation for Propulsion. Busan, Corée du Sud (2011).
- [25] P. WOLANSKI. Detonative propulsion. *Proc. Combust. Inst.* 34(1) (2013), 125–158.
- [26] J. KASAHARA et S.M. FROLOV. Present Status of Pulse and Rotating Detonation Engine Research. Proc. 25th Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS). University of Leeds, Royaume-Uni (2015).
- [27] B.A. RANKIN, D.R. RICHARDSON, A.W. CASWELL, A.G. NAPLES, J.L. HOKE et F.R. SCHAUER. Chemiluminescence imaging of an optically accessible non-premixed rotating detonation engine. *Combust. Flame* 176 (2017), 17–22. DOI : [10.1016/j.combustflame.2016.09.020](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.09.020).
- [28] G. CANTEINS. Étude de la détonation continue rotative - Application à la propulsion. École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, Futuroscope-Chasseneuil, France (2006).
- [29] B. REYNOLDS. Stanjan, an interactive program for equilibrium analysis by method of element potentials, version 3.81. Rapp. tech. Stanford University, Mechanical Engineering Department, Palo Alto, CA, USA (1988).
- [30] R. COURANT et K.O. FRIEDRICHS. *Supersonic Flow and Shock Waves (Applied Mathematical Sciences)*. Springer, Berlin (1948).
- [31] F.A. WILLIAMS, R.J. CATTOLICA et K. SESHADRI. The San Diego Mechanism (2016). URL : <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>.
- [32] S. BOULAL, P. VIDAL, R. ZITOUN et J. LUCHE. The sensitivity of chemical kinetics with two characteristic lengths of detonation dynamics in homogeneous gases. *Int. J. Energetic Materials Chem. Prop.* 14(6) (2015), 499–517.
- [33] H.D. NG et F. ZHANG. Detonation Instability. *Shock Wave Science and Technology Reference Library*. Sous la dir. de F. ZHANG. T. 6. Springer, Berlin (2012), 107–212.

- [34] D. DESBORDES et H.N. PRESLES. Multi-Scaled Cellular Detonation. Shock Wave Science and Technology Reference Library. Sous la dir. de F. ZHANG. T. 6. Springer, Berlin (2012), 281–338.
- [35] A.K. OPPENHEIM. Novel insight into the structure and development of detonation. *Astronautica Acta* 11(6) (1965), 391–400.
- [36] R.A. STREHLOW et A.J. CROOKER. The structure of marginal detonation waves. *Acta Astronautica* 1 (1974), 303–315.
- [37] M. DORMAL, J.C. LIBOUTON et P.J. van TIGGELEN. Evolution of induction time in detonation cells. *Acta Astronautica* 6(7-8) (1979), 875–884.
- [38] R.A. STREHLOW. Gas phase detonations : Recent developments. *Combust. Flame* 12(2) (1968), 81–101.
- [39] J.C. LIBOUTON, A. JACQUES et P.J. van TIGGELEN. Cinétique, structure et entretien des ondes de détonation. Proc. 1st Specialist Meeting (Int.) of the Combustion Institute. T. 2. Section Française du Combustion Institute. Université de Bordeaux, Talence, France (1981), 437–442.
- [40] A.A. VASIL'EV, V.V. MITROFANOV et M.E. TOPCHIAN. Detonation waves in gases. *Combust. Expl. Shock Waves* 23(5) (1987), 605–623.
- [41] V.N. GAMEZO, D. DESBORDES et E.S. ORAN. Formation and Evolution of Two-dimensional Cellular Detonations. *Combust. Flame* 116(1-2) (1999), 154–165.
- [42] H.N. PRESLES, D. DESBORDES et P. BAUER. An Optical Method for the Study of the Detonation Front Structure in Gaseous Explosive Mixtures. *Combust. Flame* 70(2) (1987), 207–213.
- [43] K. I. SHCHELKIN et Y. K. TROSHIN. Gas-dynamics of Combustion. Mono Book Corp, Baltimore, MD, USA (1965).
- [44] J.H.S. LEE. The Detonation Phenomenon. Cambridge University Press, New York, NY, USA (2008).
- [45] A.I. GAVRIKOV, A.A. EFIMENKO et S.B. DOROFEEV. A Model for Detonation Cell Size Prediction from Chemical Kinetics. *Combust. Flame* 120(1) (2000), 19–33.
