



HAL
open science

Modélisation numérique des détonations confinées par un gaz inerte

Maxime Reynaud

► **To cite this version:**

Maxime Reynaud. Modélisation numérique des détonations confinées par un gaz inerte. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2017. Français. NNT : 2017ESMA0017 . tel-01685507

HAL Id: tel-01685507

<https://theses.hal.science/tel-01685507v1>

Submitted on 16 Jan 2018

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, ENERGÉTIQUE ET AÉRONAUTIQUE

SECTEUR DE RECHERCHE : ÉNERGÉTIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION

PRÉSENTÉE PAR :

MAXIME REYNAUD

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES DÉTONATIONS CONFINÉES PAR UN GAZ INERTE

Directeur de thèse : **ASHWIN CHINNAYYA**

Co-encadrant : **FLORENT VIROT**

SOUTENUE LE 11 DÉCEMBRE 2017
DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY :

PRÉSIDENT

MME PAOLA CINNELLA, PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, DYNFLUID – ENSAM

RAPPORTEURS

M. OLIVIER LE MÉTAYER, PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, IUSTI – UNIVERSITÉ AIX-MARSEILLE
M. MATEI I. RADULESCU, MAÎTRE DE CONFÉRENCES, UNIVERSITÉ D'OTTAWA, CANADA

MEMBRES

M. ASHWIN CHINNAYYA, PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, INSTITUT P' – ISAE-ENSMA
M. FLORENT VIROT, MAÎTRE DE CONFÉRENCES, INSTITUT P' – ISAE-ENSMA

Remerciements

La reconnaissance est la mémoire du cœur.

Hans Christian ANDERSEN

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

Je remercie également M. MARC BELLENOUE, ainsi que les partenaires industriels SAFRAN TECH et MBDA d'avoir financé mon étude par l'intermédiaire de la chaire CAPA.

J'adresse un immense merci à M. ASHWIN CHINNAYYA. Sa disponibilité, son engagement et la qualité de son travail font de lui un directeur de thèse envié par beaucoup.

Je voudrais adresser mes plus chaleureux remerciements aux membres du jury, MM. FLORENT VIROT, OLIVIER LE MÉTAYER, MATEI RADULESCU ainsi que MME PAOLA CINNELLA, présidente du jury, pour avoir pris le temps de lire mon manuscrit et pour avoir fait le déplacement jusqu'à Poitiers. Vos commentaires et remarques vont contribuer de façon décisive à l'évolution de ma thématique de travail au sein de notre équipe.

Et d'ailleurs, quelle équipe ! La thèse, qui par sa nature semble être un fardeau solitaire, n'aurait pu voir le jour sans l'aide, l'accompagnement et la camaraderie de ces individus. Du premier jour du doctorat au dernier, elles sont présentes et fidèles au poste. Merci MARIE-CANNELLE, CATHERINE et JOCELYNE pour votre travail, sans lequel rien n'est possible. Je souhaiterais également remercier PATRICIA, dont la bonne humeur quotidienne adoucit les moments de doutes. HERVÉ, ALAIN, merci pour votre gentillesse sans pareille.

Merci à vous, camarades de fortune et d'infortune, stagiaires et doctorants. Certains d'entre vous, au travers de nos discussions, ont marqué indubitablement l'orientation et donc l'aboutissement de mes travaux. D'autres ont animé bien des débats autour de nos tablées, qu'elles se soient déroulées au RU ou au Cluricaume. Pour tout cela, je vous dis merci, et vous donne rendez-vous très bientôt en région parisienne ou ailleurs. Plus particulièrement, et sans ordre de préférence, j'adresse ces quelques mots à ANDRÉ, AIMAD, RADOUAN, ANTHONY, SYLVAIN, PAUL, DAVID, CARLOS, ROMAIN, LUC, CYPRIEN, LÉO, THOMAS, MATHIAS, RAQUEL, PETIT PIERRE, JEAN-CHRISTOPHE, DAMIEN et FLORIAN.

SAÏD, je te souhaite la plus grande réussite dans la poursuite de mes travaux. Ton succès ne fait guère de doute, car je connais ta passion et ton sérieux.

Merci au DOCTEUR GEOFFREY JARSALÉ, pour l'ensemble de son œuvre. De la cuisine asiatique aux explosions, ton expertise est désormais totale. Merci pour tout, camarade.

Ευχαριστώ την Όλγα, για την υποστήριξη και την αγάπη της.

Je tiens à remercier sincèrement mon père DIDIER, qui m'a transmis son intérêt pour les sciences.

J'adresse enfin ma gratitude la plus chaleureuse à ma mère VALÉRIE, à OLIVIER, ANTOINE, ainsi que mes grands-parents DANIÈLE et PIERRE pour leur soutien sans faille.

Ces quelques mots ne peuvent que partiellement retranscrire les sentiments particuliers que j'éprouve, à l'heure de quitter ce bureau occupé pendant près de trois ans. Alors, je vous dis simplement, merci, et à bientôt.

Table des matières

Introduction	1
1 Généralités sur les détonations	5
1.1 Introduction	5
1.2 Description stationnaire de l'onde de détonation	6
1.2.1 Théorie CJ	6
1.2.2 Théorie ZND	9
1.3 Comportement instationnaire de la détonation	12
1.3.1 Instabilités non linéaires	13
1.3.2 Détonations multicellulaires	13
1.3.3 Détonations marginales	24
1.4 Synthèse Partielle	24
2 Étude des détonations non idéales	27
2.1 Introduction	27
2.2 Influence des pertes sur les instabilités non linéaires	28
2.3 Études expérimentales et numériques des détonations non idéales	28
2.3.1 Détonations dans des canaux de petite section	29
2.3.2 Détonations dans des tubes poreux	31
2.3.3 Diffraction de la détonation	33
2.3.4 Détonations confinées par un gaz inerte	36
2.4 Synthèse partielle, position et apport de notre étude	49
3 Équations mathématiques et méthodes numériques	51
3.1 Introduction	52
3.2 Modèle mathématique	52
3.2.1 Équations d'Euler pour un fluide réactif	52
3.2.2 Modèle cinétique	53
3.2.3 Relations thermodynamiques	54
3.3 Méthodes numériques	56

3.3.1	Solveur aérodynamique	56
3.3.2	Extension au cas bidimensionnel	64
3.3.3	Intégration des termes sources	65
3.3.4	Condition de stabilité	67
3.3.5	Conditions aux limites	67
3.3.6	Procédure de recyclage du domaine de calcul	68
3.3.7	Raffinement statique de la résolution numérique	69
3.3.8	Procédure de calcul des quantités moyennes	69
3.4	Outils de visualisation numérique et de post-traitement	72
3.4.1	Détermination de la vitesse de détonation	72
3.4.2	Strioscopie ou “schlieren” numérique	73
3.4.3	Suivi des points triples	74
3.5	Validation des méthodes numériques : test de Sod	74
3.6	Synthèse partielle	75
4	Modélisation numérique des détonations idéales	81
4.1	Introduction	81
4.2	Propagation d’une détonation monodimensionnelle	82
4.2.1	Description de la configuration	82
4.2.2	Analyse du comportement dynamique de la détonation	83
4.2.3	Comparaison des écoulements moyens	85
4.3	Propagation marginale d’une détonation bidimensionnelle	90
4.3.1	Description de la configuration	90
4.3.2	Analyse de l’écoulement	91
4.3.3	Stabilité du mélange réactif	97
4.3.4	Étude de la résolution spatiale	111
4.4	Synthèse partielle	116
5	Détonations confinées par un gaz inerte	119
5.1	Introduction	119
5.2	Description de la configuration	120
5.3	Topologie générale de la détonation confinée gazeuse	123

5.3.1	Description de la topologie	123
5.3.2	Influence de la sensibilité du mélange réactif	127
5.4	Analyse des profils axiaux moyens	137
5.4.1	Modélisation ZND généralisée (modèle WK)	137
5.4.2	Comparaison avec les profils axiaux moyens	141
5.5	Synthèse des résultats numériques	150
5.5.1	Relation célérité-courbure	150
5.5.2	Hauteur critique de propagation	152
5.6	Mécanismes d'extinction	155
5.6.1	$E_a^* = 20$	155
5.6.2	$E_a^* = 30$	159
5.7	Synthèse partielle	164
6	Influence de la température du milieu inerte	167
6.1	Introduction	167
6.2	Description de la configuration	168
6.3	Influence de la température de la couche inerte sur la topologie	169
6.4	Influence de la température de la couche inerte sur les profils axiaux moyens	176
6.5	Synthèse des résultats numériques	178
6.5.1	Limites de propagation	178
6.5.2	Relation célérité-courbure	188
6.6	Synthèse partielle	192
	Conclusions et perspectives	195
A	Structure cellulaire des détonations idéales dans une configuration multicellulaire	201
B	Analogie du tube à choc	203
C	Simulations complémentaires	209
D	A computational study of the interaction of gaseous detonations with a compressible layer	215

Table des matières

Table des figures

1.1	Représentation des systèmes de coordonnées utilisés. À gauche, la détonation se propage dans le repère lié au laboratoire (a). Le schéma de droite se place dans le repère lié à la discontinuité, avec $w = u - D$ (b).	6
1.2	Représentation de l'adiabatique de Crussard \mathcal{C} et de la droite de Rayleigh-Michelson \mathcal{R} dans le plan (p, v) . Les indices 0 et CJ correspondent à l'état initial et de Chapman-Jouguet, respectivement.	9
1.3	Représentation schématique de la structure interne de l'onde de détonation décrite par le modèle ZND.	10
1.4	Représentation de l'adiabatique de Crussard \mathcal{C} , de la courbe d'Hugoniot et de la droite de Rayleigh-Michelson \mathcal{R} dans le plan (p, v) . Les indices 0, CJ et VN correspondent à l'état initial, Chapman-Jouguet et von Neumann, respectivement. β représente l'avancement de la réaction chimique.	11
1.5	(a), (b), (c) et (d) : Évolution temporelle de la pression du choc pour $E_a^* = 27.00$, $E_a^* = 27.40$, $E_a^* = 28.20$ et $E_a^* = 30.00$, respectivement [22]. (e) : Diagramme illustrant les bifurcations en fonction de l'énergie d'activation réduite $E_a^* = E_a/RT_0$ [23].	12
1.6	(a) : Chronogramme de la propagation d'une onde de détonation dans un mélange $2\text{CO} + \text{O}_2 + 2\text{H}_2$ [27]. (b) : Interférogramme d'une détonation autonome dans un mélange $2\text{CO} + \text{O}_2 + 2\text{H}_2$ [29].	14
1.7	Strioscopie de la structure d'un front de détonation (haut) se propageant dans un mélange $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ à la pression de 3.4 kPa, accompagné d'un schéma explicatif (bas). Adapté de Radulescu et al. [30].	16
1.8	(a) : Impression de la structure cellulaire sur une plaque recouverte d'un dépôt de carbone. Mélange $\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2 + 11\text{Ar}$ à la pression de 1 bar. Avec l'aimable autorisation de GEOFFREY JARSALÉ. (b) : Déformation d'un film Mylar par la distribution non uniforme de pression le long du front de détonation [35].	17
1.9	(a) : Film stroboscopique de la propagation d'une détonation multicellulaire dans un mélange $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2$ [34]. (b) : Représentation d'une cellule de détonation et de la célérité locale du choc le long de son axe [36].	18
1.10	Classification de la structure cellulaire de la détonation basée sur sa régularité, adapté de Libouton et al. [39].	19
1.11	Variation de la taille de la cellule de détonation en fonction de la pression initiale pour des mélanges comprenant de l'hydrogène ou différents hydrocarbures en proportions stoechiométriques avec l'oxygène [45].	20
1.12	Variation de la taille de la cellule de détonation avec la richesse pour différents mélanges hydrocarbures et d'air [46] et d'hydrogène et d'air [47] ($p_0 = 1 \text{ atm}$) [45].	21
1.13	Visualisation du front de détonation dans un mélange $2.4\text{H}_2 - \text{O}_2 - 5.5\text{N}_2$ à $p_0 = 21 \text{ kPa}$. De gauche à droite : strioscopie, fluorescence OH et PLIF [57].	22

1.14	Exemples d'instabilités hydrodynamiques : (a) Kelvin-Helmoltz, (b) Richtmyer-Meshkov.	23
2.1	Évolution de la vitesse de la détonation en fonction de l'inverse du diamètre du tube (normalisé par le diamètre critique) pour deux types de mélanges et comparaison avec la théorie de Fay (trait plein). (a) $C_2H_2 + 2.5O_2 + xAr$ (+ $x = 70\%$, $\square x = 75\%$, $\triangle x = 80\%$). (b) $0.5(C_2H_2 + 5N_2O) + 0.5Ar$. Adapté des travaux de Laberge et al. [80].	30
2.2	Photographie longue pose d'une détonation se propageant dans un tube poreux dans différents mélanges et à différentes pressions initiales [90].	32
2.3	Photographies de la structure cellulaire de la détonation dans les cas sur-critique (a) et critique (b) [36].	34
2.4	Strioscopies illustrant l'extinction de la détonation dans une colonne de gaz réactifs $79\%O_2 - 21\%H_2$ entourée d'air [104]. Les deux dernières photographies correspondent au même instant capturé lors de deux expériences différentes, en changeant le sens du couteau.	38
2.5	Strioscopie d'une onde de détonation se propageant dans un mélange $2H_2 + O_2$ confiné par du N_2 [106].	39
2.6	Strioscopies de détonations se propageant dans un mélange $50\%H_2 + 50\%O_2$ confinées par de l'hélium (gauche) et de l'hydrogène (droite). Adapté des travaux de Adams [108].	40
2.7	Photographie du montage expérimental utilisé dans les travaux de Murray et Lee [86, 87] (a). Propagation d'une détonation dans un tube en plastique, 3.85% éthylène-air (b).	42
2.8	Champs de température pour les ratio des impédances acoustiques $Z = 1.73$ ($T_i = 100$ K et $T_r = 300$ K) (a) et pour $Z = 0.29$ ($T_i = 3500$ K et $T_r = 300$ K) (b) [127].	48
3.1	Schéma de l'approximation choc-choc du solveur HLLC au point $i + 1/2$, dans un diagramme (x, t) [144].	61
3.2	Illustration du processus de recyclage.	70
3.3	Illustration du raffinement statique de la résolution numérique.	71
3.4	Schématisation du problème du tube à choc à l'état initial (a) puis lors de l'évolution vers un état d'équilibre (b). Les différents éléments représentés sur la Figure (b) sont, de la gauche vers la droite, une onde de choc, une surface de contact et un faisceau de détentés.	74
3.5	Évolution des profils de densité (a), pression (b), vitesse matérielle (c) et température (d) à partir des conditions [Sod1] pour 1,000 et 10,000 mailles. Les différentes itérations correspondent à $t_0 = 0.0$ ms (noir), $t_1 = 2.885$ ms (bleu), $t_2 = 5.769$ ms (vert) et $t_3 = 8.653$ ms (rouge).	76
3.6	Évolution des profils de densité (a), pression (b), vitesse matérielle (c) et température (d) à partir des conditions [Sod2] pour 1,000 et 10,000 mailles. Les différentes itérations correspondent à $t_0 = 0.0$ ms (noir), $t_1 = 0.875$ ms (bleu), $t_2 = 2.181$ ms (vert) et $t_3 = 4.358$ ms (rouge).	77

3.7	Évolution des profils de densité (a), (c) et (d) et température (b) à partir des conditions [Sod2] pour 1,000 mailles avec différents limiteurs de pente. Les différentes itérations correspondent à $t_0 = 0.0$ ms, $t_1 = 0.875$ ms, $t_2 = 2.181$ ms et $t_3 = 4.358$ ms. Les Figures (c) et (d) représentent une vue agrandie du choc et de la discontinuité de contact, respectivement, tandis que la Figure (b) s'intéresse aux oscillations des profils de température.	78
4.1	(a) : vitesse instantanée de la détonation en fonction de la distance de propagation, pour les différentes énergies d'activation réduites. (b) : représentation des différentes énergies d'activation réduites dans le lieu de stabilité. La courbe en traits pointillés représente la limite de stabilité. . .	84
4.2	Profils moyens obtenus pour différentes énergies d'activation réduites E_a^* (symboles) et comparaison avec le modèle ZND (lignes). (a) : masse volumique moyenne $\bar{\rho}$ normalisée par la masse volumique initiale ρ_0 en fonction de la distance au choc. (b) : pression moyenne \bar{p} normalisée par la pression initiale p_0 en fonction de la distance au choc. (c) : fraction massique de gaz frais moyenne \tilde{Y} en fonction de la distance au choc (échelle verticale logarithmique). (d) : logarithme du terme de production chimique moyen $\tilde{\omega}$ divisé par \tilde{Y} en fonction de $1000/\bar{T}$. 1/25 des points est représenté sur les Figures (a), (b) et (c). Tous les points compris entre le choc et la fin de la zone de réaction sont représentés sur la Figure (d).	86
4.3	Évolution de la fraction massique de gaz frais moyenne pour les différentes énergies d'activation réduites. Élargissement de la Figure 4.2 (c). 1/5 des points est représenté.	87
4.4	(a) : <i>scatterplot</i> de $\ln(\tilde{\omega}/Y)$ en fonction de $1000/T$. (b) : superposition des profils instantanés de la masse volumique Y et comparaison avec le profil moyen \tilde{Y}	88
4.5	(a) : nombre de Mach local moyen $\tilde{M} = (\bar{D} - \tilde{u})/\tilde{c}$ (symboles) et comparaison avec le modèle ZND (lignes) pour différentes énergies d'activation réduites. (b) : Élargissement au voisinage de $\tilde{M} = 1$. 1/50 des points est représenté sur les deux Figures (a) et (b).	89
4.6	Fluctuations moyennes normalisées de masse volumique, de pression et de vitesse pour le cas $E_a^* = 38.23$. 1/50 des points est représenté.	89
4.7	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) masse volumique, (b) pression (échelle logarithmique), (c) fraction massique des gaz frais, (d) température, (e) strioscopie numérique de la masse volumique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$	94
4.8	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa.	96

4.9	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc suivant qu'il s'agisse d'un calcul stationnaire (lignes), monodimensionnel (symboles blancs) ou bidimensionnel (symboles rouges). 1/20 et 1/10 des données 1D et 2D sont représentées, respectivement, sur les Figures (a), (b) et (c). 1/100 et 1/50 des données 1D et 2D sont représentées, respectivement, sur la Figure (d).	98
4.10	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc suivant qu'il s'agisse d'un calcul monodimensionnel (symboles blancs) ou bidimensionnel (symboles rouges). 1/50 et 1/25 des données 1D et 2D sont représentées, respectivement.	99
4.11	Évolution de la vitesse instantanée du front D/D_{CJ} lors de la propagation de la détonation pour plusieurs énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.	101
4.12	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation pour les différentes énergies d'activation réduites E_a^* . Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.	102
4.13	Comparaison pour différentes énergies d'activation réduites des champs de température T/T_0 . Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.	104
4.14	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique (c) et du nombre de Mach dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs énergies d'activation réduites E_a^* (symboles). 1/12 des points des représenté sur les Figures (a), (b) et (c) et 1/100 des points des représenté sur la Figure (d). Comparaison avec les résultats de la modélisation ZND (lignes)	105
4.15	Évolution de la fraction massique de gaz frais moyenne pour les différentes énergies d'activation réduites. Élargissement de la Figure 4.14 (c). Un point sur deux est représenté.	106
4.16	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs énergies d'activation réduites E_a^* . 1/12 des points est représenté.	107
4.17	(a) : Évolution du rapport $\frac{\sqrt{\bar{p}'}^2}{\bar{p}} - \frac{\bar{p}}{\sqrt{\bar{\rho}'^2}}$ en fonction de la distance pour les différentes énergies d'activation réduites dans les cas 1D et 2D. (b) : Évolution du terme de répartition énergétique F en fonction de la distance pour les différentes énergies d'activation réduites dans les cas 1D et 2D. 1/40 et 1/20 des points sont représentés en 1D et 2D, respectivement.	109
4.18	Structure instantanée (bleu), moyenne (rouge) et écart-type (noir) du front de détonation pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$. (d) : Écarts-types obtenus pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites.	110

4.19	Logarithme du terme de production chimique moyen $\tilde{\omega}$ divisé par \tilde{Y} en fonction de $1000/\bar{T}$ pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$. (d) : synthèse des trois énergies d'activation réduites dans le cas 2D. Les profils sont colorisés suivant la fraction massique de gaz frais \tilde{Y}	112
4.20	Comparaison pour différentes résolutions des champs de température T/T_0 . (a) : $N_{1/2} = 10$, (b) : $N_{1/2} = 30$ et (c) : $N_{1/2} = 60$	113
4.21	Comparaison pour différentes résolutions des champs de vorticité. (a) : $N_{1/2} = 10$, (b) : $N_{1/2} = 30$ et (c) : $N_{1/2} = 60$	115
4.22	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique (c) et du nombre de Mach dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs résolutions numérique $N_{1/2}$. 1/30, 1/100 et 1/200 des points sont représentés, respectivement.	117
4.23	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs résolutions numérique $N_{1/2}$. 1/15, 1/50 et 1/100 des points sont représentés, respectivement.	118
5.1	Schéma de la configuration étudiée.	121
5.2	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) strioscopie numérique, (d) densité, (e) pression, (f) composante verticale de la vitesse, (g) composante horizontale de la vitesse et (h) vitesse (norme). Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$	126
5.3	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$. La ligne rouge représente l'interface entre la couche réactive et inerte.	127
5.4	Champs de température T/T_0 (a) et de fraction massique des gaz frais Y (b) lorsqu'un découplage local se produit à la périphérie de la couche réactive. L'interface entre les deux couches est représentée par la ligne en pointillés blancs sur le champ de température. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$	128
5.5	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) strioscopie numérique de la densité, (d) densité, (e) pression, (f) composante verticale de la vitesse, (g) composante horizontale de la vitesse et (h) vitesse (norme). Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 30$ et $h = 16 \text{ mm} \approx 7.5 \lambda$	130
5.6	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 30$ et $h = 16 \text{ mm}$	131

5.7	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) strioscopie numérique de la densité, (d) densité, (e) pression, (f) composante verticale de la vitesse, (g) composante horizontale de la vitesse et (h) vitesse (norme). Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.	133
5.8	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.	133
5.9	Comparaison des profils de vitesse pour les différentes énergies d'activation réduites entre les cas idéaux à gauche (propagation en canal) et non-idéaux à droite (confinement par un gaz inerte). (a) et (b) : $E_a^* = 20$. (c) et (d) : $E_a^* = 30$. (e) et (f) : $E_a^* = 38.23$.	135
5.10	Histogrammes de la vitesse de la détonation pour les différentes énergies d'activation réduites dans les cas idéaux (propagation en canal) et non-idéaux (confinement par un gaz inerte). (a) & (b) : $E_a^* = 20$, (c) & (d) : $E_a^* = 30$ et (e) & (f) : $E_a^* = 38.23$. Les Figures de droite sont représentées en échelle logarithmique.	136
5.11	Structure instantanée (bleu), moyenne (blanc) et écart-type (noir) du front de détonation pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.	138
5.12	Construction géométrique mettant en relation la courbure du front de détonation \mathcal{R} et la dérivée de la vitesse transversale $\frac{\partial v}{\partial y}$. Adapté des travaux de Higgins [167].	140
5.13	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 38.23$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.	143
5.14	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 38.23$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.	144
5.15	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 30$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 16 \text{ mm} \approx 8 \lambda$.	146
5.16	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 30$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 16 \text{ mm} \approx 8 \lambda$.	147

5.17	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 20$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.	148
5.18	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 20$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.	149
5.19	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction. (a) : mélanges réguliers ($E_a^* = 10$ et $E_a^* = 20$). (b) : mélanges irréguliers ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$). Les traits pleins représentent les résultats issus du modèle WK tandis que les symboles représentent ceux issus des simulations bi-dimensionnelles.	151
5.20	(a) : vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par taille de cellule. (b) : vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par l'épaisseur hydrodynamique.	153
5.21	Champs de température T/T_0 (gauche) et de fraction massique de gaz frais Y (droite) illustrant le mécanisme d'extinction pour un mélange régulier ($E_a^* = 20$). Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.	157
5.22	Historique de la pression maximale régnant dans l'écoulement. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 4 \text{ mm}$ à $h = 2 \text{ mm}$. La pression est donnée en MPa et les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.	158
5.23	Évolution de la vitesse de propagation de la détonation D/D_{CJ} en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 4 \text{ mm}$ à $h = 2 \text{ mm}$.	159
5.24	Champs de température (gauche) et de fraction massique de gaz frais (droite) illustrant le mécanisme d'extinction pour un mélange irrégulier ($E_a^* = 30$). Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.	162
5.25	Historique de la pression maximale régnant dans l'écoulement. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 16 \text{ mm}$ à $h = 12 \text{ mm}$. La pression des donnée en MPa et les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.	162
5.26	Évolution de la vitesse de propagation de la détonation D/D_{CJ} en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 16 \text{ mm}$ à $h = 12 \text{ mm}$.	163

6.1	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) densité, (d) pression, (e) strosopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$ et $T_i = 750 \text{ K}$	171
6.2	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) densité, (d) pression, (e) strosopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$ et $T_i = 1400 \text{ K}$	173
6.3	Vue détaillée de la structure de l'écoulement à l'interface entre les deux couches. Pour cette simulation, $E_a^* = 30$, $h = 15 \text{ mm} \approx 7 \lambda$ et $T_i = 1400 \text{ K}$	174
6.4	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$	175
6.5	Isocontours de pression d'une détonation tridimensionnelle se propageant dans un moteur à détonation rotative. Adapté de Tsuboi et al. [174]	176
6.6	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$	177
6.7	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$	179
6.8	Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$	180
6.9	Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$	181
6.10	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par taille de cellule colorisé suivant la température de la couche inerte. (a) : $E_a^* = 20$. (b) : $E_a^* = 30$. (c) : $E_a^* = 38.23$	183
6.11	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par taille de cellule (a) et par l'épaisseur hydrodynamique (b) colorisé suivant la température de la couche inerte. \circ : $E_a^* = 20$, \diamond : $E_a^* = 30$, Δ : $E_a^* = 38.23$	184
6.12	Évolution de la hauteur critique de propagation h_c en fonction du ratio des impédances acoustiques Z	185

6.13	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz fais, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 25$ mm et $T_i = 124$ K.	187
6.14	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 25$ mm et $T_i = 124$ K.	187
6.15	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction pour les différentes énergies d'activation réduites et pour les différentes températures de la couche inerte. (a) : $E_a^* = 20$. (b) : $E_a^* = 30$. (c) : $E_a^* = 38.23$	190
6.16	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction ((a) & (c)) et par l'épaisseur hydrodynamique ((b) & (d)) pour les différentes énergies d'activation réduites et pour les différentes températures de la couche inerte. (a) & (b) : colorisation suivant la température T_i . (c) & (d) : colorisation suivant la régularité du milieu réactif. \circ : $E_a^* = 20$, \diamond : $E_a^* = 30$, Δ : $E_a^* = 38.23$	191
6.17	Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction ((a) & (b)) et par l'épaisseur hydrodynamique ((c) & (d)) pour les différentes énergies d'activation réduites et pour les différentes températures de la couche inerte. Les Figures (a) et (c) regroupent les résultats relatifs à $T_i = 295$ K et à $T_i = 750$ K. Les Figures (b) et (d) regroupent les résultats relatifs à $T_i = 1400$ K. \circ : $E_a^* = 20$, \diamond : $E_a^* = 30$, Δ : $E_a^* = 38.23$	193
6.18	Champ moyen de densité d'une détonation confinée par un gaz inerte. Le plan sonique moyen est représenté par la ligne noire tandis que les lignes de courant sont représentées en blanc. Avec l'aimable autorisation de SAID TAILEB.	199
A.1	Historiques des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation pour les différentes énergies d'activation réduites. Les distances sont données en mm. Pour ces simulations, $h = 12$ mm.	202
B.1	Schéma de la modélisation effectuée par Dabora [107].	205
B.2	Variation du ratio de pression \bar{P} en fonction du paramètre de densité [107].	206
B.3	Variation de $\tan(\delta)$ en fonction du paramètre de densité [107].	207
C.1	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz fais, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$, $h = 8$ mm et $T_i = 750$ K.	210

C.2	Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$, $h = 8$ mm et $T_i = 750$ K.	212
C.3	Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8$ mm.	213
D.1	Physics of Fluids (2017) : http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4982659	215

Liste des tableaux

1.1	Synthèse des épaisseurs hydrodynamiques évaluées dans la littérature. . . .	24
2.1	Récapitulatif des dimensions critiques obtenues dans les différentes études de détonations confinées par un gaz inerte en configuration de charge libre.	44
2.2	Récapitulatif des dimensions critiques obtenues dans les différentes études de détonations confinées par un gaz inerte en configuration rectangulaire. .	46
3.1	Récapitulatif des conditions utilisées pour les différents tests, d'après les valeurs retenues dans [153].	75
4.1	Synthèse des paramètres CJ et VN relatifs au mélange modélisé.	83
4.2	Synthèse des facteurs pré-exponentiels utilisés en fonction de l'énergie d'activation réduite de façon à conserver la demi-longueur de réaction $l_{1/2} = 90.79 \mu\text{m}$ constante.	83
4.3	Évolution de l'épaisseur hydrodynamique suivant le type de calcul : ZND, 1D et 2D.	97
5.1	Paramètres relatifs aux conditions initiales dans les deux couches de gaz. Z est le ratio des impédances acoustiques entre les deux couches.	121
5.2	Synthèse des paramètres employés dans ce chapitre. k est le facteur pré-exponentiel, $N_{1/2}$ le nombre de mailles par demi-longueur de réaction, λ la taille de cellule et $k_{1/2} = \lambda/l_{1/2}$	122
5.3	Synthèse des données récoltées pour les différentes énergies d'activation réduites	150
5.4	Synthèse des données relatives aux limites de propagation obtenues dans les simulations bidimensionnelles et via le modèle WK.	153
6.1	Correspondance entre la température de la couche inerte T_i et le ratio des impédances acoustiques Z	169

Nomenclature

Acronymes

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFL	Courant–Friedrichs–Lewy
CJ	Chapman-Jouguet
DDT	<i>Deflagration to Detonation Transition</i>
F	Représentation symbolique du combustible
MP	<i>Monotonicity Preserving</i>
MUSCL	<i>Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws</i>
O	Représentation symbolique de l’oxydant
P	Représentation symbolique des produits de combustion
PDE	<i>Pulsed Detonation Engine</i>
PPM	<i>Piecewise Parabolic Method</i>
QSSA	<i>Quasi-Steady-State Approximation</i>
RDE	<i>Rotating Detonation Engine</i>
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
WK	Modèle de Wood et Kirkwood
ZND	Zel’dovich-von Neumann-Döring

Symboles Grecs

Δt	Résolution temporelle	s
Δx	Résolution spatiale	m
γ	Indice adiabatique	(-)
λ	Largeur de cellule	m
ν	coefficients stœchiométriques	(-)
$\dot{\xi}$	Variable d’avancement de la réaction chimique	(-)

ρ	Masse volumique	kg m^{-3}
φ	Richesse	(-)
$\dot{\omega}$	Taux de réaction chimique	s^{-1}

Symboles Latins

A	Coefficient de proportionnalité	(-)
A	Matrice Jacobienne	
c	Célérité du son	m s^{-1}
C_p	Chaleur spécifique à pression constante du mélange	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
C_v	Chaleur spécifique à volume constant du mélange	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
D	Célérité de l'onde de détonation	m s^{-1}
E	Énergie totale par unité de masse	J kg^{-1}
e	Énergie interne par unité de masse	J kg^{-1}
E_a	Énergie d'activation	J mol^{-1}
E_a^*	Énergie d'activation réduite	(-)
F	Vecteur des flux convectifs dans la direction x	
G	Vecteur des flux convectifs dans la direction y	
\hat{h}	Enthalpie sensible	J kg^{-1}
h	Enthalpie absolue	J kg^{-1}
h	Hauteur de la couche de gaz réactif	m
h_c	Hauteur critique	m
h_t	Épaisseur hydrodynamique	m
k	Facteur pré-exponentiel	s^{-1}
L	Dimension du domaine de calcul	m
L	Longueur de la cellule de détonation	m
$l_{1/2}$	Demi-longueur de réaction	m
l_i	longueur d'induction	m
\dot{m}	Débit massique	kg s^{-1}
M	Nombre de Mach	(-)

N_{sp}	Nombre d'espèces chimiques	(-)
$N_{1/2}$	Nombre de mailles de calcul par demi-longueur de réaction	(-)
p	Pression du fluide	Pa
q	Chaleur de réaction	J kg^{-1}
R	Constante universelle des gaz parfaits	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
r	Constante spécifique des gaz parfaits	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
S	Variable associée aux stioscopies numériques	
S	Vecteur des termes sources	
T	Température	K
U	Vecteur des variables conservatives	
u, v	Vitesse du fluide	m s^{-1}
V	Volume	m^3
v	Volume spécifique	$\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$
v_j^n	Approximation numérique du vecteur des variables conservatives U sur la maille j à l'itération n	
w_j^n	Approximation numérique du vecteur des variables caractéristiques U sur la maille j à l'itération n	
\mathcal{W}	Masse molaire	kg mol^{-1}
w	Vitesse du fluide dans le repère du choc	m s^{-1}
Y	Fraction massique	(-)
Z	Ratio des impédances acoustiques	(-)

Introduction

La consommation intérieure brute d'énergie en Europe était de 1628 tonnes équivalent pétrole en 2015, soit près de 16 barils de pétrole par habitant sur l'année [1]. La somme des contributions issues du gaz naturel, des dérivés du pétrole et des combustibles solides s'élève à 73% de la consommation intérieure brute totale. Cette forte dépendance aux énergies fossiles soulève plusieurs problèmes : des contraintes géopolitiques liées à l'importation des ressources primaires, des contraintes financières liées à la volatilité des prix et enfin des contraintes environnementales. L'augmentation de la place faite aux énergies renouvelables est la solution ayant aujourd'hui reçu le plus d'attention à la fois des pouvoirs publics et de la communauté scientifique. Cela concerne aussi bien la mise au point et l'utilisation de nouveaux combustibles (biomasse, biocarburant, bois...) que le développement de systèmes alternatifs de conversion de l'énergie (éoliennes, panneaux solaires...). Néanmoins, une meilleure efficacité des dispositifs de transformation des combustibles fossiles permettrait également de réduire ces contraintes en diminuant leur consommation.

Une fraction non négligeable des besoins énergétiques européens est consacrée à la production d'électricité via des turbines à gaz. À cela s'ajoute environ 3% de ces besoins, dédiés à l'aviation domestique et internationale et reposant sur l'utilisation de turbo-réacteurs [1]. Afin d'améliorer le rendement de ces machines, de nombreuses recherches ont porté leur attention sur l'optimisation des phases de compression et de détente, par l'intermédiaire des matériaux utilisés ou de leur architecture. Le cœur du système, à savoir la chambre de combustion, n'a bénéficié récemment que de relativement peu d'innovations. Les travaux s'inscrivant dans la thématique de la "*pressure gain combustion*" [2], ou combustion à pression augmentée, cherchent à répondre à cette problématique via la mise au point de dispositifs de combustion novateurs. La modification du cycle thermodynamique résultant de ces ruptures technologiques pourrait permettre d'accroître l'efficacité des turbomachines, et donc de produire davantage d'énergie ou d'augmenter l'impulsion pour la même quantité de carburant. La chaire industrielle CAPA (Combustion Alternative pour la Combustion Aérobie), dont fait partie cette thèse, vise à apporter des réponses à ces problématiques. Ce projet de recherche, financé par l'ANR, SAFRAN, MBDA-France et porté par l'institut Pprime (UPR 3346 CNRS) et l'ISAE-ENSMA, est consacré à l'étude expérimentale et numérique de la combustion à volume constant et de la détonation.

Plusieurs dispositifs propulsifs reposant sur la propagation des détonations existent dans la littérature. Récemment, le moteur à détonation rotative (RDE, pour *Rotating Detonation Engine*) a bénéficié d'une attention accrue de la part de la communauté

scientifique. Ce système est constitué de deux cylindres concentriques entre lesquels se propagent une ou plusieurs ondes de détonation. L'injection s'effectue sur la face inférieure et est autorégulée par les niveaux de pression atteints en aval des ondes de détonation. L'expansion des produits de détonation vers la face extérieure des cylindres produit une poussée continue. Le principal avantage découlant de l'emploi des détonations réside en un rendement théorique supérieur à celui de la combustion isobare aujourd'hui utilisée dans les chambres de combustion des turbomachines [3]. En outre, les moteurs à détonation rotative permettent d'obtenir une poussée quasi continue tout en étant extrêmement compacts. Les niveaux de pression atteints permettraient entre autres de s'affranchir de certains étages de compresseurs en amont de la chambre de combustion.

Cependant, l'écoulement au sein des moteurs à détonation rotative évolue dans des conditions fortement non idéales, conséquences des propriétés géométriques intrinsèques au dispositif. Ainsi, les caractéristiques des détonations observées expérimentalement dans ce type de moteur sont considérablement inférieures aux prédictions théoriques [4]. Plusieurs problématiques ont été identifiées comme pouvant être responsables de ces écarts. Le combustible et l'oxydant étant souvent injectés séparément pour des raisons de sécurité, un mélange partiel et inhomogène pourrait dégrader les performances attendues. De façon similaire, l'interpénétration des produits de détonation et des gaz frais pourrait conduire à un problème identique. La géométrie imposée par la chambre, et en particulier sa courbure, est également susceptible d'affecter la dynamique des fronts. Enfin, le confinement des gaz frais par les gaz brûlés issus des fronts de combustion précédents pourrait avoir un impact sur la propagation des ondes de détonation. Ce point particulier constituera le cœur de notre étude. La compréhension individuelle de chacune de ces problématiques est nécessaire à l'appréciation de la phénoménologie des moteurs à détonation rotative dans leur globalité.

Afin de mieux comprendre l'influence du confinement gazeux sur l'onde de détonation et sa dynamique, des simulations numériques ont été effectuées pour étudier cette problématique de façon générique. La configuration physique associée est représentée par la superposition d'une couche de prémélange au sein de laquelle se propage la détonation et d'une couche de gaz inerte. Cette situation, volontairement simplifiée relativement au système propulsif réel, a pour objectif de qualifier l'influence des gaz chauds sur la détonation et d'en quantifier l'effet potentiel sur les limites de propagation. Plus généralement, nos résultats s'inscrivent dans la thématique des détonations non idéales. La compréhension des interactions ayant lieu entre la détonation et des conditions de propagation défavorables contribue à en améliorer la connaissance dans sa globalité.

Ce mémoire est organisé en 6 chapitres. Le Chapitre 1 décrit la phénoménologie générale

des détonations. Le Chapitre 2 présente les détonations non idéales et plus spécifiquement les configurations expérimentales conduisant à l'introduction de pertes dans la zone de réaction de la détonation. Le Chapitre 3 présente le modèle mathématique et les méthodes numériques sur lesquels s'appuie le code de calcul développé dans le cadre de cette étude. Le Chapitre 4 présente les premiers résultats relatifs aux détonations idéales. La configuration des détonations confinées par un gaz inerte est traitée au sein des deux Chapitres 5 et 6. Dans le Chapitre 5, seuls les effets de confinements géométriques sont analysés et la couche d'inerte possède des propriétés identiques à celles de la couche réactive. Dans le Chapitre 6, l'étude se focalise sur l'influence de la température de la couche inerte, et en démontre les effets sur la dynamique de l'onde de détonation.

Généralités sur les détonations

Sommaire

1.1	Introduction	5
1.2	Description stationnaire de l'onde de détonation	6
1.2.1	Théorie CJ	6
1.2.2	Théorie ZND	9
1.3	Comportement instationnaire de la détonation	12
1.3.1	Instabilités non linéaires	13
1.3.2	Détonations multicellulaires	13
1.3.3	Détonations marginales	24
1.4	Synthèse Partielle	24

1.1 Introduction

Bien que la fabrication et l'utilisation de substances explosives soient attestées depuis plus de 1,000 ans, ce n'est qu'au cours de la seconde moitié du XIX^e siècle que débute l'étude rigoureuse des détonations. En 1869, Abel [5] réalisa une série d'expérimentations sur des poudres explosives. Il parvint à la conclusion que, suivant la technique d'amorçage employée, les substances pouvaient aussi bien brûler que détoner. L'aboutissement de ces travaux nécessita d'importants progrès techniques, à la fois dans la mise au point d'explosifs suffisamment stables et puissants, et dans la conception d'amorces fiables. La caractérisation rigoureuse du régime de détonation par Abel conduisit au développement d'expériences destinées à établir la célérité de l'onde détonante dans les explosifs condensés [6, 7], puis dans les mélanges gazeux [8, 9]. En particulier, l'étude menée par Mallard et Le Chatelier [9], qui est la première formulation moderne de la détonation, a pour héritage ces découvertes. C'est également le cas des travaux de Chapman [10] et Jouguet [11], dont la théorie est encore en usage aujourd'hui.

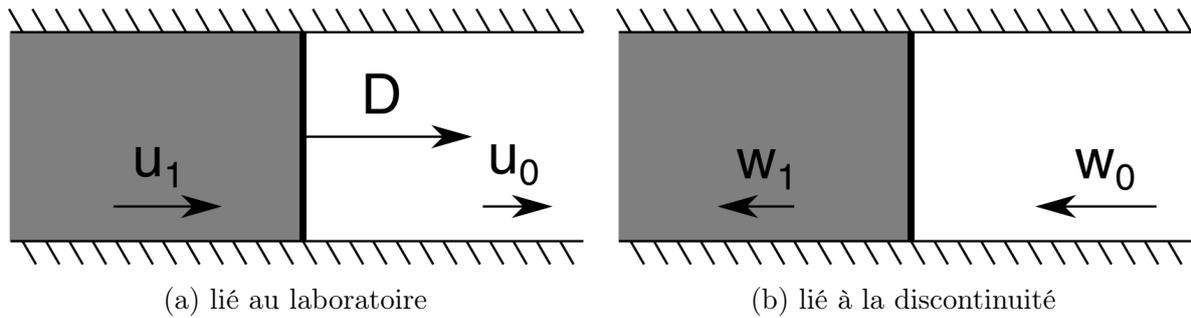


FIGURE 1.1 – Représentation des systèmes de coordonnées utilisés. À gauche, la détonation se propage dans le repère lié au laboratoire (a). Le schéma de droite se place dans le repère lié à la discontinuité, avec $w = u - D$ (b).

Ce chapitre traite des mécanismes physiques ayant lieu lors de la propagation d'une onde de détonation, et de leur modélisation théorique. Dans un premier temps, nous allons nous intéresser aux théories de Chapman - Jouguet (CJ) et Zel'dovich - von Neumann - Döring (ZND), dans lesquelles l'onde est stationnaire. Nous traiterons ensuite du caractère instable de la zone de réaction et des conséquences sur la structure réelle du front.

1.2 Description stationnaire de l'onde de détonation

1.2.1 Théorie CJ

La théorie désignée sous les initiales CJ, des noms de Chapman [10] et Jouguet [11], fut la première modélisation stationnaire de l'onde de détonation. C'est à cette époque que la formulation moderne, reposant sur la théorie des ondes de choc, a émergé. La détonation y est assimilée à une discontinuité plane se propageant à la vitesse constante D . La réaction chimique, initiée par l'onde de choc, est considérée comme instantanée et complète. Les phénomènes dissipatifs ne sont pas pris en compte dans cette approche. Dans la suite, les gaz sont modélisés par l'équation des gaz parfaits. Le milieu initial (respectivement, final) est indicé 0 (respectivement, 1). La vitesse du milieu est notée u dans le repère lié au laboratoire et w dans le repère lié à la discontinuité, comme représenté sur la Figure 1.1.

Les équations de conservation s'écrivent dans le repère lié à la discontinuité :

$$\rho_0 w_0 = \rho_1 w_1 \quad (1.1)$$

$$p_0 + \rho_0 w_0^2 = p_1 + \rho_1 w_1^2 \quad (1.2)$$

$$h_0 + \frac{w_0^2}{2} = h_1 + \frac{w_1^2}{2} \quad (1.3)$$

avec ρ la masse volumique, p la pression et enfin h l'enthalpie absolue. En éliminant les vitesses au sein de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, il vient :

$$\mathcal{R} : p_1 - p_0 + \dot{m}^2(v_1 - v_0) = 0 \quad (1.4)$$

où $v = 1/\rho$ est le volume spécifique et \dot{m} le débit massique. Cette équation est celle de la droite de Rayleigh-Michelson (\mathcal{R}) dans le plan (p, v) . En substituant les Équations 1.1 et 1.2 dans l'équation de l'énergie, nous obtenons l'équation de l'adiabatique de Crussard (\mathcal{C}) dans le plan (p, v) .

$$\mathcal{C} : h_1 - h_0 - \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_1 + v_0) = 0 \quad (1.5)$$

Cette courbe traduit la conservation des grandeurs thermodynamiques et est entièrement déterminée par les conditions initiales. À partir des enthalpies sensibles \hat{h} , il est possible d'introduire la chaleur de réaction q qui est la différence entre les enthalpies de formation des produits et des réactifs à la température de référence.

$$\mathcal{C} : \hat{h}_1 - \hat{h}_0 - q - \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_1 + v_0) = 0 \quad (1.6)$$

La chaleur de réaction n'est pas connue a priori, car elle dépend de la composition chimique à l'équilibre. Des codes thermodynamiques (STANJAN [12], CEA [13], Chemkin [14], Cantera [15]) permettent d'en calculer la valeur.