- [46] H.D. NG. The effects of chemical reaction kinetics on the structure of gaseous detonation waves. McGill University, Montréal, Canada (2005).
- [47] P. CLAVIN. Nonlinear dynamics of shock and detonation waves in gases. *Combust. Sci. Technol.* (2016). DOI : [10.1080/00102202.2016.1260562](https://doi.org/10.1080/00102202.2016.1260562).
- [48] M. KANESHIGE et J.E. SHEPHERD. Detonation database (1997). URL : http://shepherd.caltech.edu/detn_db/html/db.html.
- [49] C. CAMPBELL et D.N. WOODHEAD. Striated Photographic Records of Explosion Waves. *J. Chem. Soc.* 130 (1927), 1572–1578.
- [50] N. MANSON. Sur la structure des ondes explosives dites hélicoïdales dans les mélanges gazeux. *C.R. Acad. Sci.* 222 (1946), 46–48.
- [51] J.A. FAY. A Mechanical Theory of Spinning detonation. *J. Chem. Phys.* 20(6) (1952), 942–950.
- [52] B.T. CHU. Vibration of the Gaseous Column Behind a Strong Detonation wave. Proc. Gas-Dynamics Symposium on Aerothermochemistry. North-western University, Evanston, IL, USA (1956), 95–111.

- [53] G.L. SCHOTT. Observations of the Structure of Spinning Detonation. *Physics of Fluids* 8(5) (1965), 850–865.
- [54] B.V. VOITSEKHOVSKII, V.V. MITROFANOV et M.E. TOPCHIAN. Structure of the detonation front in gases (survey). *Combust. Expl. Shock Waves* 5(3) (1969), 267–273.
- [55] Z.W. HUANG, M.H. LEFEBVRE et P.J. van TIGGELEN. Experiments on spinning detonations with detailed analysis of the shock structure. *Shock Waves* 10(2) (2000), 119–125.
- [56] F. VIROT. Contribution à l'étude expérimentale et numérique du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes H_2 , CH_4 , $C_2H_6-O_2$ dilués ou non par N_2 ou Ar. École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, Futuroscope-Chasseneuil, France (2009).
- [57] J.H.S. LEE, R.I. SOLOUKHIN et A.K. OPPENHEIM. Current views on gaseous detonation. *Astronautica Acta* 14 (1969), 565–584.
- [58] C. WANG, C.W. SHU, W. HAN et J. NING. High resolution WENO simulation of 3D detonation waves. *Combust. Flame* 160(2) (2013), 447–462.
- [59] A.A. VASIL'EV. Dynamic Parameters of Detonation. *Shock Wave Science and Technology Reference Library*. Sous la dir. de F. ZHANG. T. 6. Springer, Berlin (2012), 213–279.
- [60] N. MANSON, C. BROCHET, J. BROSSARD et Y. PUJOL. Vibratory phenomena and instability of self-sustained detonation in gases. 9th Symp. (Int.) Combust. The Combustion Institute. Cornell University, Ithaca, NY, USA (1963), 441–469.
- [61] V.Y. UL'YANITSKII. Galloping mode in a gas detonation. *Combust. Expl. Shock Waves* 17(1) (1981), 93–97.
- [62] V.I. MANZHALEI. Detonation regimes of gases in capillaries. *Combust. Expl. Shock Waves* 28(3) (1992), 296–301.
- [63] A.A. VASIL'EV. Quasi-steady regimes of wave propagation in active mixtures. *Shock Waves* 18(4) (2008), 245–253.
- [64] V.N. GAMEZO, A.A. VASIL'EV, A.M. KHOKHLOV et E.S. ORAN. Fine cellular structures produced by marginal detonations. *Proc. Combust. Inst.* 28(1) (2000), 611–617.
- [65] H.S. DOU, H.M. TSAI, B.C. KHOO et J. QIU. Simulations of detonation wave propagation in rectangular ducts using a three-dimensional WENO scheme. *Combust. Flame* 154(4) (2008), 644–659.
- [66] Y. HUANG, H. JI, F. LIEN et H. TANG. Numerical study of three-dimensional detonation structure transformations in a narrow square tube : from rectangular and diagonal modes into spinning modes. *Shock Waves* 24(4) (2014), 375–392.