Les états finaux doivent satisfaire à la fois les Équations 1.4 et 1.6. Dans le plan (p, v) , représenté sur la Figure 1.2, cela se traduit par la nécessité d'être situé à l'intersection de la droite de Rayleigh-Michelson et de la courbe de Crussard. Plusieurs cas sont envisageables :

- La droite de Rayleigh-Michelson et l'adiabatique de Crussard ne présentent pas d'intersection.
- La droite de Rayleigh-Michelson et l'adiabatique de Crussard présentent deux points d'intersection notés F et f (pour fort et faible, respectivement). La validité physique de ces solutions ne peut être remise en cause qu'au travers d'observations

expérimentales ou de considérations physiques additionnelles, puisqu'elles satisfont les équations de conservation. La solution forte F est considérée comme instable : l'écoulement étant subsonique en aval de la détonation, les ondes de détentes peuvent atteindre la zone de réaction et atténuer l'amplitude de l'onde. Cette solution ne peut donc pas constituer une solution autonome. De même, il est possible de démontrer que la solution faible f n'est pas une solution physique.

- La droite de Rayleigh-Michelson est tangente à l'adiabatique de Crussard. Cette solution est celle historiquement retenue par Chapman et Jouguet. Jouguet démontra que cette solution équivaut à un nombre de Mach valant l'unité à l'état final et à une minimisation de l'entropie. Chapman prouva que la tangence correspond à la vitesse minimale admissible pour la détonation. Dans ce cas, la détonation se propage à la même vitesse que les perturbations acoustiques dans le milieu final : $D_{CJ} = u_{CJ} + c_{CJ}$, c_{CJ} étant la célérité du son. C'est ce qui assure à l'onde de détonation son autonomie vis-à-vis des perturbations.

La condition de tangence, dite condition CJ, permet de clore le système d'équations tout en s'affranchissant de la connaissance détaillée du mécanisme de propagation de la détonation. L'utilisation de l'hypothèse des chocs forts ($D^2 \gg c_0^2$) permet de caractériser l'état CJ au travers des relations approchées suivantes :

$$D_{CJ} \approx \sqrt{2(\gamma^2 - 1)q} \quad (1.7)$$

$$M_0^2 \approx \frac{2\rho_0(\gamma^2 - 1)q}{\gamma P_0} \quad (1.8)$$

$$\frac{p_{CJ}}{p_0} \approx \frac{\gamma}{\gamma + 1} M_0^2 \quad (1.9)$$

$$\frac{\rho_{CJ}}{\rho_0} \approx \frac{\gamma + 1}{\gamma} \quad (1.10)$$

$$\frac{T_{CJ}}{T_0} \approx \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1} \right)^2 M_0^2 \quad (1.11)$$

$$c_{CJ} \approx \frac{\gamma D_{CJ}}{\gamma + 1} \quad (1.12)$$

$$u_{CJ} \approx \frac{D_{CJ}}{\gamma + 1} \quad (1.13)$$

avec γ le coefficient adiabatique, $M_0 = D_{CJ}/c_0$ le nombre de Mach de l'onde de détonation, T la température. L'application de ces relations approchées présente une bonne concordance avec les mesures obtenues expérimentalement, et notamment avec la vitesse de détonation.

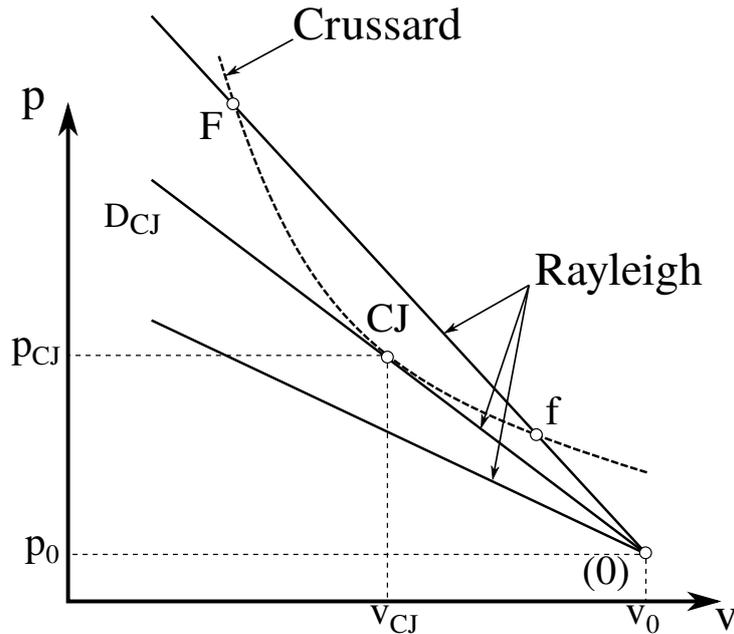


FIGURE 1.2 – Représentation de l'adiabatique de Crussard \mathcal{C} et de la droite de Rayleigh-Michelson \mathcal{R} dans le plan (p, v) . Les indices 0 et CJ correspondent à l'état initial et de Chapman-Jouguet, respectivement.

1.2.2 Théorie ZND

Le modèle CJ, reposant sur la simple analyse d'un volume de contrôle, fournit de très bons résultats dans la prédiction de l'état stationnaire de l'onde de détonation. En revanche, ce modèle ne permet pas d'étudier les limites de propagation (c'est-à-dire le domaine de détonabilité) pas plus qu'il donne la possibilité d'établir la dynamique de l'onde de détonation d'un point de vue mésoscopique. L'investigation des conditions dans lesquelles une détonation peut, ou non, atteindre un régime de propagation autoentretenu nécessite la modélisation de la zone de réaction, dans laquelle la libération d'énergie a lieu. Il est donc nécessaire de modéliser l'évolution chimique du système, afin d'obtenir une description complète de la zone de réaction, de l'état initial à l'état final.

Le modèle ZND, développé indépendamment par Zel'dovich [16], von Neuman [17] et Döring [18] dans les années 1940, est le prolongement de la théorie CJ et répond en partie à cette problématique. Cette modélisation repose sur des considérations préalablement effectuées par Vieille [19] et Michel'son [20]. La théorie ZND décrit la structure de l'onde de détonation comme suit : la zone de réaction, comprise entre l'onde de choc et l'état CJ, est constituée d'une zone d'induction et d'une zone de recombinaison. La zone d'induction est une étape thermiquement neutre, voire endothermique du fait de la production de radicaux. La libération d'énergie intervient lorsque ceux-ci sont présents en quantité suffisante : c'est l'étape dite de recombinaison. Un schéma décrivant cette structure ainsi que l'évolution de

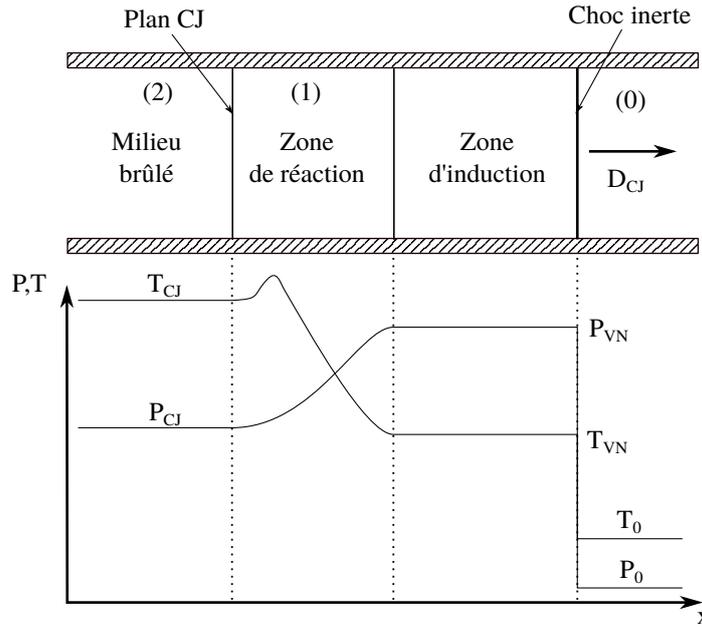


FIGURE 1.3 – Représentation schématique de la structure interne de l'onde de détonation décrite par le modèle ZND.

la pression et de la température dans les différentes zones est présenté sur la Figure 1.3. Au travers du choc, la pression augmente abruptement pour atteindre la valeur P_{VN} , puis se relaxe jusqu'à P_{CJ} . À noter que dans la zone d'induction, les variables thermodynamiques demeurent quasiment inchangées.

Cette modélisation requiert l'intégration d'une nouvelle courbe dans le plan (p,v) afin de représenter l'évolution des variables thermodynamiques. Il s'agit de la courbe d'Hugoniot (\mathcal{H}), correspondant à l'adiabatique de Crussard (\mathcal{C}) pour laquelle la chaleur de réaction q est égale à zéro. La progression de ces variables est présentée sur la Figure 1.4. À partir de l'état initial, la pression et la masse volumique augmentent au travers de l'onde de choc pour atteindre le point VN (von Neumann) via la courbe d'Hugoniot \mathcal{H} . La libération d'énergie intervient alors, faisant évoluer le système le long de la droite de Rayleigh-Michelson jusqu'à l'état CJ.

Le profil de la zone de réaction peut être obtenu par l'intégration des équations de conservation dans le repère du choc. Ces équations de conservation sont écrites de façon conservative :

$$d(\rho w) = 0 \quad (1.14)$$

$$d(p + \rho w^2) = 0 \quad (1.15)$$

$$d\left(h + \frac{1}{2}w^2\right) = 0 \quad (1.16)$$

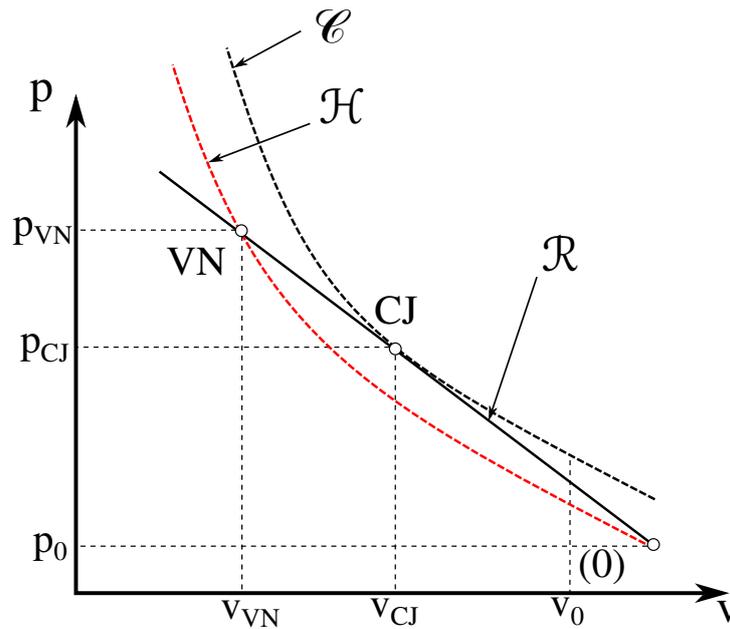


FIGURE 1.4 – Représentation de l'adiabatique de Crussard \mathcal{C} , de la courbe d'Hugoniot et de la droite de Rayleigh-Michelson \mathcal{R} dans le plan (p,v) . Les indices 0, CJ et VN correspondent à l'état initial, Chapman-Jouguet et von Neumann, respectivement. β représente l'avancement de la réaction chimique.

Elles peuvent être réécrites sous forme différentielle :

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{dw}{w} = 0 \quad (1.17)$$

$$dp + \rho w dw = 0 \quad (1.18)$$

$$C_p dT + q dY + w dw = 0 \quad (1.19)$$

C_p étant la capacité thermique à pression constante et Y la fraction massique de gaz frais. La transformation des réactifs en produits introduit une variation de vitesse décrite par la loi :

$$\frac{dw}{dx} = \frac{q\dot{\omega}/(C_p T)}{1 - M^2} \quad (1.20)$$

avec $\dot{\omega} = dY/dt$. La résolution s'effectue de façon itérative sur la vitesse de détonation D . Lorsque le numérateur (la condition de thermicité) et le dénominateur (la condition de sonicité) s'annulent simultanément, la solution est atteinte.

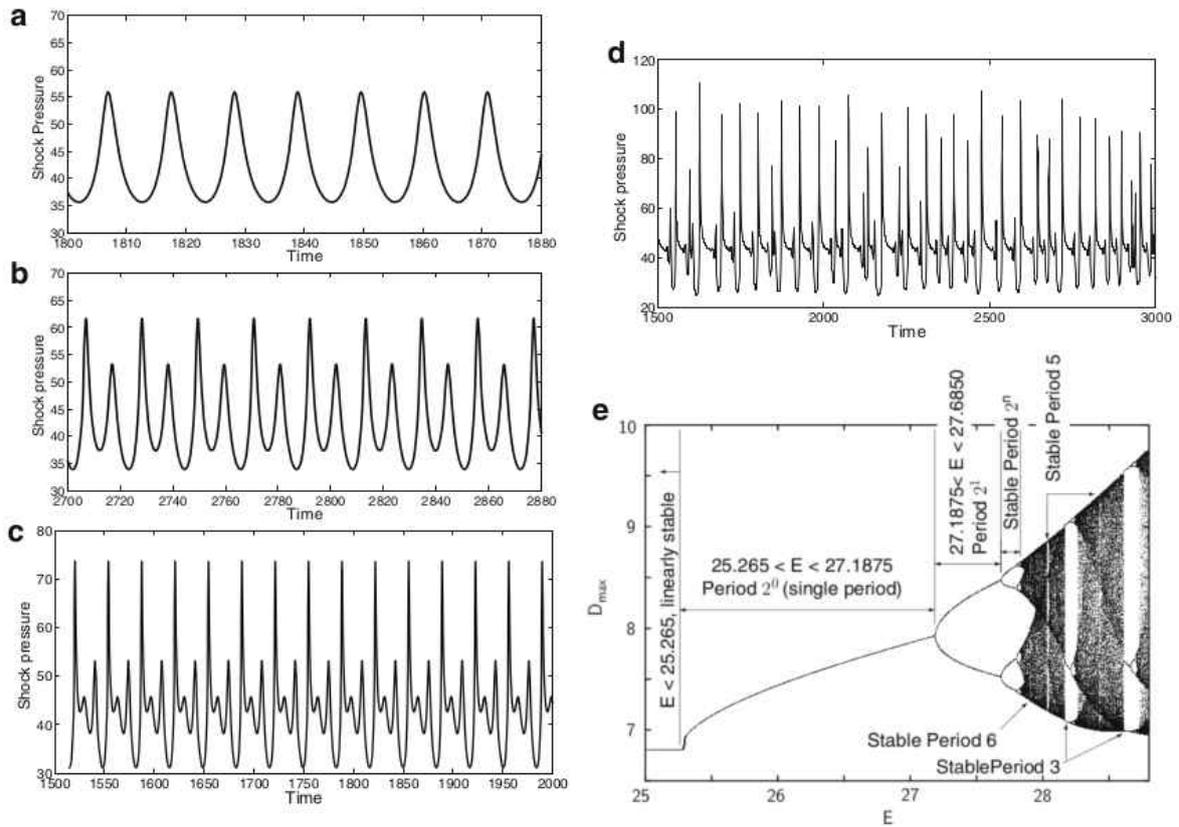


FIGURE 1.5 – (a), (b), (c) et (d) : Évolution temporelle de la pression du choc pour $E_a^* = 27.00$, $E_a^* = 27.40$, $E_a^* = 28.20$ et $E_a^* = 30.00$, respectivement [22]. (e) : Diagramme illustrant les bifurcations en fonction de l'énergie d'activation réduite $E_a^* = E_a/RT_0$ [23].

1.3 Comportement instationnaire de la détonation

Les taux de réaction décrivant la transformation des réactifs en produits au sein de la zone de réaction sont extrêmement sensibles à la température. Ainsi, de faibles variations de l'amplitude du choc précurseur conduisent à d'importants écarts en termes de longueur d'induction. Une variation de l'ordre de 1% de la vitesse D peut entraîner une variation de la longueur d'induction de 10% à 60% [21]. Ces fluctuations de la zone de réaction génèrent des ondes de pression qui affectent à leur tour l'amplitude du choc, d'où la présence d'une boucle instable de rétroaction. La conception stationnaire du phénomène de détonation est en conséquence jamais observée expérimentalement. Le front de détonation se comporte de façon instable, et adopte une structure instationnaire et tridimensionnelle.

1.3.1 Instabilités non linéaires

La stabilité de la détonation peut être étudiée suivant plusieurs méthodes. L'analyse de stabilité linéaire consiste à imposer au système une petite perturbation et à en étudier la réponse [24]. L'hypothèse de la perturbation faible permet de linéariser puis d'intégrer le système d'équations, mais limite par nature le spectre d'investigation aux petites perturbations. La résolution des équations de Navier-Stokes permet de décrire complètement la dynamique fortement non linéaire des détonations. Le comportement stable ou instable peut être analysé pour différents paramètres et conditions initiales, dans plusieurs dimensions de l'espace.

L'étude numérique, restreinte à une dimension, de la stabilité des détonations a été largement traitée dans la littérature [25]. Les paramètres thermodynamiques $q/rT_0 = 50$ et $\gamma = 1.2$ sont les plus fréquemment employés. C'est l'énergie d'activation réduite $E_a^* = E_a/RT_0$ qui joue le rôle de variable de contrôle. Ainsi, pour $E_a^* < 25.26$, la détonation est stable et son comportement est stationnaire. L'amplitude du choc précurseur est constante et égale à la valeur théorique de la théorie ZND. Pour des valeurs de E_a^* supérieures à 25.26, des oscillations apparaissent et affectent entre autres l'amplitude du choc précurseur et la vitesse de détonation. La nature de ces oscillations, c'est-à-dire leur amplitude et leur période, varie suivant la valeur de E_a^* . Entre $E_a^* = 25.26$ et $E_a^* = 27.19$, la pression du choc fluctue suivant une unique période et augmente en intensité avec l'énergie d'activation réduite (voir Figure 1.5 (a)). Pour les valeurs situées entre $E_a^* = 25.26$ et $E_a^* = 27.19$, une seconde période oscillatoire apparaît (voir Figure 1.5 (b)). D'autres périodes apparaissent pour des valeurs de E_a^* plus grandes, dans un intervalle de plus en plus court. Ce phénomène est appelé cascade de doublements de période et conduit à un comportement chaotique (voir Figure 1.5 (d)). Les différents maxima sont représentés en fonction de l'énergie d'activation réduite sur le diagramme de bifurcations, Figure 1.5 (e). Ces résultats démontrent que si le mélange est suffisamment sensible aux perturbations, le couplage entre le choc et la zone de réaction se comporte de façon chaotique.

1.3.2 Détonations multicellulaires

Lorsque le problème est étendu à deux, voire trois dimensions de l'espace, les instabilités intrinsèques à la détonation affectent notablement sa structure et sa dynamique. Pour cette raison, la détonation plane telle que formulée dans les théories CJ et ZND n'est pas représentative de sa structure réelle. Le front de détonation dans sa forme la plus libre adopte naturellement une structure instationnaire tridimensionnelle. Campbell et Wood-

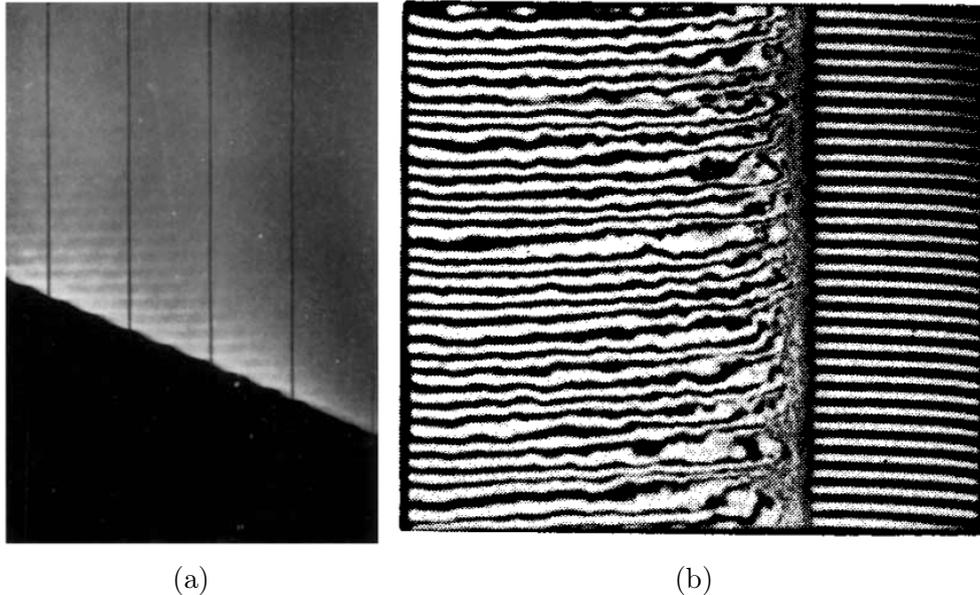


FIGURE 1.6 – (a) : Chronogramme de la propagation d'une onde de détonation dans un mélange $2\text{CO} + \text{O}_2 + 2\text{H}_2$ [27]. (b) : Interférogramme d'une détonation autonome dans un mélange $2\text{CO} + \text{O}_2 + 2\text{H}_2$ [29].

head [26, 27] furent les premiers à obtenir la preuve expérimentale du caractère pulsatoire du front. Sur le chronogramme présenté Figure 1.6 (a), de brèves oscillations sont présentes le long de la trajectoire, témoignant des variations de vitesse de la détonation. La vitesse moyenne reste cependant constante et correspond à la valeur calculée par le modèle CJ. Au début des années 1960, l'utilisation de nouveaux outils de diagnostics expérimentaux (capteurs de pression piézoélectriques, méthode des plaques recouvertes d'un dépôt de carbone...) a confirmé la forme ondulatoire de l'onde de détonation, et ce dans l'immense majorité des configurations étudiées. La visualisation directe de l'écoulement [28] et les mesures par interférométries [29] (voir Figure 1.6 (b)) ont notamment révélé la présence d'ondes de choc se déplaçant transversalement à la direction principale de propagation.

Description de la structure cellulaire

Le front de détonation est constitué d'une alternance d'ondes de Mach et de chocs incidents se propageant longitudinalement, séparés par des ondes transverses. Ces ondes transverses s'étendent et s'atténuent en aval du front jusqu'à devenir de simples perturbations acoustiques. Les intersections de ces trois ondes de choc sont qualifiées de points triples et se déplacent le long du front de détonation au gré du mouvement des ondes transverses. Une ligne de glissement issue du point triple sépare les gaz issus du choc incident de ceux qui traversent l'onde de Mach. Une strioscopie ainsi qu'un schéma reprenant cette configuration sont présentés Figure 1.7. La dénomination "point triple" correspond

à l'analyse de l'écoulement bidimensionnel, dans lequel les ondes de choc sont représentées par des lignes et donc leur intersection par un point. Pour des écoulements tridimensionnels, les différentes ondes de choc sont constituées de surfaces, et leurs intersections de lignes.

Suivant une technique mise au point par Antolik [31], Denisov et Troshin [32, 33] utilisèrent des plaques uniformément recouvertes de suie afin d'étudier la structure de l'onde de détonation. Le passage de la détonation inscrit sur ces plaques des traces caractéristiques du mélange employé. Elles témoignent des trajectoires adoptées par les points triples lors de leur déplacement le long du front de détonation. Bien que le mécanisme précis par lequel la suie est érodée des plaques enfumées ne soit pas connu, les conditions de vitesse et de pression sévissant localement aux points triples sont sans aucun doute responsables de l'érosion du dépôt de carbone et donc de l'impression de ces trajectoires. La Figure 1.8 (a) constitue un exemple typique de plaque illustrant cette méthode aujourd'hui largement employée dans les expériences de détonique en phase gazeuse. Le réseau ainsi dessiné par les trajectoires des points triples forme un ensemble de structures losangiques en forme d'écailles appelées cellules de détonation, de largeur caractéristique λ et de longueur L . Sur la Figure 1.8 (b), la topologie tridimensionnelle de la détonation est imprimée sur un mylar en aluminium placé devant le front. Le réseau formé par les cellules est clairement visible. La mesure des cellules de détonation est essentielle, car leurs dimensions sont des propriétés intrinsèques du mélange réactif aux conditions initiales et limites données [34]. La détonation est dite multicellulaire lorsque la largeur des cellules λ est petite en comparaison de la dimension transversale caractéristique (diamètre ou largeur du tube, diamètre d'une détonation sphérique) du système. La Figure 1.9 (a) illustre la propagation d'une détonation multicellulaire à différents instants successifs. Dans ce cas, la trace de la structure cellulaire est obtenue progressivement via l'enregistrement par une caméra ultrarapide d'une source laser passant au travers d'une plaque recouverte d'un dépôt carboné.

Le processus de formation d'une cellule de détonation est présenté schématiquement sur la Figure 1.9 (b). L'origine, ou apex résulte de la collision de deux points triples formant une explosion locale qui se traduit en une détonation forte. La vitesse locale du choc augmente rapidement à environ $D/D_{CJ} \approx 1.8$ [37], puis décroît progressivement dû à la courbure du front et aux gradients présents dans l'écoulement. Au centre de la cellule, les ondes transverses situées de part et d'autre de l'axe longitudinal entrent en collision avec d'autres points triples ou avec une frontière physique. À ce stade, la vitesse est légèrement inférieure à D_{CJ} . L'amortissement se poursuit, conduisant à un accroissement de la longueur d'induction entre le choc et la zone de réaction, jusqu'à ce qu'une nouvelle

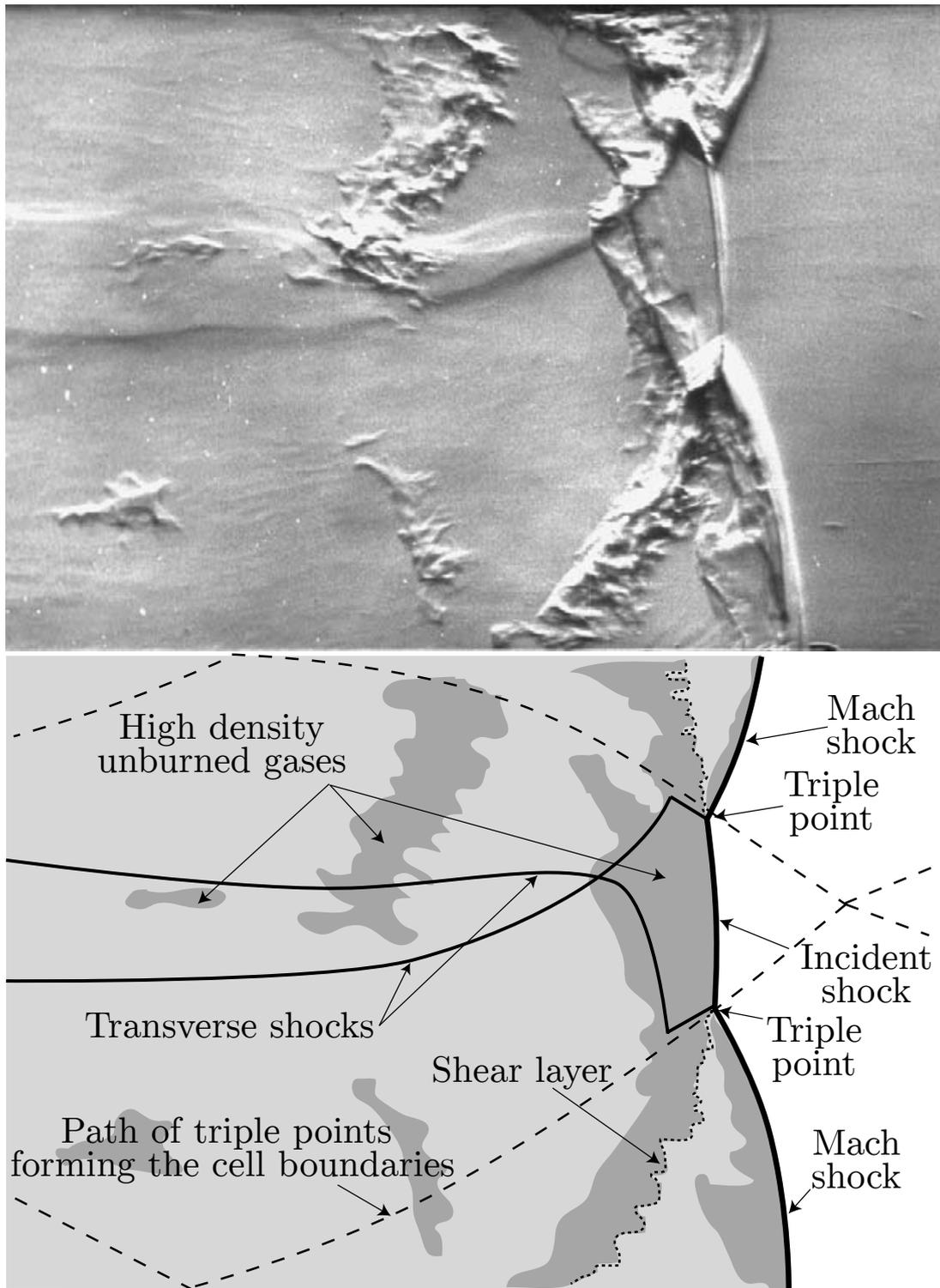


FIGURE 1.7 – Strioscopie de la structure d'un front de détonation (haut) se propageant dans un mélange $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ à la pression de 3.4 kPa, accompagné d'un schéma explicatif (bas). Adapté de Radulescu et al. [30].

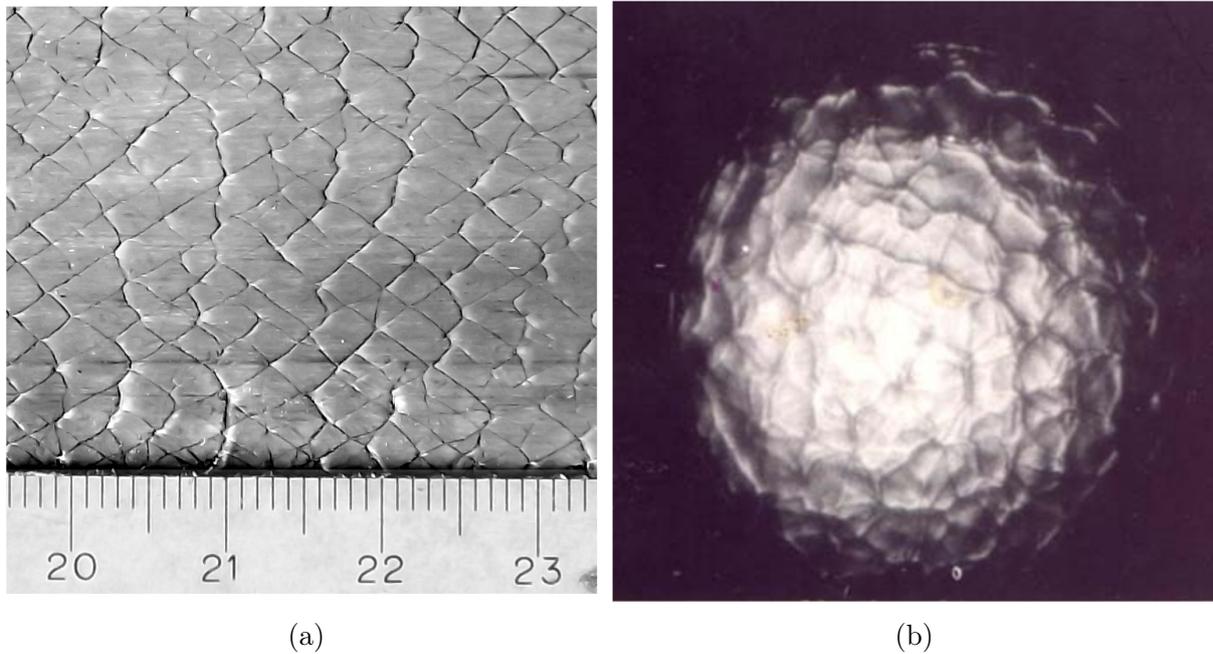


FIGURE 1.8 – (a) : Impression de la structure cellulaire sur une plaque recouverte d'un dépôt de carbone. Mélange $C_2H_4 + 3O_2 + 11Ar$ à la pression de 1 bar. Avec l'aimable autorisation de GEOFFREY JARSALÉ. (b) : Déformation d'un film Mylar par la distribution non uniforme de pression le long du front de détonation [35].

collision se produise. Les dimensions caractéristiques de la cellule de détonation présentent une relation de similarité, quel que soit le mélange employé. Ainsi, à l'état CJ, le rapport de la largeur λ sur la longueur L est égal à 0.6. L'angle moyen de la trajectoire des points triples par rapport à la direction de propagation est d'environ 30° .

La structure cellulaire de la détonation (c'est-à-dire l'ensemble des cellules) forme un réseau plus ou moins régulier suivant le mélange employé. Strehlow [38] dans un premier temps, puis Libouton et al. [39] par la suite, ont proposé une classification fondée sur la régularité des cellules. La Figure 1.10 illustre les différentes catégories proposées par Libouton et al. [39]. Le cas (a) correspond à une structure très régulière pour laquelle toutes les cellules présentent des dimensions identiques. Il est caractéristique des mélanges fortement dilués par un gaz inerte monoatomique, tel que l'argon ou l'hélium. Le cas (b) appartient à la catégorie des structures régulières. Une diminution de la dilution ou une augmentation de la pression initiale relativement au cas (a) conduisent à ce résultat. La faible régularité de la structure cellulaire (cas (c)) entraîne une dispersion des tailles de cellule, diminuant d'autant la précision de la mesure d'une largeur caractéristique. Les formes rencontrées ne sont plus uniformes. Ce type de structure est rencontré pour des mélanges H_2/O_2 , ou des mélanges dilués avec des molécules diatomiques ou triatomiques. Enfin, le cas (d) correspond à la configuration la plus irrégulière. Des sous-structures se

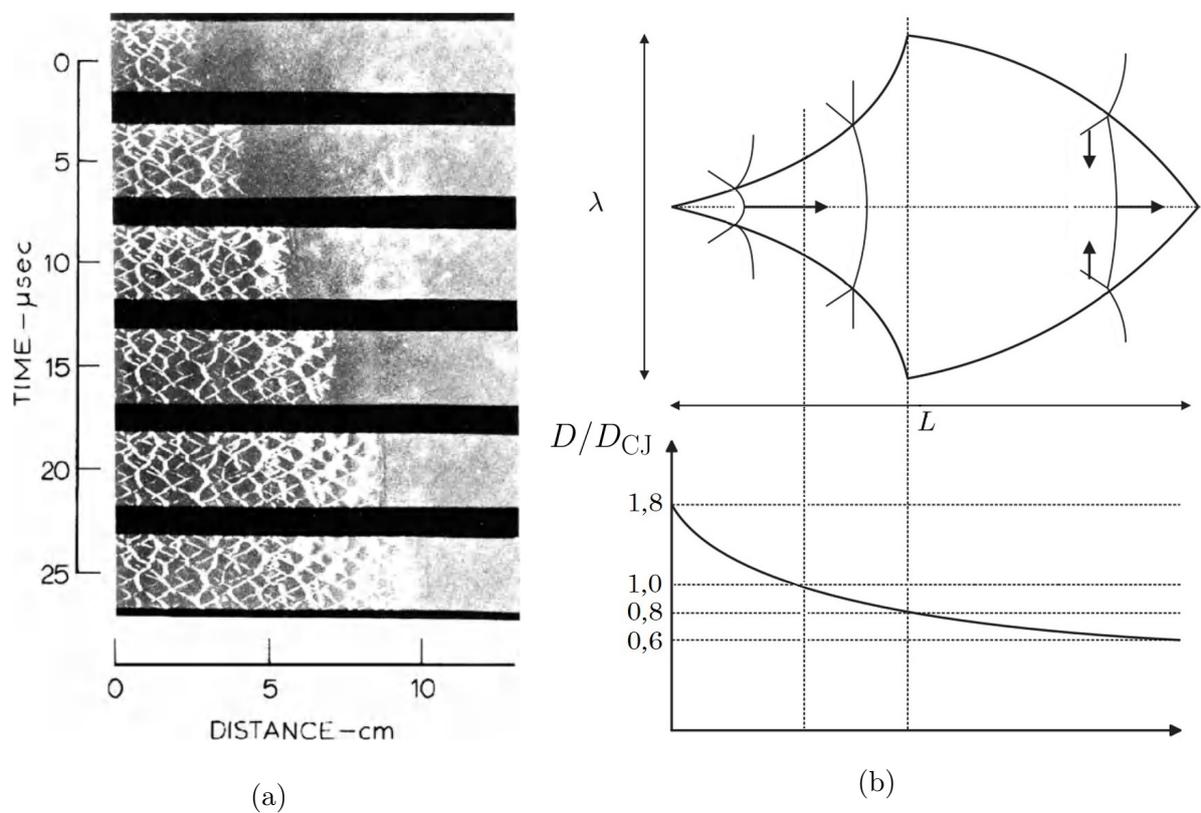


FIGURE 1.9 – (a) : Film stroboscopique de la propagation d'une détonation multicellulaire dans un mélange $C_2H_2 + O_2$ [34]. (b) : Représentation d'une cellule de détonation et de la célérité locale du choc le long de son axe [36].

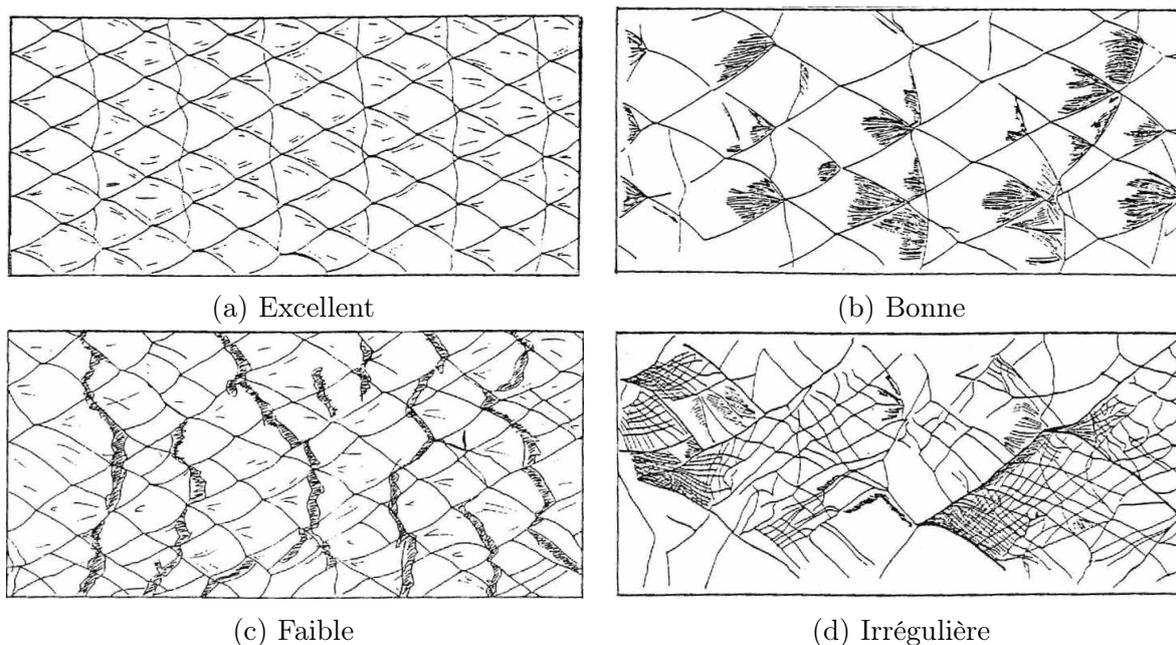


FIGURE 1.10 – Classification de la structure cellulaire de la détonation basée sur sa régularité, adapté de Libouton et al. [39].

développent à l'intérieur des cellules. Cette catégorie est typique des mélanges d'hydrocarbures et d'air. L'énergie d'activation réduite $E_a^* = E_a/RT_0$, qui est un paramètre calculé en fonction des propriétés du mélange, influence directement sur la structure cellulaire.

Influence des conditions initiales sur la taille de cellule

Il existe une relation de proportionnalité entre la taille caractéristique des cellules et une longueur représentative de la réaction chimique telle que la longueur d'induction l_i : $\lambda = Al_i$ [40, 41]. La constante A est déterminée expérimentalement pour un mélange donné à la stœchiométrie ($\phi = 1$), ce qui permet par la suite le calcul de λ pour différentes compositions à partir de longueurs de réactions l_i évaluées via la théorie ZND. Les prédictions ainsi obtenues correspondent quantitativement aux données issues de l'expérience, en particulier pour des compositions proches de la stœchiométrie. En revanche, pour des richesses plus éloignées de l'unité, les valeurs expérimentales peuvent différer de plus d'un ordre de grandeur de celles calculées grâce à la relation linéaire présentée ci-dessus. Plusieurs tentatives ont été faites afin d'améliorer la validité de cette loi de proportionnalité, notamment par une meilleure estimation du coefficient A . En particulier, Gavrikov et al. [42] ont cherché à établir une dépendance entre A et plusieurs facteurs de stabilité du mélange réactif, tels que l'énergie d'activation. Ng [43], suivant une approche similaire reposant sur l'évolution du coefficient de proportionnalité avec certains paramètres de stabilité, obtint des résultats d'une précision accrue au prix d'une complexité

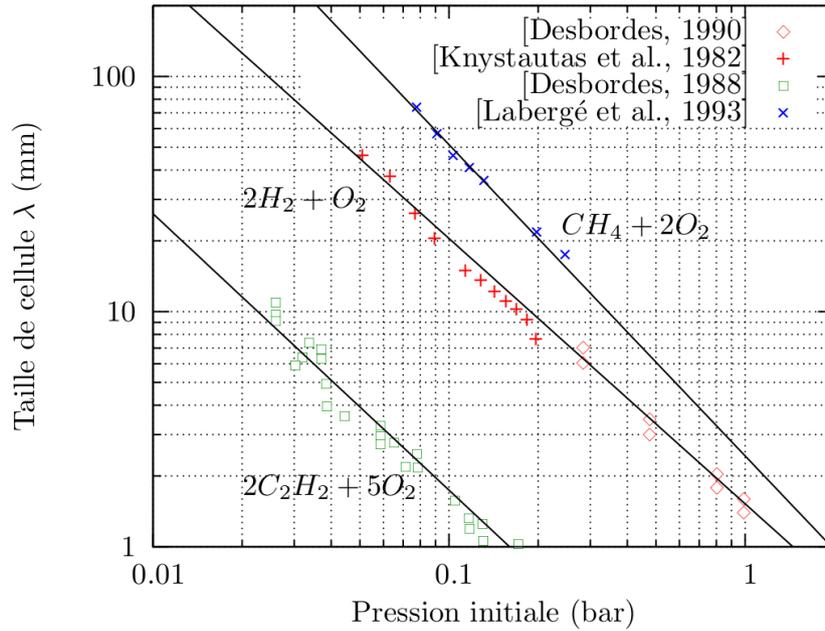


FIGURE 1.11 – Variation de la taille de la cellule de détonation en fonction de la pression initiale pour des mélanges comprenant de l’hydrogène ou différents hydrocarbures en proportions stoechiométriques avec l’oxygène [45].

et d’un nombre de constantes plus important. La détermination d’une relation universelle liant la taille de cellule et l’échelle spatiale de libération de l’énergie chimique n’a pas été clairement établie. Empiriquement, ce facteur de proportionnalité A a été évalué comme ayant pour valeur entre un et deux ordres de grandeur ($A \approx 10-100$) [44]. En conséquence, la taille de cellule est fortement corrélée aux conditions initiales telles que la pression du milieu, sa température ou la richesse du mélange. La relation de proportionnalité entre λ et la pression initiale s’écrit $\lambda \propto p_0^{-\alpha}$ avec $\alpha \in [1.1, 1.2]$ entre 1 kPa et 1000 kPa pour la plupart des mélanges (voir Figure 1.11). En revanche, l’influence de la température initiale n’est pas aussi simple, car elle fait également intervenir la pression et la densité. Les variations de richesse se traduisent par une parabole dont le minimum est situé à $\phi \approx 1$ (voir Figure 1.12). La dilution du mélange réactif accroît généralement la taille de cellule λ .