- [67] N. TSUBOI, M. ASAHARA, K. ETO et A. K. HAYASHI. Numerical simulation of spinning detonation in square tube. *Shock Waves* 18 (2008), 329–344.
- [68] N. TSUBOI, Y. MORII et A.K. HAYASHI. Two-dimensional numerical simulation on galloping detonation in a narrow channel. *Proc. Combust. Inst.* 34(2) (2013), 1999–2007.
- [69] Y. SUGIYAMA. Numerical Study on Propagation Behaviors of Gaseous Detonation in Two- and Three-Dimensional Tubes. Keio University, Yokohama, Japon (2013).

- [70] D. DESBORDES. Aspects stationnaires et transitoires de la détonation dans les gaz : relation avec la structure cellulaire du front. Université de Poitiers, Poitiers, France (1990).
- [71] R. KNYSTAUTAS, J.H.S. LEE et C.M. GUIRAO. The Critical Tube Diameter for Detonation Failure in Hydrocarbons-Air Mixtures. *Combust. Flame* 48 (1982), 63–83.
- [72] D. DESBORDES. Critical initiation conditions for gaseous diverging spherical detonations. *J. Phys.* IV 5 (1995), 155–162.
- [73] I. SOCHET, T. LAMY, J. BROSSARD, C. VAGLIO et R. CAYZAC. Critical tube diameter for detonation transmission and critical initiation energy of spherical detonation. *Shock Waves* 9(2) (1999), 113–123.
- [74] G.G. BACH, R. KNYSTAUTAS et J.H.S. LEE. Direct initiation of spherical detonations in gaseous explosives. 12th Symp. (Int.) Combust. The Combustion Institute. Université de Poitiers, Poitiers, France (1969), 853–864.
- [75] R.F. CHISNELL. The normal motion of a shock wave through a non-uniform one-dimensional medium. *Proc. Royal Society A* 232 (1955), 350–370.
- [76] Y. ÔNO, S. SAKASHITA et H. YAMAZAKI. Propagation of Shock Waves in Inhomogeneous Gases. *Prog. Theor. Phys.* 23(2) (1960), 294–304.
- [77] H. YAMAZAKI. Instability of Shock Waves in Inhomogeneous Gases. *Prog. Theor. Phys.* 48(6A) (1972), 1860–1869.
- [78] C. CHARIGNON. Transition Déflagration-Détonation dans les Supernovæ Thermonucléaires. Université Paris-Sud, Orsay, France (2013).
- [79] T. HIRANO, T. SUZUKI, I. MASHIKO et K. IWAI. Flame propagation through mixtures with concentration gradient. 16th Symp. (Int.) Combust. The Combustion Institute. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, USA (1977), 1307–1315.
- [80] P. GIRARD, M. HUNEAU, C. RABASSE et J.C. LEYER. Flame propagation through unconfined and confined hemispherical stratified gaseous mixtures. 17th Symp. (Int.) Combust. The Combustion Institute. University of Leeds, Royaume-Uni (1979), 1247–1255.
- [81] G.A. KARIM et H.T. LAM. Ignition and flame propagation within stratified methane-air mixtures formed by convective diffusion. 21st Symp. (Int.) Combust. T. 1. The Combustion Institute. Technical University of Munich, Allemagne (1988), 1909–1915.
- [82] G.A. KARIM et V.P. PANLILIO. Flame propagation and extinction within mixtures involving hydrogen and diluent inert gases in air. *Int. J. Hydrogen Energy* 18(2) (1993), 157–161.
- [83] D.R. WHITEHOUSE, D.R. GREIG et G.W. KOROLL. Combustion of stratified hydrogen-air mixtures in the 10.7 m³ combustion test facility cylinder. *Nucl. Eng. Des.* 166(3) (1996), 453–462.
- [84] F.J. MILLER, J.W. EASTON, A.J. MARCHESE et H.D. ROSS. Gravitational effects on flame spread through non-homogeneous gas layers. *Proc. Combust. Inst.* 29(2) (2002), 2561–2567.

- [85] N. LAMOUREUX, F. MALET, N. DJEBAÏLI-CHAUMEIX, A. BENTAIB, A. BLEYER et C.E. PAILLARD. H₂ Gradient Effect on Premixed Flame Propagation in a Vertical Facility : ENACCEF. Proc. 20th Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS). McGill University, Montréal, Canada (2005).
- [86] J. DAUBECH, I. SOCHET et C. PROUST. Flame front perturbations induced by concentration gradients. Proc. 21st Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS). ENSMA, Futuroscope-Chasseneuil, France (2007).
- [87] S. MUKHOPADHYAY et J. ABRAHAM. Influence of compositional stratification on autoignition in n-heptane/air mixtures. *Combust. Flame* 158(6) (2011), 1064–1075.
- [88] Y. B. ZEL'DOVICH. Regime Classification of an Exothermic Reaction with Nonuniform Initial Conditions. *Combust. Flame* 39(2) (1980), 211–214.
- [89] M. SHORT. The initiation of detonation from general non-uniformly distributed initial conditions. *Phil. Trans. R. Soc. A* 353 (1995), 173–203.
- [90] C. QI, O. DAI, H. YU et Z. CHEN. Different modes of reaction front propagation in n-heptane/air mixture with concentration non-uniformity. *Proc. Combust. Inst.* (2016). DOI : [10.1016/j.proci.2016.06.086](https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.086).
- [91] M. KUZNETSOV, T. JORDAN et J. GRUNE. Combustion regimes in a stratified layer of hydrogen - air mixture. Proc. Int. Cong. on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP). Nice, France (2011).
- [92] K.G. VOLLMER, F. ETTNER et T. SATTELMAYER. Deflagration-to-detonation transition in hydrogen/air mixtures with a concentration gradient. *Combust. Sci. Technol.* 10-11 (2012), 1903–1915.
- [93] J. HASSLBERGER, F. ETTNER, L.R. BOECK et T. SATTELMAYER. 2D and 3D Flame Surface Analysis of Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Hydrogen-Air Mixtures with Concentration Gradients. Proc. 24th Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS). Taipei, Taiwan (2013).
- [94] J. GRUNE, K. SEMPET, M. KUZNETSOV et T. JORDAN. Experimental investigation of fast flame propagation in stratified hydrogen–air mixtures in semi-confined flat layers. *J. Loss Prevention Process Industry* 26(6) (2013), 1442–1541.
- [95] L.R. BOECK. Deflagration-to-Detonation Transition and Detonation Propagation in H₂-air mixtures with Transverse Concentration Gradients. Technische Universität München, Munich, Allemagne (2015).
- [96] C.M. BROPHY et R.K. HANSON. Fuel Distribution Effects on Pulse Detonation Engine Operation and Performance. *J. Prop. Power* 22(6) (2006), 1155–1161.
- [97] H.D. PERKINS et C.J. SUNG. Effects of Fuel Distribution on Detonation Tube Performance. *J. Prop. Power* 21(3) (2005), 539–545.
- [98] R. DRISCOLL, P. AGHASI, A. St GEORGE et E.J. GUTMARK. Three-dimensional, numerical investigation of reactant injection variation in a H₂/air rotating detonation engine. *Int. J. Hydrogen Energy* 41(7) (2016), 5162–5175.

- [99] T. GAILLARD, D. DAVIDENKO et F. DUPOIRIEUX. Numerical Optimisation in Non Reacting Conditions of the Injector Geometry for a Continuous Detonation Wave Rocket Engine. *Acta Astronautica* 111 (2015), 334–344.
- [100] S.M. FROLOV, A.V. DUBROVSKII et V.S. IVANOV. Three-dimensional Numerical Simulation of the Operation of a Rotating-Detonation Chamber with Separate Supply of Fuel and Oxidizer. *J. Phys. Chem. B* 7(1) (2013), 35–43.
- [101] M. FOLUSIAK, K. SWIDERSKI, J. KINDRACKI, A. KOBIERA, B. LUKASIK et P. WOLANSKI. Assessment of numerical simulations of RDE combustion chamber. *Proc. 24th Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*. Taipei, Taiwan (2013).
- [102] C.A. NORDEEN, D. SCHWER, F. SCHAUER, J. HOKE, T. BARBER et B.M. CETEGEN. Role of inlet reactant mixedness on the thermodynamic performance of a rotating detonation engine. *Shock Waves* 26 (2016), 417–428.