Structure turbulente de la détonation

Le caractère instationnaire et tridimensionnel des détonations n’est pas compatible avec une description laminaire de l’écoulement des gaz en aval du front. L’extrême sensibilité de la zone de réaction aux fluctuations de températures, qui est à l’origine de la structure cellulaire, est également responsable du caractère turbulent de l’écoulement. Dans ce cas, la turbulence est issue des fluctuations de vitesse, au même titre que dans les écoulements

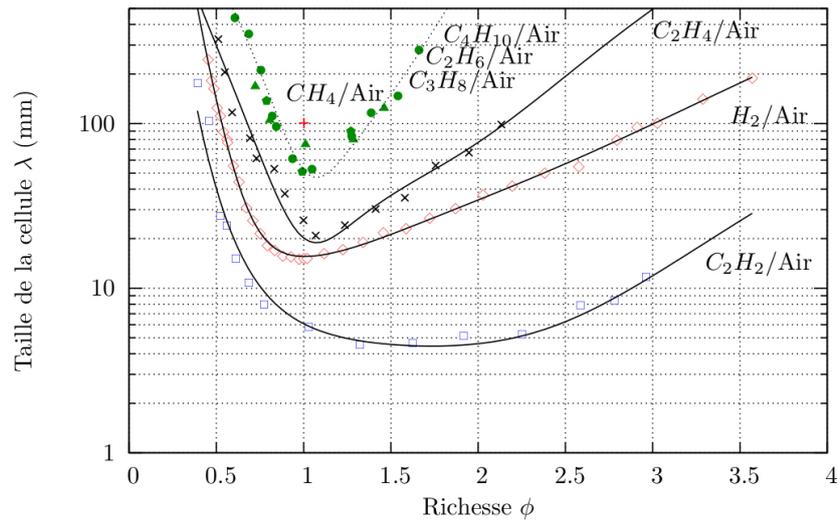


FIGURE 1.12 – Variation de la taille de la cellule de détonation avec la richesse pour différents mélanges hydrocarbures et d'air [46] et d'hydrogène et d'air [47] ($p_0 = 1 \text{ atm}$) [45].

incompressibles, mais aussi de l'interaction entre les chocs et des gradients de pression et de densité (mécanisme baroclinique) [48].

La présence de poches de gaz frais en aval du front est une conséquence directe de la sensibilité de la zone de réaction aux variations de température. L'allongement de la longueur d'induction au cours de la vie d'une cellule de détonation (voir Figure 1.9 (b)) entraîne une accumulation de gaz frais entre le choc et la zone de réaction. Lors de la phase de convergence des ondes transverses, dans la seconde moitié de la cellule, les points triples induisent la création d'une langue de gaz frais déportée en aval du front. Cette poche est définitivement détachée du front lors de la collision des points triples.

De nombreux travaux, numériques et expérimentaux, ont fait état de la présence de poches de gaz frais dans l'écoulement [49–55]. Elles sont mentionnées pour la première fois dans l'étude expérimentale de Subbotin [49], lequel a effectué des visualisations directes de détonations se propageant dans des mélanges réactifs plus ou moins réguliers. À l'issue de sa publication, Subbotin conclut notamment que : i/ la collision des ondes transverses peut donner lieu à la création de poches de gaz frais évoluant en aval du front de détonation. ii/ Ces poches de gaz persistent sur une distance d'environ une taille de cellule au-delà de l'onde de détonation. Oran et al. [50] ont cherché, au travers de l'analyse de simulations numériques, à mieux comprendre d'une part les mécanismes de formation de ces poches de gaz, et d'autre part en quoi elles pourraient affecter la propagation de la détonation. En particulier, Oran et al. [50] ont suggéré que la présence de ces poches pourrait être à l'origine de la réinitiation d'un nouveau cycle à la fin de chacune des cellules de détonation. Les simulations effectuées par Gamezo et al. [53] ont porté sur l'influence de la régularité

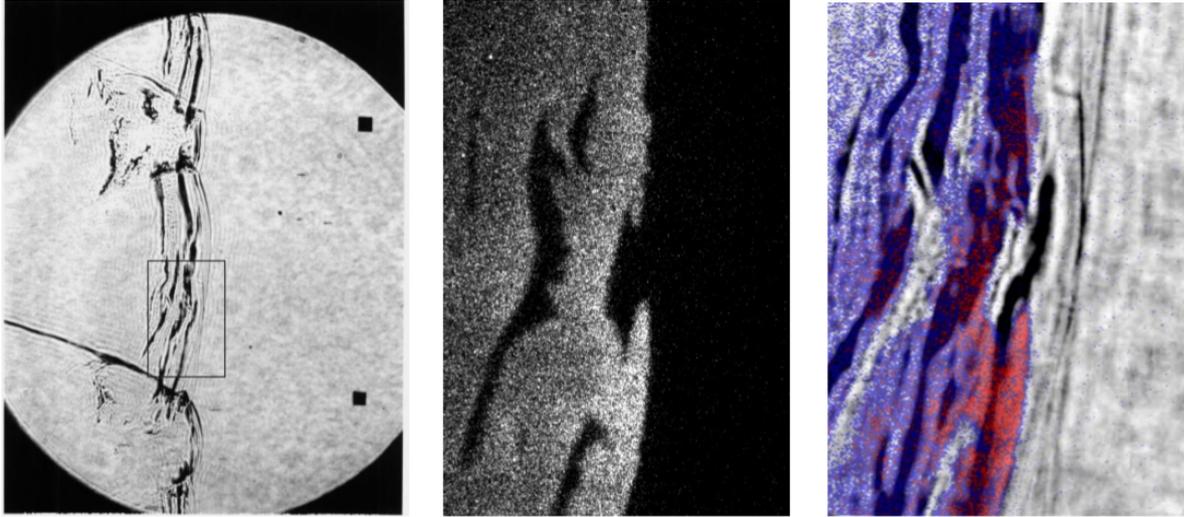


FIGURE 1.13 – Visualisation du front de détonation dans un mélange $2.4\text{H}_2 - \text{O}_2 - 5.5\text{N}_2$ à $p_0 = 21 \text{ kPa}$. De gauche à droite : strioscopie, fluorescence OH et PLIF [57].

du mélange réactif (c'est-à-dire la valeur de l'énergie d'activation dans le modèle cinétique global) sur la formation des poches de gaz frais. Au-delà d'une valeur minimale de l'énergie d'activation, les auteurs ont confirmé la présence de ces poches et leur mode de formation. Leur taille, ainsi que leur profondeur de pénétration en aval du front de détonation, augmentent avec le degré d'instabilité du mélange réactif. De plus, ces simulations ont montré que le mode de combustion de ces poches dépend également de l'énergie d'activation du mélange. Pour de faibles valeurs de E_a^* , l'auto-inflammation des gaz frais pré comprimés par l'onde de choc primaire constitue le mécanisme principal de combustion des poches. En revanche, lorsque l'énergie d'activation est plus importante, les échanges de masse et de chaleur avec les régions chaudes voisines des poches vont également participer de façon non négligeable au mécanisme de combustion. Kiyanda et Higgins [56], par le biais de visualisation strioscopique à haute vitesse et de la détection de la luminosité émise par les radicaux OH, ont démontré que dans des configurations très irrégulières, près de 40% des gaz frais sont déportés au sein de poches de gaz. L'analyse des temps d'induction a notamment révélé que le mélange turbulent entre les gaz brûlés et imbrûlés est responsable en grande partie de la combustion de ces poches en moins d'une taille de cellule. Une visualisation du front de détonation et des poches de gaz frais associées est représentée Figure 1.13. L'image centrale (fluorescence OH) laisse clairement apparaître les îlots de gaz frais en amont du front et la formation d'une nouvelle poche.

Ces poches de gaz, et plus particulièrement les discontinuités de densité qu'elles induisent dans l'écoulement, sont à l'origine d'instabilités hydrodynamiques. Les instabilités favorisent le mélange et donc la combustion des îlots de gaz frais convectés en aval du front. Les instabilités de Kelvin-Helmoltz se développent le long des lignes de glissement

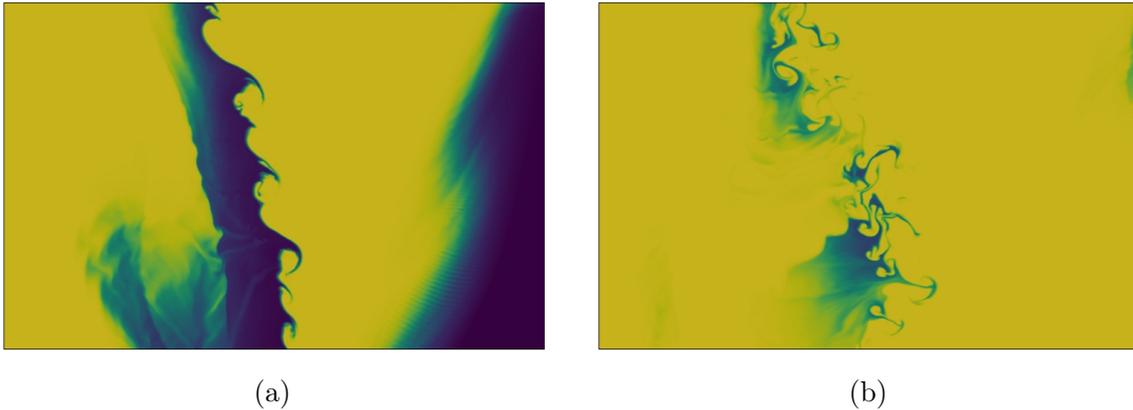


FIGURE 1.14 – Exemples d’instabilités hydrodynamiques : (a) Kelvin-Helmoltz, (b) Richtmyer-Meshkov.

(voir Figure 1.14 (a)), puis des instabilités de Richtmyer-Meshkov sont générées lors du passage d’ondes de choc dans les poches de gaz frais [30] (voir Figure 1.14 (b)). Les fluctuations générées par ces instabilités hydrodynamiques persistent longtemps après la disparition des poches de gaz, et sont responsables de l’aspect irrégulier et turbulent de l’écoulement en aval du front. L’influence de la combustion de ces poches de gaz et des instabilités hydrodynamiques sur la détonation et sa structure cellulaire n’est pas résolue à ce jour [58].

Les effets multidimensionnels tels que l’interaction des ondes transverses ou la turbulence jouent un rôle important dans le mécanisme de propagation des détonations irrégulières. L’écoulement ne peut donc pas être correctement représenté par les échelles de longueur issues des théories stationnaires du type ZND. En particulier, les temps d’induction sont accrus de plusieurs ordres de grandeur comparativement aux résultats stationnaires. De plus, l’élargissement du spectre des tailles de cellules présentes dans l’écoulement rend discutables la mesure et la pertinence d’une unique dimension caractéristique λ . La nécessité d’introduire une autre échelle caractéristique, tenant compte des processus instationnaires ayant lieu en aval du front, a été introduite par Soloukhin qui lui donna le nom d’épaisseur hydrodynamique [59, 60]. Elle correspond à la zone située entre le front et la localisation moyenne du plan sonique, pour lequel le nombre de Mach dans le repère du choc vaut 1 et qui isole l’amont des perturbations acoustiques en aval. Vasil’ev et al. [61, 62] ont réalisé les premières tentatives de mesure de l’épaisseur hydrodynamique en plaçant un obstacle dans l’écoulement. Lorsque la détonation atteint l’obstacle, l’écoulement est supersonique et un choc détaché apparaît. La transition vers un écoulement subsonique se traduit par la transition vers un choc attaché à l’obstacle. En observant cette transition, il est possible de déterminer la distance à laquelle l’écoulement devient supersonique dans le repère du laboratoire. Une approche similaire a été employée

TABLE 1.1 – Synthèse des épaisseurs hydrodynamiques évaluées dans la littérature.

	h_t/λ
Vasil'ev et al. [61]	2 – 4
Vasil'ev et al. [62]	3.5 – 10
Weber et Olivier [63]	0.4 – 0.8
Edwards et al. [65]	2 – 4
Jarsalé et al. [66]	5 – 7

et étendue par Weber et Olivier [63] qui ont utilisé un peigne constitué d'une multitude d'obstacles afin de tenir compte de la non-planéité du front. Néanmoins, cette méthode sous-estime l'épaisseur hydrodynamique, car elle permet de déterminer le plan sonique dans le repère du laboratoire, et non dans le repère de la détonation [64]. Edwards et al. [65] ont développé une technique différente basée sur l'enregistrement et l'analyse des signaux de pression. Ils ont supposé que l'atténuation des fluctuations de pression coïncide avec la fin de l'épaisseur hydrodynamique. Le Tableau 1.1 synthétise les différentes estimations de l'épaisseur hydrodynamique présentes dans la littérature.

1.3.3 Détonations marginales

L'instabilité du front est une caractéristique intrinsèque et universelle des détonations. Cependant, lorsque les dimensions caractéristiques du tube sont du même ordre de grandeur que la taille de cellule λ , le couplage avec les conditions limites affecte la dynamique de la détonation, qualifiée dans ce cas de marginale. La structure cellulaire s'adapte aux contraintes imposées par la géométrie. Les structures observées diffèrent suivant la géométrie du tube.

La structure la plus simple dans un tube à section rectangulaire est constituée de deux ondes transverses se propageant suivant la largeur et la profondeur. Selon la synchronisation entre les deux ondes, la trajectoire des points triples décrit des mouvements différents, qualifiés de modes rectangulaire, diagonal ou hélicoïdal [67, 68]. Dans les tubes de section circulaire, la détonation marginale correspond à un mode de propagation à une seule onde transverse. Le point triple adopte alors une trajectoire hélicoïdale à pas constant.

1.4 Synthèse Partielle

Une détonation est un choc fort se propageant de manière autoentretenu. L'énergie nécessaire provient de la réaction chimique initiée par le choc au cours de son mouve-

ment. Les modélisations stationnaires (CJ, ZND) permettent d'obtenir une représentation correcte de la détonation d'un point de vue macroscopique mais ne parviennent pas à en restituer la structure mésoscopique. En réalité, la détonation est complexe, tridimensionnelle et instationnaire. La sensibilité de la zone de réaction aux perturbations de températures est à l'origine de ce comportement. Le front de détonation est constitué de chocs incidents, d'ondes de Mach et d'ondes transverses, concourants aux points triples. Le réseau formé par la trajectoire des points triples est caractéristique du mélange employé ainsi que des conditions initiales. L'écoulement en aval du front de détonation est le siège d'une turbulence spécifique qualifiée de turbulence "hors équilibre" (interaction choc-choc et choc-tourbillon). Des poches de gaz frais se forment et sont convectées en aval du front, multipliant les instabilités hydrodynamiques.

Étude des détonations non idéales

Sommaire

2.1	Introduction	27
2.2	Influence des pertes sur les instabilités non linéaires	28
2.3	Études expérimentales et numériques des détonations non idéales	28
2.3.1	Détonations dans des canaux de petite section	29
2.3.2	Détonations dans des tubes poreux	31
2.3.3	Diffraction de la détonation	33
2.3.4	Détonations confinées par un gaz inerte	36
2.4	Synthèse partielle, position et apport de notre étude	49

2.1 Introduction

Au-delà du milieu réactif au sein duquel évolue l'onde de détonation, son environnement immédiat influe sur sa dynamique et sur son domaine de viabilité. Dans la plupart des cas, ces échanges avec le milieu extérieur se traduisent par des pertes, entraînant une chute de la vitesse de détonation et pouvant conduire à son extinction. La compréhension des interactions ayant lieu entre les conditions limites imposées par le système et la détonation permet d'approfondir la connaissance des mécanismes responsables de sa propagation. Ce chapitre traite de l'influence des conditions de propagation non idéales sur la détonation. Dans un premier temps, nous abordons les effets induits par des pertes sur les instabilités non linéaires. Plusieurs types de conditions limites sont ensuite passées en revue dans la suite de ce chapitre, en ayant pour but de mettre en lumière les similarités entre les différentes configurations non idéales rencontrées dans la littérature. Une attention particulière est portée au cas des détonations confinées par un gaz inerte, qui constitue le cœur de notre étude.

2.2 Influence des pertes sur les instabilités non linéaires

Dans la Sous-section 1.3.1, l'influence potentielle de l'environnement extérieur sur l'onde de détonation n'est pas prise en compte. Dans ce cas, les instabilités et le comportement oscillatoire qui se développent sont seulement le fruit de la sensibilité du mélange aux perturbations. De façon plus réaliste, des conditions de propagation non idéales sont susceptibles d'interférer avec ces instabilités. Les phénomènes physiques associés sont en général responsables de pertes dans la zone de réaction (réactions endothermiques, friction avec les parois, échange de chaleur, variations de section), et peuvent être modélisés par un terme source négatif dans les équations d'Euler [69].

Zhang et Lee [69] se sont intéressés à la résolution des équations d'Euler incorporant un terme traduisant les effets de frottement pariétal. Ils ont démontré que ces effets provoquent une diminution de la vitesse de détonation. La température post-choc est réduite, ce qui entraîne un accroissement de la sensibilité du taux de réaction aux perturbations. Les pertes se traduisent donc par une augmentation des instabilités. L'analyse de Dionne et al. [70] indique également que le frottement augmente "l'énergie d'activation effective" du mélange, et accroît les instabilités. Watt et Sharpe [71, 72] ont réalisé une étude paramétrique de la stabilité des détonations divergentes. Dans ce cas, les particules fluides subissent une expansion de moins en moins forte à mesure que la courbure du front diminue. La limite de stabilité, c'est-à-dire la valeur de E_a^* à partir de laquelle les instabilités apparaissent, diminue avec le rayon du choc. Pour un rayon infini, on retrouve la valeur obtenue dans le cas idéal ($E_a^* = 25.26$ pour le jeu de paramètres considéré, $\gamma = 1.2$ et $q/rT_0 = 50$). La courbure du front joue un rôle déstabilisateur et accroît l'instabilité de la détonation. Les simulations récemment effectuées par Faria et Kasimov [73] confirment également ces résultats.

2.3 Études expérimentales et numériques des détonations non idéales

De nombreuses situations expérimentales conduisent à la propagation de détonations dans des conditions non idéales, c'est-à-dire dans un milieu qui leur est défavorable d'une quelconque façon. Cette section est destinée à la description plus approfondie de certaines d'entre elles, afin de mettre à jour les similarités existant avec la détonation confinée par un gaz inerte.

2.3.1 Détonations dans des canaux de petite section

Suivant ses dimensions, le dispositif physique au sein duquel évolue la détonation est susceptible d'affecter sa structure cellulaire (voir la Sous-section 1.3.3 consacrée aux détonations marginales) mais aussi sa vitesse de propagation. En effet, des échanges thermiques et de quantité de mouvement ont lieu près des parois. Lorsque les dimensions caractéristiques du tube sont petites, ces phénomènes occupent une place plus importante dans la dynamique du front et la détonation se propage à une vitesse inférieure à celle prévue par la théorie CJ. En deçà d'un diamètre particulier d_c appelé diamètre critique, les pertes ne permettent plus à la détonation autonome de se propager. La zone de réaction et le choc précurseur se découplent, ce qui conduit à son extinction.

De nombreux travaux ont pour objet l'évolution de la vitesse de propagation en fonction des dimensions du canal employé. Kistiakowsky et al. [74] ont mesuré la vitesse de la détonation dans des canaux de différents diamètres et ont démontré que le déficit de vitesse évolue linéairement avec l'inverse du diamètre du tube. Manson et Guénoche [75] ont observé un comportement identique dans des mélanges d'acétylène - oxygène et propane - oxygène à différentes richesses. Ils supposèrent les pertes aux parois responsables de l'extinction de la détonation dans une couche de mélange située à la circonférence du tube. Gordon et al. [76] ont été les premiers à faire le rapprochement entre la propagation proche des limites et l'apparition du mode hélicoïdal de la structure cellulaire. Ce constat illustre l'importance des instabilités dans la propagation de l'onde de détonation. Manson et al. [77] ont poursuivi dans cette voie, et ont montré que l'amplitude des fluctuations de vitesse augmente proche des limites. Ils ont également découvert le mode de propagation dit "galopant", consistant en une succession d'extinctions et de réinitiations. Saint-Cloud et al. [78] ont par la suite démontré que ce mode, qui est caractéristique de la propagation proche des limites, est constitué d'une alternance de transitions déflagration-détonation (*Deflagration to Detonation Transition*, DDT) et d'extinctions.

La découverte de ces phénomènes a rapidement conduit à la nécessité de développer de nouveaux modèles. Zel'dovich [16] fut le premier à s'intéresser aux effets induits par les parois du tube sur l'onde de détonation d'un point de vue théorique. Il incorpora les pertes liées aux frottements et aux échanges thermiques au sein d'une modélisation monodimensionnelle de la détonation. Fay [79] a proposé par la suite une représentation bidimensionnelle, dans laquelle le développement d'une couche limite est responsable du déficit de vitesse subi par la détonation. Dans le repère du choc, les particules sont accélérées au voisinage des parois, d'où une divergence des lignes de courant et donc un déficit de vitesse.

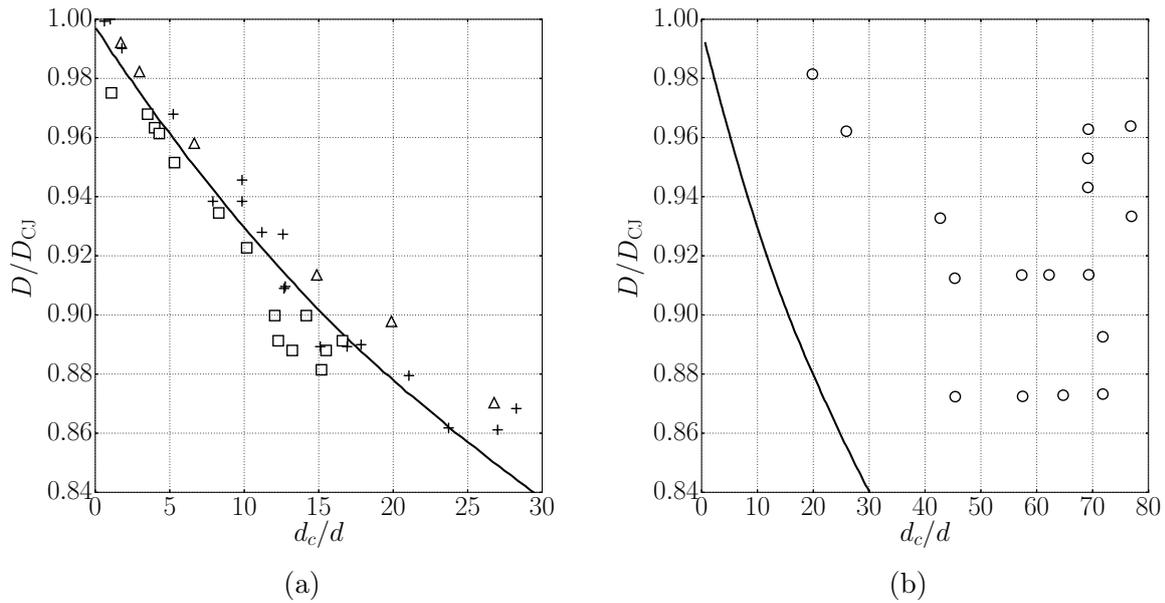


FIGURE 2.1 – Évolution de la vitesse de la détonation en fonction de l'inverse du diamètre du tube (normalisé par le diamètre critique) pour deux types de mélanges et comparaison avec la théorie de Fay (trait plein). (a) $C_2H_2 + 2.5O_2 + xAr$ ($+ x = 70\%$, $\square x = 75\%$, $\triangle x = 80\%$). (b) $0.5(C_2H_2 + 5N_2O) + 0.5Ar$. Adapté des travaux de Laberge et al. [80].

C'est à partir de ces constatations que la communauté chercha à établir une corrélation entre le diamètre critique et les propriétés du mélange réactif, et en particulier la taille de cellule λ . Dupré et al. [81, 82] ont réalisé plusieurs études conduisant au critère $\lambda = \pi d_c$ dans les tubes ronds, liant la taille de cellule à la circonférence du tube. Ils obtinrent un déficit maximum avant extinction de l'ordre de 10%. Les travaux de Moen et al. [83] se sont concentrés sur l'influence de la sensibilité du mélange sur le diamètre critique. Ils réalisèrent des mesures de vitesse pour des mélanges fortement dilués, caractérisés par une structure cellulaire régulière. Dans ce cas, les mesures correspondent aux valeurs théoriques obtenues via le modèle de Fay [79]. En revanche, les mesures effectuées dans les mélanges non dilués et les résultats théoriques sont en désaccord. Lee [44] suggère que la prédominance des instabilités sur la structure laminaire, sur laquelle repose le modèle de Fay, est à l'origine de ces différences. En d'autres termes, cela signifie que les mécanismes responsables de la propagation autonome de la détonation diffèrent suivant la sensibilité du mélange réactif. Dans les mélanges réguliers¹, le choc précurseur provoque l'auto-inflammation des gaz. C'est le mécanisme retenu dans les modèles stationnaires (ZND, Fay, etc..). Lorsque le mélange est irrégulier, les structures cellulaires et turbulentes dominent l'écoulement. Ce résultat fut par la suite confirmé par de nombreux travaux [80, 84], dont un exemple est présenté sur la Figure 2.1. Les Figures 2.1 (a) et (b) synthétisent

1. C'est-à-dire un mélange pour lequel la structure cellulaire est régulière.

les données relatives à des mélanges dilués et irréguliers, respectivement.

2.3.2 Détonations dans des tubes poreux

L'utilisation de parois poreuses permet d'introduire artificiellement des pertes au sein de l'écoulement. Ces pertes sont provoquées de deux façons : par la fuite du fluide au travers des pores ainsi que par l'amortissement des ondes transverses lors de leur réflexion sur les parois. Les premiers travaux s'intéressant à la propagation d'une détonation autonome dans une section poreuse ont été réalisés par Dupré et al. [85]. Ils suggérèrent que l'extinction de la détonation lorsque les dimensions du canal sont trop faibles est due à l'amortissement des ondes transverses, contrairement à ce qui était alors communément admis dans d'autres travaux portant sur les détonations avec pertes [86, 87] dans lesquels l'influence du taux d'expansion du tube de courant est mise en avant. Les résultats de Teodorczyk et Lee [88] et Vasil'ev [89] vont dans la même direction, et attribuent le déficit de vitesse mesuré à l'amortissement des ondes transverses. L'étude la plus exhaustive à ce jour concernant l'influence des parois poreuses a été effectuée par Radulescu et Lee [90] puis Radulescu [91]. Ils ont obtenu des photographies de la structure cellulaire de la détonation (*Open-shutter photographs*) pour plusieurs types de mélanges et en faisant varier le rapport h/λ de la hauteur du canal sur la taille de cellule par le biais de la pression initiale.

La Figure 2.2 présente des photographies des structures cellulaires obtenues pour différents types de mélanges et pour différentes tailles de cellules. Les variations de λ sont contrôlées au moyen de la pression initiale et traduisent la sensibilité du milieu explosif : plus la taille de cellule est petite, et plus le mélange est sensible. Lors du passage dans la section poreuse, la détonation subit un déficit de vitesse et la taille de cellule augmente. Lorsque le rapport h/λ devient trop faible, la détonation cesse de se propager. La dilution du mélange a une influence directe sur le mécanisme de l'extinction. Ainsi, pour le mélange non dilué représenté sur la Figure 2.2 (a) inférieure, le découplage entre l'onde de choc et la zone de réaction se produit immédiatement après l'entrée de la détonation dans la zone poreuse. En revanche, l'extinction se déroule de façon beaucoup plus progressive pour le mélange dilué (voir la Figure 2.2 (b) inférieure). La taille de cellule augmente graduellement jusqu'à la disparition de la détonation. Le rapport limite h/λ en deçà duquel la détonation ne peut plus se propager dépend de la nature du mélange considéré. Pour les mélanges fortement dilués, $h_c/\lambda = 11$ contre $h_c/\lambda = 4$ pour les mélanges purs. Radulescu et Lee [90] ont comparé les résultats expérimentaux à ceux issus d'une modélisation monodimensionnelle de la détonation incorporant les pertes. Ce modèle repose sur les travaux de Fay [79] et plus généralement sur la théorie ZND. Il fait

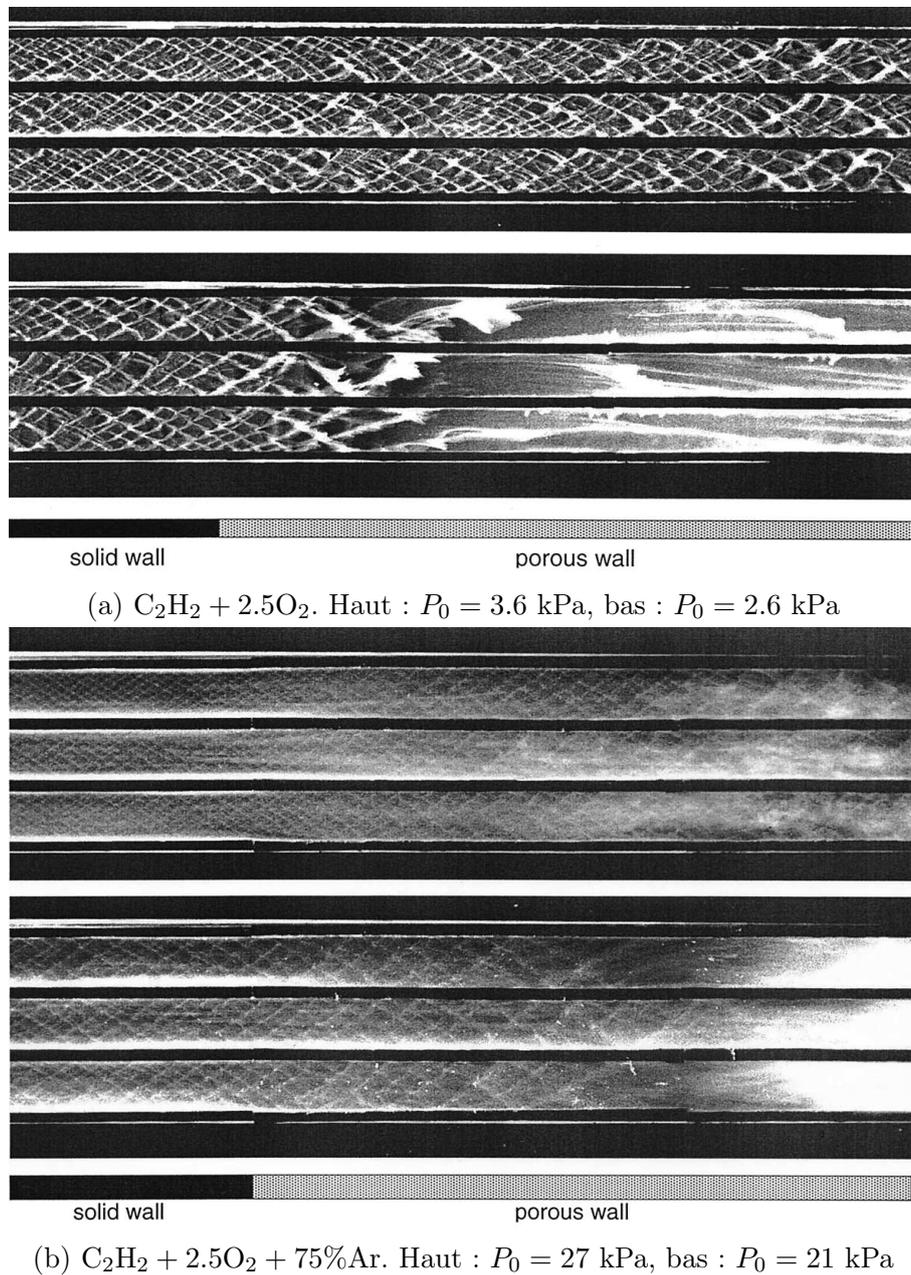


FIGURE 2.2 – Photographie longue pose d’une détonation se propageant dans un tube poreux dans différents mélanges et à différentes pressions initiales [90].

l'hypothèse d'une détonation constituée d'un choc précurseur initiant la réaction chimique exothermique. Les résultats concernant les mélanges dilués sont correctement reproduits par le modèle, contrairement aux mélanges non dilués. Pour les auteurs, cette discordance trouve son origine dans les mécanismes physiques de propagation de l'onde de détonation. Pour les mélanges irréguliers, l'auto-inflammation des gaz par le choc incident ne suffit pas pour expliquer la propagation de la détonation, qui serait alors intimement liée au réseau d'ondes transverses et aux fluctuations hydrodynamiques. A noter que pour les mélanges irréguliers, la réduction du rapport géométrique de la largeur du canal par sa hauteur entraîne une augmentation de la dimension critique.

Mazaheri et al. [92] ont effectué une étude numérique correspondant au dispositif expérimental de Radulescu et Lee [90]. Les simulations reposent sur une modélisation bidimensionnelle non visqueuse régie par les équations d'Euler réactives. Conjointement, un modèle dédié au fluide dans les parties poreuses a été utilisé. Les visualisations de l'écoulement montrent un accord qualitatif avec les photographies expérimentales. En revanche, les limites de propagation (c'est-à-dire le rapport h_c/λ) obtenues dans les simulations ne correspondent pas à celles issues de l'expérience. Ces différences soulignent l'importance des phénomènes turbulents et diffusifs dans la propagation des détonations irrégulières, et la nécessité de faire évoluer les modèles numériques afin d'en tenir compte.

Récemment, Wang et al. [93] se sont intéressés à la propagation de détonations dans des tubes poreux pour un mélange méthane-oxygène à différentes richesses. Les dimensions critiques obtenues h_c/λ sont situées entre 4 et 6 et correspondent à celles déterminées par Radulescu et Lee [90] pour un mélange irrégulier.

2.3.3 Diffraction de la détonation

On parle de diffraction de la détonation lorsque celle-ci est transmise dans un espace de plus grand volume. La vitesse du front dépend alors des nouvelles conditions limites. Dans certains cas, le régime de propagation autonome ne peut pas être atteint et l'extinction survient. Trois configurations spécifiques sont décrites :

Diffraction de la détonation dans un demi-espace libre

Cette sous-section traite du cas de la diffraction de la détonation dans un demi-espace libre. Le front se propage initialement dans un tube de diamètre d émergeant dans un espace ouvert. Seules les caractéristiques du mélange employé et les dimensions du tube

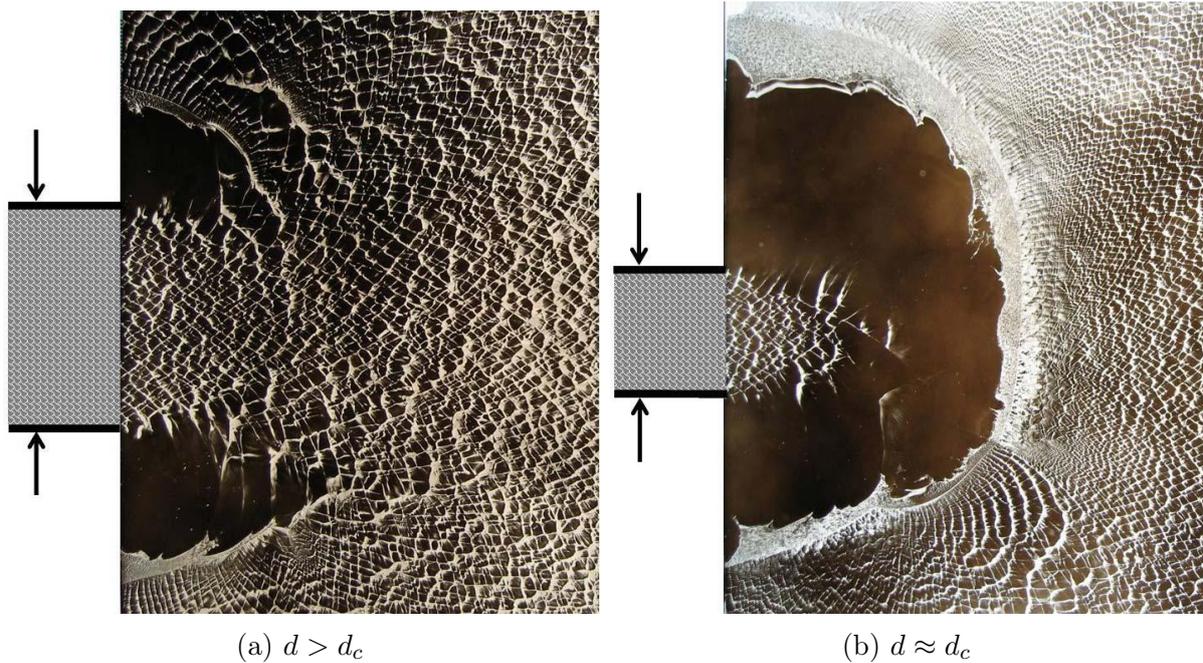


FIGURE 2.3 – Photographies de la structure cellulaire de la détonation dans les cas surcritique (a) et critique (b) [36].

influent sur le succès ou l'échec de la transmission.

Bien que Lafitte [94] se soit en premier intéressé à cette configuration, c'est Zeldovich et al. [95] qui ont démontré l'existence d'un diamètre critique d_c du tube dans lequel se propage initialement la détonation. L'expansion du front à sa sortie entraîne l'apparition d'ondes de détente se propageant de l'extérieur vers l'axe central. Dans les mélanges non dilués correspondant à des détonations dites irrégulières, ces détentes occasionnent un découplage local quasi instantané entre le choc et la zone de libération d'énergie. Dans ce cas, l'extinction progressive de la détonation coïncide avec la trajectoire du faisceau de détentes. Trois possibilités sont rencontrées suivant la valeur de d :

- Cas surcritique ($d > d_c$) : les ondes de détente n'atteignent pas l'axe central et l'onde de détonation poursuit sa propagation sans interruption.
- Cas critique ($d \approx d_c$) : les ondes de détente atteignent l'axe central. L'onde de détonation s'éteint puis une réinitiation survient, conduisant en une surdétonation se relaxant progressivement vers un état autonome.
- Cas sous-critique ($d < d_c$) : les ondes de détente atteignent l'axe central. L'onde de détonation ne parvient plus à se propager et un découplage global se produit entre le choc et la zone de réaction.

La Figure 2.3 présente la structure cellulaire obtenue pour les cas surcritique (a) et critique (b). La trajectoire du faisceau de détentes est particulièrement visible sur la Figure 2.3 (b) via le cône d'extinction. Des visualisations en strioscopie et en chimilu-

minescence OH ont été effectuées par Pintgen et Shepherd [96] pour des mélanges très réguliers et très irréguliers. Les variations de vitesses mesurées dans le mélange dilué sont bien plus lentes que pour la détonation irrégulière. Dans les cas critiques, le réamorçage de la détonation se produit à partir de sites de réinitiation résultants des fluctuations locales de l'écoulement.

Il existe une corrélation entre le diamètre critique et la taille de cellule, de sorte que $d_c \approx 13 \lambda$ [97–99] pour une gamme importante de mélanges. Ce n'est cependant pas le cas des mélanges fortement dilués, pour lesquels $d_c \approx 30 \lambda$ [36]. Dans ce cas, la zone de réaction est beaucoup moins sensible aux variations de température, si bien que le faisceau de détente ne coïncide plus avec l'extinction locale du front. C'est la courbure du front qui, si elle est trop forte, conduit au découplage entre le choc et la zone de réaction.

La géométrie influence également la corrélation entre le diamètre critique et la taille de cellule. Lorsque le rapport largeur/hauteur du canal devient grand, la relation dans les mélanges irréguliers devient $h_c \approx 3 \lambda$ [44].

L'existence de deux processus distincts d'extinction est à rapprocher de l'existence de deux mécanismes de propagation des détonations, suivant qu'elles sont considérées comme régulières ou irrégulières. Ces résultats rejoignent en ce sens ceux relatifs aux configurations de canaux de faible section et de tubes poreux.

Diffraction de la détonation dans un tube à section conique

Lorsque l'onde de détonation débouche dans un tube à section conique, l'amplitude des pertes subies par la détonation dépend de l'angle formé par la section. Les premières études portant sur cette configuration géométrique spécifique ont été initiées par Kogarko [100], puis Gubin et al. [101]. Une étude paramétrique portant sur l'angle de demi-ouverture des cônes a été réalisée par Khasainov et al. [102]. Ils ont montré que le rapport du diamètre critique sur la taille de cellule d_c/λ augmente jusqu'à $\alpha = 40^\circ$, puis reste égal à la valeur correspondant à la diffraction dans un demi-espace ouvert ($\alpha = 90^\circ$), soit $d_c/\lambda \approx 13$. De plus, le réamorçage adopte un mécanisme différent suivant l'angle α . Pour $\alpha < 40^\circ$, la réinitiation survient près des parois du cône, alors que pour $\alpha > 40^\circ$ le réamorçage se produit près de l'axe central.

Diffraction de la détonation dans à canal à divergence constante

Dans les dispositifs présentés jusqu'alors au sein de la Sous-section 2.3.3, la divergence globale de l'écoulement n'est pas constante et diminue avec la distance de propagation du front. Il est cependant possible de maintenir cette divergence constante en jouant sur la forme de la section de test. Au lieu de maintenir un angle constant avec l'horizontal, Borzou et Radulescu [103] ont mis au point une géométrie de canal dont la dérivée logarithmique de la section est constante, en forme de cornet exponentiel. La largeur du dispositif est constante et de petite taille devant la hauteur. Ainsi, la propagation de la détonation est quasi-stationnaire. Deux canaux différents furent employés pour deux types de mélanges : $2C_2H_2+5O_2+21Ar$ et $2C_3H_8+5O_2$. Conjointement aux expérimentations, une modélisation stationnaire a été développée à partir des équations monodimensionnelles. Des simulations numériques ont également été conduites pour le mélange le plus régulier, dilué à l'argon.

Les simulations numériques correspondent qualitativement aux résultats expérimentaux. Borzou et Radulescu [103] ont comparé les résultats des simulations numériques avec ceux du modèle stationnaire pour le mélange régulier dilué à l'argon. Les vitesses de propagation ainsi que les taux de divergence critiques ont été sous-estimés par les simulations numériques, signe que la structure cellulaire régulière affaiblit la détonation. Les résultats expérimentaux relatifs au mélange irrégulier $2C_3H_8 + 5O_2$ ne sont pas correctement reproduits par la modélisation stationnaire. Ces différences seraient dues aux phénomènes diffusifs, ces derniers occupant une place importante dans l'écoulement des détonations irrégulières.

2.3.4 Détonations confinées par un gaz inerte

Les détonations gazeuses se propageant dans un tube en acier ne permettent pas d'atteindre des pressions suffisamment élevées pour en déformer les parois. Le confinement est dans ce cas infiniment rigide du point de vue de la détonation. En revanche, les niveaux de pression engendrés par les explosifs solides sont tels que leur confinement peut être considéré comme faible. Le passage du front coïncide alors avec la déformation des parois et avec l'expansion des produits de détonation. Les ondes de détente induites à la périphérie de la cartouche explosive réduisent la vitesse de l'onde de détonation, et peuvent en provoquer l'extinction lorsque le diamètre de la charge est trop faible. Il est possible d'observer ces effets pour les détonations gazeuses confinées par un gaz inerte. Cette configuration est également à rapprocher du cas des détonations évoluant dans les moteurs à détonation rotative, lesquelles sont confinées par les gaz brûlés issus du cycle

de combustion précédent.

Études expérimentales de la détonation confinée par un gaz inerte

La réalisation pratique d'un dispositif permettant d'observer et de mesurer des détonations confinées par un gaz soulève de nombreuses difficultés. Tout l'enjeu réside dans la création d'un volume de prémélange gazeux en contact avec l'inerte tout en limitant la diffusion entre ces deux volumes avant la mise à feu. La littérature propose des solutions pratiques extrêmement variées. Cette sous-section vise à présenter les différents travaux relatifs à cette problématique et à souligner les convergences et divergences existantes entre ces études.

Les premières études ont été réalisées par Sommers [104], puis Sommers et Morrison [105]. Elles visaient à améliorer la compréhension des détonations dans les explosifs condensés. L'expérimentation en milieu gazeux présente plusieurs avantages : étant transparent, il permet l'utilisation de diagnostics optiques. De plus, les pressions rencontrées sont plus faibles que dans les explosifs solides et permettent la réutilisation des différents capteurs. Enfin, les longueurs caractéristiques de la libération d'énergie dépassent de plusieurs ordres de grandeur celles rencontrées dans les explosifs solides.