- [103] J. FUJI, Y. KUMAZAWA, A. MATSUO, S. NAKAGAMI, K. MATSUOKA et J. KASAHARA. Numerical investigation on detonation velocity in rotating detonation engine chamber. *Proc. Combust. Inst.* (2016). DOI : [10.1016/j.proci.2016.06.155](https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.155).
- [104] K. ISHII, Y. TAKAHASHI et T. TSUBOI. Detonation Propagation in Hydrogen-Oxygen Mixtures with Concentration Gradients. *Proc. 18th Int. Colloq. on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*. Seattle, WA, USA (2001).
- [105] K. ISHII et M. KOJIMA. Behavior of detonation propagation in mixtures with concentration gradients. *Shock Waves* 17(1) (2007), 95–102.
- [106] D. LIEBERMAN. Detonation Interaction with Sharp and Diffuse Interfaces. California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA (2006).
- [107] E.K. DABORA, J.A. NICHOLLS et R.B. MORRISON. The influence of a compressible boundary on the propagation of gaseous detonation. 10th Symp. (Int.) Combust. The Combustion Institute. University of Cambridge, Cambridge, Royaume-Uni (1965), 817–830.
- [108] N.A. TONELLO, M. SICHEL et C.W. KAUFFMAN. Mechanisms of detonation transmission in layered H₂-O₂ mixtures. *Shock Waves* 5(4) (1995), 225–238.
- [109] L.R. BOECK, F.M. BERGER, J. HASSLBERGER et T. SATTELMAYER. Detonation propagation in hydrogen-air mixtures with transverse concentration gradients. *Shock Waves* 26 (2016), 181–192.
- [110] D.A. KESSLER, V.N. GAMEZO et E.S. ORAN. Gas-phase detonation propagation in mixture composition gradients. *Phil. Trans. R. Soc. A* 370 (2012), 567–596.
- [111] M. DONATO, L. DONATO et J.H.S. LEE. Transmission of detonations through composition gradients. *Proc. 1st Specialist Meeting (Int.) of the Combustion Institute. T. 2. Section Française du Combustion Institute. Université de Bordeaux, Talence, France* (1981), 467–472.
- [112] D. BJERKEDVEDT, O.K. SONJU et I.O. MOEN. The Influence of Experimental Condition on the Reinitiation of Detonation Across and Inert Region. *Prog. Astronaut. Aeronaut.* 106 (1986), 106–109.

- [113] G.O. THOMAS, P. SUTTON et D.H. EDWARDS. The Behavior of Detonation Waves at Concentration Gradients. *Combust. Flame* 84(3-4) (1991), 312–322.
- [114] T. ENGBRETSSEN, D. BJERKETVEDT, O.K. SONJU et I.O. MOEN. Propagation of Gaseous Detonations Through Regions of Low Reactivity. *Prog. Astronaut. Aeronaut.* 153 (1993), 324–346.
- [115] A. TEODORCZYK et F. BENOAN. Interaction of detonation with inert gas zone. *Shock Waves* 6(4) (1996), 211–223.
- [116] M.S. KUZNETSOV, S.B. DOROFEEV, A.A. EFIMENKO, V.I. ALEKSEEV et W. BREITUNG. Experimental and numerical studies on transmission of gaseous detonation to a less sensitive mixture. *Shock Waves* 7(5) (1997), 294–304.
- [117] M.S. KUZNETSOV, V.I. ALEKSEEV, S.B. DOROFEEV, I.D. MATSUKOV et J.L. BOCCIO. Detonation propagation, decay, and reinitiation in nonuniform gaseous mixtures. 27th Symp. (Int.) Combust. T. 2. The Combustion Institute. University of Colorado, Boulder, CO, USA (1998), 2241–2247.
- [118] I. SOCHET, T. LAMY et J. BROSSARD. Experimental investigation on the detonability of non-uniform gaseous mixtures. *Shock Waves* 10(5) (2000), 363–376.
- [119] E. SCHULTZ et J.E. SHEPHERD. Detonation Diffraction Through a Mixture Gradient, Report FM00-1. Rapp. tech. California Institute of Technology, Explosion Dynamics Laboratory, Pasadena, CA, USA (2000).