Un premier dispositif expérimental consistait en un jet de prémélange H_2/O_2 émergeant dans l'air ambiant. L'objectif était d'initier une détonation à la base du jet et d'observer sa propagation au moyen de strioscopies. Dans ce cas, le confinement gazeux est constitué par l'air autour du jet réactif. Les auteurs ne sont pas parvenus à produire une détonation autonome, chaque essai conduisant systématiquement à un découplage entre le choc et la zone de réaction. La Figure 2.4 illustre au moyen de strioscopies la séquence d'événements conduisant à l'extinction. Dès la sortie du tube, le front adopte une forme conique. L'interface séparant l'air du mélange réactif est visible en aval du choc. La zone de combustion correspond à l'épaississement de la structure et à l'apparition des turbulences. Rapidement, une distance importante sépare le choc précurseur de la zone de réaction, signe caractéristique de l'extinction.

A ce stade de leurs investigations, la viabilité des détonations gazeuses confinées par un médium inerte n'était toujours pas démontrée. Pour s'assurer de la faisabilité de cette configuration, Sommers modifia l'extrémité du dispositif présenté sur la Figure 2.4. Les parois solides du tube ont été remplacées par film plastique de faible épaisseur (10 μm). Les strioscopies obtenues attestent de la présence d'une détonation, et démontrent alors qu'une expansion moins forte permet à l'onde de se propager. Ce résultat les encouragea

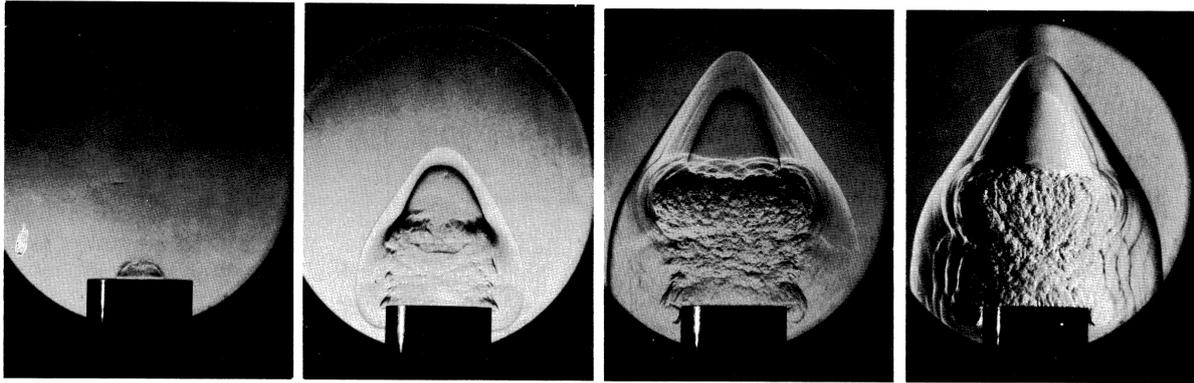


FIGURE 2.4 – Strioscopies illustrant l’extinction de la détonation dans une colonne de gaz réactifs 79%O₂ – 21%H₂ entourée d’air [104]. Les deux dernières photographies correspondent au même instant capturé lors de deux expériences différentes, en changeant le sens du couteau.

à poursuivre leurs recherches et à développer une nouvelle section de test permettant de réduire les pertes endurées par la détonation. Cette dernière était rectangulaire, constituée d’une paroi métallique, de deux parois en verre permettant de visualiser l’écoulement et d’une ouverture vers l’extérieur. Trois parois sur quatre étant solides, les conditions de propagation sont moins défavorables à l’onde de détonation que pour une colonne de gaz réactif sans aucun confinement. Cette configuration a été un succès, démontrant pour la première fois la possibilité de confiner une détonation gazeuse par un autre gaz. Les strioscopies obtenues permettent une première description de l’écoulement : un front de détonation courbe, surmonté d’un choc oblique se propageant dans le milieu inerte et d’une interface séparant l’inerte des produits de détonation. Des mélanges H₂/O₂ à différentes richesses ont été testées.

La section de test a également été modifiée afin de remplacer le confinement par l’air ambiant par de l’hélium. Dans ce cas, le gaz inerte était injecté dans un insert jouxtant le canal principal de manière à s’assurer que les deux écoulements restent laminaires. L’utilisation d’un gaz de plus faible densité a modifié notablement la structure de l’écoulement. Selon la composition du mélange réactif, l’onde de choc oblique se redresse et dans certains cas évolue en un choc détaché. D’après Sommers [105], le paramètre principal caractérisant l’influence du confinement sur la détonation est le ratio des impédances acoustiques entre les milieux inertes et réactifs. L’impédance acoustique est le produit de la masse volumique ρ et de la célérité du son dans le milieu c .

Les travaux réalisés par Dabora [107] puis Dabora et al. [106] s’inscrivent dans la lignée de ceux effectués par Sommers [104]. La principale innovation réside dans l’utilisation d’un film en nitrocellulose afin de séparer le milieu réactif du milieu inerte. D’après Dabora,



FIGURE 2.5 – Strioscopie d’une onde de détonation se propageant dans un mélange $2\text{H}_2+\text{O}_2$ confiné par du N_2 [106].

la diffusion moléculaire qui s’établit entre les deux milieux avant l’arrivée de l’onde de détonation est non négligeable. Les premières tentatives de réalisation d’une séparation souple permettant à la fois de prévenir la diffusion sans offrir un confinement trop important à la détonation se sont soldées par des échecs. Un film plastique commercial a été employé à dessein par Sommers, qui démontra que son effet ne pouvait pas être négligé. Dabora a utilisé un film à base de savon et est parvenu à des conclusions identiques.

Au moyen d’une analyse théorique, Dabora a évalué l’épaisseur maximale d’un film permettant de ne pas influencer sur la dynamique de la détonation ($< 0.68 \mu\text{m}$). Cette étude a abouti à la création d’une interface en nitrocellulose d’une épaisseur extrêmement faible (23 nm). Un dispositif expérimental similaire à celui de Sommers [104] a été utilisé, avec un mélange H_2/O_2 stœchiométrique confiné par du diazote, de l’hélium ou du dihydrogène. La strioscopie présentée Figure 2.5 est un exemple classique des écoulements rencontrés. La détonation se propage dans la partie inférieure, constituée du pré-mélange réactif. Dans le canal supérieur, l’onde de choc oblique et l’interface entre les gaz inertes et réactifs sont clairement visibles.

Ces essais ont permis d’établir les conclusions suivantes :

- Le déficit de vitesse engendré par le confinement est proportionnel à la longueur de réaction et à l’inverse de la largeur de la section du tube. Les impédances acoustiques ρc des milieux réactif et inerte constituent également un paramètre influençant la vitesse de la détonation ainsi que sa structure.
- Proche des limites de propagation, la détonation adopte un comportement oscillatoire.
- Lorsque le confinement est constitué de N_2 , au delà de 10% de déficit de célérité, la

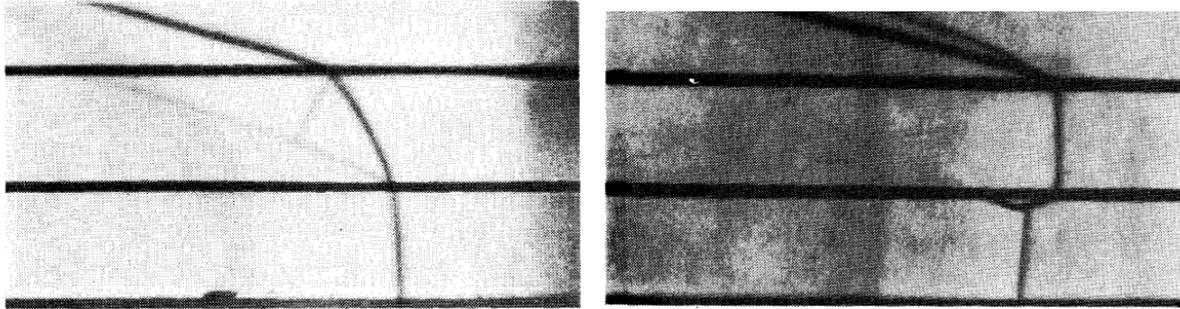


FIGURE 2.6 – Strioscopes de détonations se propageant dans un mélange 50% H_2 + 50% O_2 confinées par de l'hélium (gauche) et de l'hydrogène (droite). Adapté des travaux de Adams [108].

détonation ne peut plus se propager. Le ratio h_c/λ correspondant est égal à 3.

Adams [108, 109] s'est intéressé aux effets produits par des confinements gazeux de différentes natures afin de faire varier le ratio des impédances acoustiques. Il concentra son attention sur les gaz légers, tels que l'hélium ou l'hydrogène, afin de réduire ce ratio $Z = \frac{\rho_r c_r}{\rho_i c_i}$. Les indices r et i représentent les milieux réactifs et inertes, respectivement. Deux configurations sont illustrées sur la Figure 2.6. La section de test est divisée en trois parties. La partie inférieure contient le mélange réactif et est surmontée d'un film en nitrocellulose identique à celui développé par Dabora. Le mélange inerte est placé dans le canal intermédiaire, qui est lui-même séparé par un second film de la partie supérieure contenant de l'air. Sur la partie gauche, le milieu explosif est confiné par de l'hélium. Les éléments constituant la combinaison détonation - onde de choc sont identiques à ceux observés dans les études antérieures, pour des confinements de plus forte densité. La seule différence concerne l'onde de choc oblique, pour laquelle l'angle d'inclinaison est moins prononcé. En revanche, lorsque l'hélium est remplacé par de l'hydrogène, la structure de la détonation est modifiée comme en témoigne la partie droite de la Figure 2.6. La détonation présente une courbure inversée, le choc oblique est devenu un choc détaché couplé à la détonation par un petit choc oblique d'angle très faible. Le déficit de vitesse maximum enregistré est de 17%, soit environ deux fois plus que celui obtenu par Dabora et al. [106].

De nouveaux résultats ont été obtenus par Vasil'ev [110] au moyen d'un dispositif expérimental différent. Vasil'ev remet en cause l'usage d'un film plastique permettant de séparer les gaz réactifs et inertes. Ce film interagirait avec la structure cellulaire de la détonation, et ce quel que soit son épaisseur. Il permettrait en particulier aux points triples de se réfléchir sur le film, et soutiendrait donc artificiellement la propagation de l'onde de détonation. Ces travaux s'attachent donc particulièrement à s'affranchir de cette

problématique afin de revenir à une propagation en "charge libre", telle qu'initialement conçue par Sommers [104]. Dans cette nouvelle configuration, le prémélange réactif était préalablement placé dans un tube vertical, dont les parois étaient constituées d'un plastique étiré de plusieurs fois sa longueur initiale. La mise à feu était déclenchée consécutivement à la découpe du tube à sa base par des lames placées perpendiculairement. Les parois se rétractaient alors du fait de la force élastique, et le mélange réactif n'était plus confiné que par l'air ambiant. Toutefois, la vitesse de rétractation des parois élastique dépassait les 70 m s^{-1} et l'interface entre le prémélange et l'air devenait turbulente.

Vasil'ev a établi un parallèle entre les détonations confinées par un gaz inerte et la diffraction des détonations dans un demi-espace libre (voir Sous-section 2.3.3). D'après lui, la configuration du confinement gazeux est moins favorable à la propagation de la détonation, qui ne dispose d'un milieu réactif que dans des dimensions limitées, contrairement à la détonation transmise dans un demi-espace libre. Par conséquent, le diamètre minimum d'une colonne de gaz réactif confinée par de l'inerte permettant la propagation de la détonation devrait être supérieur au diamètre critique de la détonation émergeant dans un volume ouvert. Afin de quantifier la relation de proportionnalité pouvant exister entre ces deux configurations, Vasil'ev [110] fait également le rapprochement avec la phénoménologie caractéristique de l'initiation des détonations cylindriques. Dans ce cas, la vitesse du front diminue jusqu'à un minimum puis, si l'énergie initialement déposée est suffisante, réaugmente pour atteindre sa valeur définitive. Deux rayons caractéristiques se dégagent de cette analyse : R_1 pour la vitesse minimale et R_2 pour la vitesse définitive. Vasil'ev suppose alors que le diamètre critique en charge libre doit être encadré par ces deux rayons de sorte que $2R_1 < d_c < 2R_2$.

Un nouveau dispositif expérimental a été développé par Vasil'ev et Zak [111], afin de prévenir l'apparition de turbulences à l'interface entre les deux gaz. En effet, dans la première étude de Vasil'ev [110] la partie turbulente des colonnes de gaz peut représenter près de 20% de leur volume global. Le nouveau processus consistait à créer deux écoulements concentriques (réactif et inerte) ayant des vitesses identiques. Les résultats obtenus diffèrent notablement de ceux de Dabora [107] et Dabora et al. [106], les diamètres critiques obtenus par Vasil'ev et Zak étant bien plus importants. Les auteurs ont attribué une nouvelle fois ces différences à l'utilisation d'un film plastique dans les travaux de Dabora.

L'influence du film plastique est également centrale dans les travaux publiés par Murray et Lee [86, 87]. Dans une première série d'expériences, un tube de grandes dimensions (0.89 m de diamètre et 10 m de longueur) a été utilisé. Les parois du tube étaient constituées de polyéthylène de trois épaisseurs différentes, allant de $25.4 \mu\text{m}$ à $254 \mu\text{m}$. La



FIGURE 2.7 – Photographie du montage expérimental utilisé dans les travaux de Murray et Lee [86, 87] (a). Propagation d’une détonation dans un tube en plastique, 3.85% éthylène-air (b).

Figure 2.7 (a) illustre le dispositif expérimental. La Figure 2.7 (b) présente la propagation d’une détonation dans le dispositif à différents instants successifs. La première phase est instationnaire et consiste en l’adaptation de la détonation aux nouvelles conditions limites qui lui sont imposées. Le front adopte par la suite un comportement quasi stationnaire. Les résultats semblent montrer que lorsque l’épaisseur du confinement tend vers zéro, les dimensions critiques sont du même ordre que celles obtenues dans le cas de la diffraction de la détonation dans un semi-espace libre, à savoir $d_c/\lambda \approx 13$. Ce constat va à l’encontre des conclusions de Vasil’ev [110], pour lequel $d_c/\lambda \approx 26 - 100$, soit environ 2 et 8 fois le diamètre critique dans le cas de la détonation diffractée dans un demi-espace libre. Pour Murray et Lee, ces différences sont dues à la nature turbulente de l’interface entre les deux milieux dans les dispositifs employés par Vasil’ev [110]. La seconde série d’expériences a été conduite dans une section de test de laboratoire, consistant en un tube rectangulaire modulaire. Dans ce dispositif, une, deux ou trois parois rigides pouvaient être substituées par des confinements souples. Quelle que soit la série d’expériences, les conditions critiques de propagation sont atteintes pour un déficit de vitesse $D/D_{CJ} \approx 0.9$.

Borisov et al. [112] ont élaboré une autre méthode destinée à créer une charge libre au sens de Vasil’ev, c’est-à-dire une colonne de gaz réactifs confinée uniquement par l’air ambiant. Le dispositif consistait en un générateur d’ondes planes et en une section de test disposés verticalement en hauteur. Une fois le prémélange injecté, le cordon reliant la section de test et le générateur était ensuite consumé par un courant électrique, libérant le tube vertical et amorçant sa chute. À l’instant où la section de test atteignait le sol, un circuit électrique déclenchait l’allumage d’un explosif solide ou d’un mélange réactif situé

à l’opposé, dans le générateur de détonations. Les auteurs ont testé de nombreux mélanges dans des colonnes de gaz de dimensions variées. Les dimensions critiques obtenues sont situées entre 1.5 et 9 fois le diamètre critique de diffraction d’une détonation dans un espace ouvert, et sont bien au-delà des valeurs obtenues par Dabora et al. [106, 107].

Les années 2010 ont vu resurgir un intérêt pour cette configuration, tout particulièrement dans l’optique de prévoir la détonabilité d’un courant de gaz réactif crée par une fuite accidentelle [113–116]. Le dispositif utilisé dans ces études reprend le concept de Dabora à plus grande échelle. Trois parois sont solides et la quatrième est ouverte sur le milieu inerte. Un film plastique, d’épaisseur supérieure à celle des films synthétisés par Dabora [107] sépare le milieu inerte du milieu réactif afin de prévenir le phénomène de diffusion. Les hauteurs critiques obtenues h_c/λ sont de l’ordre de 3.

Cho et al. [117] se sont également intéressés à cette configuration, dans l’optique de mieux comprendre les divergences existantes entre les résultats numériques et expérimentaux dans l’étude du moteur à détonation rotative. Dans ce travail, l’interface entre les milieux réactifs et inertes est amovible. Elle est retirée au moyen d’un actionneur pneumatique avant l’allumage. Des mélanges hydrogène-air et éthylène-air ont été étudiés à trois richesses différentes. La section de test est rectangulaire, et son épaisseur correspond à environ une taille de cellule du mélange considéré. Les auteurs ont mesuré des déficits de vitesse de l’ordre de 13% relativement à la partie du tube sans confinement. Ils ont également réalisé une visualisation de l’écoulement via une chimiluminescence OH.

Les différentes conditions critiques expérimentales obtenues pour des détonations confinées par un gaz inerte sont synthétisées dans les deux Tableaux 2.1 et 2.2, correspondant aux essais en charge libre et en canal rectangulaire, respectivement. Le nom de l’étude, la dimension critique normalisée d_c/λ ou h_c/λ , la dimension critique d_c ou h_c , le mélange réactif, l’épaisseur du film plastique et la nature du confinement inerte sont rappelés. La dimension critique normalisée n’est mentionnée que lorsqu’elle est indiquée dans l’étude ou lorsque la taille de cellule λ existe dans la littérature. Dans certains cas, la dimension critique n’est pas déterminée directement et seuls le succès ou l’échec d’un essai relativement à la dimension de la couche réactive sont connus. Pour ces essais, les mentions < ou > précèdent la dimension critique pour une propagation réussie ou échouée, respectivement. À noter que toutes les expériences ont été réalisées à pression ambiante.

Étude	d_c/λ	d_c	Mélange	Film plastique	Gaz inerte
Sommers [104]		> 7.6 mm	Hydrogène (79%) - Oxygène	Non	Air
		< 7.6 mm	Hydrogène (79%) - Oxygène	10 μm	Air
Vasil'ev [110]	> 12	> 20 mm	Hydrogène - Oxygène	Non	Air
	< 100	< 20 mm	Acétylène - Oxygène	Non	Air
Murray et Lee [86]	15.2	890 mm	Éthylène (4.70%) - Air	25.4 μm	Air
	9.6	890 mm	Éthylène (4.15%) - Air	127 μm	Air
	7.5	890 mm	Éthylène (3.90%) - Air	254 μm	Air
Vasil'ev et Zak [111]	55	11 mm	Acétylène - Oxygène	Non	Air
		7 mm	Acétylène (50%) - Oxygène	Non	Air
	> 16	> 25 mm	Hydrogène - Oxygène	Non	Air
Borisov et al. [112]	38	89.4 mm	Méthane - Oxygène	Non	Air
	72	65 mm	Éthane - Oxygène	Non	Air
	72	65 mm	Propane - Oxygène	Non	Air
	380	38 mm	Acétylène - Oxygène	Non	Air
	29	178 mm	Acétylène - Air	Non	Air
	110	55 mm	Éthylène - Oxygène	Non	Air

TABLE 2.1 – Récapitulatif des dimensions critiques obtenues dans les différentes études de détonations confinées par un gaz inerte en configuration de charge libre.

Étude	h_c/λ	h_c	Mélange	Film plastique	Gaz inerte
Sommers [104]		> 12.7 mm	Hydrogène (78%) - Oxygène	Non	Air
	< 7.45	< 12.7 mm	Hydrogène - Oxygène	Non	Air
		< 12.7 mm	Hydrogène (50%) - Oxygène	Non	Air
		> 12.7 mm	Hydrogène (35%) - Oxygène	Non	Air
		> 12.7 mm	Méthane (40%) - Oxygène	Non	Air
	< 4.7	< 12.7 mm	Méthane - Oxygène	Non	Air
		> 12.7 mm	Méthane (19%) - Oxygène	Non	Air
		> 12.7 mm	Hydrogène (78%) - Oxygène	Non	Hélium
	< 7.45	< 12.7 mm	Hydrogène - Oxygène	Non	Hélium
		< 12.7 mm	Hydrogène (50%) - Oxygène	Non	Hélium
	> 12.7 mm	Hydrogène (35%) - Oxygène	Non	Hélium	
Dabora [107]		5.6 mm	Hydrogène (75%) - Oxygène	0.023 μm	Diazote
	2.7	4.6 mm	Hydrogène - Oxygène	0.023 μm	Diazote
		4.6 mm	Hydrogène (60%) - Oxygène	0.023 μm	Diazote
		< 4.6 mm	Hydrogène (55%) - Oxygène	0.023 μm	Diazote
		7.6 mm	Hydrogène (50%) - Oxygène	0.023 μm	Diazote
		12.7 mm	Hydrogène (45%) - Oxygène	0.023 μm	Diazote
		6.35 mm	Hydrogène (75%) - Oxygène	0.023 μm	Hydrogène
		< 7.6 mm	Hydrogène (75%) - Oxygène	0.023 μm	Hélium
Rudy et al. [113]	3	30 mm	Hydrogène - Air	10 μm	Air
Grune et al. [114]	3	30 mm	Hydrogène - Air	5.8 μm	Air
	13	600 mm	Hydrogène (20%) - Air	5.8 μm	Air

	2	3 mm	Hydrogène - Oxygène	5.8 μm	Air
Rudy et al. [115]	3.6	40 mm	Hydrogène (25%) - Air	3 μm	Air
	2.93	22.5 mm	Hydrogène - Air	3 μm	Air
	3.03	25 mm	Hydrogène (40%) - Air	3 μm	Air
Rudy et al. [116]	2.93	22.5 mm	Hydrogène - Air	3 μm	Air
	3.06	32.5 mm	Hydrogène - Air - Méthane (5%)	3 μm	Air
	3.35	47.5 mm	Hydrogène - Air - Méthane (10%)	3 μm	Air
Cho et al. [117]	< 4.6	< 50.8 mm	Hydrogène (24%) - Air	Non	Air
	< 6.6	< 50.8 mm	Hydrogène - Air	Non	Air
	< 6.2	< 50.8 mm	Hydrogène (39%)- Air	Non	Air
		< 50.8 mm	Éthylène (5.3%)- Air	Non	Air
	< 2.0	< 50.8 mm	Éthylène - Air	Non	Air
		< 50.8 mm	Éthylène (8.6%)- Air	Non	Air

TABLE 2.2 – Récapitulatif des dimensions critiques obtenues dans les différentes études de détonations confinées par un gaz inerte en configuration rectangulaire.

Travaux numériques

La détonation confinée par un gaz inerte n'a fait l'objet que de peu d'études numériques. Les premières simulations ont été effectuées par Ivanov et al. [118, 119], mais l'extrême faiblesse de la résolution numérique (2,000 mailles pour la totalité du domaine de calcul, soit moins d'une maille par demi-longueur de réaction) permet de mettre en doute les résultats et les conclusions obtenues.

Oran et al. [120] abordent brièvement cette configuration dans leur étude de la propagation des détonations dans deux couches de prémélange distinctes. Ils visaient à reproduire les résultats obtenus expérimentalement par Liu [121, 122], dans lesquels la détonation se propage dans des couches réactives de richesse différente. Le cas du confinement par l'inerte ne constitue qu'un cas particulier de l'étude. Les structures caractéristiques de la détonation confinée sont observées (détonation courbe et onde de choc oblique).

Li et al. [123] ont également traité cette configuration. Afin de se prémunir de l'apparition d'instabilités cellulaires et de se rapprocher de la physique des explosifs condensés, les auteurs ont utilisé un modèle cinétique dépendant de la pression. Des comparaisons ont été réalisées avec différents modèles analytiques (Wood et Kirkwood [124], Tsuge et al. [125]). Le modèle de Wood et Kirkwood, via la relation célérité - courbure, produit d'excellents résultats en accord avec les simulations numériques contrairement à celui de Tsuge et al. (modèle de Newton). Dans une étude connexe [126], les mêmes auteurs se sont intéressés à l'influence exercée par un réseau d'hétérogénéités spatiales sur les limites de propagation. Le milieu réactif est toujours confiné par une couche de gaz inerte, et des ondulations sinusoïdales de la densité sont introduites dans le milieu initial. La présence des hétérogénéités réduit le déficit de vitesse en comparaison avec le cas homogène. Ce résultat possède néanmoins une portée limitée du fait de la nature artificielle des homogénéités, qui sont difficilement comparables aux instabilités intrinsèques liées à la structure cellulaire de la détonation, qui se développent en aval du front.

En 2017, Houim et Fievisohn [127] ont étudié l'influence du ratio d'impédance acoustique sur la détonation confinée par un gaz inerte. Ils ont réalisé des simulations bidimensionnelles reposant sur les équations d'Euler. Le mélange stœchiométrique d'éthylène et d'oxygène a été modélisé par une chimie simple en une étape. Ces calculs ont été conduits pour une géométrie fixe en faisant varier la température de la couche inerte, ce qui correspond à des ratios d'impédance acoustique différents. Pour des ratios Z proches de l'unité (1.0 et 0.71), les calculs ont conduit à l'extinction de la détonation. Pour un ratio élevé ($Z = 1.73$), représentatif d'un confinement par un gaz lourd tel que l'argon ou SF_6 , la détonation se propage avec succès. C'est également le cas des configurations pour

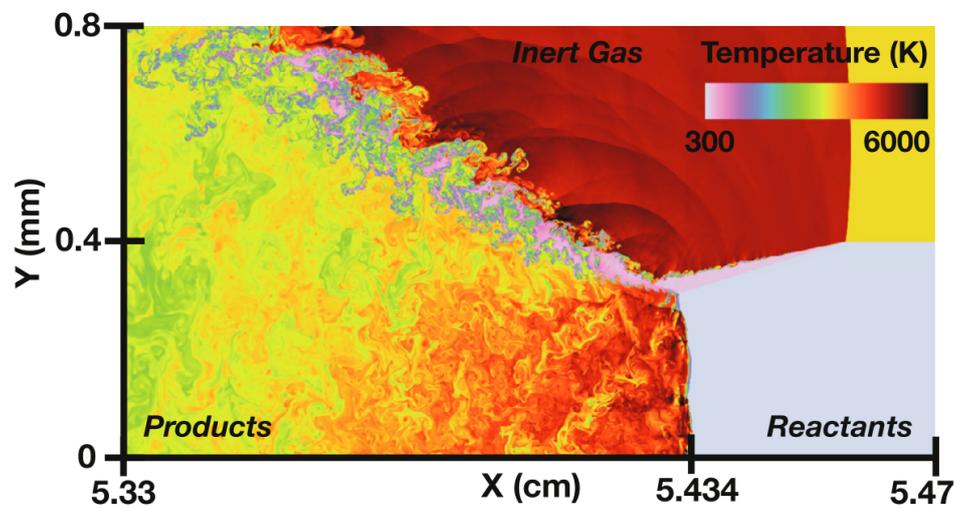
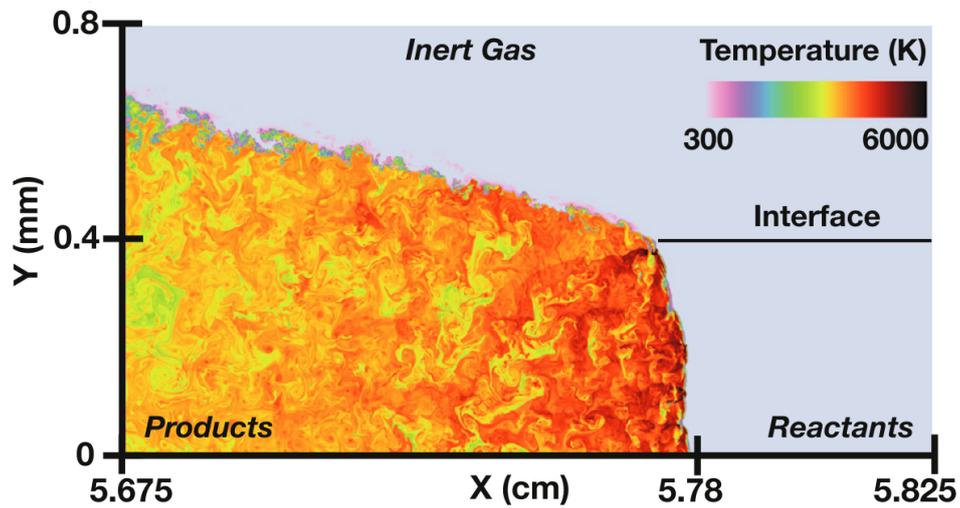


FIGURE 2.8 – Champs de température pour les ratio des impédances acoustiques $Z = 1.73$ ($T_i = 100$ K et $T_r = 300$ K) (a) et pour $Z = 0.29$ ($T_i = 3500$ K et $T_r = 300$ K) (b) [127].

lesquelles le gaz inerte est à température élevée : 1000 K ($Z = 0.55$) et 3500 K ($Z = 0.29$). Dans ces cas précis, l'onde de choc oblique évoluant dans la couche inerte devient une onde de choc détachée. Les deux différentes topologies de l'écoulement sont illustrées sur la Figure 2.8. Les champs de température correspondent à $Z = 1.73$ pour la Figure 2.8 (a) et $Z = 0.29$ pour la Figure 2.8 (b). Dans le premier cas, il s'agit d'un confinement plus lourd que le milieu réactif. Dans le second cas, le confinement est à 3500 K, ce qui conduit à une structure différente de l'écoulement. Le choc détaché se propage bien en amont de la détonation. Un choc oblique fait la jonction entre ces deux éléments, et un important jet de gaz frais se développe en aval du front.

2.4 Synthèse partielle, position et apport de notre étude

Beaucoup de situations expérimentales conduisent à des conditions de propagation non idéales, dans lesquelles l'influence du milieu extérieur sur la détonation ne peut plus être négligée. En effet, la zone de réaction dans laquelle a lieu la libération d'énergie est de longueur finie, la rendant susceptible d'être affectée par les conditions limites du système. C'est ce qui se produit lors de la propagation dans un canal, au travers d'échanges thermiques et de quantité de mouvement avec les parois. C'est aussi le cas lors de la propagation dans un tube poreux, via la perte de masse par les pores et l'amortissement des ondes transverses ou encore dans la diffraction de la détonation, pour laquelle la divergence du front et sa décélération locale affectent le taux de réaction. La configuration centrale de ce manuscrit, dans laquelle la détonation est confinée par une couche de gaz inerte n'échappe pas à ce constat. Bien qu'elles soient par nature distinctes, ces situations produisent des effets similaires : décélération du front et réduction de la vitesse de la détonation pouvant selon l'amplitude des pertes conduire à son extinction.

Les détonations confinées par un gaz inerte ont été l'objet d'une douzaine d'études expérimentales. Des moyens variés ont été employés dans la réalisation concrète du dispositif. Ces différences portent notamment sur des géométries distinctes dans lesquelles seulement une partie de la détonation est exposée au confinement (configurations rectangulaires à une ou deux ouvertures) ou bien sa totalité (configuration cylindrique de charge libre). De nombreux mélanges réactifs, dans des proportions pour lesquelles les tailles de cellules caractéristiques ne sont pas connues, ont été employés rendant de fait difficile la détermination d'une loi comportementale. L'ensemble de ces facteurs est responsable des écarts obtenus en termes de dimension critique dans la littérature. Ces études ont cependant permis d'identifier les structures caractéristiques des détonations confinées : une détonation courbe, la présence d'un choc oblique ou détaché évoluant dans le médium

inerte ainsi que l'interface entre les gaz brûlés et le milieu inerte.

En revanche, la dynamique précise de la détonation et la façon dont elle interagit avec le confinement est peu connue. Les simulations numériques ont un rôle particulier à jouer afin d'améliorer la compréhension des phénomènes en jeu dans cette configuration, pour laquelle la mise en place de diagnostics expérimentaux demeure complexe. Chacune des configurations expérimentales est caractérisée par des limites de propagations qui lui sont propres, et qui dépendent en outre de la stabilité du mélange réactif. Il n'existe pas à ce jour de critère généralisé permettant d'établir le domaine de détonabilité dans ces situations expérimentales variées.

Notre étude vise à simuler la propagation de détonations confinées par un gaz inerte. L'influence de plusieurs paramètres est examinée : la hauteur de la couche de mélange, la régularité du gaz réactif et le ratio d'impédances acoustiques entre les deux couches. Les résultats obtenus constituent une base de données numérique destinée à mieux comprendre cette configuration et la littérature associée. Plus largement, il s'agit également d'améliorer la compréhension des détonations lorsque des pertes sont présentes dans la zone de réaction.

Équations mathématiques et méthodes numériques

Sommaire

3.1	Introduction	52
3.2	Modèle mathématique	52
3.2.1	Équations d'Euler pour un fluide réactif	52
3.2.2	Modèle cinétique	53
3.2.3	Relations thermodynamiques	54
3.3	Méthodes numériques	56
3.3.1	Solveur aérodynamique	56
3.3.2	Extension au cas bidimensionnel	64
3.3.3	Intégration des termes sources	65
3.3.4	Condition de stabilité	67
3.3.5	Conditions aux limites	67
3.3.6	Procédure de recyclage du domaine de calcul	68
3.3.7	Raffinement statique de la résolution numérique	69
3.3.8	Procédure de calcul des quantités moyennes	69
3.4	Outils de visualisation numérique et de post-traitement	72
3.4.1	Détermination de la vitesse de détonation	72
3.4.2	Strioscopie ou "schlieren" numérique	73
3.4.3	Suivi des points triples	74
3.5	Validation des méthodes numériques : test de Sod	74
3.6	Synthèse partielle	75

3.1 Introduction

Un code numérique spécifique au traitement de la configuration des détonations confinées a été développé. Les phénomènes physiques associés sont, du point de vue de la simulation numérique, particulièrement exigeants car ils font intervenir de multiples échelles spatiales caractéristiques. La libération de l'énergie chimique a lieu dans la zone de réaction, qui constitue l'échelle spatiale la plus petite. La taille de cellule $\lambda \approx 10 - 100 l_{1/2}$ est la signature de l'interaction des multiples instabilités hydrodynamiques du front de choc. L'épaisseur hydrodynamique excède généralement la taille de cellule ($\lambda < h_t < 10 \lambda$). Enfin, la distance de propagation est de plusieurs centaines de fois la taille de cellule λ . Cette situation physique peut donc être qualifiée de problème multi-échelle.

Ce chapitre traite des choix qui ont été effectués quant à la modélisation de l'écoulement et des méthodes numériques. Les équations retenues pour la description de la problématique sont présentées dans un premier temps. La seconde partie est consacrée au détail des schémas numériques employés. Enfin, les méthodes de visualisation et de post-traitement sont détaillées.

3.2 Modèle mathématique

3.2.1 Équations d'Euler pour un fluide réactif

En l'absence de phénomènes diffusifs, l'évolution d'un système bidimensionnel composé d'un ou de plusieurs gaz réactifs est décrite par les équations d'Euler réactives :

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

avec

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

U est le vecteur des variables conservatives, F et G les vecteurs des flux conservatifs dans les directions x et y , respectivement, et S est le vecteur des termes sources. ρ_k est la masse volumique de la $k^{\text{ème}}$ espèce chimique. u et v sont les vitesses selon les directions x et y . $E = e + (u^2 + v^2)/2$ et e sont, respectivement, l'énergie totale et l'énergie interne du fluide par unité de masse. \mathcal{W}_k et $\dot{\omega}_k$ sont, respectivement, la masse molaire et le terme source chimique de la $k^{\text{ème}}$ espèce. Ces équations traduisent la conservation de la masse, de la quantité de mouvement ainsi que de l'énergie de l'ensemble du système. Elles traduisent également les transformations chimiques ayant lieu au sein du système, c'est-à-dire la disparition et l'apparition d'espèces.

3.2.2 Modèle cinétique

La réaction de combustion dégage l'énergie nécessaire à la propagation autonome de l'onde de détonation. Elle peut être représentée au travers d'une équation bilan globale :



où ν_F , ν_O et ν_P désignent respectivement les coefficients stœchiométriques du combustible F, de l'oxydant O et des produits P. Cette réaction est une synthèse simplifiée des transformations ayant lieu dans le milieu, mais ne reflète pas le mécanisme réactionnel effectif. Pour décrire de façon exacte la création, l'évolution et la disparition des espèces chimiques, il est nécessaire de connaître les réactions élémentaires régissant le système. Cependant, la prise en compte de l'ensemble de ces réactions conduit à la présence de plusieurs dizaines d'espèces chimiques qui réagissent via plusieurs centaines de réactions élémentaires différentes. La modélisation de la chimie par des schémas détaillés augmente considérablement les temps de calcul. Il est néanmoins possible d'utiliser des schémas

réduits à une ou plusieurs étapes, permettant de reproduire un certain nombre de propriétés caractéristiques de la réaction chimique réelle. L'utilisation d'un modèle global est justifiée par le désir de réduire le nombre de paramètres de contrôle en modélisant la réaction chimique de façon la plus simple qu'il soit.

La phénoménologie de la détonation est en très grande partie décrite correctement par une modélisation en une étape. De nombreuses études numériques s'appuient sur ce schéma et obtiennent des résultats qualitativement comparables à ceux issus de la littérature expérimentale. Kessler et al. [128] ont effectué des simulations dans un mélange méthane - air, particulièrement irrégulier. Les structures obtenues sont qualitativement similaires à celles observées expérimentalement. Gamezo et al. [129] se sont intéressés à des détonations fortement irrégulières dans des conditions marginales. Les sous-structures cellulaires se développant pour ce type de détonations marginales ont été reproduites par la modélisation cinétique en une étape. Néanmoins, certains aspects ne peuvent pas être modélisés par une chimie en une étape. La double structure cellulaire [130] nécessite à minima l'introduction d'une espèce chimique supplémentaire pour transcrire la seconde réaction exothermique. C'est également le cas des effets de réactions en chaîne, qui peuvent affecter la réactivité du mélange [131, 132].

Cependant, l'emploi de schémas cinétiques détaillés pour la simulation des détonations soulève plusieurs problèmes. Pour des mélanges réguliers, les structures globales de l'écoulement ne diffèrent pas entre l'utilisation d'un modèle détaillé [52] ou en une étape [54]. De plus, certaines simulations des détonations dans les mélanges irréguliers avec une modélisation de la chimie détaillée donnent des résultats qui ne correspondent pas à la littérature expérimentale [133]. Les coefficients des mécanismes réactionnels ne sont pas calibrés pour être utilisés simultanément à très haute pression et à très haute température. L'ensemble de ces éléments nous a conduits à choisir une chimie simplifiée en une étape pour toutes les simulations de ce manuscrit, pour lesquelles nous nous limitons aux détonations modérément irrégulières.

3.2.3 Relations thermodynamiques

Équation d'état

Pour fermer le système d'équations décrit précédemment, il convient d'y incorporer une équation d'état. À chaque espèce du mélange est associée une pression partielle p_k et une masse molaire \mathcal{W}_k . Le mélange occupe un volume V sous la pression p , à la température T . Tous les constituants du mélange sont à la même température. La pression partielle

p_k de la $k^{\text{ème}}$ espèce est la pression qu'aurait le mélange s'il n'était constitué que de cette espèce. Nous supposons que chaque espèce chimique est régie par la loi des gaz parfaits :

$$p_k = \rho_k r_k T \quad (3.3)$$

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

$$\begin{aligned} p &= \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} p_k = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \rho_k r_k T = TR \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \frac{\rho_k}{\mathcal{W}_k} \\ &= TR \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \frac{\rho_k}{\rho} \frac{\rho}{\mathcal{W}_k} = T\rho R \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \frac{Y_k}{\mathcal{W}_k} = T\rho \frac{R}{\mathcal{W}} \end{aligned}$$

On obtient alors $p = \rho r T$, où $r = R/\mathcal{W}$ et $\mathcal{W} = \left(\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_k/\mathcal{W}_k \right)^{-1}$ sont respectivement la constante et la masse molaire du mélange.

Vitesse du son

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

$$c^2 = \left[\left(\frac{p}{\rho^2} \right) - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{p, Y_k} \right] \left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)_{\rho, Y_k}^{-1} \quad (3.4)$$

qui peut s'écrire aussi comme

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k} \cdot \left[\left(\frac{p}{\rho^2} \right) - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} \right] \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k}^{-1} \quad (3.5)$$

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

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} = 0 \quad , \quad \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, Y_k} = rT \quad , \quad \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k} = \rho r \quad , \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_{\rho, Y_k} = C_v$$

On obtient alors

$$c = \sqrt{\gamma r T} \quad (3.6)$$

3.3 Méthodes numériques

Les détonations sont source d'écoulements complexes où s'entremêlent des discontinuités des grandeurs physiques et des réactions chimiques rapides. Il est nécessaire de développer des stratégies de résolution adaptées à de telles structures.

3.3.1 Solveur aérodynamique

La discrétisation des équations d'Euler présentées dans la Sous-section 3.2.1 est effectuée via la méthode des différences finies. Cette méthode offre une grande simplicité d'écriture et est avantageuse en termes de temps de calcul. En revanche, elle ne permet pas de modéliser des écoulements dans des géométries complexes. Dans la suite de cette sous-section, nous nous attacherons à décrire la discrétisation des équations d'Euler monodimensionnelles suivantes :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \quad (3.7)$$

où $U = [\rho, \rho u, \rho E, \rho_k]^T$ et $F(U) = [\rho u, \rho u^2 + p, (\rho E + P)u, \rho_k u]^T$. Ce choix est motivé par l'architecture du code de calcul dans lequel un splitting directionnel est utilisé. Ainsi, les équations d'Euler bidimensionnelles sont résolues séparément dans chaque direction de l'espace. Ce point est adressé ultérieurement dans cette section. La discrétisation s'effectue en deux étapes :

- Reconstruction des variables caractéristiques aux interfaces à partir des valeurs centrées (Schéma MP).
- Résolution du problème de Riemann aux interfaces et calculs des flux (Schéma HLLC).

Schéma MP (Monotonicity Preserving)

Les schémas MP [134] (*Monotonicity Preserving*) ont été développés afin de résoudre les équations d'Euler, dont la solution présente à la fois des structures continues et des discontinuités. Ils offrent une bonne précision tout en garantissant un comportement non oscillatoire au travers des chocs.

Ces schémas reposent sur l'utilisation de limiteurs. Cette technique a été développée par van Leer [135] pour les schémas d'ordre 2 (MUSCL, *Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws*) puis par Colella et Woodward [136] pour la *Piecewise Parabolic*

Method (PPM). Une interpolation d'ordre élevée est utilisée afin de déterminer la valeur à l'interface de maille puis celle-ci est corrigée et *limitée* de manière à restreindre les oscillations susceptibles d'être générées par le schéma. Les limiteurs calculés dans le cadre du schéma MP permettent de préserver à la fois la monotonie et la précision. Cette interpolation est privilégiée ici aux méthodes WENO [137] car elle engendre de moindres erreurs de dissipation et de dispersion pour les chocs et les discontinuités de contact de forte amplitude [138, 139]. Dans notre étude, une interpolation d'ordre 9 est utilisée, ce qui implique un stencil de 9 mailles.

Dans la suite de cette section, v_j^n représente l'approximation numérique de la variable conservative $U(x, t)$ moyennée sur la maille j à l'itération n :

$$v_j^n \simeq \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} U(x, t) dx \quad (3.8)$$

avec $\Delta x = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$ le pas d'espace uniforme. Par la suite, l'indice n sera omis pour plus de clarté.

La procédure de calcul des variables aux interfaces se fait de la manière suivante :

- Dans un premier temps, il est nécessaire de calculer les variables caractéristiques. Il est admis que la reconstruction de U est meilleure lorsque effectuée à partir des variables caractéristiques afin de réduire les oscillations [140]. Cette opération peut être effectuée au moyen de matrices de passage, définies à partir des valeurs propres de la matrice Jacobienne $A(U) = \partial F / \partial U : u - c$, u et $u + c$. Dans ce cas, les matrices de valeurs propres gauches et droites s'écrivent :

$$L = \begin{bmatrix} b_2/2 + u/2c & -b_1u/2 - 1/2c & b_1/2 \\ 1 - b_2 & b_1u & -b_1 \\ b_2/2 - u/2c & -b_1u/2 + 1/2c & b_1/2 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

et

$$R = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - c & u & u + c \\ H - uc & \frac{1}{2}u^2 & H + uc \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

avec $b_1 = (\gamma - 1)/c^2$, $b_2 = u^2 b_1/2$ et $H = c^2/(\gamma - 1) + \frac{1}{2}u^2$ Ainsi la variable

caractéristique locale est donnée par

$$w_k = L(v_j)v_{j+k} \text{ pour } k = -4, 4 \quad (3.11)$$

Afin de s'affranchir du calcul des matrices de passage, il est également possible de calculer les variables caractéristiques locales directement à partir des variables primitives :

$$w_k^1 = p_{j+k} + \frac{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}}{2} u_{j+k} \quad (3.12)$$

$$w_k^2 = p_{j+k} - \frac{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}}{2} u_{j+k} \quad (3.13)$$

$$w_k^3 = p_{j+k} + \frac{c_j^2 + c_{j+1}^2}{2} \rho_{j+k} \quad (3.14)$$

pour $k = -4, 4$. C'est le choix qui a été fait.

- Les valeurs aux interfaces $w_{j+1/2}^L$ et $w_{j-1/2}^R$ sont calculées en deux temps. La procédure est uniquement explicitée pour $w_{j+1/2}^L$ car elle est symétrique pour $w_{j-1/2}^R$. Dans un premier temps, un polynôme est utilisé afin de calculer une valeur provisoire de $w_{j+1/2}^L$ à l'interface gauche située en $j + 1/2$.

$$\begin{aligned} w_{j+1/2}^L = & (4 w_{j-4} - 41 w_{j-3} + 199 w_{j-2} - 641 w_{j-1} \\ & + 1879 w_j + 1375 w_{j+1} - 305 w_{j+2} \\ & + 55 w_{j+3} - 5 w_{j+4})/2520 \end{aligned} \quad (3.15)$$

Ce moyen de calcul de la valeur provisoire à l'interface introduit des oscillations près des discontinuités. La seconde partie de l'algorithme est destinée à corriger ce défaut en bornant la solution sous certaines conditions. Introduisons à cet effet deux fonctions : *median* et *minmod*. Par définition, le médian de trois nombre est le nombre situé entre les deux autres. $\text{minmod}(x, y)$ peut alors être redéfini comme étant le médian de x, y et 0. Par extension, $\text{minmod}(z_1, \dots, z_k)$ retourne le plus petit nombre de la série si tous les arguments sont positifs, le plus grand si tous sont négatifs et zéro dans les autres cas.

- La première contrainte concerne la monotonicité de la solution après l'avancement en temps.

$$w_{j-1/2}^L \in [w_{j-1}, w_j] \quad (3.16)$$

soit par changement d'indice

$$w_{j+1/2}^L \in [w_j, w_{j+1}] \quad (3.17)$$

$$w_{j+1/2}^L \in [w_j, w^{UL}] \quad (3.18)$$

avec

$$w^{UL} = w_j + \alpha(w_j - w_{j-1}) \quad (3.19)$$

Il est donc nécessaire que $w_{j+1/2}^L$ soit inclus dans l'intersection des deux intervalles décrits Eqs. 3.16 et 3.17 afin de préserver la monotonie de la solution. Cette contrainte est implémentée à l'aide des deux fonctions introduites précédemment, `median` et `minmod`. L'appartenance à l'intersection des Eqs. 3.16 et 3.17 peut s'écrire

$$w_{j+1/2}^L \in [w_j, w^{MP}] \quad (3.20)$$

où

$$w^{MP} = w_j + \minmod[w_{j+1} - w_j, \alpha(w_j - w_{j-1})] \quad (3.21)$$

Pour placer $w_{j+1/2}^L$ dans cet intervalle, il faut la substituer par :

$$w_{j+1/2}^L \leftarrow \text{median}(w_{j+1/2}^L, w_j, w^{MP}) \quad (3.22)$$

Cette contrainte assure la monotonie de la solution sous réserve que la condition CFL soit respectée. Néanmoins, elle entraîne une perte de précision près des extrema. La suite de l'algorithme est dédiée à la correction de cette problématique.

- Dans les régions lisses dépourvues d'extremum, il n'est pas nécessaire de corriger la valeur obtenue, car elle satisfait les critères de précision. En revanche lorsque ce n'est pas le cas, la contrainte de monotonie doit être relâchée en agrandissant les intervalles considérés précédemment :

$$w_{j+1/2}^L \in [w^{\min}, w^{\max}] \quad (3.23)$$

d'où

$$w_{j+1/2}^L \leftarrow \text{median}(w_{j+1/2}^L, w^{\min}, w^{\max}) \quad (3.24)$$

Les valeurs intermédiaires w^{\min} et w^{\max} sont calculées de la façon suivante :

$$w^{\min} = \max[\min(w_j, w_{j+1}, w^{MD}), \min(w_j, w^{UL}, w^{LC})] \quad (3.25)$$

$$w^{\max} = \min[\max(w_j, w_{j+1}, w^{MD}), \max(w_j, w^{UL}, w^{LC})] \quad (3.26)$$

avec

$$w^{MD} = \frac{1}{2}(w_j + w_{j+1}) - \frac{1}{2}d_{j+1/2}^{M4} \quad (3.27)$$

$$w^{LC} = w_j + \frac{1}{2}(w_j - w_{j-1} + \frac{4}{3}d_{j-1/2}^{M4}) \quad (3.28)$$

et

$$d_{j+1/2}^{M4} = \text{minmod}(4d_j - d_{j+1}, 4d_{j+1} - d_j, d_{j+1}) \quad (3.29)$$

$$d_j = w_{j-1} + w_{j+1} - 2w_j \quad (3.30)$$

— Enfin, les variables primitives sont recalculées à partir de $w_{j+1/2}^L$:

$$p_{j+1/2}^L = \frac{1}{2}(w_{j+1/2}^{L,1} + w_{j+1/2}^{L,2}) \quad (3.31)$$

$$\rho_{j+1/2}^L = 2 \frac{p_{j+1/2}^L - w_{j+1/2}^{L,3}}{(c_j^2 + c_{j+1}^2)} \quad (3.32)$$

$$u_{j+1/2}^L = \frac{w_{j+1/2}^{L,1} - w_{j+1/2}^{L,2}}{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}} \quad (3.33)$$

$$(3.34)$$

Ainsi, après le calcul des flux, les vecteurs U_L , U_R , F_L et F_R sont connus. La détermination de la valeur finale est effectuée par résolution du problème de Riemann détaillé dans la prochaine partie.

Solveur HLLC

Les calculs ont été réalisés en combinant le schéma MP pour l'interpolation des variables caractéristiques et le solveur de Riemann approché pour le calcul des flux. Le solveur HLLC a été choisi en raison de sa robustesse et de sa simplicité de mise en œuvre. C'est une

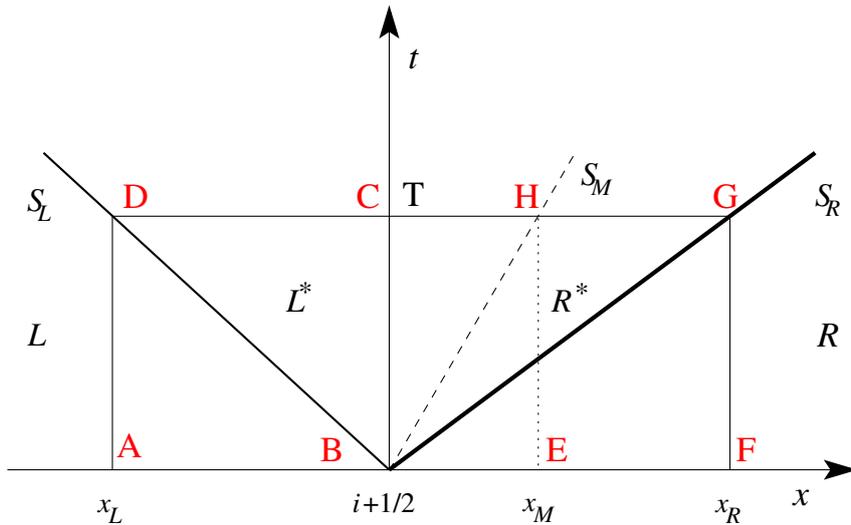


FIGURE 3.1 – Schéma de l'approximation choc-choc du solveur HLLC au point $i + 1/2$, dans un diagramme (x, t) [144].

extension du solveur HLL (Solveur numérique de Riemann développé par Harten, Lax et van Leer [141]) dans laquelle la discontinuité de contact a été rétablie [142, 143]). Le calcul des flux HLLC est décrit ci-dessous :

Considérons le volume de contrôle défini par $S = [0, T] \times [x_L, x_R]$ (voir Figure 3.1). En intégrant l'Eq. 3.7 dans ce volume, nous obtenons

$$\oint_C (-U\vec{x} + F\vec{t}) \cdot d\vec{C} = 0 \quad (3.35)$$

soit, en posant $d\vec{C} = dx \cdot \vec{x} + dt \cdot \vec{t}$

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

L'évaluation de l'intégrale précédente dans le rectangle ABCD de la Figure 3.1, conduit à

$$\int_{x_L}^0 U_L dx - \int_0^T F_L^* dt + \int_0^{x_L} U_L^* dx - \int_T^0 F_L dt = 0 \quad (3.36)$$

d'où

$$-x_L U_L - F_L^* T + x_L U_L^* + F_L T = 0 \quad , \text{ i.e. } F_L^* = F_L + S_L (U_L^* - U_L)$$

En effectuant un calcul similaire dans le rectangle EFGH, nous obtenons

$$\int_{x_M}^{x_R} U_R dx - \int_0^T F_R dt + \int_{x_R}^{x_M} U_R^* dx - \int_T^0 F_R^* dt = 0 \quad (3.37)$$

Soit finalement

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

De la même manière,

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

avec

$$S_L \begin{bmatrix} \rho_L^* \\ \rho_L^* u_L^* \\ \rho_L^* E_L^* \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \rho_L^* u_L^* \\ \rho_L^* u_L^{*2} + P^* \\ (\rho_L^* E_L^* + P^*) u_L^* \end{bmatrix} = S_L \begin{bmatrix} \rho_L \\ \rho_L u_L \\ \rho_L E_L \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \rho_L u_L \\ \rho_L u_L^2 + P_L \\ (\rho_L E_L + P_L) u_L \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

La résolution du système d'équations conduit à

$$\rho_L^* E_L^* = \frac{\rho_L E_L (S_L - u_L) - u_L P_L + S_M P^*}{S_L - S_M} \quad (3.39)$$

avec $u_L^* = S_M$ (condition d'interface au niveau de la discontinuité de contact). En résumé, nous pouvons écrire

$$U_L^* = \begin{bmatrix} \rho_L^* = \frac{\rho_L (S_L - u_L)}{S_L - S_M} \\ \rho_L^* u_L^* = \frac{\rho_L u_L (S_L - u_L) + P^* - P_L}{S_L - S_M} = \rho_L^* S_M \\ \rho_L^* E_L^* = \frac{\rho_L E_L (S_L - u_L) - u_L P_L + S_M P^*}{S_L - S_M} \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

Et de façon similaire,

$$U_R^* = \begin{bmatrix} \rho_R^* = \frac{\rho_R (S_R - u_R)}{S_R - S_M} \\ \rho_R^* u_R^* = \frac{\rho_R u_R (S_R - u_R) + P^* - P_R}{S_R - S_M} = \rho_R^* S_M \\ \rho_R^* E_R^* = \frac{\rho_R E_R (S_R - u_R) - u_R P_R + S_M P^*}{S_R - S_M} \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

L'élimination de P^* dans l'équation de quantité de mouvement permet d'isoler l'expression

de la vitesse de la discontinuité de contact S_M [142]

$$S_M = \frac{\rho_R u_R (S_R - u_R) - P_R - \rho_L u_L (S_L - u_L) + P_L}{\rho_R (S_R - u_R) - \rho_L (S_L - u_L)} \quad (3.42)$$

Cela nous conduit à l'expression de P^*

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

Nous pouvons en déduire les expressions de F_L^* et F_R^*

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

L'évaluation des vitesses S_L et S_R est réalisée à l'aide de l'estimation des vitesses de Davis [145]

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

Enfin, le calcul du flux $F_{i+1/2}$ s'effectue de la façon suivante

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

Avancement en temps

L'Eq. 3.7 s'écrit, sous forme semi-discrète :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \mathcal{L}_h(U) \quad \text{avec} \quad \mathcal{L}_h(U) = \frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \quad (3.43)$$

$F_{i+1/2}$ étant le flux numérique dont l'évaluation a été décrite dans le paragraphe précédent. L'intégration de cette équation est réalisée à l'aide d'un schéma TVD (*Total Variation*

Diminishing) d'ordre 3 [146, 147]. La procédure d'intégration est la suivante :

$$\begin{cases} U^{(1)} = U^n + \Delta t \mathcal{L}_h(U^n) \\ U^{(2)} = \frac{1}{4} [3U^n + U^{(1)} + \Delta t \mathcal{L}_h(U^{(1)})] \\ U^{(n+1)} = \frac{1}{3} [U^n + 2U^{(2)} + 2\Delta t \mathcal{L}_h(U^{(2)})] \end{cases} \quad (3.44)$$

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

3.3.2 Extension au cas bidimensionnel

Ces méthodes permettent la résolution de l'équation monodimensionnelle Eq. 3.7. Pour notre configuration bidimensionnelle, il est nécessaire d'étendre cette stratégie dans la seconde direction de l'espace. La démarche est également valable pour une extension aux calculs 3D.

La partie hyperbolique des équations du mouvement en deux dimensions s'écrit :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0 \quad (3.45)$$

La méthode de *splitting directional* est utilisée afin d'étendre les schémas de résolution monodimensionnels à un problème multidimensionnel. Elle consiste à reprendre les éléments présentés dans la sous-section précédente en les appliquant successivement dans chacune des directions de l'espace. Cette méthode n'est pas exacte, car dans notre cas le système n'est pas linéaire [144]. Ainsi l'Eq. 3.45 est remplacée par la séquence suivante :

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \\ \text{ICs : } U^n \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} \tilde{U} \quad (3.46)$$

Le système d'équations aux dérivées partielles 3.46 avec U^n pour condition initiale est intégré sur un pas de temps afin d'obtenir la solution temporaire \tilde{U} . Le système 3.47 est ensuite intégré sur un pas de temps avec \tilde{U} pour solution initiale afin d'obtenir \tilde{U}^{n+1} .

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0 \\ \text{ICs : } \tilde{U} \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} \tilde{U}^{n+1} \quad (3.47)$$

La solution du premier système constitue la valeur initiale du second. Cette approche permet de restreindre une partie importante du code de calcul à un solveur monodimensionnel, réduisant ainsi la taille des structures de données. Formellement, le schéma numérique de la partie homogène de l'Eq. 3.45 s'écrit à l'aide des opérateurs précédemment définis $\tilde{U} = \mathcal{L}_{h,\Delta y}(\Delta t)\mathcal{L}_{h,\Delta x}(\Delta t)U^n$.

3.3.3 Intégration des termes sources

La présence d'un terme source $S(U)$ dans l'Eq. 3.7 peut traduire de nombreuses situations physiques. Dans notre cas, ce sont les réactions chimiques qui se produisent dans le milieu et l'énergie qu'elles apportent à l'écoulement qui sont modélisées au travers de ce terme.

Dans la majorité des cas, l'intégration des termes sources est effectuée suivant des schémas implicites ou semi-implicites. En effet, ces derniers s'avèrent très robustes pour l'intégration des termes sources raides, comme c'est le cas des termes sources chimiques. Ils sont cependant coûteux en temps calcul. Un des moyens de s'affranchir de cette difficulté est d'utiliser des schémas explicites. Après intégration de la partie homogène des équations du mouvement, il convient de résoudre un ensemble d'équations différentielles ordinaires (ODE). L'intégration de ces équations nécessite la connaissance des conditions initiales qui sont les solutions obtenues après résolution de la partie homogène des équations du mouvement. Ainsi, la séquence complète de résolution s'écrit :

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0 \\ \text{ICs : } U^n \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} \tilde{U} \quad (3.48)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{PDEs : } \frac{d}{dt} U = S(U) \\ \text{ICs : } \tilde{U} \end{array} \right\} \xrightarrow{\Delta t} U^{n+1} \quad (3.49)$$

Intégration du terme source chimique

La méthode d'intégration des termes sources chimiques est basée sur l'approximation QSSA (*Quasi Steady State Approximation*). Le schéma utilisé est explicite, pour des raisons de simplicité d'implémentation, mais assez robuste pour intégrer des termes sources chimiques. Ces derniers sont généralement raides, car les temps chimiques sont petits en comparaison des temps convectifs. Le taux de réaction utilisé pour modéliser le processus chimique, de type $A \rightarrow B$, repose sur la loi d'Arrhenius :

$$\frac{d[Y_A]}{dt} = -k[Y_A] \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.50)$$

L'équation 3.50 peut être réécrite de la forme

$$\frac{d[Y_A]}{[Y_A]} = -k dt \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.51)$$

Soit après intégration

$$[Y_A](t) = [Y_A](t - dt) \exp\left[-k dt \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)\right] \quad (3.52)$$

où $[Y_A](t - dt)$ est la concentration molaire de l'espèce réactive A à l'instant précédent. Numériquement, cela se traduit par

$$[Y_A]^{n+1} = [Y_A]^n \exp\left[-k \Delta t \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)\right] \quad (3.53)$$

$\dot{\xi}$ représente la variable d'avancement de la réaction chimique telle que

$$\dot{\xi} = [Y_A]^{n+1} - [Y_A]^n \quad (3.54)$$

que l'on peut encore écrire

$$\dot{\xi} = [Y_A]^n \left(\exp \left[-k\Delta t \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \right] - 1 \right) \quad (3.55)$$

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

$$[Y_A]^{n+1} = [Y_A]^n + \dot{\xi} \quad (3.56)$$

Une limitation de la chimie a été implémentée. Cette dernière désactive le terme source chimique pour des fractions massiques inférieures à 10^{-3} pour conserver une longueur de réaction finie.

3.3.4 Condition de stabilité

Le schéma utilisé pour l'intégration des termes sources est inconditionnellement stable. La seule restriction sur le pas de temps est celle liée à la stabilité de l'opérateur $\tilde{\mathcal{L}}_h$. Le solveur développé étant explicite, la stabilité de l'intégration globale est assurée par la restriction CFL (Courant Friedrichs Lewy). Elle impose $\Delta t = \text{CFL} \cdot \tau_{conv}$, où τ_{conv} est le temps convectif déterminé par $1/\tau_{conv} = \max_i (|u_i| + c_i) / \Delta x$. En outre, la condition CFL est restreinte par l'inclusion 3.18 du schéma MP qui impose $\text{CFL} \leq 1/(1 + \alpha) = 0.2$. Le pas de discrétisation temporel Δt varie donc à chaque itération en fonction de l'écoulement pour respecter ces conditions.

3.3.5 Conditions aux limites

Deux types de conditions aux limites sont implémentées dans le code de calcul : les conditions de paroi et les conditions d'absorption.

Conditions de paroi

Dans ce travail des conditions de paroi dites de "paroi glissante" sont utilisées, justifiée par l'emploi des équations d'Euler. De plus, les parois sont considérées comme adiabatiques. La traduction mathématique de cette condition limite sur les variables primitives s'écrit :

$$\rho_{1-i} = \rho_i, u_{1-i} = -u_i, p_{1-i} = p_i, Y_{1-i} = Y_i \text{ pour } i = 1, 10 \quad (3.57)$$

Conditions aux limites d'absorption

Pour modéliser la sortie de l'écoulement du domaine de calcul, des conditions limites d'absorption sont employées :

$$\rho_{1-i} = \rho_i, u_{1-i} = u_i, p_{1-i} = p_i, Y_{1-i} = Y_i \text{ pour } i = 1, 10 \quad (3.58)$$

3.3.6 Procédure de recyclage du domaine de calcul

Le ratio des échelles de longueur caractéristiques du domaine de propagation et de la libération d'énergie chimique atteint plusieurs ordres de grandeur dans le cas des détonations. En conséquence, un nombre important de mailles est nécessaire pour en simuler de façon réaliste le comportement. C'est pourquoi, compte tenu de la nature finie des ressources informatiques, il convient d'implémenter des stratégies permettant de réduire les temps de calcul. La procédure de recyclage répond à cet objectif en s'appuyant sur la parallélisation du domaine via le standard MPI. Ce dernier repose sur le principe de la mémoire distribuée, dans lequel chaque processus accède à une mémoire qui lui est propre. Ils peuvent communiquer, soit avec un processus précis, soit de façon collective avec l'ensemble de leurs pairs. Le domaine de calcul est divisé en différentes zones, appelées blocs, correspondant pour chacune d'entre elles à un processus.

La procédure de recyclage est décrite schématiquement sur la Figure 3.2 :

1. La détonation se propage de la gauche vers la droite dans le domaine de calcul.
2. La détonation est détectée à l'extrémité droite du domaine de calcul, ce qui initie la procédure de recyclage. Dans la pratique, cela se produit lorsqu'une élévation de la pression (0.1 % de la valeur initiale p_0) est détectée près du bord du domaine.
3. Dans ce cas, les blocs les plus en aval de la détonation sont remplacés par de nouveaux blocs qui sont eux ajoutés en amont du front. Les vecteurs sont réinitialisés à l'état initial. Cette élimination d'une partie du domaine de calcul ne perturbe pas la propagation de l'onde de détonation si elle est effectuée au delà de la ligne sonique [148]. Sur le plan informatique, le déplacement des blocs se traduit par une

modification simple de la topologie cartésienne MPI : seuls les tableaux des blocs dits "voisins" sont modifiés.

4. Le calcul reprend normalement son cours jusqu'à la prochaine détection au bord du domaine.

Cette technique cyclique présente l'avantage de s'affranchir du caractère instationnaire de l'onde de détonation, au contraire des procédés reposant sur une contre-vitesse imposée. Elle est employée dans plusieurs études numériques [118, 126, 149].

3.3.7 Raffinement statique de la résolution numérique

Conséquemment au processus de recyclage, le front de détonation évolue majoritairement dans les blocs situés à l'extrémité droite du domaine de calcul. Le raffinement statique du maillage repose sur cette propriété et est illustré sur la Figure 3.3. Les blocs éloignés de la détonation possèdent une résolution moins importante dans la direction de propagation, ce qui permet de concentrer les moyens de calculs dans la zone de réaction. La différence de résolution entre les différentes zones évolue suivant une puissance de deux. Cette technique est plus simple à mettre en place qu'un raffinement adaptatif, et est adaptée à notre étude dans laquelle l'intérêt se porte principalement au voisinage de l'onde de détonation.

3.3.8 Procédure de calcul des quantités moyennes

Il peut s'avérer nécessaire d'analyser la structure d'un écoulement via ses champs moyens, en particulier lorsque certains phénomènes sont autosimilaires. Une procédure permettant de suivre l'évolution, au cours du temps, de ces champs a été mise en place. Le point de départ est l'expression de la moyenne temporelle $\bar{\varphi}$ d'une quantité arbitraire φ .

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{T} \int_{t_i}^t \varphi(\tau) d\tau \quad (3.59)$$

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

$$\bar{\varphi} \cdot T = \int_{t_i}^t \varphi(\tau) d\tau \quad (3.60)$$

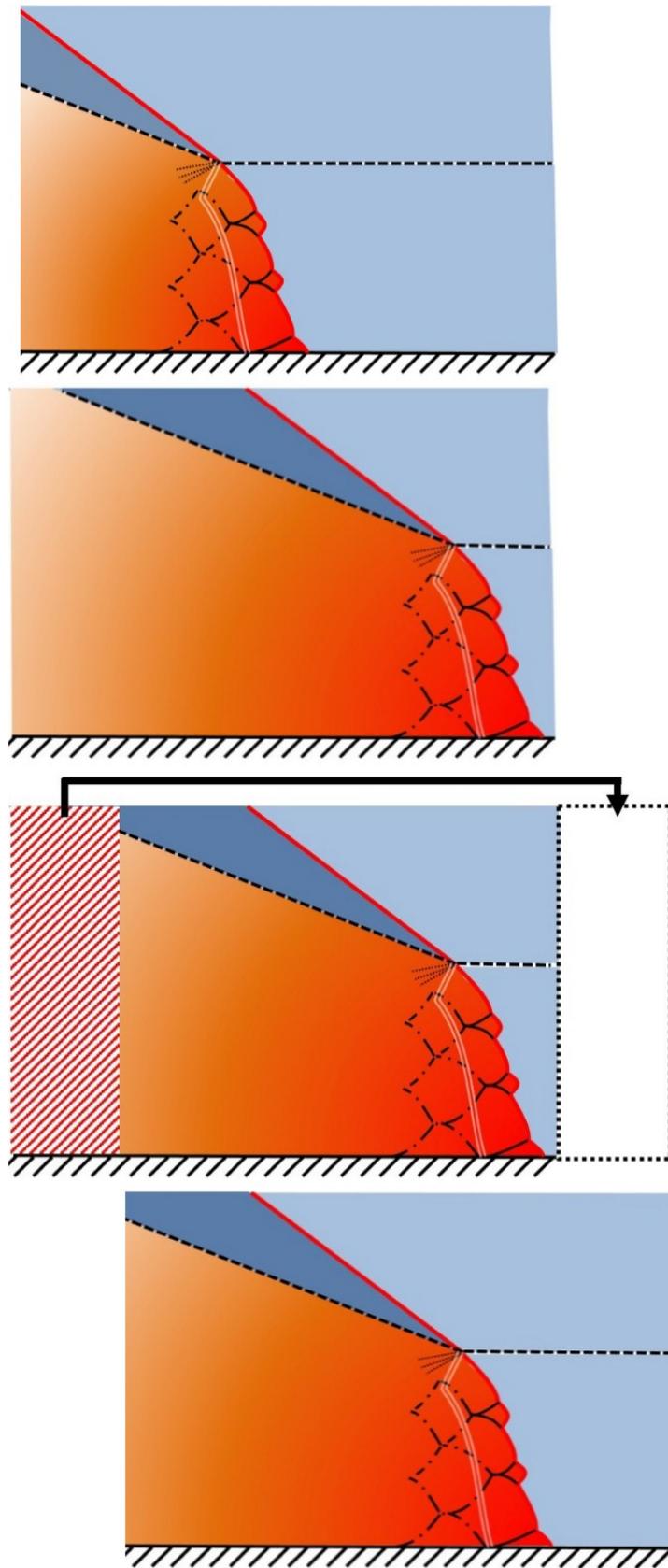


FIGURE 3.2 – Illustration du processus de recyclage.

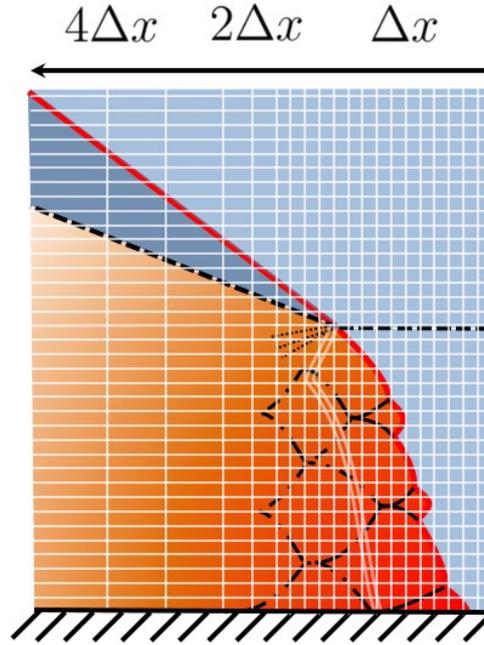


FIGURE 3.3 – Illustration du raffinement statique de la résolution numérique.

Numériquement, cela se traduit par

$$\bar{\varphi}^n \cdot \sum_{m=n_i}^n \Delta t^m = \sum_{m=n_i}^n \varphi^m \Delta t^m \quad (3.61)$$

où $\bar{\varphi}^n$, Δt^m et φ^m sont respectivement la moyenne de φ à l'instant n , le pas de temps et φ à l'instant m . A l'instant $n + 1$, l'égalité ci-dessus reste valable. On peut donc écrire

$$\bar{\varphi}^{n+1} \cdot \sum_{m=n_i}^{n+1} \Delta t^m = \sum_{m=n_i}^{n+1} \varphi^m \Delta t^m \quad (3.62)$$

En retranchant termes à termes l'Eq. 3.61 et l'Eq. 3.62, nous obtenons l'équation ci-dessous

$$\bar{\varphi}^{n+1} [t^n + \Delta t^{n+1}] - \bar{\varphi}^n t^n = \varphi^{n+1} t^{n+1} \quad (3.63)$$

ou encore

$$\bar{\varphi}^{n+1} [t^n + \Delta t^{n+1}] = \bar{\varphi}^n t^n + \varphi^{n+1} t^{n+1} \quad (3.64)$$

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

$$\bar{\varphi}^{n+1} = \frac{\bar{\varphi}^n t^n + \varphi^{n+1} \Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \quad (3.65)$$

avec $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{n+1}$. L'expression de l'Eq. 3.65 peut être réarrangée. Ainsi

$$\bar{\varphi}^{n+1} = \bar{\varphi}^n \frac{t^n}{t^{n+1}} + \varphi^{n+1} \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \quad (3.66)$$

qui peut être réécrite de la façon suivante

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^n &= \bar{\varphi}^n \left(\frac{t^n}{t^{n+1}} - 1 \right) + \varphi^{n+1} \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \\ &= \underbrace{\bar{\varphi}^n \left(\frac{t^n - t^{n+1}}{t^{n+1}} \right)}_{-\Delta t^{n+1}/t^{n+1}} + \varphi^{n+1} \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \end{aligned} \quad (3.67)$$

d'où

$$\bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^n = [\varphi^{n+1} - \bar{\varphi}^n] \frac{\Delta t^{n+1}}{t^{n+1}} \quad (3.68)$$

ou encore

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

L'Eq. 3.69 peut être appliquée à n'importe quelle quantité variant au cours du temps, dont on souhaite connaître la valeur moyenne.

3.4 Outils de visualisation numérique et de post-traitement

Cette section traite des différents outils développés afin de visualiser et d'analyser les propriétés de l'écoulement.

3.4.1 Détermination de la vitesse de détonation

L'effet le plus évident des pertes sur l'onde de détonation est le déficit de vitesse engendré en comparaison de la vitesse dite idéale, issue de la théorie CJ. La connaissance de cette donnée ainsi que de son évolution au cours de la simulation constitue donc un prérequis indispensable à une analyse des détonations non idéales.

La vitesse du front est issue de la mesure de la position de la détonation à chaque itération. Cette mesure est effectuée le long de la paroi inférieure du domaine ($y = 0$) et correspond à la détection d'une hausse de pression (0.1 % de la valeur initiale p_0) dans le milieu au repos. À partir de cette information, la vitesse en fonction du temps est obtenue via l'algorithme de Savitzky–Golay [150]. Ce dernier est une extension de la technique des

moyennes glissantes et permet de lisser une courbe et d'en extraire les dérivées successives. Il consiste en l'interpolation de polynômes sur des stencils de données adjacentes via la méthode des moindres carrés. La connaissance des coefficients polynomiaux permet alors le calcul des dérivées. L'algorithme mathématique précis est détaillé dans la publication originale de Savitzky et Golay [150]. Dans ce travail, des polynômes d'ordre 10 sont utilisés sur des stencils de 10 mailles.

3.4.2 Strioscopie ou "schlieren" numérique

Dans les écoulements réactifs fortement compressibles, plusieurs discontinuités (ondes de choc, discontinuités de contact ou lignes de glissement, faisceau de détente) peuvent apparaître. Ces discontinuités entraînent des changements rapides de l'état thermodynamique du fluide. Cela se traduit par une augmentation brutale de la température, de la pression, de la masse volumique dans le cas d'une compression, ou par une diminution de ces grandeurs dans le cas d'une détente. Pour une meilleure analyse des résultats de calcul, il est important d'utiliser des outils de visualisation qui permettent de mettre en relief les détails de la structure des écoulements étudiés.

Les images strioscopiques numériques sont générées, en suivant le modèle des images expérimentales, à partir du champ du gradient de densité [151]. Pour des écoulements 2D, la norme du gradient de masse volumique s'écrit

$$\|\nabla\rho\| = \sqrt{\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2} \quad (3.70)$$

Afin de faire apparaître toutes les discontinuités du champ de masse volumique, même les plus faibles, il est intéressant d'utiliser une échelle non linéaire en utilisant la fonction

$$S(x, y) = \beta \exp\left(-\frac{\varsigma\|\nabla\rho\|}{\|\nabla\rho\|_{max}}\right) \quad (3.71)$$

avec $\|\nabla\rho\|_{max}$, la valeur maximale du gradient de masse volumique dans tout le champ de l'écoulement [152]. β et ς sont des paramètres réglables. Ils permettent, respectivement, de faire varier les niveaux de gris et de mieux faire ressortir les faibles gradients et dépendent ainsi du problème considéré.

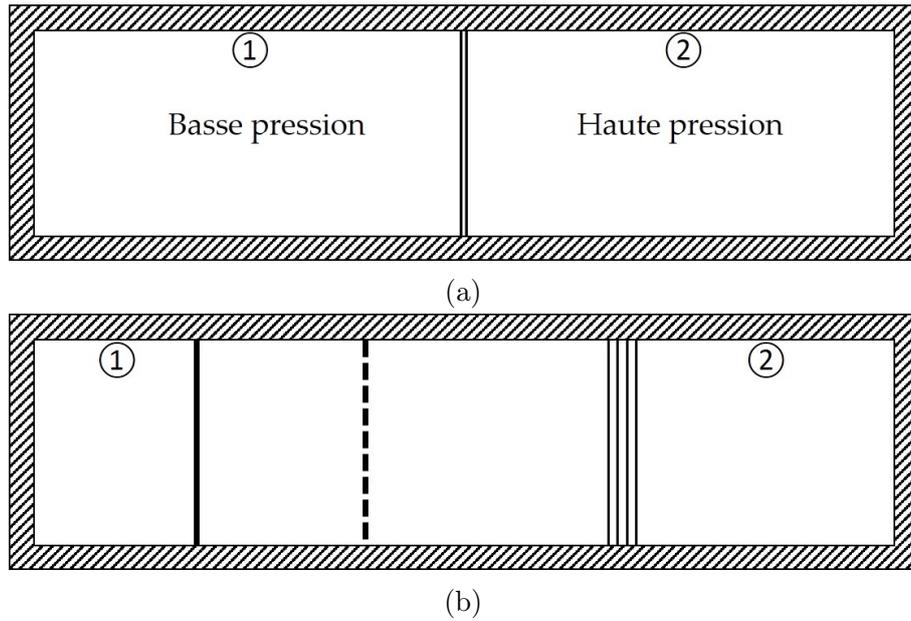


FIGURE 3.4 – Schématisation du problème du tube à choc à l'état initial (a) puis lors de l'évolution vers un état d'équilibre (b). Les différents éléments représentés sur la Figure (b) sont, de la gauche vers la droite, une onde de choc, une surface de contact et un faisceau de détentes.

3.4.3 Suivi des points triples

L'onde de détonation possède une structure multidimensionnelle. La caractérisation de cette structure dite "cellulaire" offre de nombreuses informations sur le régime de propagation. Expérimentalement, la trajectoire des points triples est enregistrée via leur passage sur un dépôt carboné. D'un point de vue numérique, il existe plusieurs méthodes permettant de capturer la trajectoire des points triples. Nous avons choisi de mémoriser les maxima de pression rencontrés en tout point du domaine. Les points triples étant des zones localisées où les pressions sont maximales, le champ obtenu P_T coïncide avec la trace de la structure cellulaire.

$$P_T(x, y) = \max(p(x, y, t)) \quad (3.72)$$

3.5 Validation des méthodes numériques : test de Sod

Le problème de Sod [153], aussi appelé problème du tube à choc, est un cas test permettant d'éprouver les méthodes numériques. La configuration est décrite par les schémas de la Figure 5.26. Initialement, deux gaz dans des états thermodynamiques

	[Sod1]	[Sod2]
p_1 (bar)	0.1	0.01
ρ_1 (kg m ⁻³)	0.125	0.01
p_2 (bar)	1	1
ρ_2 (kg m ⁻³)	1	1
W_m (g mol ⁻¹)	28.85	28.85
T_1 (K)	347	347
T_2 (K)	277	347
CFL	0.2	0.2

TABLE 3.1 – Récapitulatif des conditions utilisées pour les différents tests, d’après les valeurs retenues dans [153].

différents sont séparés au moyen d’un diaphragme. Celui-ci est ensuite rompu, provoquant la mise en équilibre du système. Une onde de choc se propage à la célérité c du milieu haute pression vers le milieu basse pression, suivie d’une surface de contact évoluant à la vitesse v . Elle correspond à une discontinuité de la masse volumique. Un faisceau de détente évolue du milieu basse pression vers le milieu haute pression. Afin de résoudre ce problème, les méthodes numériques doivent parvenir à modéliser correctement les discontinuités. Les conditions des différents problèmes de Sod sont introduites dans le Tableau 3.1. Elles correspondent à un choc faible pour les conditions [Sod1], et fort pour [Sod2].

L’évolution des profils de densité, de pression, de vitesse et de température est présentée sur la Figure 3.5 pour les conditions [Sod 1]. L’évolution de la densité (Figure 3.5 (a)) permet la visualisation de l’onde de choc, la discontinuité de surface et la détente.

Différents schémas numériques sont comparés sur la Figure 3.7 pour leur aptitude à résoudre ce problème. Les schémas Godunov [154], Minmod [155], Van Leer [135] et Superbee [156] ont été implémentés. L’utilisation de la méthode MP d’ordre 9 permet une meilleure description des discontinuités tout en limitant les oscillations. Celles-ci sont particulièrement présentes sur les profils de température (voir Figure 3.7 (b)).

3.6 Synthèse partielle

Ce chapitre introduit le modèle mathématique et les méthodes numériques sur lesquelles repose le code de calcul développé au cours de la thèse. Nous avons choisi de modéliser l’écoulement par les équations d’Euler et par une chimie simple en une étape. La résolution repose sur des schémas numériques d’ordre élevé (MP d’ordre 9 pour l’interpolation des variables caractéristiques). Le problème de Riemann est résolu via un schéma HLLC et l’avancement en temps par un schéma Runge-Kutta d’ordre 3. Les stratégies numériques

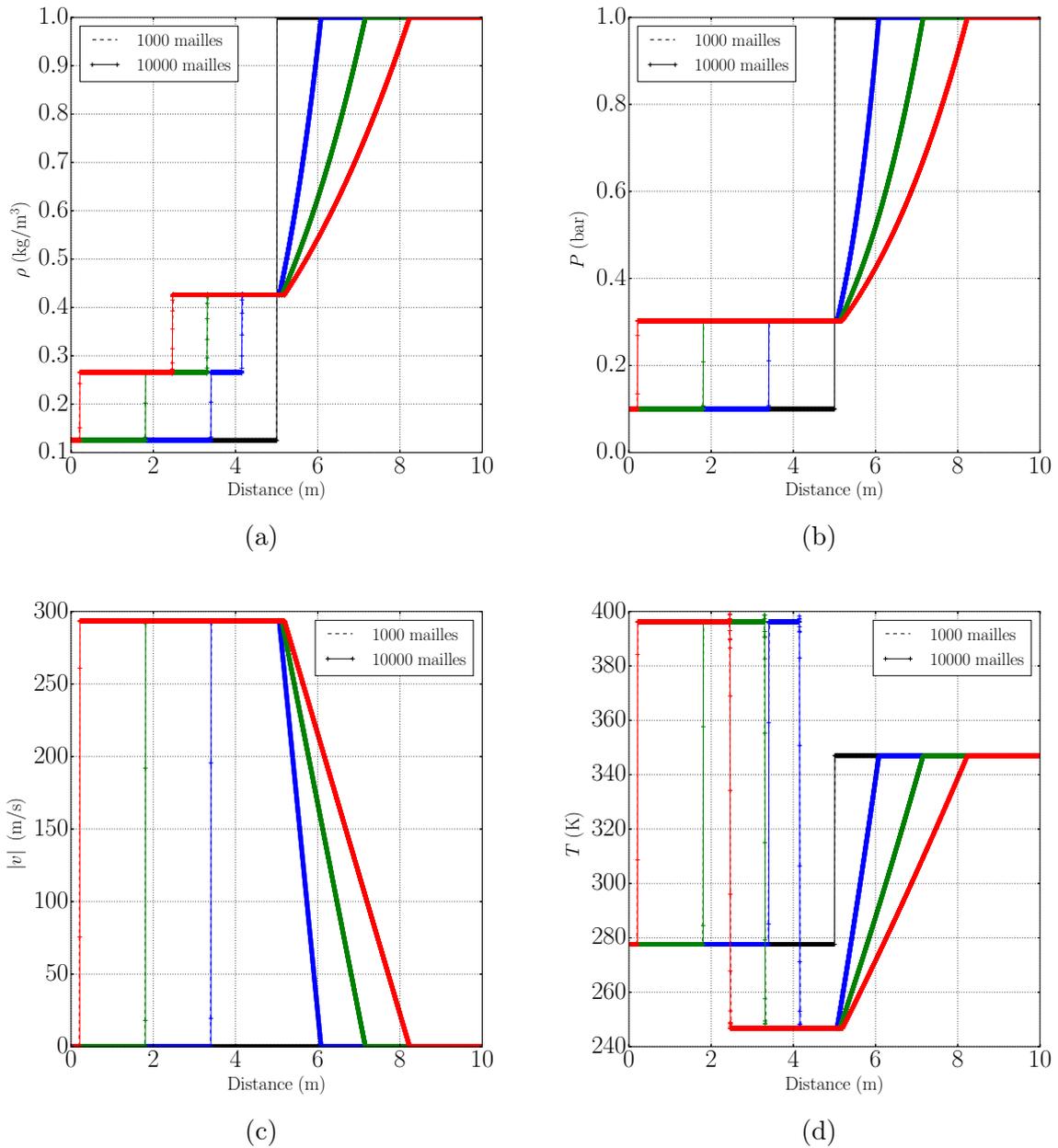


FIGURE 3.5 – Évolution des profils de densité (a), pression (b), vitesse matérielle (c) et température (d) à partir des conditions [Sod1] pour 1,000 et 10,000 mailles. Les différentes itérations correspondent à $t_0 = 0.0$ ms (noir), $t_1 = 2.885$ ms (bleu), $t_2 = 5.769$ ms (vert) et $t_3 = 8.653$ ms (rouge).

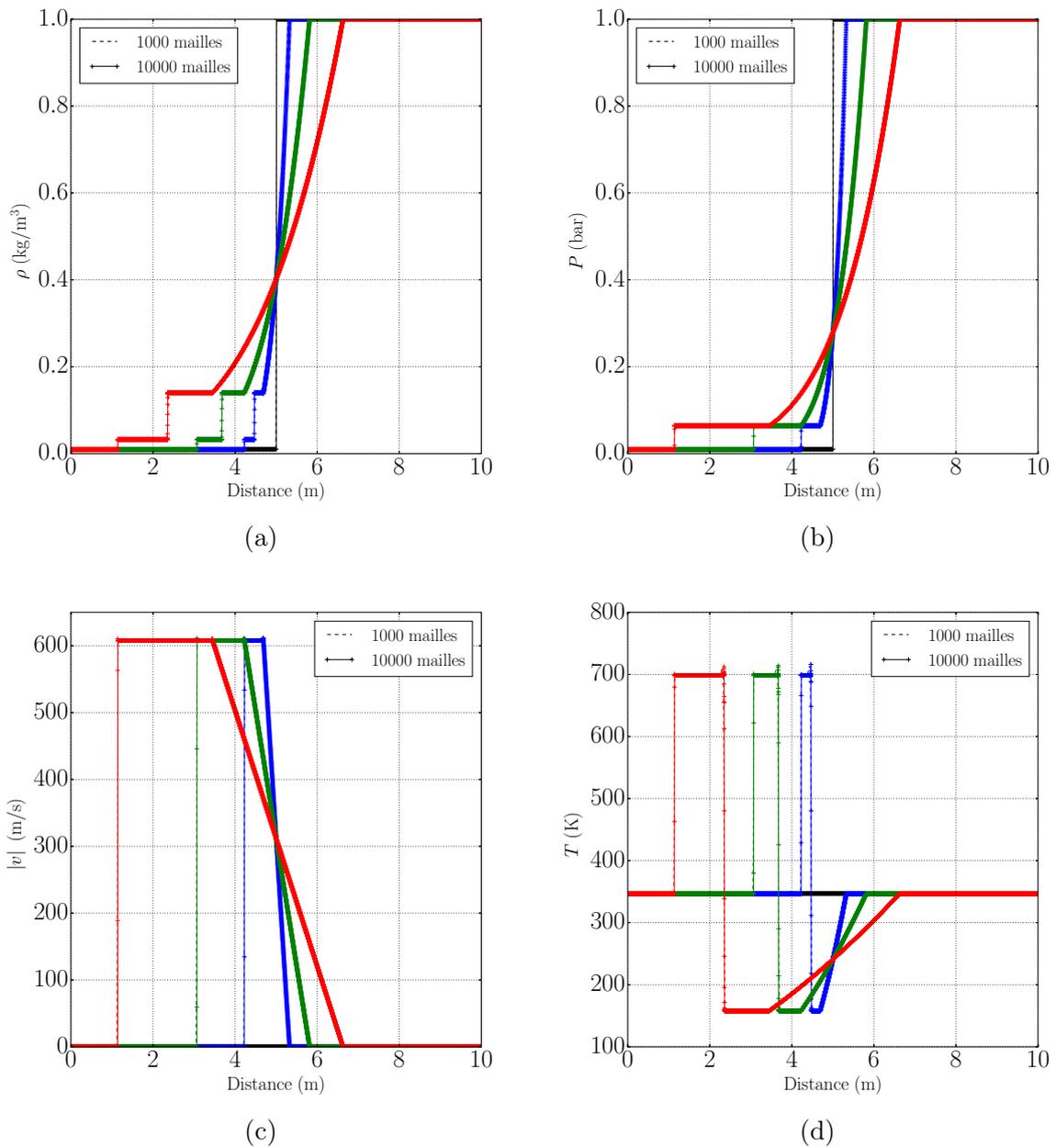


FIGURE 3.6 – Évolution des profils de densité (a), pression (b), vitesse matérielle (c) et température (d) à partir des conditions [Sod2] pour 1,000 et 10,000 mailles. Les différentes itérations correspondent à $t_0 = 0.0$ ms (noir), $t_1 = 0.875$ ms (bleu), $t_2 = 2.181$ ms (vert) et $t_3 = 4.358$ ms (rouge).