- [120] J. LI, W.H. LAI, K. CHUNG et F.K. LU. Experimental study on transmission of an overdriven detonation wave from propane/oxygen to propane/air. *Combust. Flame* 154(3) (2008), 331–345.
- [121] G. CICCARELLI et S. DOROFEEV. Flame acceleration and transition to detonation in ducts. *Prog. Energy Combust. Sci.* 34(4) (2008), 499–550.
- [122] O. STERN et M. VOLMER. Über die Abklingungszeit der Fluoreszenz. *Phys. Z.* 20 (1919), 183–188.
- [123] R. B. BIRD, W.E. STEWART et E.N. LIGHTFOOT. *Transport Phenomenon*, 2nd Edition. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA (2002), 521–524.
- [124] E. MACH et J. WOSYKA. Über einige mechanische Wirkungen des elektrischen Funkens. *Sitzungsber Akad Wiss Wien (II. Abth.)* 72 (1875), 101–130.
- [125] L. FOUCAULT. Description des procédés employés pour reconnaître la configuration des surfaces optiques. *C.R. Acad. Sci.* 47 (1858), 958–959.
- [126] A. TÖPLER. Über die Methode der Schlierenbeobachtung als mikroskopisches Hilfsmittel, nebst Bemerkungen zur Theorie der schiefen Beleuchtung (observations selon une nouvelles méthode optique). *Ann. Phys.* 127 (1866), 556–580.
- [127] J.P. PRENEL et P. SMIGIELSKI. *Mécanique des fluides - Visualisation par variation d'indice*, Référence AF3332. Techniques de l'ingénieur. Paris, France (1999).
- [128] A. Van TIGGELEN et A. FEUGIER. *Chimiluminescence et chimionisation dans les flammes. Oxydations et combustions*. Sous la dir. d'A. van TIGGELEN. Publications de l'Institut Français du Pétrole. T. 2. Technip, Paris, France (1968), 757–777.
- [129] M.R.W. LAUER. *Determination of the Heat Release Distribution in Turbulent Flames by Chemiluminescence Imaging*. Technische Universität München, Munich, Allemagne (2011).

- [130] H.N. NAJM, P.H. PAUL, C.J. MUELLER et P.S. WYCKOFF. On the Adequacy of Certain Experimental Observables as Measurements of Flame Burning Rate. *Combust. Flame* 113(3) (1998), 312–332.
- [131] V. NORI et J. SEITZMAN. Evaluation of Chemiluminescence as a Combustion Diagnostic under Varying Operating Conditions. *AIAA* (953) (2008).
- [132] H.F. COWARD et G.W. JONES. Limits of Flammability of Gases and Vapors, Bulletin No. 503. Rapp. tech. United States Department of the Interior, Bureau of Mines, Washington, DC, USA (1952).
- [133] M.G. ZABETAKIS. Flammability characteristics of combustible gases and vapors, Bulletin No. 627. Rapp. tech. United States Department of the Interior, Bureau of Mines, Washington, DC, USA (1965).
- [134] J.H.S. LEE et M.I. RADULESCU. On the Hydrodynamic Thickness of Cellular Detonations. *Combust. Expl. Shock Waves* 41(6) (2005), 745–765.
- [135] G. P. SMITH, D. M. GOLDEN, M. FRENKLACH, N. W. MORIARTY, B. EITENEER, M. GOLDENBERG, C. T. BOWMAN, R. K. HANSON, S. SONG, W. C. GARDINER, V. V. LISSIANSKI et Z. QIN. *Gri-Mech* 3.0 (2016). URL : http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [136] S. BOULAL, P. VIDAL et R. ZITOUN. Experimental investigation of detonation quenching in non-uniform compositions. *Combust. Flame* 172 (2016), 222–233.
- [137] R.I. SOLOUKHIN. *Shock Waves and Detonations in Gases*. Mono Book Corp, Baltimore, MD, USA (1966).
- [138] J.H.S. LEE et I.O. MOEN. The mechanism of transition from deflagration to detonation in vapour cloud explosions. *Prog. Energy Combust. Sci.* 6(4) (1980), 350–389.