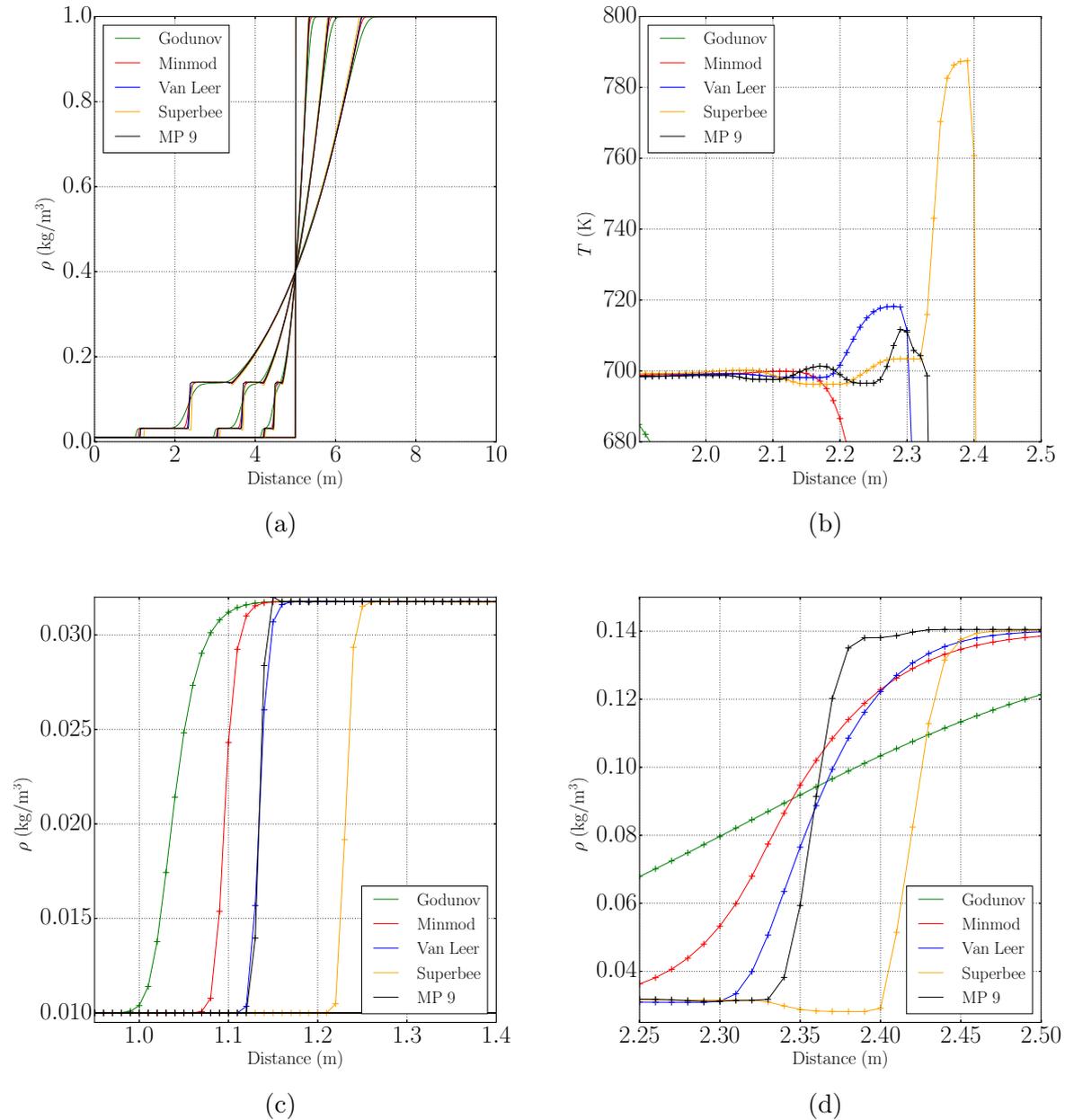


FIGURE 3.7 – Évolution des profils de densité (a), (c) et (d) et température (b) à partir des conditions [Sod2] pour 1,000 mailles avec différents limiteurs de pente. Les différentes itérations correspondent à $t_0 = 0.0$ ms, $t_1 = 0.875$ ms, $t_2 = 2.181$ ms et $t_3 = 4.358$ ms. Les Figures (c) et (d) représentent une vue agrandie du choc et de la discontinuité de contact, respectivement, tandis que la Figure (b) s'intéresse aux oscillations des profils de température.

permettant de diminuer les temps de calcul ont également été présentées ainsi que certains outils de post-traitement caractéristiques de l'étude des détonations. Enfin, la fin de ce chapitre présente les résultats du test de Sod, ces derniers constituant un premier volet de la validation des méthodes de calcul employées.

Modélisation numérique des détonations idéales

Sommaire

4.1	Introduction	81
4.2	Propagation d'une détonation monodimensionnelle	82
4.2.1	Description de la configuration	82
4.2.2	Analyse du comportement dynamique de la détonation	83
4.2.3	Comparaison des écoulements moyens	85
4.3	Propagation marginale d'une détonation bidimensionnelle	90
4.3.1	Description de la configuration	90
4.3.2	Analyse de l'écoulement	91
4.3.3	Stabilité du mélange réactif	97
4.3.4	Étude de la résolution spatiale	111
4.4	Synthèse partielle	116

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude des détonations sans perte. Cette configuration peut être qualifiée d'idéale et est associée à la propagation autonome d'une détonation dans un canal au sein duquel les pertes aux parois ne sont pas prises en comptes. Les objectifs sont de valider le code de calcul, les procédures d'analyse et de post-traitement, mais aussi de proposer une première série de résultats pouvant être comparée par la suite à ceux relatifs aux détonations non idéales, c'est-à-dire avec pertes. Dans un premier temps, l'étude est restreinte à la simulation des détonations monodimensionnelles. La seconde partie de ce chapitre est consacrée aux détonations marginales bidimensionnelles.

4.2 Propagation d'une détonation monodimensionnelle

Cette section est dédiée aux détonations monodimensionnelles idéales. L'étude de ces détonations permet d'une part de valider les résultats du code de calcul en les comparant aux profils stationnaires ZND, et d'autre part d'évaluer l'influence des instabilités non linéaires sur l'écoulement. Pour cela, les calculs sont effectués pour plusieurs énergies d'activation réduites, afin de faire varier la sensibilité du mélange réactif.

4.2.1 Description de la configuration

Le domaine de calcul est monodimensionnel et est d'une longueur de $L_x = 20 \text{ mm} = 220 l_{1/2}$, $l_{1/2}$ étant la demi-longueur de réaction, distance entre le front et le point pour lequel la moitié des réactifs ont été consommés. Consécutivement à l'emploi de la technique de recyclage d'une partie du domaine de calcul (voir Sous-section 3.3.6), la distance de propagation effective de l'onde de détonation est bien plus importante que celle du domaine de calcul et atteint plusieurs milliers de fois $l_{1/2}$. Les conditions limites de part et d'autre de ce domaine sont des conditions d'absorption. La résolution numérique employée est $N_{1/2} = 60$ points par demi-longueur de réaction, ce qui correspond à $\Delta x = 1.51 \mu\text{m}$. Le nombre de mailles total est de 10240, répartis sur 20 processeurs avec un déraffinement actif sur les deux derniers blocs. La CFL est de 0.2. Les paramètres thermodynamiques employés sont issus de la littérature [53, 157] et modélisent un mélange stœchiométrique H_2/O_2 à $p_0 = 1 \text{ atm}$ et $T_0 = 295 \text{ K}$. La chaleur dégagée par la réaction chimique est $q/rT_0 = 28.83$ et l'énergie d'activation réduite du mélange est dans ce cas $E_a/RT_0 = E_a^* = 38.23$. Le Tableau 4.1 regroupe les paramètres CJ et VN calculés à partir des paramètres précédents. Le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius est $k = 1.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, choisi de façon à obtenir une taille de cellule caractéristique d'environ $\lambda = 2 \text{ mm}$ [158] dans les simulations bidimensionnelles. La configuration retenue pour effectuer la calibration du facteur préexponentiel, dans laquelle la hauteur du canal est suffisamment importante pour considérer la structure cellulaire comme étant intrinsèque au mélange, est présentée en Annexe A. Afin d'étudier l'influence de la sensibilité du milieu réactif, d'autres valeurs de l'énergie d'activation réduite ont également été utilisées : $E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$. Le facteur préexponentiel est alors modifié en conséquence de manière à conserver la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ constante dans les profils stationnaires ZND. Ici, $l_{1/2} = 90.79 \mu\text{m}$ après calibration. Le Tableau 4.2 synthétise les valeurs des facteurs préexponentiels utilisées pour chacune des énergies d'activation réduites employées. Les simulations de cette section ont été effectuées sur le supercalculateur du MÉSOCENTRE DE CALCUL POITEVIN, machine

TABLE 4.1 – Synthèse des paramètres CJ et VN relatifs au mélange modélisé.

D_{CJ}	P_{VN}	P_{CJ}	T_{VN}	T_{CJ}
2845 m s ⁻¹	17.5 bar	34 bar	1707 K	3007 K

TABLE 4.2 – Synthèse des facteurs pré-exponentiels utilisés en fonction de l'énergie d'activation réduite de façon à conserver la demi-longueur de réaction $l_{1/2} = 90.79 \mu\text{m}$ constante.

E_a^*	$k(\text{s}^{-1})$
10	2.015×10^7
20	8.121×10^7
30	3.356×10^8
38.23	1.100×10^9

équipée de 2,300 coeurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2680 v2 - 2.80 Ghz pour une puissance de 55 TFlops.

4.2.2 Analyse du comportement dynamique de la détonation

Initialement, le domaine de calcul est entièrement constitué de mélange réactif. À l'instant initial, l'ensemble des variable est placé à l'état von Neumann (VN) dans une partie du domaine, entraînant une surdétonation, laquelle s'amortit progressivement pour converger vers un état de propagation stationnaire ou quasi stationnaire.

La Figure 4.1 (a) présente l'évolution de la vitesse de détonation en fonction de la distance parcourue par le front, pour différentes énergies d'activation réduites. Initialement, la détonation se propage à une vitesse supérieure à D_{CJ} , conséquence des conditions initiales imposées au système à $t = 0$. Les trois profils de vitesse, correspondant aux différentes valeurs de E_a^* , sont identiques pendant près de $400 l_{1/2}$. Durant cette période initiale, la célérité de la détonation diminue et tend vers la valeur théorique D_{CJ} . Pour $E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$, la relaxation de la vitesse se poursuit et la détonation se propage alors effectivement de façon stationnaire à la vitesse D_{CJ} . En revanche, un comportement différent se manifeste dans le cas où $E_a^* = 38.23$. La courbe de vitesse décrit des oscillations chaotiques dont l'amplitude est comprise dans l'intervalle $[0.7 D_{CJ} - 1.7 D_{CJ}]$. Ce comportement traduit la présence d'instabilités non linéaires caractéristiques du mélange modélisé (voir les Sections 1.3.1 et 2.2 dans les chapitres précédents). Malgré ces fluctuations, la vitesse moyenne est de 2841 m s^{-1} , soit moins de 0.2% d'écart avec la valeur théorique D_{CJ} (voir Tableau 4.1). La Figure 4.1 indique donc que la valeur critique marquant l'apparition des instabilités non linéaire est située entre $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$ dans cette configuration monodimensionnelle.

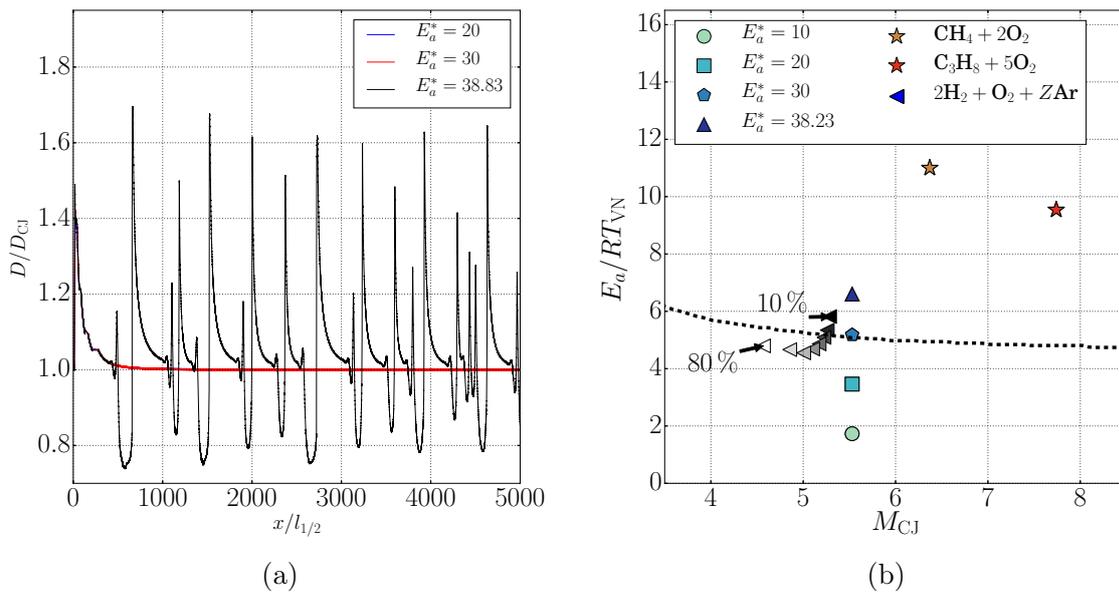


FIGURE 4.1 – (a) : vitesse instantanée de la détonation en fonction de la distance de propagation, pour les différentes énergies d’activation réduites. (b) : représentation des différentes énergies d’activation réduites dans le lieu de stabilité. La courbe en traits pointillés représente la limite de stabilité.

La cartographie des différents points de fonctionnements étudiés, relativement à leur stabilité monodimensionnelle, est présentée sur la Figure 4.1 (b). Sur ce graphique, l’énergie d’activation E_a normalisée par RT_{VN} est tracée en fonction du nombre de Mach à l’état CJ. Les différents points correspondent à des énergies d’activation différentes et leur position relativement à la limite de stabilité tracée en pointillés permet de caractériser le comportement associé, selon qu’il est stable ou instable [159]. Les points relatifs à $E_a^* = 10$ et $E_a^* = 20$ sont situés dans la zone de stabilité. Pour $E_a^* = 30$, le point est placé sur la limite de stabilité, et l’analyse du profil de vitesse Figure 4.1 a démontré que cette valeur de l’énergie d’activation réduite conduit à un comportement stable. Enfin, dans le cas où $E_a^* = 38.23$, le point est situé au-dessus de la limite de stabilité. Le degré d’instabilité associé est toutefois faible, comme en témoigne la comparaison avec un point représentatif d’un mélange $CH_4 + 2O_2$ ou $C_3H_8 + 5O_2$ dans des conditions normales de pression et de température. C’est une des raisons pour laquelle les conditions associées à la valeur $E_a^* = 38.23$ sont qualifiées par la suite de modérément instables. A titre de comparaison, les données représentatives d’un mélange $2H_2 + O_2$ plus ou moins dilué à l’argon sont également présentées. La dilution permet dans ce cas le passage d’un mélange instable à un mélange stable.

4.2.3 Comparaison des écoulements moyens

La détonation, dans le cas d'une énergie d'activation réduite $E_a^* = 38.23$, adopte donc un comportement instable. Dès lors, il est légitime de s'interroger sur la pertinence des modèles stationnaires de type ZND pour représenter correctement la zone de réaction et l'évolution des variables thermodynamiques. Dans cette optique, l'état moyen du fluide en aval du front de détonation est calculé au cours des simulations. Afin de prendre en compte les fluctuations de la masse volumique dans ce calcul de moyennes [30], la procédure au sens de Favre [160] a été préférée. Pour rappel, la procédure de calcul itératif de l'état moyen est décrite dans la Sous-section 3.3.8 et est effectuée dans le repère de la détonation.

La Figure 4.2 présente l'évolution des variables thermodynamiques moyennes en aval du front de détonation pour chacune des énergies d'activation réduites. Les Figures 4.2 (a) et (b) exposent l'évolution de la pression moyenne \bar{p} et de la masse volumique moyenne $\bar{\rho}$ normalisées par leur valeur initiale, respectivement. La Figure 4.2 (c) présente les profils de la fraction massique moyenne de gaz frais \tilde{Y} . Enfin, la Figure 4.2 (d) représente l'évolution de $\ln(\tilde{\omega}/\tilde{Y})$ en fonction de $1000/\bar{T}$. Les profils stationnaires ZND associés aux différents E_a^* sont également tracés.

Les différences de comportement engendrées par la sensibilité du milieu réactif sont à l'origine de différences importantes entre les profils moyens. Lorsque les énergies d'activation réduites considérées correspondent à une détonation stable, et donc stationnaire ($E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$), les profils sont identiques à ceux obtenus par le modèle stationnaire ZND. Cela se vérifie sur l'ensemble des graphes de la Figure 4.2. Dans le cas stationnaire, l'augmentation de l'énergie d'activation se traduit par une libération plus rapide de l'énergie chimique, et donc par des profils plus raides, réduisant la longueur globale de la zone de réaction. Les profils moyens obtenus pour $E_a^* = 38.23$ démontrent qu'au contraire, la transformation des réactifs en produits requiert une distance plus importante, d'où des profils plus longs que dans les cas stables. L'allongement de la zone de réaction est particulièrement flagrant sur le profil de la Figure 4.2 (c). La distance nécessaire à la combustion de 90% des gaz frais passe de $3 l_{1/2}$ dans le cas stationnaire à $9 l_{1/2}$ dans les simulations 1D. En revanche, les profils restent relativement similaires entre $\tilde{Y} = 1$ et $\tilde{Y} = 0.5$ (voir Figure 4.3). Cela indique notamment que la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ entre les calculs stationnaires et les résultats monodimensionnels se conserve, et ce même lorsque les instabilités non linéaires sont présentes. Il semble ainsi que ces instabilités non linéaires réduisent la sensibilité du milieu réactif, qui présenterais dans ce cas une énergie d'activation effective inférieure à l'énergie d'activation réelle.

La moyenne du taux de libération de l'énergie chimique est analysée sur la Figure 4.2 (d).

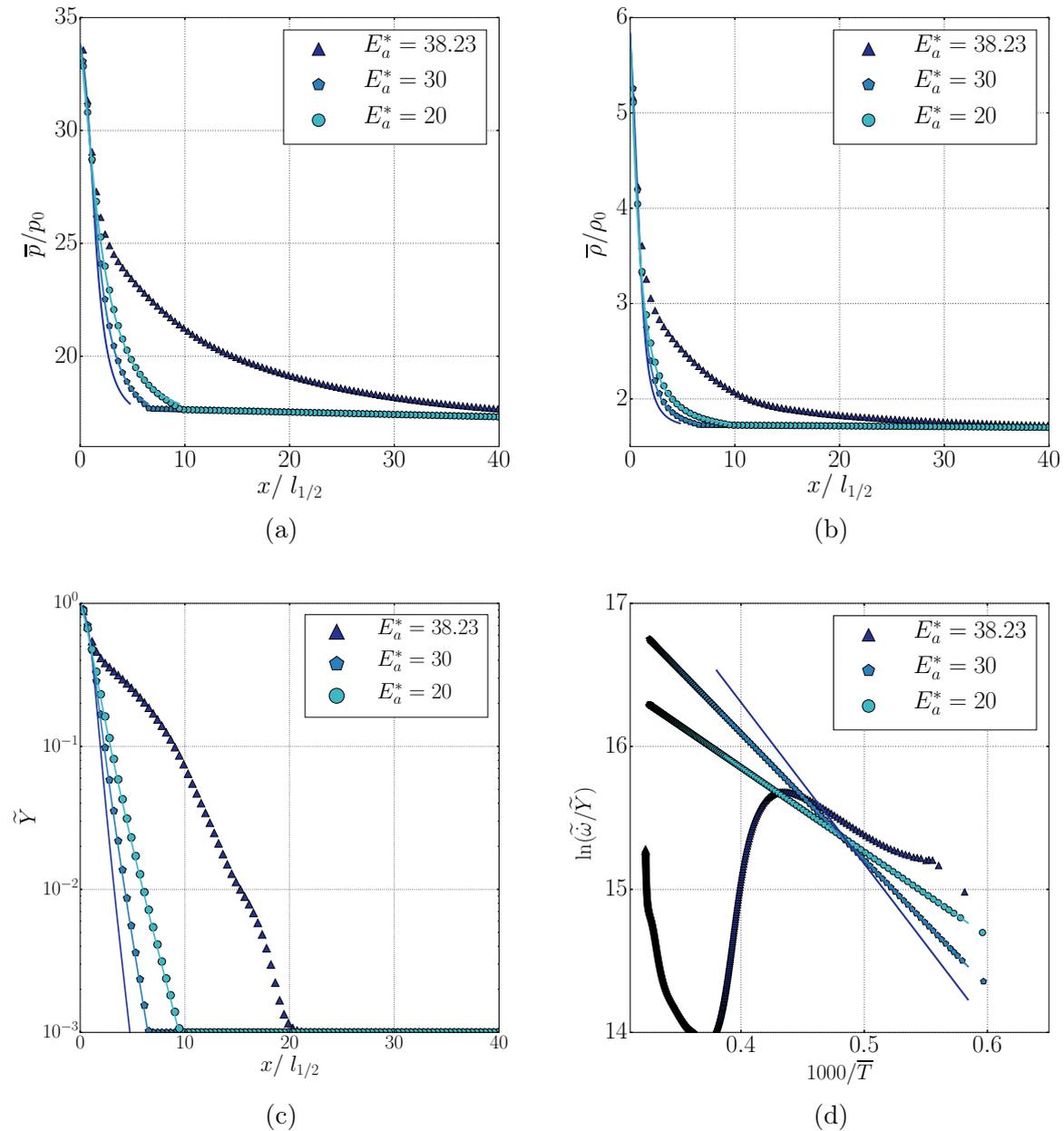


FIGURE 4.2 – Profils moyens obtenus pour différentes énergies d’activation réduites E_a^* (symboles) et comparaison avec le modèle ZND (lignes). (a) : masse volumique moyenne $\bar{\rho}$ normalisée par la masse volumique initiale ρ_0 en fonction de la distance au choc. (b) : pression moyenne \bar{p} normalisée par la pression initiale p_0 en fonction de la distance au choc. (c) : fraction massique de gaz frais moyenne \tilde{Y} en fonction de la distance au choc (échelle verticale logarithmique). (d) : logarithme du terme de production chimique moyen $\tilde{\omega}$ divisé par \tilde{Y} en fonction de $1000/\bar{T}$. 1/25 des points est représenté sur les Figures (a), (b) et (c). Tous les points compris entre le choc et la fin de la zone de réaction sont représentés sur la Figure (d).

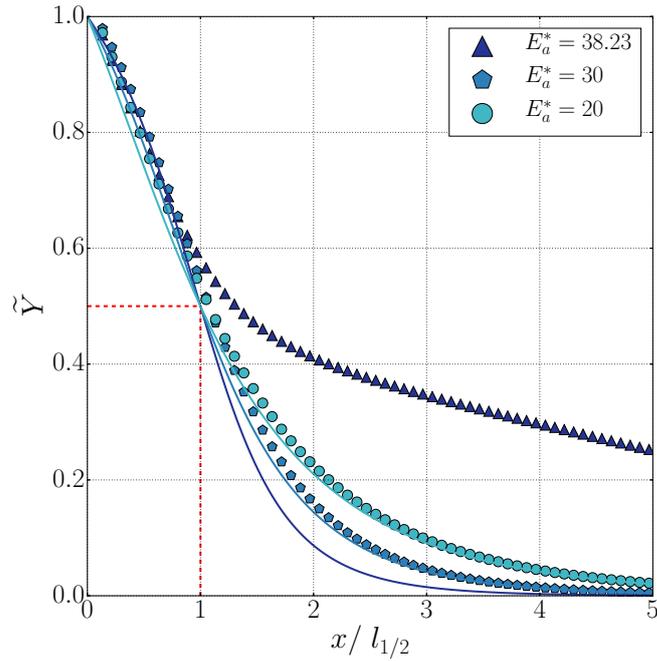


FIGURE 4.3 – Évolution de la fraction massique de gaz frais moyenne pour les différentes énergies d'activation réduites. Élargissement de la Figure 4.2 (c). 1/5 des points est représenté.

Sachant que $\ln(\tilde{\omega})/\tilde{Y} = \tilde{Y}^{-1}(kY \exp(-E_a/RT))$, il est possible de déterminer graphiquement une énergie d'activation réduite effective à partir de la pente décrite par ces courbes. Dans le cas des mélanges stables, les énergies d'activation effectives correspondent aux valeurs réelles (20.13 et 30.16 pour $E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$, respectivement). En revanche, le profil relatif à $E_a^* = 38.23$ n'est pas linéaire et ne permet donc pas de calculer une énergie d'activation moyenne effective sur l'intégralité du profil. Seule la première partie de la courbe, correspondant à la première moitié du profil de fraction massique \tilde{Y} , présente une pente négative et est représentative d'une réaction pouvant être modélisée par une loi d'Arrhenius (avec une énergie d'activation positive). Sur cette partie, la valeur de l'énergie d'activation moyenne effective serait est de 15.

Le logarithme du taux de libération de l'énergie chimique est présenté sur la Figure 4.4 (a) pour 400 profils instantanés issus de différentes itérations du calcul correspondant à $E_a^* = 38.23$. Ces profils ont été extraits toutes les 1000 itérations. L'ensemble des points forme une droite dont le calcul de la pente conduit à une énergie d'activation effective d'environ 38. La Figure 4.4 (b) révèle la superposition de 400 profils instantanés de la fraction massique de gaz frais Y , ainsi que le profil moyen représenté en noir. Les oscillations de la vitesse de détonation sont responsables des fluctuations de la longueur d'induction. Ainsi, même si le déclenchement effectif de la réaction exothermique se pro-

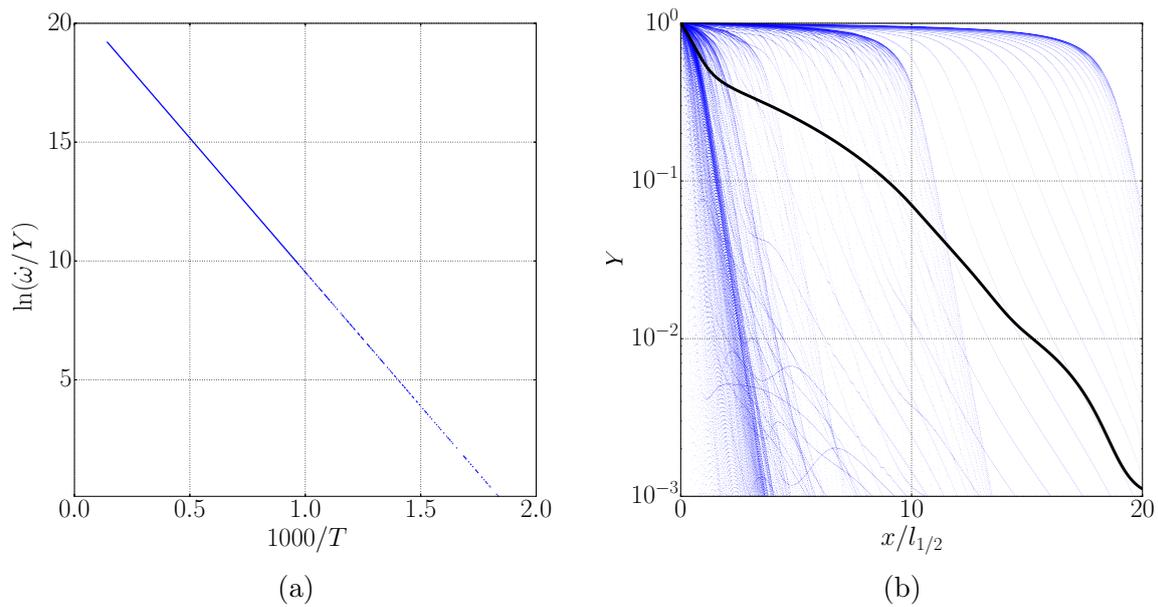


FIGURE 4.4 – (a) : *scatterplot* de $\ln(\dot{\omega}/Y)$ en fonction de $1000/T$. (b) : superposition des profils instantanés de la masse volumique Y et comparaison avec le profil moyen \tilde{Y} .

duit à la même distance en aval du choc incident, la vitesse de transformation des réactifs en produits est sensiblement identique dans une grande partie des profils. À cause de la variabilité de la longueur d'induction d'un profil à un autre, la libération d'énergie moyenne ne peut cependant pas être globalement modélisée par une simple loi d'Arrhenius. Cela explique la forme du taux moyen de la libération d'énergie chimique (cf. Figure 4.2 (d)), en dépit du résultat de la Figure 4.4 (a).

Les instabilités non linéaires affectent la distance entre le front de choc et le plan sonique moyen, c'est-à-dire l'épaisseur hydrodynamique. La Figure 4.5 (a) présente l'évolution du nombre de Mach moyen $\tilde{M} = \frac{\bar{D} - \tilde{u}}{\sqrt{\gamma \bar{p}/\bar{\rho}}}$ calculé dans le repère du choc. Pour les mélanges stables, l'épaisseur hydrodynamique est d'environ $10 l_{1/2}$, en conformité avec les calculs stationnaires ZND. Pour le cas $E_a^* = 38.23$, la valeur grimpe à $60 l_{1/2}$, soit environ 3λ (par anticipation des calculs bidimensionnels réalisés dans la section suivante). La Figure 4.5 (b) révèle un élargissement de la Figure 4.5 (a) au voisinage de $\tilde{M} = 1$. Un changement radical de la pente est présent dans les profils 1D pour un nombre de Mach légèrement inférieur à 1. Ce décalage découle de la limitation de la réaction chimique implémentée pour $Y < 0.001$ (voir Sous-section 3.3.3).

La Figure 4.6 permet de quantifier les fluctuations moyennes de masse volumique $\sqrt{\overline{\rho'^2}/\bar{\rho}}$, de pression $\sqrt{\overline{p'^2}/\bar{p}}$ et de vitesse matérielle $\sqrt{\overline{u'^2}}/\tilde{u}$ en aval de la détonation dans le cas instable $E_a^* = 38.23$. Les fluctuations représentent la moyenne de l'écart entre le profil instantané et le profil moyen. Pour ces trois quantités, le maximum est atteint peu

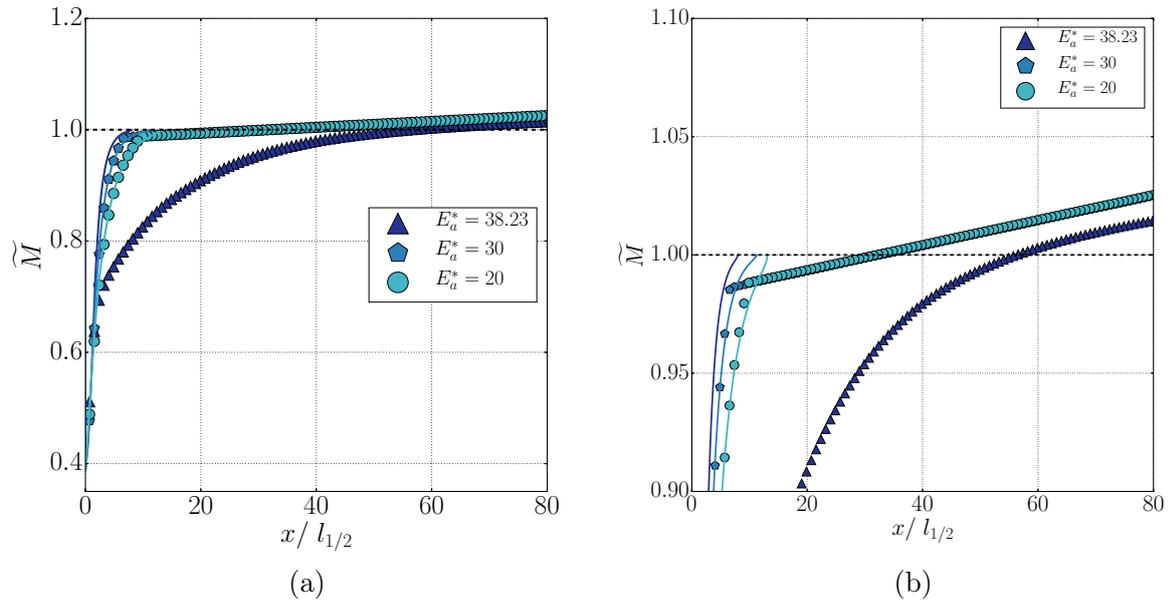


FIGURE 4.5 – (a) : nombre de Mach local moyen $\tilde{M} = (\bar{D} - \tilde{u})/\tilde{c}$ (symboles) et comparaison avec le modèle ZND (lignes) pour différentes énergies d'activation réduites. (b) : Élargissement au voisinage de $\tilde{M} = 1$. 1/50 des points est représenté sur les deux Figures (a) et (b).

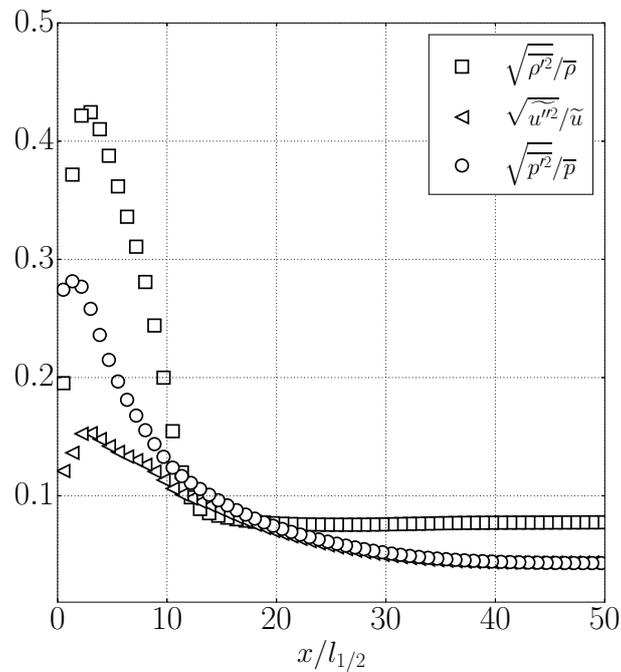


FIGURE 4.6 – Fluctuations moyennes normalisées de masse volumique, de pression et de vitesse pour le cas $E_a^* = 38.23$. 1/50 des points est représenté.

de temps après le choc incident (environ $5 l_{1/2}$). Les fluctuations de masse volumique sont les plus importantes, et atteignent 40% de la valeur moyenne $\bar{\rho}$. Les fluctuations de pression et de vitesse sont d'au maximum 30% et 15%, respectivement. Au-delà de la zone de réaction (de l'ordre de $10 l_{1/2}$ pour que $Y < 0.01$), les fluctuations restent inférieures à 10%.

Les résultats présentés dans cette section illustrent l'influence des instabilités non linéaires sur la structure moyenne des détonations monodimensionnelles. Les fluctuations de la célérité du front font varier le temps d'induction et le profil moyen de la libération d'énergie chimique. Le plan sonique est repoussé à environ 3λ du front de détonation et le niveau des fluctuations de masse volumique et de pression sont non-négligeables. Pour l'énergie d'activation la plus élevée $E_a^* = 38.23$, la modélisation stationnaire ZND ne permet donc pas de décrire correctement l'évolution moyenne des quantités thermodynamiques au sein de la zone de réaction. En revanche, le modèle ZND est adéquat dans la représentation des mélanges caractérisés par de faibles énergies d'activation réduites ($E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$).

4.3 Propagation marginale d'une détonation bidimensionnelle

Dans cette section, la détonation se propage dans un canal dont la hauteur est du même ordre de grandeur que la taille de cellule. Les objectifs sont de s'assurer que la physique des détonations est correctement restituée par le code de calcul, de développer les outils d'analyse et de post-traitement nécessaires à la suite de l'étude et de mettre en évidence les différences avec les calculs monodimensionnels, notamment lorsque les instabilités se développent.

4.3.1 Description de la configuration

Le domaine de calcul est cartésien et des dimensions complètes sont $L_x \times L_y = 43 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} = 21,5 \lambda \times \lambda = 474 l_{1/2} \times 22 l_{1/2}$. Le domaine de propagation est de longueur bien plus importante du fait de la technique de recyclage du domaine de calcul (voir Sous-section 3.3.6). Les conditions limites en amont et en aval sont des conditions d'absorption, tandis que les conditions limites supérieures et inférieures modélisant les parois du canal sont des conditions de symétrie. Les paramètres thermodynamiques employés sont identiques à ceux employés dans la Section 4.2 et visent à représenter un mélange stœchio-

métrique H_2/O_2 à $p_0 = 1$ atm et $T_0 = 295$ K. La chaleur dégagée par la réaction chimique est $q/rT_0 = 28.83$ et l'énergie d'activation réduite du mélange est $E_a/RT_0 = E_a^* = 38.23$. Le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius est $k = 1.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, de façon à obtenir une taille de cellule caractéristique d'environ $\lambda = 2.0$ mm [158]. Le nombre de points par demi-longueur de réaction est $N_{1/2} = 30$. Le nombre de mailles de calcul est de 8,448,000. 200 processeurs ont été utilisés, dont 194 avec la résolution maximale, les autres étant déraffinés sur trois niveaux. Les simulations dont il est question dans cette section ont été effectuées sur le MÉSOCENTRE DE CALCUL POITEVIN, machine équipée de 2,300 coeurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2680 v2 - 2.80 Ghz pour une puissance de 55 TFlops.

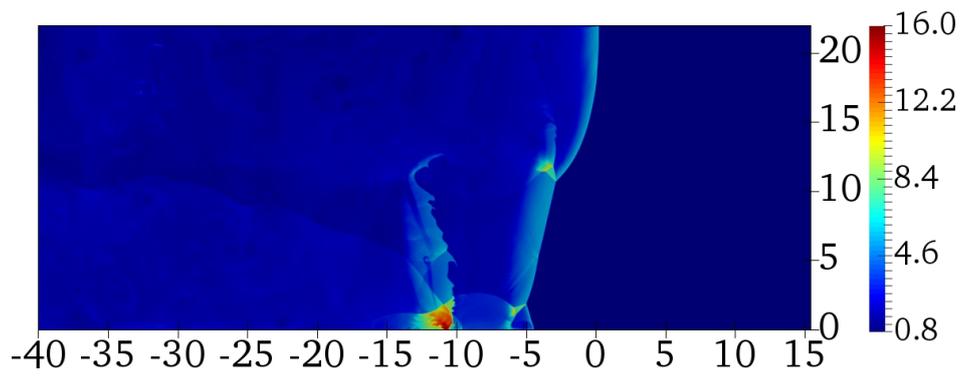
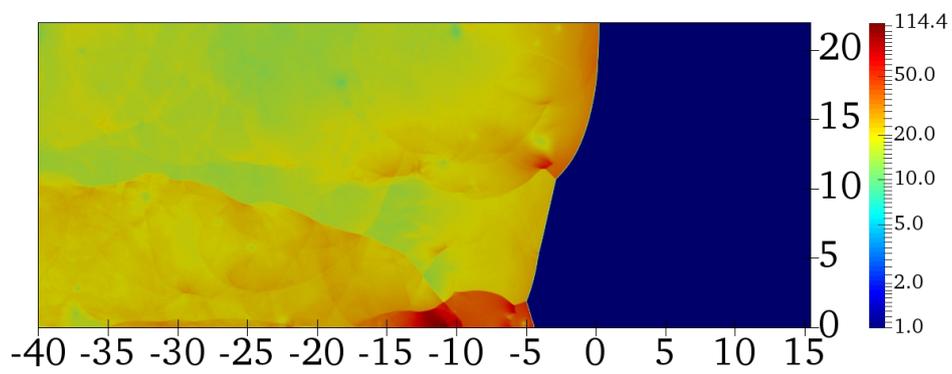
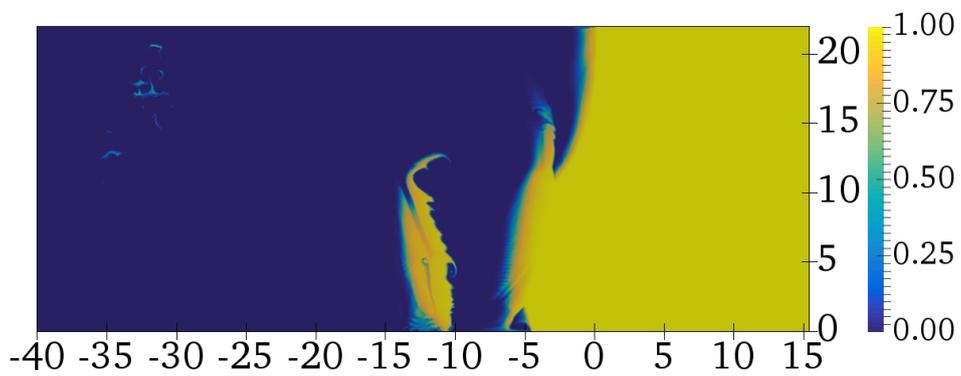
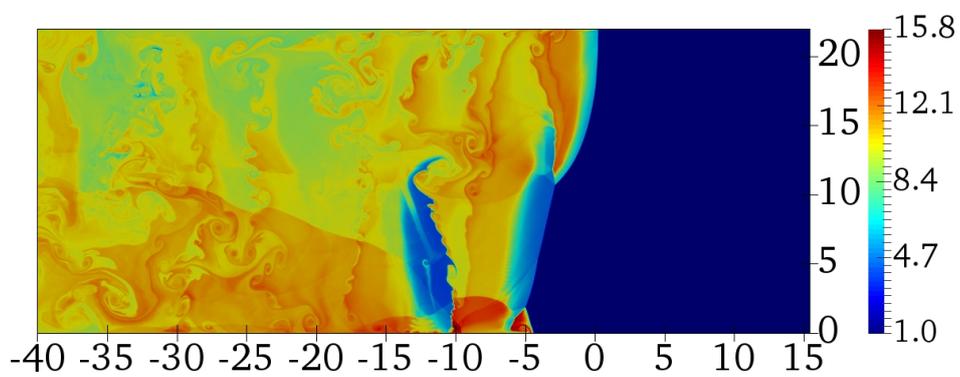
4.3.2 Analyse de l'écoulement

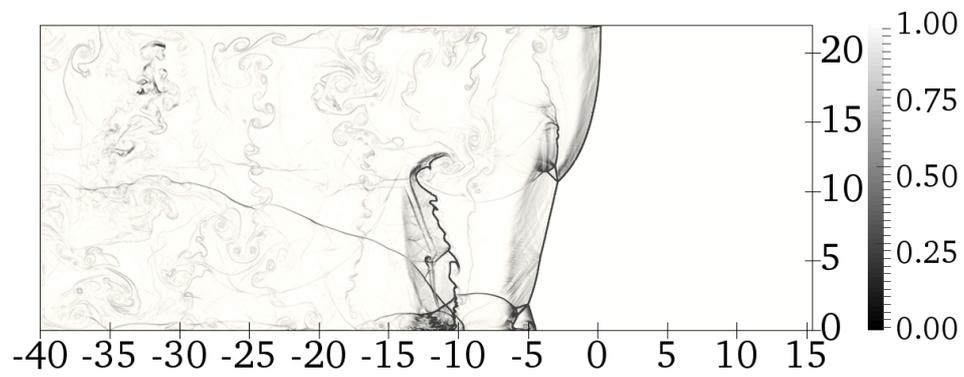
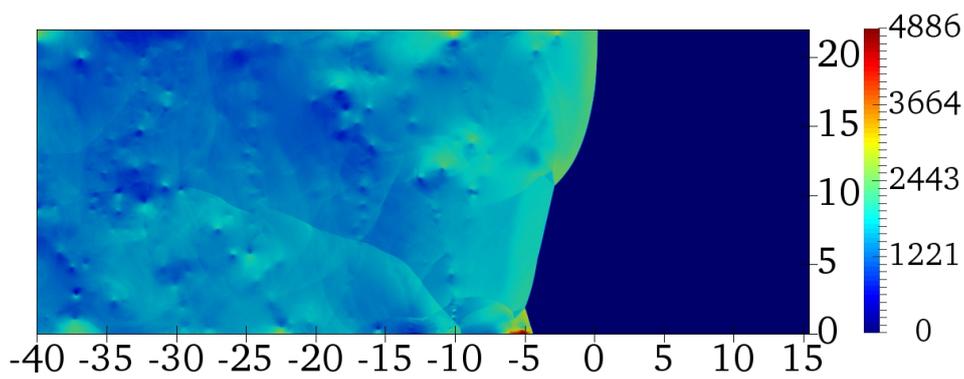
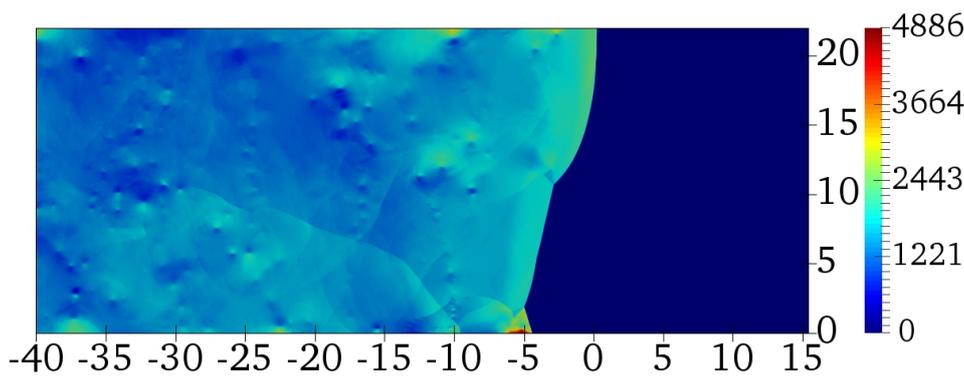
Initialement, le domaine de calcul est entièrement constitué de mélange réactif. À l'instant $t = 0$, une partie du domaine est portée à l'état de von Neumann. Dès lors, la transformation des réactifs en produits conduit à la formation d'une onde de détonation forte. Celle-ci va décélérer progressivement pour atteindre le régime de propagation autonome. La vitesse de propagation de la détonation est obtenue via la procédure décrite dans la Sous-section 3.4.1 et conduit à 2850 m s^{-1} , soit moins de 0.2% d'écart avec la valeur théorique D_{CJ} de 2845 m s^{-1} .