- [139] A. TEODORCZYK, J.H.S. LEE et R. KNYSTAUTAS. Photographic Study of the Structure and Propagation Mechanisms of Quasidetons in Rough Tube. *Prog. Astronaut. Aeronaut.* 133 (1991), 223–240.
- [140] R.R. BHATTACHARJEE, S.S.M. LAU-CHAPDELAINE, G. MAINES, L. MALEY et M.I. RADULESCU. Detonation re-initiation mechanism following the Mach reflection of a quenched detonation. *Proc. Combust. Inst.* 34(2) (2013), 1893–1901.
- [141] Y. LV et M. IHME. Computational analysis of re-ignition and re-initiation mechanisms of quenched detonation waves behind a backward facing step. *Proc. Combust. Inst.* 35(2) (2015), 1963–1972.
- [142] P. VIDAL et B.A. KHASAINOV. Analysis of critical dynamics for shock-induced adiabatic explosions by means of the Cauchy problem for the shock transformation. *Shock Waves* 9(4) (1999), 273–290.
- [143] P.A. URTVIEW et A.K. OPPENHEIM. Experimental observation of the transition to detonation in an explosive gas. *Phil. Trans. R. Soc. A* 295 (1966), 13–28.
- [144] B.J. MCBRIDE, S. GORDON et M.A. RENO. Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species. Technical Memorandum NASA TM-4513. National Aeronautics et Space Administration, Cleveland, OH, USA (1993).
- [145] Z. HONG, D.F. DAVIDSON, K.Y. LAM et R. K. HANSON. A shock tube study of the rate constants of HO₂ and CH₃ reactions. *Combust. Flame* 159(10) (2012), 3007–3013.

- [146] X.D. LIU, S. OSHER et T. CHAN. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *J. Comput. Physics* 115 (1994), 200–212.
- [147] S. GOTTLIEB et C.W. SHU. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Rapp. tech. ICASE Report No. 96-50*. Institute for Computer Applications in Science et Engineering, Hampton, VA, USA (1996).
- [148] X. GOU, W. SUN, Z. CHEN et Y. JU. A dynamic multi-timescale method for combustion modeling with detailed and reduced chemical kinetic mechanisms. *Combust. Flame* 157(6) (2010), 1111–1121.
- [149] G.J. SHARPE. Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations. *J. Fluid Mech.* 447 (2001), 31–51.
- [150] M.I. RADULESCU, G.J. SHARPE, C.K. LAW et J.H.S. LEE. The hydrodynamic structure of unstable cellular detonations. *J. Fluid Mech.* 580 (2007), 31–81.
- [151] R.I. SOLOUKHIN. Multiheaded Structure of Gaseous Detonation. *Combust. Flame* 10 (1966), 51–58.
- [152] D.H. EDWARDS, A.J. JONES et D.E. PHILLIPS. The location of Chapman-Jouguet surface in a multiheaded detonation wave. *J. Phys. D : Appl. Phys.* 9(9) (1976), 1331–1342.
- [153] G. CICCARELLI, T. GINSBERG, J. BOCCIO, C. ECONOMOS, K. SATO et M. KINOSHITA. Detonation Cell Size Measurements and Predictions in Hydrogen-Air-Steam Mixtures at Elevated Temperatures. *Combust. Flame* 99(2) (1994), 212–220.
- [154] J.H.S. LEE. Detonation Waves in Gaseous Explosives. *Handbook of Shock Waves*. Sous la dir. de G. BEN-DOR, O. IGRA et T. ELPERIN. T. 3. Academic Press, Cambridge, MA, USA (2000), 309–415.