Caractéristiques générales

La Figure 4.7 présente l'écoulement au travers de différents champs centrés sur l'onde de détonation. Ces champs correspondent au régime de propagation autonome, ce qui signifie qu'un temps suffisamment long s'est écoulé depuis $t = 0$ s afin de s'affranchir de l'influence des conditions initiales. Les différentes variables ont été adimensionnalisées par les valeurs à l'état initial lorsque celles-ci sont non nulles.

Le champ de masse volumique (Figure 4.7 (a)) permet d'identifier les éléments composant le front de détonation. Ce dernier n'est pas plan et adopte une structure bidimensionnelle instationnaire. Il se divise dans le cas présent en deux ondes de Mach, près des parois du canal, et en un choc incident dans la partie centrale inférieure. Les ondes de Mach se caractérisent par une zone de réaction moins épaisse que les chocs incidents. Deux points triples, effectuant la jonction entre la détonation et les ondes transverses, se déplacent en direction de l'un vers l'autre. Ils possèdent une structure caractéristique en double réflexion de Mach. Une zone de plus forte masse volumique, traduisant la présence d'une poche de gaz frais, est présente en aval du front dans la partie inférieure du canal.

(a) ρ/ρ_0 (b) p/p_0 (c) Y (d) T/T_0

(e) S (f) $\sqrt{u^2 + v^2}$ (m s^{-1})(g) u (m s^{-1})

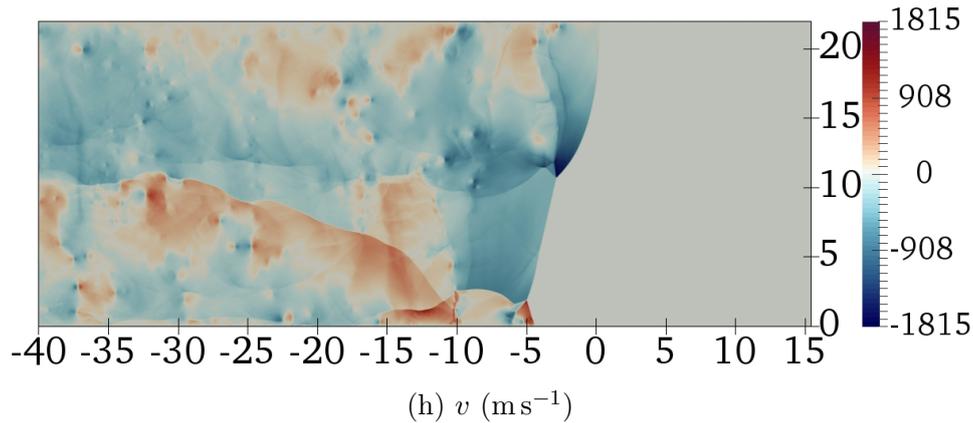


FIGURE 4.7 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) masse volumique, (b) pression (échelle logarithmique), (c) fraction massique des gaz frais, (d) température, (e) strioscopie numérique de la masse volumique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

L'interaction des fluctuations de pression avec cette poche conduit à une augmentation importante de la masse volumique. La Figure 4.7 (b) présente le champ de pression en échelle logarithmique. Les ondes transverses associées aux points triples sont visibles. Ces ondes transverses ne sont pas de la même amplitude : l'onde inférieure conduit à des niveaux de pression bien plus importants que ceux situés au centre du canal. Elle s'étend également bien plus loin en aval du front. Les régions des points triples associés aux plus hautes pressions ne sont pas celles situées sur le choc précurseur, mais plutôt au voisinage du second point triple de la double réflexion de Mach.

La Figure 4.7 (c) expose la variation de la fraction massique de gaz frais. Sur le front de détonation, le processus de formation d'une nouvelle poche de gaz frais via le mouvement des points triples est en cours. Le gaz constituant ces poches possède deux origines. Une première partie provient de la zone d'induction en aval du choc incident, laquelle s'élargit continuellement jusqu'à la collision des points triples. La seconde partie est issue des gaz frais contigus aux lignes de glissement, elles-mêmes associées aux points triples. C'est la collision des points triples qui va détacher par la suite la poche de gaz frais du front. La poche située à environ $5 l_{1/2}$ en aval de la détonation résulte de ce processus se produisant lors d'un cycle antérieur. Une fois le détachement effectué, les gaz frais sont convectés vers l'aval du front. La poche se divise transversalement en deux parties suivant l'origine des gaz et la façon dont ces gaz frais se transforment en produit dépend de cette origine. La partie aval, issue de la zone d'induction du choc incident, brûle de façon volumique tandis que la partie amont, issue des lignes de glissements, brûle le long de l'enveloppe de la poche par diffusion numérique. De telles différences dans les modes de combustion

des poches de gaz ont été mises en évidence expérimentalement [30, 58]. Cette partie de l'enveloppe est sujette à des instabilités de type Kelvin-Helmoltz et Richmyer-Meshkov. Dans la partie supérieure gauche du domaine, à environ $40 l_{1/2} \approx 2 \lambda$ du front, des vestiges relatifs à la combustion d'une ancienne poche de gaz frais sont présents.

Le champ de température (Figure 4.7 (d)) permet la visualisation de ces différents événements et traduit l'historique de l'écoulement. Les zones d'induction et les poches de gaz frais sont les parties les plus froides du champ, hors gaz frais. Les nombreuses structures tourbillonnaires présentes dans le champ de température sont des vestiges des multiples collisions de points triples survenues le long du front. Par exemple, la zone supérieure gauche du domaine dans laquelle des filaments de gaz frais subsistent se caractérise par des températures plus faibles que dans le reste de l'écoulement. Tous ces éléments sont également identifiables sur la Figure 4.7 (e), qui décrit l'écoulement au travers d'une strioscopie numérique (voir Sous-section 3.4.2). Cette variable permet de faire apparaître les gradients de masse volumique. Les structures composant le front sont nettement marquées : les différentes ondes (Mach, incidente, transverse) mais aussi l'enveloppe des poches de gaz convectées au sein de l'écoulement.

Les Figures 4.7 (f) et (g) présentent les champs de la norme de la vitesse et de la vitesse longitudinale, respectivement. Peu de différences sont présentes entre ces deux champs, ce qui démontre qu'une majorité de la composante des vecteurs vitesse est issue de la vitesse longitudinale. Les points de faible vitesse sont associés au centre des structures tourbillonnaires. La vitesse transversale est illustrée par la Figure 4.7 (h). L'alternance entre les sections positives et négatives est principalement due au mouvement des ondes transverses en aval du front.

Les structures obtenues sont caractéristiques de celles observées expérimentalement via des techniques de strioscopie ou de chimiluminescence [30, 56, 57].

Les trajectoires des points triples sont enregistrées via la sauvegarde des maxima de pression en chaque point du domaine de calcul, et sont représentées sur la Figure 4.8. Au cours de la propagation, le nombre de cellules présentes dans la largeur du tube varie entre 1 et 2.5. Cette irrégularité est due à la génération, à la fusion et à l'extinction de points triples au sein de l'écoulement. La qualité du réseau cellulaire peut être qualifiée, relativement aux travaux de Libouton et al. [39], de modérément irrégulière. Cette qualification complète celle issue de l'analyse de la stabilité non linéaire (voir Section 4.2). Il est toutefois important de noter que dans cette configuration marginale, la structure est également contrainte par les conditions limites de paroi. L'allure des cellules obtenues via la simulation correspond qualitativement aux traces formées expérimentalement par les points triples

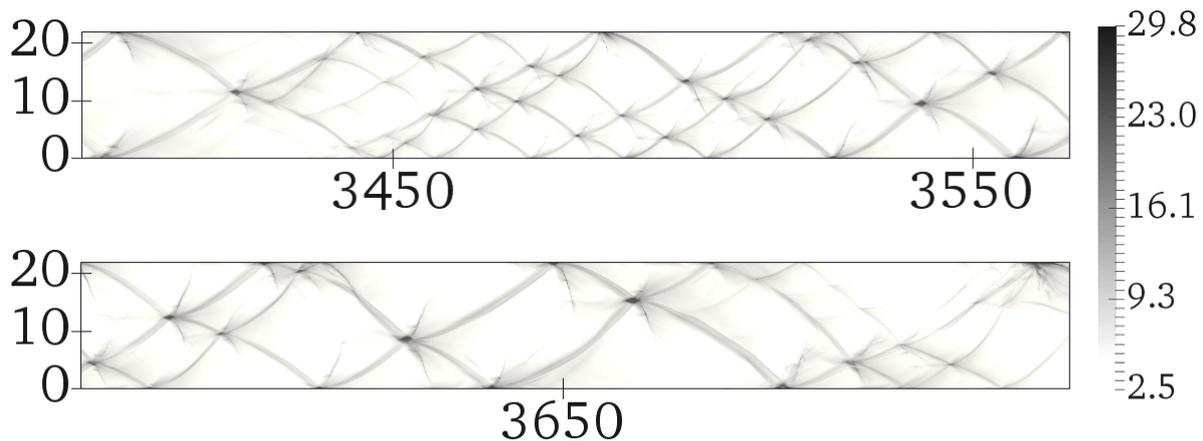


FIGURE 4.8 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa.

sur une plaque carbonée pour le mélange modélisé [53].

Analyse des quantités moyennes

Compte tenu de la nature fortement irrégulière et instationnaire de l'écoulement, il est légitime de s'interroger sur la forme de l'écoulement moyen en aval du front de détonation. Les profils moyens sont calculés sur la ligne $y = 0$ correspondant à la paroi inférieure du domaine de calcul. La moyenne est calculée durant la simulation d'après la procédure introduite dans la Sous-section 3.3.8, dans le repère du front de choc.

L'évolution des variables thermodynamiques moyennes en aval du front est présentée sur la Figure 4.9 et comparée avec les résultats issus du modèle stationnaire ZND ainsi qu'avec les résultats monodimensionnels de la Section 4.2. La modélisation stationnaire ne permet pas d'obtenir des résultats concordant avec les simulations 2D, au même titre que pour les calculs 1D. Ce résultat est attendu puisque les fluctuations présentes au sein de l'écoulement sont accrues en 2D. De plus, des différences existent entre les résultats monodimensionnels et bidimensionnels. Sur la Figure 4.9 (a) décrivant l'évolution des profils de pression, la relaxation de la pression est plus longue en 2D. Dans les simulations monodimensionnelles, le début du profil de pression concorde avec les résultats issus du modèle ZND, ce qui n'est plus le cas pour les simulations bidimensionnelles dans lesquelles le profil de pression décroche complètement. En revanche, l'évolution de la masse volumique moyenne (cf. Figure 4.9 (b)) ne diffère pas suivant qu'il s'agit d'une simulation 1D ou 2D. L'évolution de la fraction massique moyenne est représentée sur la Figure 4.9 (c). Elle montre une consommation plus rapide du milieu réactif dans le cas bidimensionnel

TABLE 4.3 – Évolution de l'épaisseur hydrodynamique suivant le type de calcul : ZND, 1D et 2D.

	$h_t/l_{1/2}$	h_t/λ
ZND	5	0.2
1D	60	2.8
2D	140	6.7

que dans le cas monodimensionnel, conséquence des niveaux de pression plus importants observés sur la Figure 4.9 (a) . La Figure 4.9 (d) illustre l'évolution du nombre de Mach moyen calculé dans le repère de la détonation. La distance entre le choc et le point pour lequel $\widetilde{M} = 1$ permet la détermination de l'épaisseur hydrodynamique. Le calcul 2D conduit à une augmentation de l'épaisseur hydrodynamique. L'ensemble des valeurs est rassemblé dans le Tableau 4.3. Ainsi, la présence des fluctuations non linéaires dans le calcul monodimensionnel sont responsables d'une multiplication par 14 de l'épaisseur hydrodynamique. Le passage en 2D n'augmente cette distance que d'un facteur 2.5.

La Figure 4.10 expose l'évolution de la moyenne des fluctuations suivant qu'il s'agit d'un calcul monodimensionnel ou bidimensionnel. La moyenne des fluctuations de pression est présentée sur la Figure 4.10 (a). Les niveaux atteints en 2D sont supérieurs d'un facteur 2 comparativement au calcul 1D. Au maximum, le niveau de fluctuation en pression atteint 60% de la valeur moyenne \bar{p} . L'amplification est légèrement moins marquée pour les fluctuations de masse volumique (cf. Figure 4.10 (b)). Le maximum passe néanmoins de 40% à 60% de la valeur moyenne $\bar{\rho}$. L'amplitude des fluctuations moyennes de vitesse est également accrue d'un facteur 2. Dans le cas du calcul bidimensionnel, le maximum est immédiatement consécutif au choc précédant la zone de réaction, contrairement aux calculs 1D dans lesquels il est atteint légèrement en aval du front. La Figure 4.10 présente le nombre de Mach turbulent moyen dans le repère du choc $\widetilde{M}_t = \sqrt{\widetilde{u'^2}}/\widetilde{c}$, avec $\widetilde{c} = (\gamma\bar{p}/\bar{\rho})^{1/2}$. Les résultats monodimensionnels conduisent à une valeur maximale de $\widetilde{M}_t = 0.2$, le profil convergeant ensuite rapidement sous $\widetilde{M}_t = 0.05$. Les résultats bidimensionnels sont caractérisés par un maximum de \widetilde{M}_t environ 3 fois plus important ($\widetilde{M}_t = 0.6$), et restent supérieurs à $\widetilde{M}_t = 0.15$ après la zone de réaction (de l'ordre de $15 l_{1/2}$ pour que $Y < 0.01$).

4.3.3 Stabilité du mélange réactif

L'objectif de cette sous-section est d'évaluer l'influence de l'énergie d'activation (c'est-à-dire de la sensibilité du mélange réactif) sur les écoulements bidimensionnels instantanés et moyens. Les calculs monodimensionnels ont démontré l'existence de deux comportements distincts, suivant la présence ou l'absence d'instabilités longitudinales. Ces dernières sont,

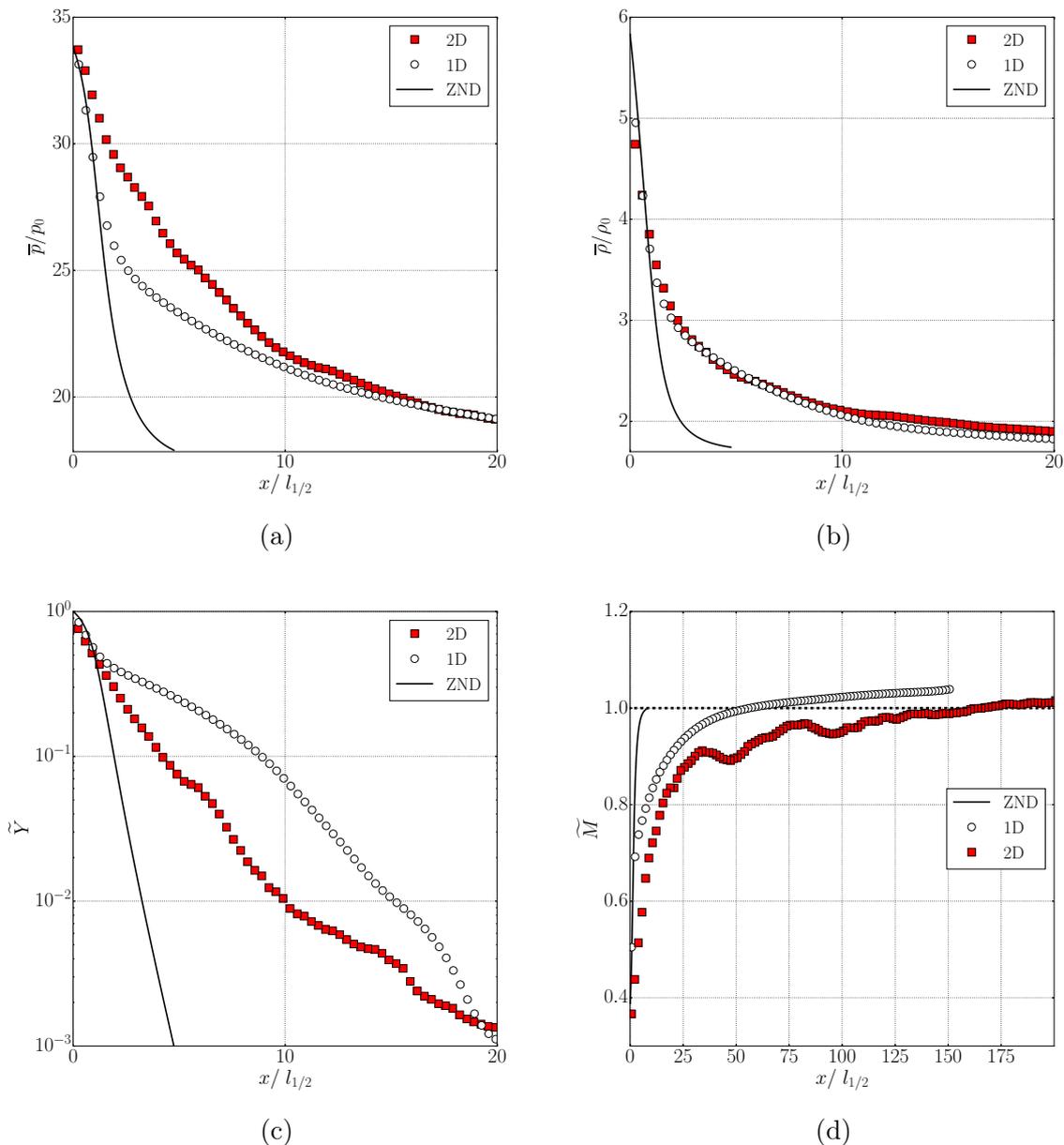


FIGURE 4.9 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc suivant qu’il s’agisse d’un calcul stationnaire (lignes), monodimensionnel (symboles blancs) ou bidimensionnel (symboles rouges). 1/20 et 1/10 des données 1D et 2D sont représentées, respectivement, sur les Figures (a), (b) et (c). 1/100 et 1/50 des données 1D et 2D sont représentées, respectivement, sur la Figure (d).

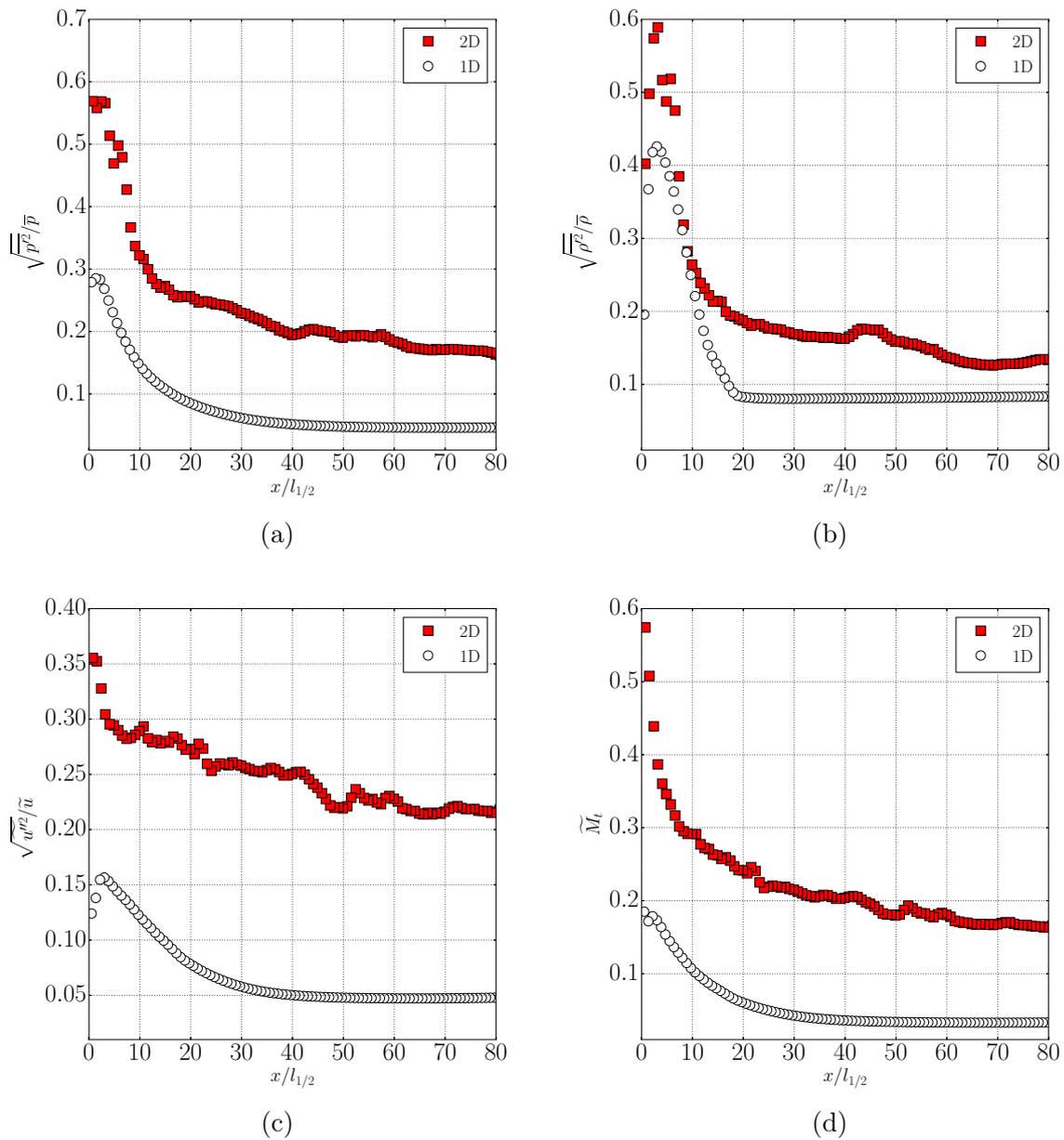


FIGURE 4.10 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc suivant qu'il s'agisse d'un calcul monodimensionnel (symboles blancs) ou bidimensionnel (symboles rouges). 1/50 et 1/25 des données 1D et 2D sont représentées, respectivement.

dans la configuration 1D, uniquement présentes pour l'énergie d'activation réduite $E_a^* = 38.23$ et sont à l'origine des différences observées entre la modélisation stationnaire et les résultats monodimensionnels. En revanche, le modèle ZND est parfaitement approprié aux énergies d'activation plus faibles comme l'ont démontré les calculs effectués pour $E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$. Le but est d'étendre ou d'infirmier ce résultat pour des calculs bidimensionnels, dans lesquels la structure cellulaire intrinsèque à la détonation apparaît. Les calculs effectués dans cette sous-section reprennent la configuration utilisée pour les mélanges caractérisés par $E_a^* = 38.23$ présentée dans la Section 4.3. Seuls E_a^* et le facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius sont modifiés, toujours suivant les paramètres rappelés dans le Tableau 4.2.

Caractéristiques générales

Les variations de célérité du front sont intimement liées à la structure cellulaire de la détonation. C'est le mouvement des points triples le long du front qui conduit à des augmentations brutales de la vitesse D . Les différences de sensibilité du milieu réactif, contrôlées dans les simulations numériques par l'énergie d'activation réduite E_a^* , influent sur les caractéristiques des profils de vitesse instantanée. La Figure 4.11 présente l'évolution de la vitesse D pour chacune des énergies d'activation réduites étudiées dans cette section.

La Figure 4.11 est associée à $E_a^* = 20$. Dans ce cas, la vitesse évolue en oscillant de façon périodique entre $0.9 D_{CJ}$ et $1.45 D_{CJ}$. La période de ces oscillations est de $37 l_{1/2}$, soit environ 2λ . Les cellules sont cependant légèrement plus grandes que ce qu'elles seraient dans une configuration non marginale, puisqu'elles s'adaptent ici aux dimensions transverses du canal. La période observée dans les profils de vitesse correspond bien à environ 1.6 fois leur largeur, ici 2 mm, conformément aux observations expérimentales selon lesquelles $\lambda/L \approx 0.6$. L'augmentation de l'énergie d'activation réduite E_a^* conduit à la perte du caractère périodique des profils de vitesse. Cela traduit la plus grande irrégularité de la structure cellulaire. L'amplitude des maxima fluctue également. L'intervalle dans lequel évolue la vitesse s'élargit, passant à $[0.8 D_{CJ} - 1.7 D_{CJ}]$ pour $E_a^* = 30$ et à $[0.75 D_{CJ} - 1.9 D_{CJ}]$ pour $E_a^* = 38.23$.

Les variations de la vitesse instantanée du front sont corrélées à la structure cellulaire de la détonation, présentée sur la Figure 4.12 pour les différentes énergies d'activation réduites. Rappelons que le développement des ondes transverses est affecté par les bords du canal et la taille de cellule est affectée par la hauteur du canal. Les calculs effectués pour $E_a^* = 20$ conduisent à une unique cellule très régulière et reproductible, en accord avec les résultats obtenus pour la vitesse de détonation sur la Figure 4.11 (a). Les énergies

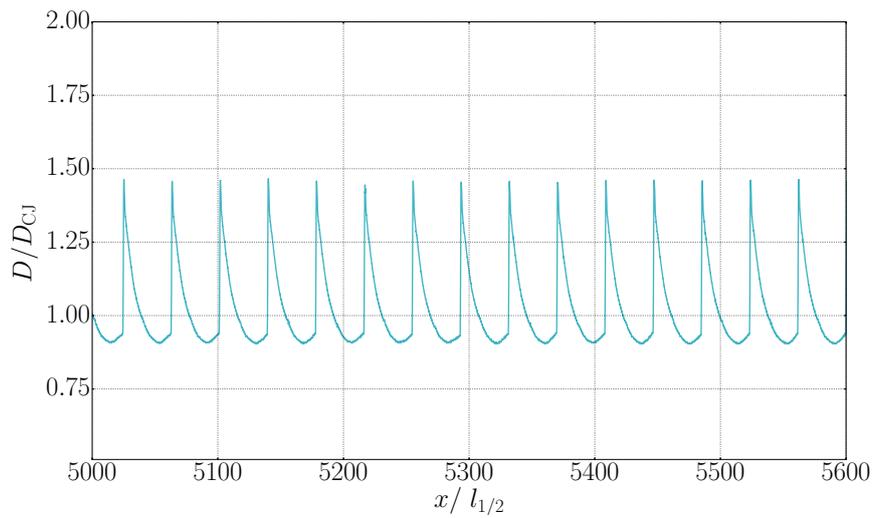
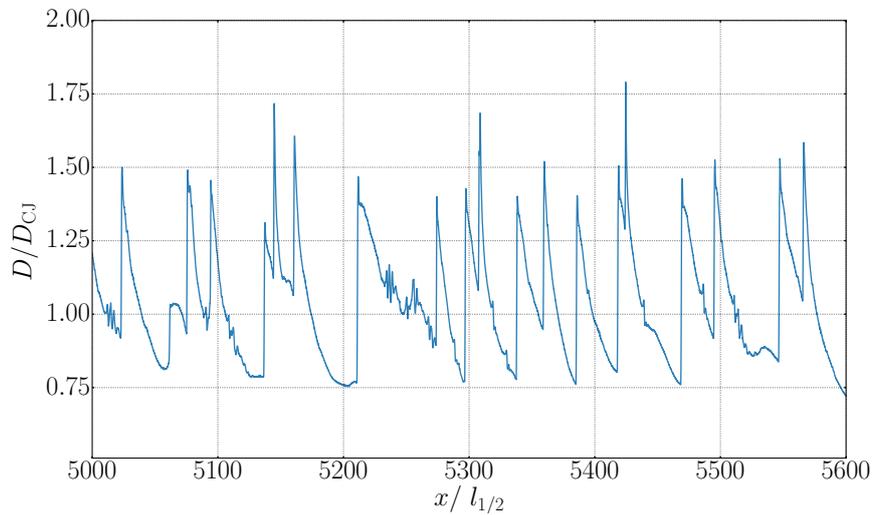
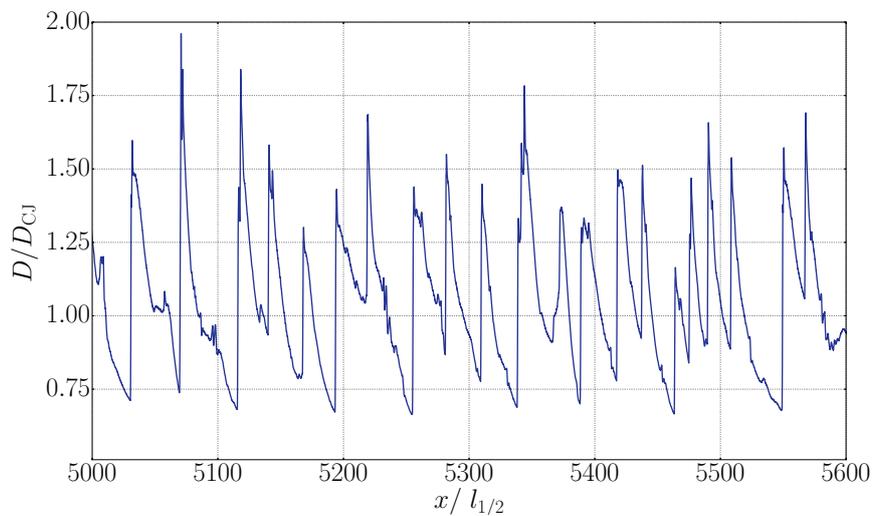
(a) $E_a^* = 20$ (b) $E_a^* = 30$ (c) $E_a^* = 38.23$

FIGURE 4.11 – Évolution de la vitesse instantanée du front D/D_{CJ} lors de la propagation de la détonation pour plusieurs énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.

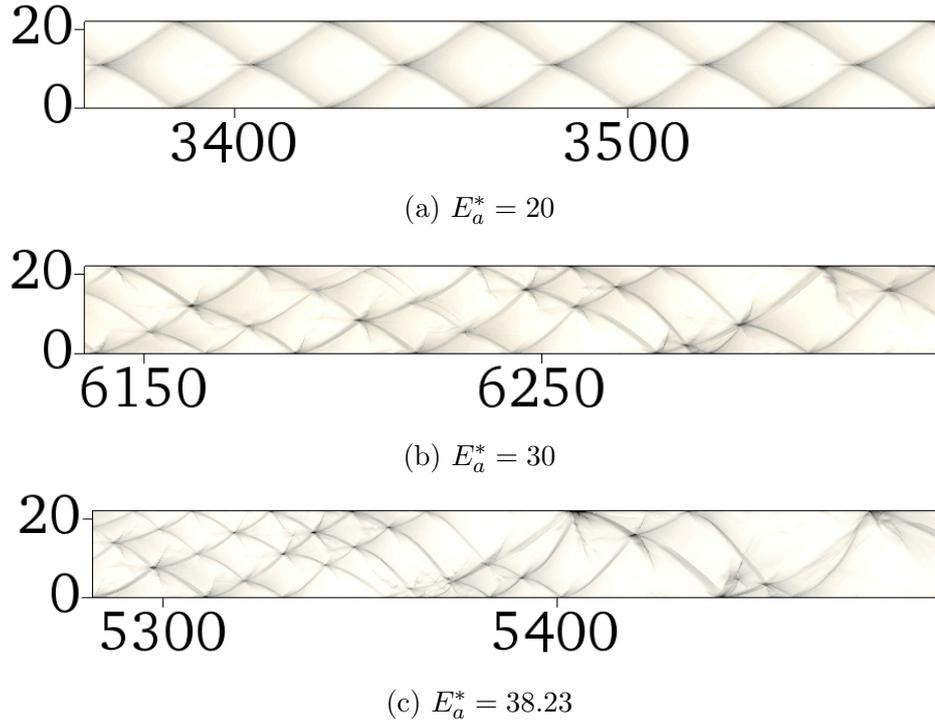


FIGURE 4.12 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation pour les différentes énergies d’activation réduites E_a^* . Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.

d’activation plus importantes donnent lieu à une dispersion plus importante des tailles de cellule. Leur nombre varie également, entre 1 et 2 pour $E_a^* = 30$ et entre 1/2 et 2.5 pour $E_a^* = 38.23$.

La Figure 4.13 présente les champs de température T/T_0 obtenus pour différentes énergies d’activation réduites E_a^* . La sensibilité du mélange réactif affecte l’écoulement en aval du front de détonation. Dans le cas où $E_a^* = 20$ (voir Figure 4.13 (a)), deux ondes transverses sont présentes dans l’écoulement et se déplacent de façon symétrique de part et d’autre de l’axe longitudinal. Le front de détonation est constitué d’une onde de Mach dans la partie centrale et de deux chocs incidents près des parois. Ces derniers sont quasiment verticaux. Des paires de tourbillons sont créées lors de la collision se produisant entre les points triples. La trace imprimée par ces tourbillons dans le champ de température persiste longtemps dans l’écoulement. Les lignes de glissement, séparant les gaz issus du choc incident de ceux passés au travers de l’onde de Mach, sont également visibles dans le champ de température. Elles adoptent une forme symétrique dont la concavité alterne suivant la position relative des ondes de Mach et des chocs incidents. L’augmentation de l’énergie d’activation réduite à $E_a^* = 30$ conduit à un écoulement plus irrégulier. Au cours de la propagation de la détonation, le nombre d’ondes transverses varie. L’écoulement

perd son caractère symétrique, les chocs incidents n'étant plus systématiquement verticaux. Les lignes de glissement présentent de nombreuses irrégularités dues aux instabilités de Kelvin-Helmoltz. C'est cependant pour $E_a^* = 38.23$ que l'écoulement adopte sa forme la plus chaotique.

Analyse des quantités moyennes

La Figure 4.14 présente l'évolution de la pression moyenne, de la masse volumique moyenne, de la fraction massique moyenne et du nombre de Mach local moyen en fonction de la distance au choc pour plusieurs énergies d'activation réduites. Les profils obtenus via la modélisation stationnaire ZND sont également présentés. Les tendances issues des calculs bidimensionnels varient de façon inverse à celles de la modélisation stationnaire. L'augmentation de l'énergie d'activation réduite dans les calculs instationnaires se traduit de façon générale par un allongement de la zone de réaction.

L'évolution de la pression, Figure 4.14 (a), traduit cette observation. Dans le cas d'une énergie d'activation réduite $E_a^* = 20$, le profil instationnaire et le profil ZND ne coïncident plus exactement, mais restent relativement proches, l'écart demeurant inférieur à une demi-longueur de réaction. Ces différences sont imputables aux ondes transverses, mais qui dans le cas d'une énergie d'activation faible n'affectent pas l'écoulement de façon substantielle. Ce n'est pas le cas des deux autres énergies d'activation réduites, pour lesquelles les différences avec les profils ZND sont importantes. Un constat similaire peut être effectué d'après les courbes d'évolution de la masse volumique moyenne et de la fraction massique moyenne. Les profils de fraction massique moyenne coïncident même sur une large partie de la zone de réaction. Il convient de noter que la demi-longueur de réaction, distance entre le front et le point pour lequel $\tilde{Y} = 0.5$ reste identique, qu'il s'agisse des calculs monodimensionnels ou bidimensionnels (voir Figure 4.15). La Figure 4.14 (d) présente l'évolution du nombre de Mach local moyen et permet la détermination de l'épaisseur hydrodynamique pour chacune des énergies d'activation réduites E_a^* . La courbe relative à $E_a^* = 20$ demeure très proche des résultats issus du modèle stationnaire, mais commencent à osciller périodiquement avant d'atteindre $\tilde{M} = 1$. Ainsi, le franchissement net de la ligne $\tilde{M} = 1$ est repoussé à $190 l_{1/2} \approx 10 \lambda$. Ces oscillations sont liées à la structure cellulaire très régulière pour cette valeur de E_a^* . Dans le cas des énergies d'activations réduites plus importantes $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$, le décrochage est beaucoup plus net entre les résultats stationnaires et les simulations numériques bidimensionnelles. L'épaisseur hydrodynamique atteint dans ce cas $210 l_{1/2} \approx 9 \lambda$ et $180 l_{1/2} \approx 8.5 \lambda$, respectivement. Ces trois valeurs de l'épaisseur hydrodynamique sont cependant relativement proches.

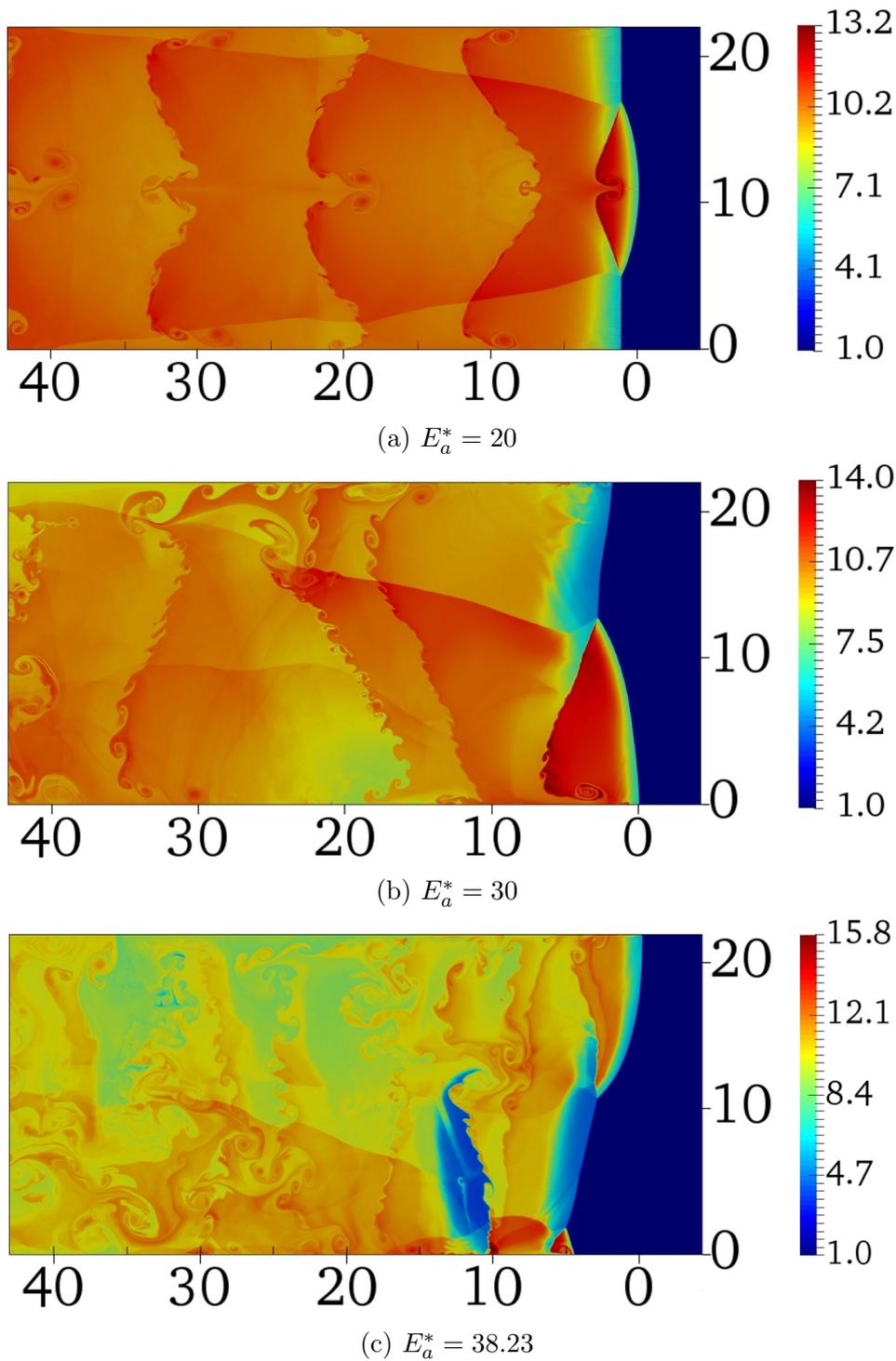


FIGURE 4.13 – Comparaison pour différentes énergies d'activation réduites des champs de température T/T_0 . Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.