Résumé

Notre étude porte sur la caractérisation expérimentale et numérique de la dynamique des ondes de détonation dans des prémélanges gazeux non-uniformément distribués dont les gradients de composition sont orientés selon la direction de propagation de la détonation. Elle vise à améliorer la compréhension des phénomènes complexes présents dans une chambre de combustion de moteur à détonations pulsées (PDE) ou rotatives (RDE) et dans des situations de fuites accidentelles de combustibles. Nous rappelons d'abord le contexte de notre étude, la phénoménologie de la détonation dans les gaz et les travaux antérieurs sur la propagation de la détonation dans des compositions non-uniformes. Nous décrivons ensuite le banc expérimental que nous avons conçu pour satisfaire à la contrainte de génération contrôlée de gradients de composition dans une chambre d'étude de section carrée $50 \times 50 \text{ mm}^2$ et de longueur 665 mm, et les diagnostics que nous avons mis en œuvre : sondes à oxygène, capteurs de pression dynamique, enregistrements sur plaques recouvertes d'un dépôt de carbone, strioscopie et spectroscopie par chimiluminescence ultra-rapides. Nous présentons alors les résultats de nos expériences dans des compositions de propane ou d'éthane et d'oxygène à la pression et à la température initiales 200 mbar et 290 K. Nous avons considéré des distributions monotones, de richesse décroissante, et des distributions non-monotones, de richesse décroissante puis croissante. Dans les distributions monotones, nous avons identifié deux types d'extinction de la détonation, l'un brusque, par découplage choc-flamme, pour des gradients suffisamment forts, l'autre progressif, par transition vers des modes marginaux de propagation, pour des gradients plus faibles. Nous avons proposé et validé des critères d'existence de la détonation fondés sur les échelles caractéristiques du problème. Nous avons démontré, pour ces distributions, la capacité de simulations numériques avec cinétique chimique détaillée à représenter nos expériences, dans le cadre d'une collaboration avec l'Université Keio. Dans les distributions non-monotones, nous avons identifié des comportements super-critique, critique et sous-critique, selon que la détonation est transmise ou non de la zone où la richesse diminue vers celle où elle augmente. Nous avons en particulier identifié les conditions de réamorçage d'une détonation éteinte dans la zone de richesse décroissante. Notre étude souligne l'intérêt de travaux futurs sur des non-uniformités de compositions initiales constitués de gaz brûlés et de gaz frais et donc, également, des non-uniformités de température initiale. Elle souligne aussi la nécessité de diagnostics optiques et d'outils numériques performants, et de schémas détaillés de cinétique chimique adaptés aux hautes pressions et températures caractérisant la dynamique des détonations.

Mots-clés : Détonation, compositions non-uniformes, extinction, réamorçage, moteurs à détonations

Abstract

Our study is an experimental and numerical work on the dynamical behaviours of detonation waves in non-uniformly distributed premixed gases with composition gradients parallel to the direction of the detonation propagation. The study aims at improving the understanding of the complex phenomena involved in the combustion chambers of pulsed or rotating detonation engine (PDE, RDE) and after accidental leaks of fuels. We first remind the context of our study, the phenomenology of gaseous detonation and the previous works on detonation propagation in non-uniform compositions. We then describe the experimental set-up that we have designed in order to meet the constraint of a controlled generation of composition gradients in a $50 \times 50 \text{ mm}^2$ square-section, 665-mm length test chamber, and the diagnoses that we have implemented : oxygen probes, fast pressure transducers, carbon-sooted plates and ultrafast Schlieren and chemiluminescence spectroscopy. Next, we present the results of our experiments in mixtures of propane or ethane and oxygen with initial pressure and temperature 200 mbar and 290 K, respectively. We have considered monotonic distributions, with decreasing equivalence ratio, and non-monotonic distributions, with decreasing then increasing equivalence ratio. In the monotonic distributions, we have identified two types of detonation quenching, one sudden, with a shock-flame decoupling, for the steeper gradients, the other progressive, with a transition through marginal modes of detonation propagation, for the weaker gradients. We have proposed and validated criteria for detonation, based on the characteristic scales of the problem. We have demonstrated, for these monotonic distributions, the ability of numerical simulations with detailed schemes of chemical kinetics to represent our experimental observations, through a collaboration with Keio University. In the non-monotonic distributions, we have identified super-critical, critical and sub-critical behaviours, depending on whether the detonation is transmitted or not from the domain where the equivalence ratio decreases to that where it increases. In particular, we have identified the re-initiation conditions for a detonation that was quenched in the domain of decreasing equivalence ratio. Our study stresses the interest for future works to consider non-uniform distributions of mixtures comprising burnt gases and fresh reactants, and, consequently, non-uniform distributions of temperature. It also stresses the need for performing optical diagnoses and numerical capacities and for detailed schemes of chemical kinetics adapted to the high pressures and temperatures characterizing detonation dynamics.

Keywords : Detonation, non-uniform compositions, quenching, re-initiation, detonation engines