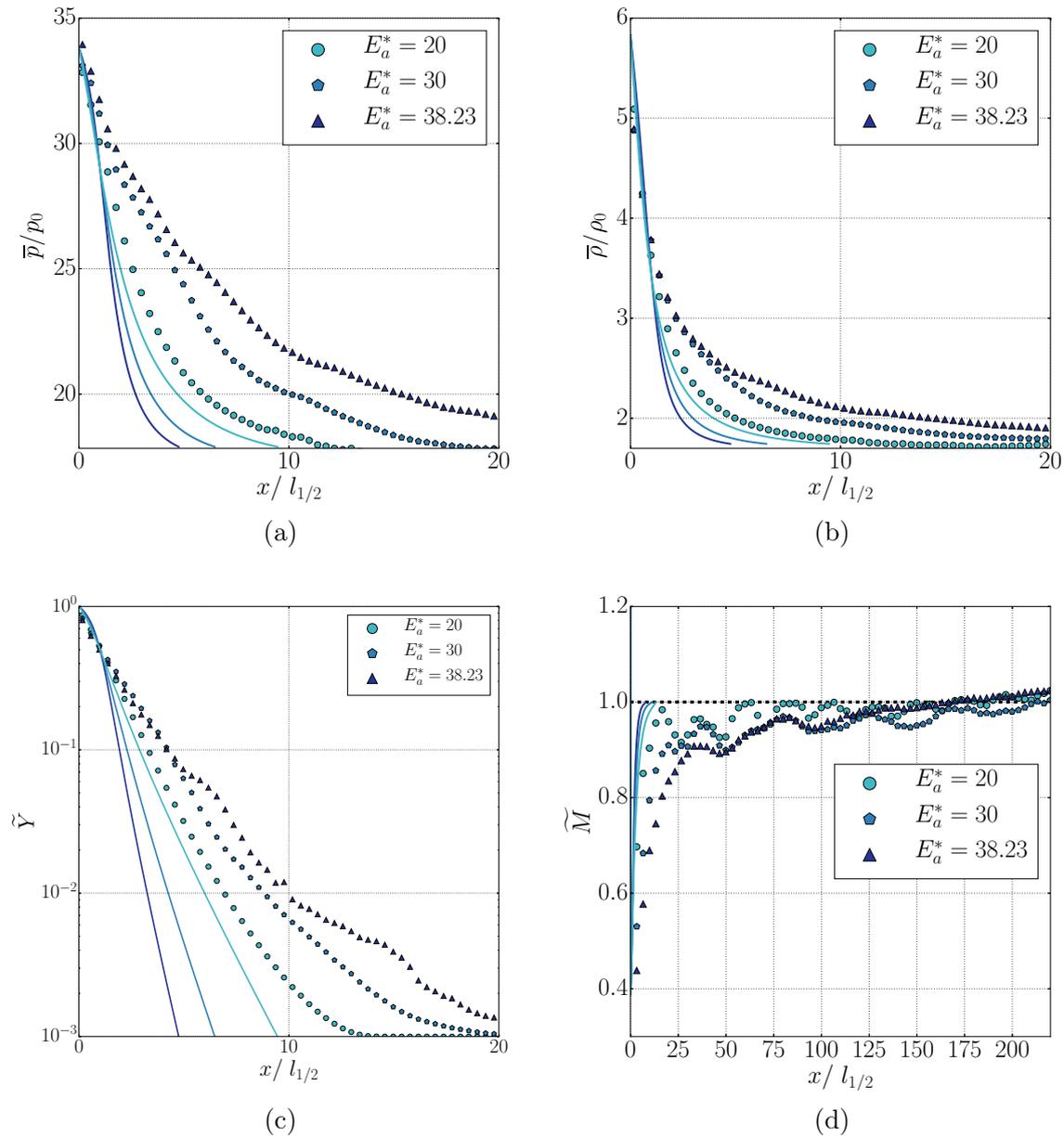


FIGURE 4.14 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique (c) et du nombre de Mach dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs énergies d'activation réduites E_a^* (symboles). 1/12 des points des représenté sur les Figures (a), (b) et (c) et 1/100 des points des représenté sur la Figure (d). Comparaison avec les résultats de la modélisation ZND (lignes)

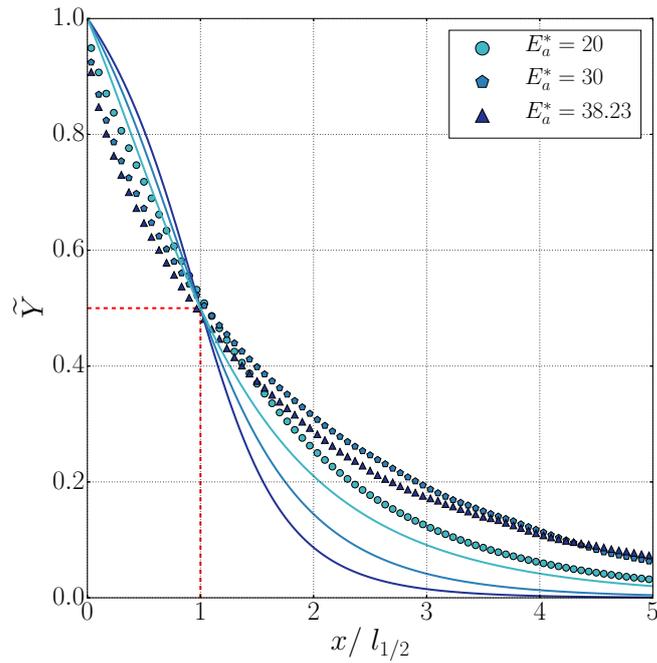


FIGURE 4.15 – Évolution de la fraction massique de gaz frais moyenne pour les différentes énergies d’activation réduites. Élargissement de la Figure 4.14 (c). Un point sur deux est représenté.

L’évolution des fluctuations moyennes de pression, de masse volumique et de vitesse ainsi que du nombre de Mach turbulent local est représentée sur la Figure 4.16. Les calculs effectués pour une énergie d’activation réduite $E_a^* = 20$ conduisent à des fluctuations d’amplitude inférieure aux résultats obtenus pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$. Les fluctuations maximales de pression et de masse volumique atteignent dans ce cas environ 30% de la valeur moyenne, soit la moitié de l’amplitude atteinte pour les énergies d’activation plus élevées. Les courbes obtenues pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$ présentent d’importantes similarités, les niveaux de fluctuations moyennes ne différant que de moins de 1%. Ces résultats démontrent bien la distinction entre deux groupes de comportements distincts suivant la valeur de l’énergie d’activation réduite : d’une part les mélanges à faible énergie d’activation ($E_a^* = 20$) et d’autre part les mélanges avec des énergies d’activation plus élevées ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$). Ainsi, les fluctuations de la pression et de la masse volumique sont importantes près du choc. De même, le nombre de Mach turbulent est largement supérieur à 0.3 sur une distance correspondant environ à $\lambda/2$.

La Figure 4.17 (a) révèle l’évolution du rapport $\frac{\sqrt{\overline{p'^2}}}{\bar{p}} \frac{\bar{p}}{\sqrt{\overline{\rho'^2}}}$ en fonction de la distance pour les différentes énergies d’activation réduites. En supposant que les moyennes quadratiques des fluctuations thermiques turbulentes peuvent être liées par une relation

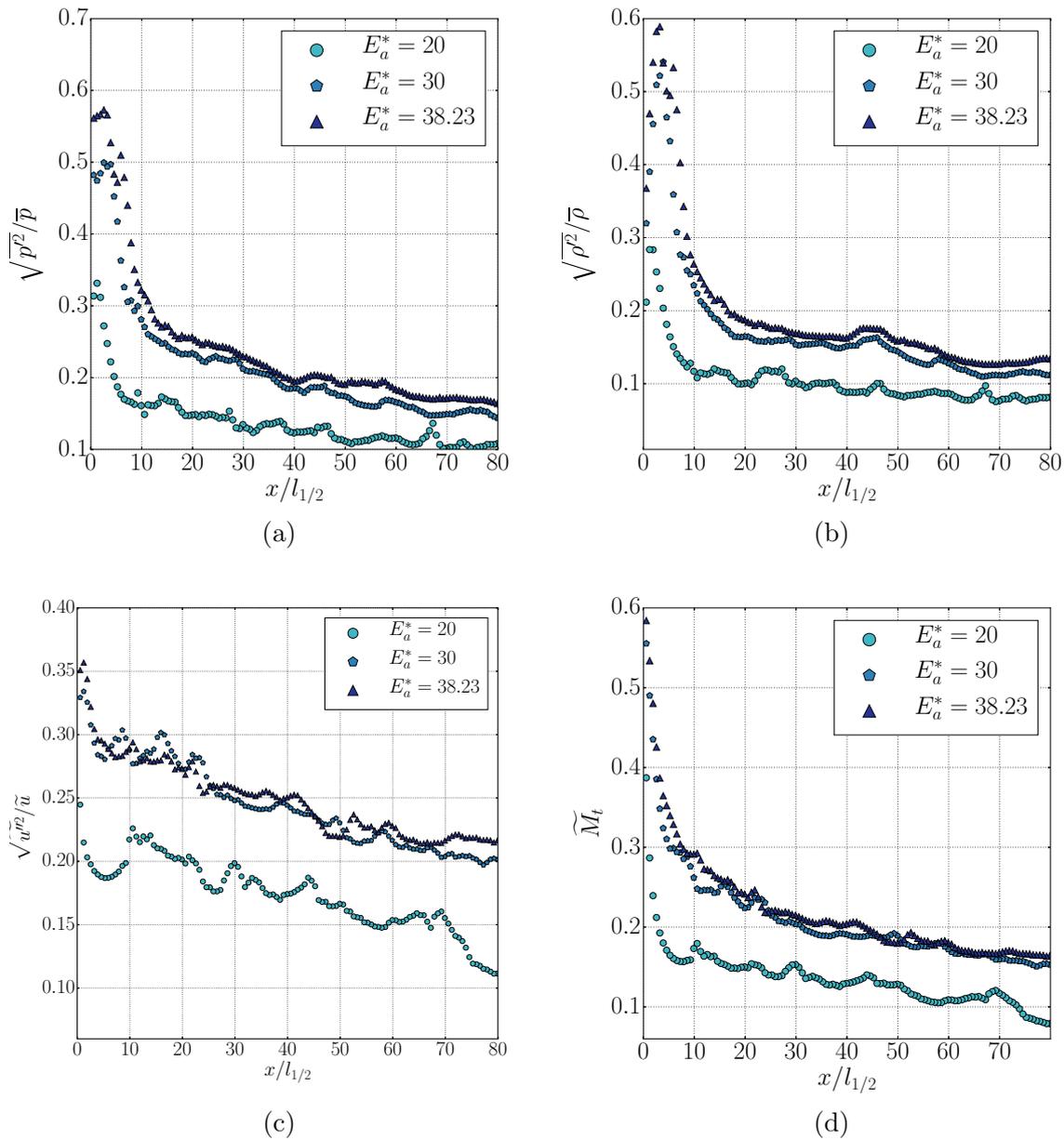


FIGURE 4.16 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs énergies d'activation réduites E_a^* . 1/12 des points est représenté.

polytropique [161], il est possible d'écrire :

$$\frac{\sqrt{p'^2}}{\bar{p}} = n_{pp} \frac{\sqrt{\rho'^2}}{\bar{\rho}} \quad (4.1)$$

Le coefficient n_{pp} correspond alors aux courbes de la Figure 4.17. Pour $E_a^* = 20$, ce rapport oscille autour de $\gamma = 1.333$, signe que l'écoulement se comporte de façon isentropique. Pour les énergies d'activation réduites plus importantes, les courbes évoluent légèrement en deçà et fluctuent entre 1 (isotherme) et 1.333 (isentropique). La valeur moyenne correspondant est alors comprise entre 1.2 et $\gamma = 1.333$. Ce résultat est à rapprocher de ceux obtenus par Donzis et Jagannathan [162] dans leur étude numérique de la turbulence compressible. Dans le cas 1D, n_{pp} évolue entre 1 et 0.55. Il est intéressant de constater que ces relations établies et étudiées dans le cas inerte s'étendent dans une certaine mesure aux écoulements réactifs, comme l'a constaté également [163] en étudiant l'effet des fluctuations de température sur une turbulence compressible.

La Figure 4.17 (b) s'intéresse à la répartition énergétique relative aux fluctuations en aval du front. Le terme de répartition énergétique F peut s'écrire [164] :

$$F = \frac{\bar{\rho} \widetilde{u'^2}}{p'^2 / \gamma \bar{p}} \quad (4.2)$$

Le numérateur et le dénominateur représentent le double de l'énergie cinétique turbulente et le double de l'énergie potentielle turbulente. Ainsi, $F = 1$ implique une répartition équilibrée de ces deux termes énergétiques. Dans le calcul 1D, la courbe semble tendre vers l'unité. Ce n'est plus le cas dans les simulations bidimensionnelles, pour lesquelles le terme cinétique prédomine. Ainsi, F augmente de façon continue au-delà de 1 pour les énergies d'activation réduites $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$. Le comportement pour $E_a^* = 20$ diffère de celui observé pour les mélanges moins réguliers. Sur une première partie correspondant à $x < 60 l_{1/2}$, les trois courbes relatives aux simulations 2D concordent. Le profil $E_a^* = 20$ décroît ensuite pour atteindre des valeurs inférieures à l'unité. Il semble cependant qu'à la fin du domaine de calcul les trois courbes reprennent une évolution semblable. Il est à noter que dans notre analyse, la composante dilatationnelle n'est pas isolée des autres composantes présentes.

La Figure 4.18 présente, en bleu, la superposition des fronts de détonation obtenus à différents instants, extraits toutes les 1000 itérations. La position moyenne du front est représentée par la courbe rouge, et l'écart type de part et d'autre de la position moyenne est tracé en noir. Les différents profils sont translatés horizontalement de façon à coïncider en $y = 0$. La coordonnée horizontale s'écrit alors $x'_s(y, t) = x_s(y, t) - x_s(0, t)$, $x_s(y, t)$

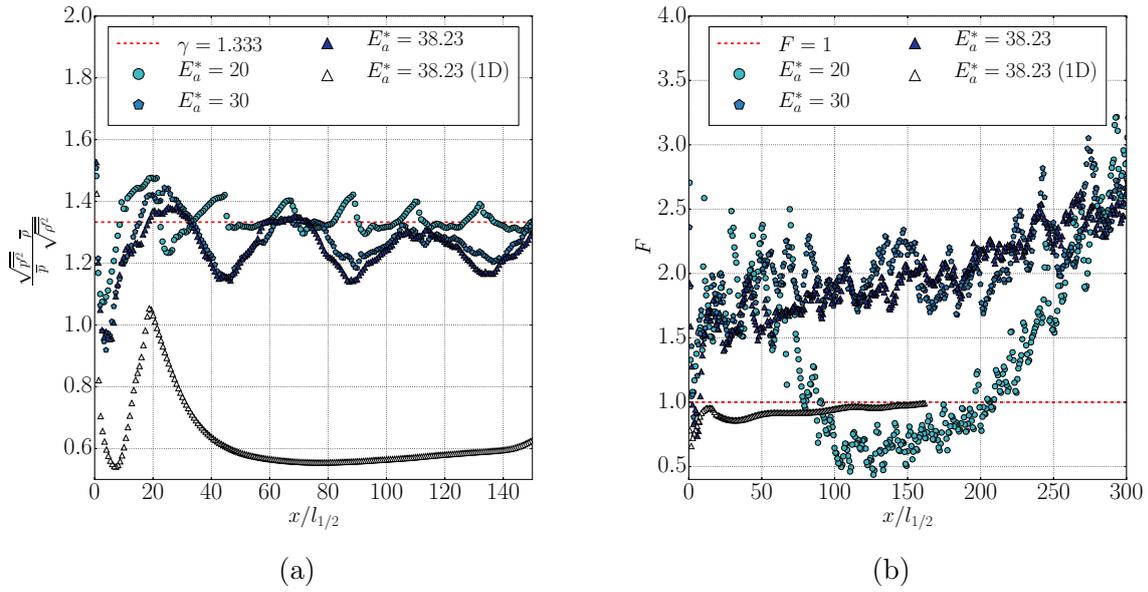


FIGURE 4.17 – (a) : Évolution du rapport $\frac{\sqrt{p'^2}}{\bar{p}} \frac{\bar{p}}{\sqrt{\rho'^2}}$ en fonction de la distance pour les différentes énergies d'activation réduites dans les cas 1D et 2D. (b) : Évolution du terme de répartition énergétique F en fonction de la distance pour les différentes énergies d'activation réduites dans les cas 1D et 2D. 1/40 et 1/20 des points sont représentés en 1D et 2D, respectivement.

étant la position du choc précurseur. Les trois figures adoptent une topologie différente suivant la valeur de l'énergie d'activation réduite. Pour $E_a^* = 20$, le locus formé par les différents fronts de détonation concourent en deux nœuds : en $y = 0$ mais aussi en $y = L_y$. Dans ce cas, le mouvement du front de détonation transcrit la régularité de la structure cellulaire. Pour les énergies d'activation plus importantes, $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$, les locii ne présentent d'un seul nœud d'intersection, celui d'origine. Les fronts de détonation divergent avec l'augmentation de la hauteur. Les courbes relatives aux énergies d'activation réduites $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$ ne diffèrent que dans l'écart maximal existant entre les deux lignes des écarts types. L'écart maximal normalisé par la hauteur du canal L_y est de 0.257 pour $E_a^* = 30$ et 0.283 pour $E_a^* = 38.23$. Dans les trois configurations, les lignes démarquant l'écart type de part et d'autre de la position moyenne présentent une légère dissymétrie. Les courbes relatives à $x'_s > 0$ sont plus avancées que celles pour $x'_s < 0$. Cela marque une probabilité plus forte que le front de détonation soit en retrait par rapport à la position moyenne. Ce constat est en accord avec la littérature [30, 165], dans laquelle il est montré que le temps passé en deçà de la vitesse D_{CJ} est supérieur au temps passé au-delà.

Les variations du terme de production chimique moyen $\tilde{\omega}$ en fonction de $1000/\bar{T}$ sont présentées sur la Figure 4.19, pour les différentes énergies d'activation réduites et sui-

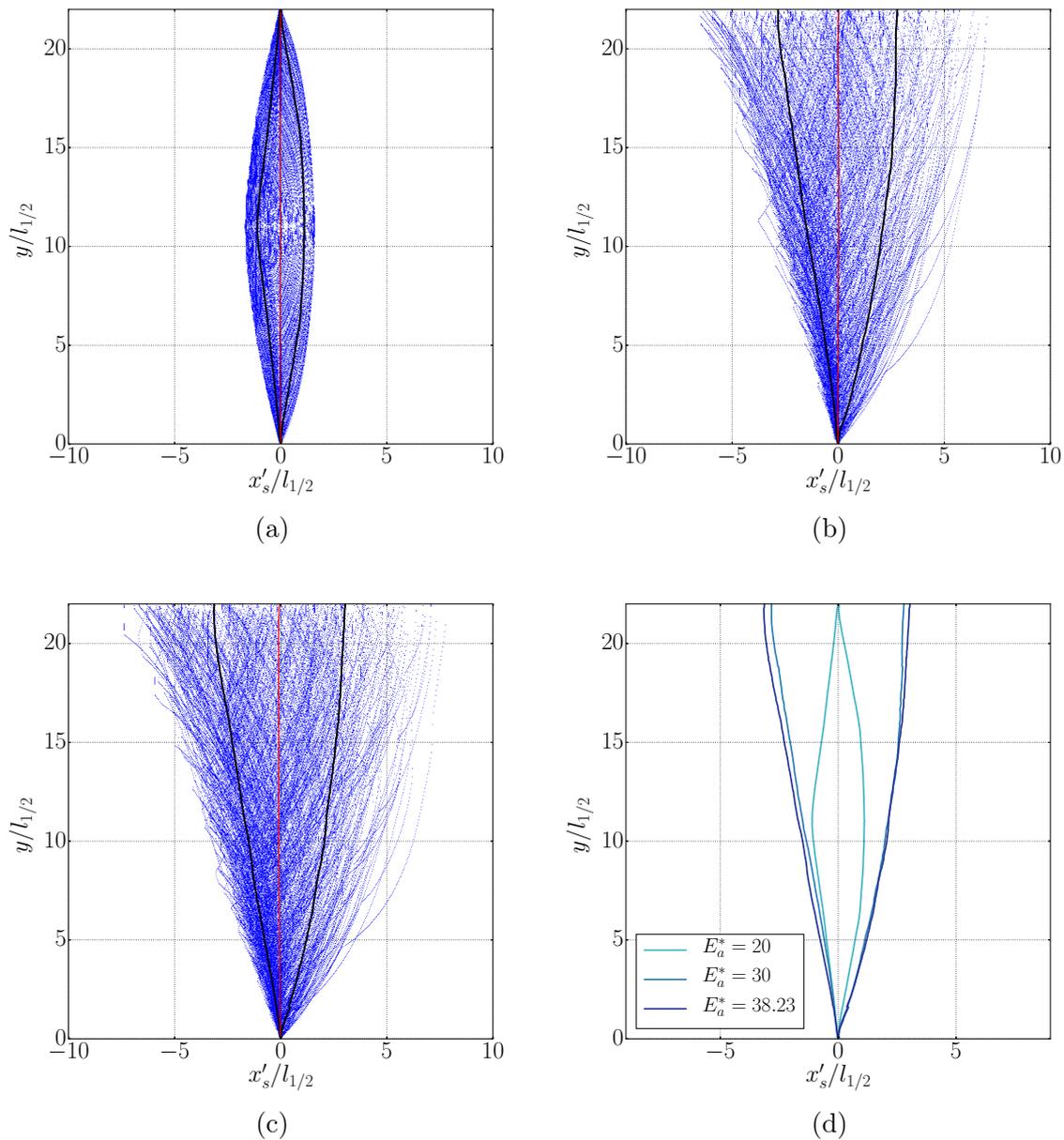


FIGURE 4.18 – Structure instantanée (bleu), moyenne (rouge) et écart-type (noir) du front de détonation pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$. (d) : Écart-types obtenus pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites.

vant qu'il s'agit des cas stationnaires, 1D ou 2D. Les profils sont colorisés suivant la fraction massique de gaz frais \tilde{Y} . Dans le cas d'une faible énergie d'activation réduite (Figure 4.19 (a)), les profils ZND et 1D coïncident parfaitement. Le profil 2D présente des points initiaux et finaux identiques, mais dévie légèrement au cours de la transformation chimique. Les variations de pente du profil peuvent être interprétées comme des variations de l'énergie d'activation effective de la réaction chimique. Ces modifications furent observées par Sow et al. [149] pour la propagation de détonations dans des canaux de petite section, avec une énergie d'activation réduite $E_a^* = 22$. Ils distinguèrent deux phases dans l'évolution du profil, pouvant être associées à deux énergies d'activation effectives distinctes. En poursuivant l'analyse, il pourrait être possible d'envisager une évolution continue de l'énergie d'activation effective, initialement faible puis variant vers des niveaux plus importants.

Pour $E_a^* = 30$, les résultats stationnaires et 1D coïncident également. En revanche, les différences avec le profil 2D sont bien plus marquées qu'elles ne l'étaient pour $E_a^* = 20$. Cette fois, les positions initiales et finales du profil sont éloignées de leur emplacement en 1D. L'évolution semble cette fois se dérouler en deux phases distinctes. Dans la première, l'énergie d'activation effective est quasi nulle, puis augmente brutalement dans la seconde phase. Enfin, pour le cas le plus instable correspondant à $E_a^* = 38.23$, les différences apparaissent dès la transition du modèle ZND à la simulation 1D. Le profil 1D se distingue par l'apparition d'une phase à pente positive dans la partie intermédiaire de la réaction chimique. Le passage de la simulation 1D à la simulation 2D réduit l'amplitude de ce phénomène, toujours présent par ailleurs.

De façon générale, il semble que l'accroissement des fluctuations de l'écoulement lorsque l'énergie d'activation augmente réduit la sensibilité globale du terme source chimique à la température.

4.3.4 Étude de la résolution spatiale

Les calculs effectués dans cette sous-section sont destinés à quantifier l'influence de la résolution numérique au travers du nombre de points par demi-longueur de réaction $N_{1/2}$. La configuration étudiée reprend celle de la Section 4.3 pour une énergie d'activation réduite $E_a^* = 38.23$. Trois niveaux de résolution numérique sont comparés : $N_{1/2} = 10$, $N_{1/2} = 30$ et $N_{1/2} = 60$. Dans les trois simulations, les vitesses de détonation calculées sont toutes les trois identiques et égales à $\bar{D} = 2850 \text{ m s}^{-1}$.

Les champs de température obtenus pour $N_{1/2} = 10, 30$ et 60 sont présentés sur la

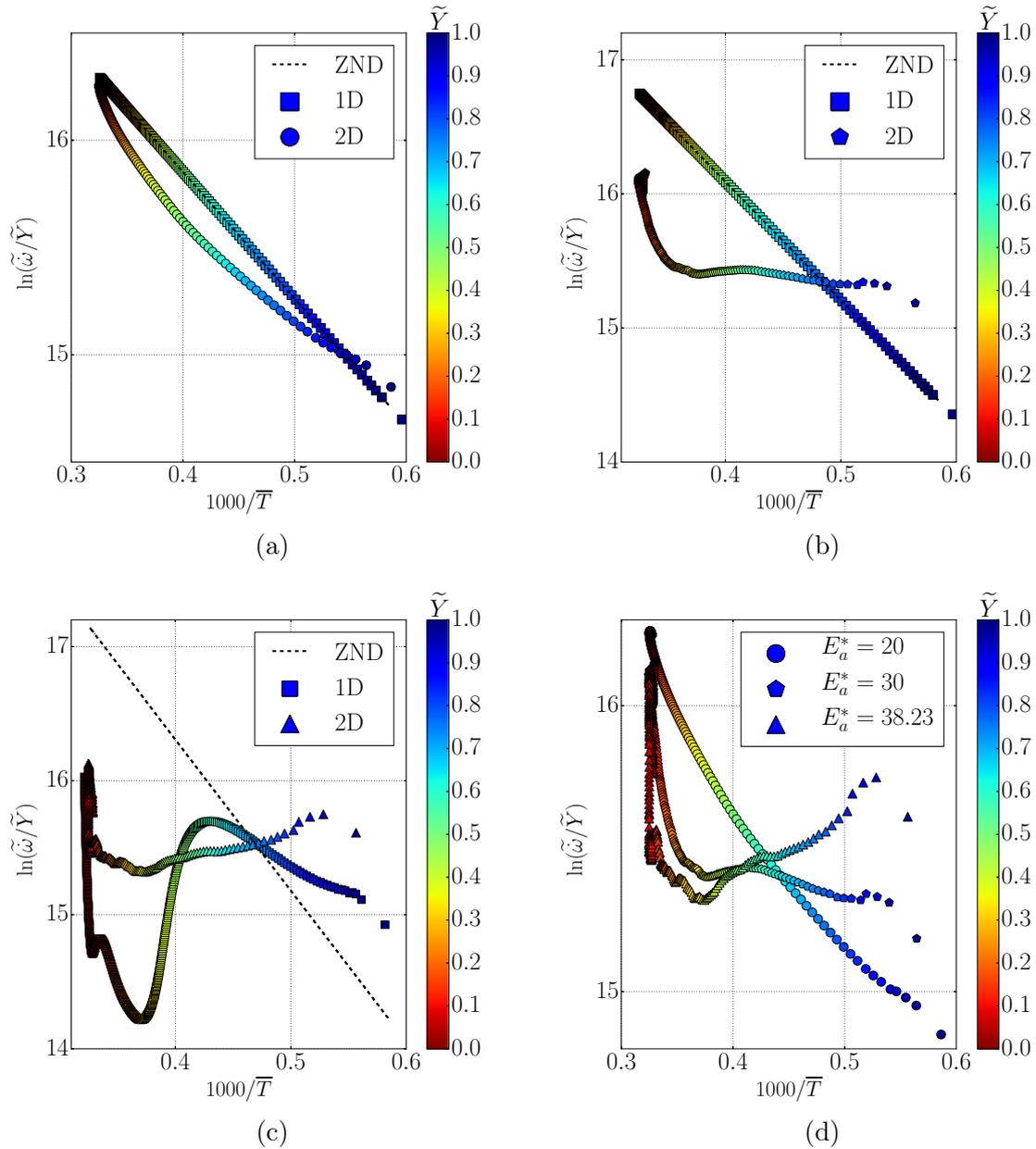


FIGURE 4.19 – Logarithme du terme de production chimique moyen $\tilde{\omega}$ divisé par \tilde{Y} en fonction de $1000/\bar{T}$ pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$. (d) : synthèse des trois énergies d'activation réduites dans le cas 2D. Les profils sont colorisés suivant la fraction massique de gaz frais \tilde{Y} .

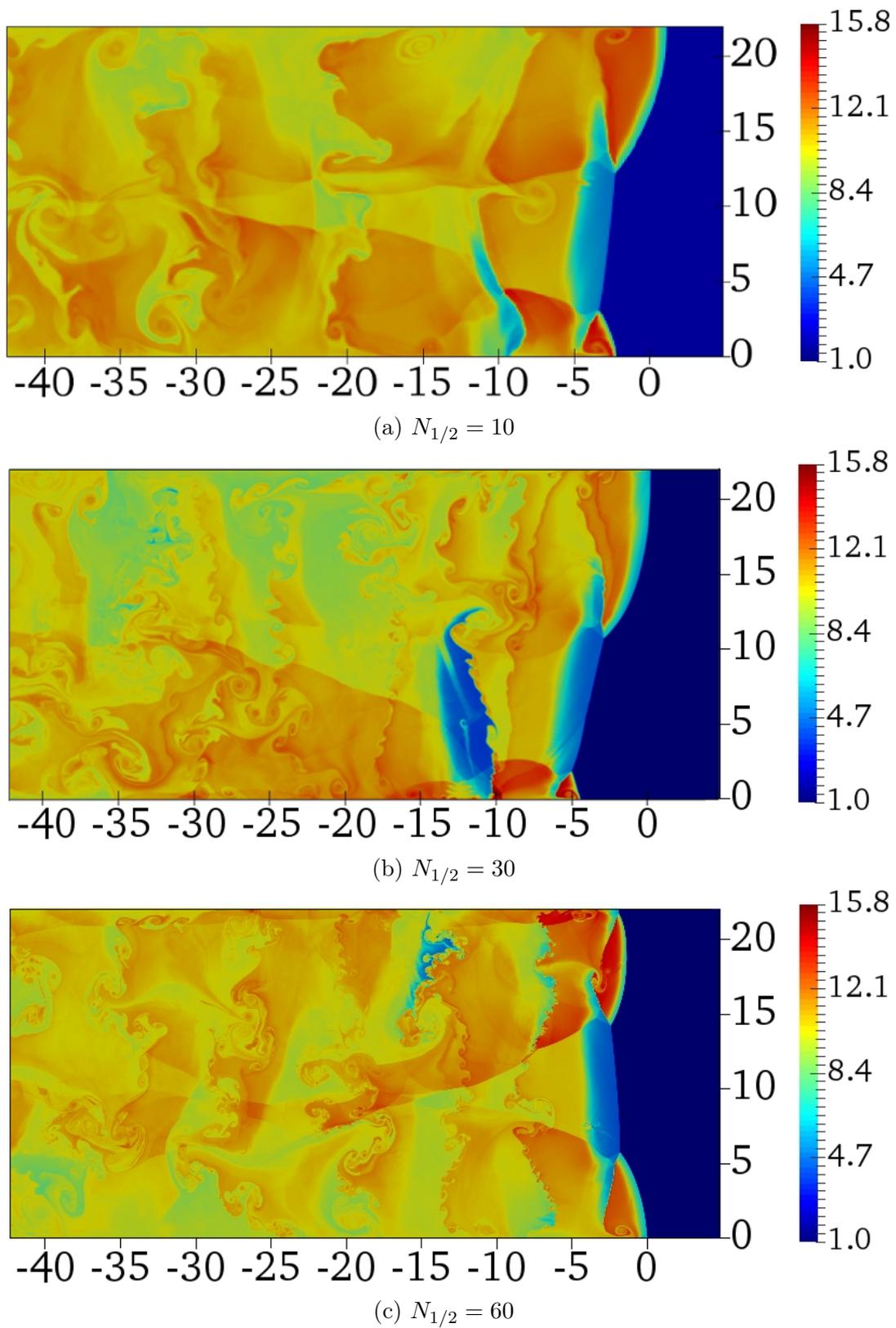


FIGURE 4.20 – Comparaison pour différentes résolutions des champs de température T/T_0 . (a) : $N_{1/2} = 10$, (b) : $N_{1/2} = 30$ et (c) : $N_{1/2} = 60$.

Figure 4.20. Cette comparaison permet d'identifier qualitativement les différences induites par différentes résolutions numériques. La forme du front de détonation n'est pas affectée par l'augmentation du nombre de mailles. En revanche, les structures qui se développent en aval sont notablement modifiées. En particulier, la forme adoptée par les poches de gaz frais dépend de $N_{1/2}$. Sur la Figure 4.20 (a) ($N_{1/2} = 10$), le contour de la poche est lisse. Ce n'est pas le cas sur les Figures 4.20 (b) et (c), pour lesquelles les instabilités hydrodynamiques déforment l'interface de la poche de gaz frais et lui donnent une forme dentelée, voire filamentaire. Ceci est particulièrement marqué pour le cas avec $N_{1/2} = 60$. L'écoulement dans sa globalité est impacté par ses différences, comme en témoigne les champs de températures pour les différentes valeurs de $N_{1/2}$. Les champs de la Figure 4.21 présentent les champs de vorticités associés aux différentes résolutions numériques. Les points de haute vorticités préfigurent la trajectoire des points triples le long du front, mais surtout la présence de structures tourbillonnaires dans l'écoulement en aval. Leur nombre est réduit pour $N_{1/2} = 10$, et augmente considérablement pour $N_{1/2} = 30$ et $N_{1/2} = 60$.

La Figure 4.22 compare les profils moyens obtenus pour $N_{1/2} = 10, 30$ et 60 dans l'optique de quantifier l'influence de la résolution numérique sur l'écoulement moyen. Alors que les visualisations des Figures 4.20 et 4.21 démontrent une augmentation importante des instabilités hydrodynamiques avec la résolution, les profils moyens concordent les uns avec les autres. Les profils de pression (Figure 4.22 (a)) et de fraction massique (Figure 4.22 (b)) convergent vers une même solution. Il en est de même avec les fluctuations de pression et de vitesse. Le plan sonique est quant à lui déterminé à $7 \pm 1 \lambda$ (Figure 4.22 (d)). Les fluctuations, exposées sur la Figure 4.23, présentent des niveaux similaires.

Ces résultats démontrent que les caractéristiques principales de l'écoulement moyen sont correctement restituées par des calculs réalisés avec une résolution relativement faible ($N_{1/2} = 10$). La vitesse du front, sa structure cellulaire et les profils moyens diffèrent peu avec la résolution spatiale des simulations. En revanche, les écoulements sont d'un degré de complexité et de turbulence qui évolue avec $N_{1/2}$. C'est en particulier le cas des fluctuations hydrodynamiques (Kelvin-Helmholtz, Rayleigh-Taylor, Richtmyer-Meshkov). Ces instabilités sont pressenties pour jouer un rôle important dans le mécanisme de propagation des détonations fortement instables. La convergence des statistiques renforce l'hypothèse suivant laquelle le mélange modélisé (H_2/O_2 à la stœchiométrie et à la pression de 1 atm) n'est que modérément instable, à la différence d'autres mélanges tels que le $\text{CH}_4 - \text{O}_2$ ou $\text{C}_3\text{H}_8 - \text{O}_2$. En revanche, les résultats obtenus ici quant à l'influence de la résolution numérique sur la propagation d'une détonation marginale ne préjugent pas complètement de l'influence de $N_{1/2}$ pour une configuration différente. En particulier, lorsque des pertes sont présentes dans la zone de réaction, car celles-ci dégradent la

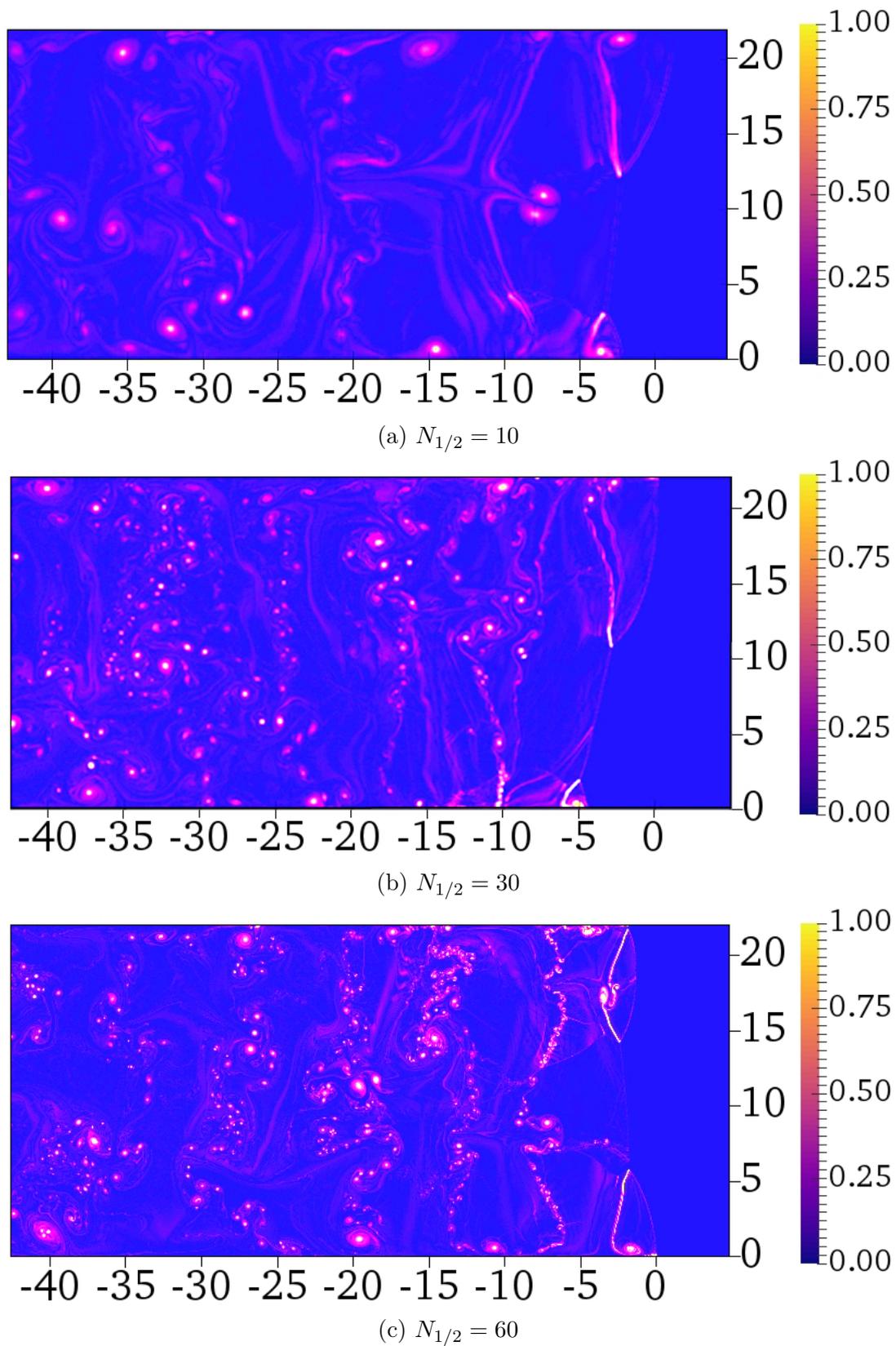


FIGURE 4.21 – Comparaison pour différentes résolutions des champs de vorticit . (a) : $N_{1/2} = 10$, (b) : $N_{1/2} = 30$ et (c) : $N_{1/2} = 60$.

régularité de la structure cellulaire. De plus, la convergence des statistiques ne fournit aucune indication sur les phénomènes transitoires pouvant se produire, tels que l'extinction de la détonation.

4.4 Synthèse partielle

Ce chapitre décrit les simulations effectuées dans les configurations stationnaires, monodimensionnelles et bidimensionnelles pour une détonation se propageant sans pertes. La comparaison entre ces différents calculs a mis en évidence l'influence des instabilités non linéaires sur la structure moyenne de l'écoulement. Les fluctuations chaotiques observées pour le mélange le plus irrégulier sont responsables de l'élargissement de la zone de réaction. La modélisation stationnaire ne permet pas de prendre en compte l'effet de ces fluctuations sur l'écoulement moyen en aval du front. Les simulations bidimensionnelles conduisent à des résultats en accord qualitatif avec la littérature expérimentale. Le passage du 1D au 2D retarde la relaxation de la pression en aval de la détonation, et accroît les fluctuations moyennes d'un facteur 2. Cependant, les profils moyens de masse volumique ne sont pas affectés.

Les calculs 1D et 2D effectués pour les différentes énergies d'activation réduites E_a^* montrent que le passage en bidimensionnel augmente l'instabilité effective du point de fonctionnement. En particulier, les simulations monodimensionnelles relatives à $E_a^* = 30$ se comportent de façon stationnaire, mais sont irrégulières en 2D. Les fluctuations moyennes en aval du choc sont réparties en deux groupes suivant la régularité du mélange réactif. Pour les mélanges irréguliers, le nombre de Mach turbulent dépasse 0.3 sur une distance correspondant environ à $\lambda/2$. Dans ce cas, les niveaux des fluctuations de pression et de masse volumique sont supérieurs d'un facteur 2 à ceux relatifs aux mélanges réguliers. L'accroissement des fluctuations de l'écoulement lorsque l'énergie d'activation réduite augmente semble réduire la sensibilité globale du terme source chimique à la température.

Enfin, la dernière partie de ce chapitre est dédiée à l'influence de la résolution numérique sur la propagation de la détonation. Les résultats montrent que l'écoulement gagne en complexité et affiche de nombreuses sous-structures tourbillonnaires lorsque la résolution numérique est accrue. Cependant, ces différences n'affectent pas la structure moyenne en aval du front. Les profils montrent qu'une résolution numérique de $N_{1/2} = 10$ suffit à obtenir des résultats satisfaisants que ce soit pour les quantités moyennes ou pour les fluctuations moyennes associées.

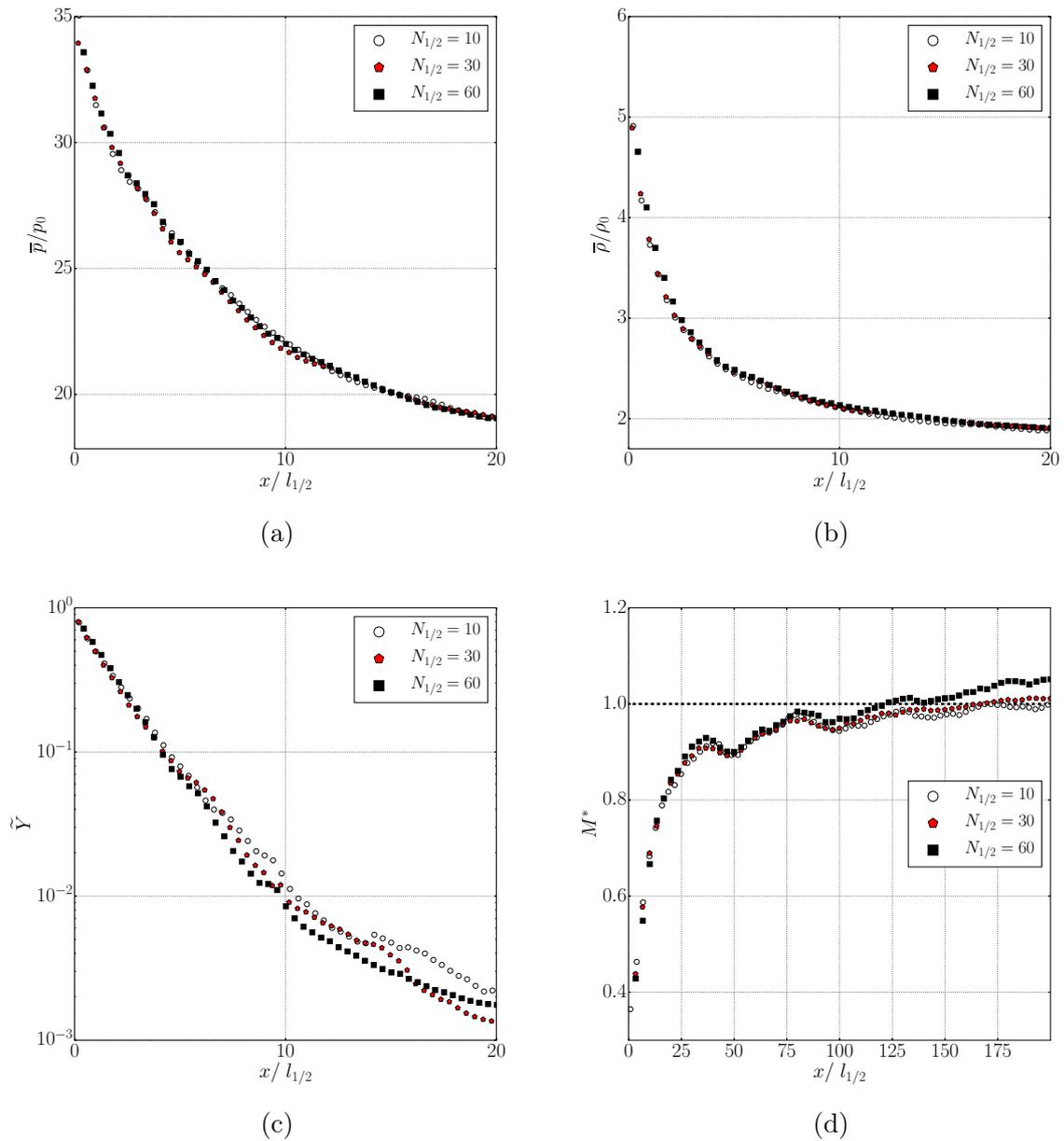


FIGURE 4.22 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique (c) et du nombre de Mach dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs résolutions numérique $N_{1/2}$. 1/30, 1/100 et 1/200 des points sont représentés, respectivement.

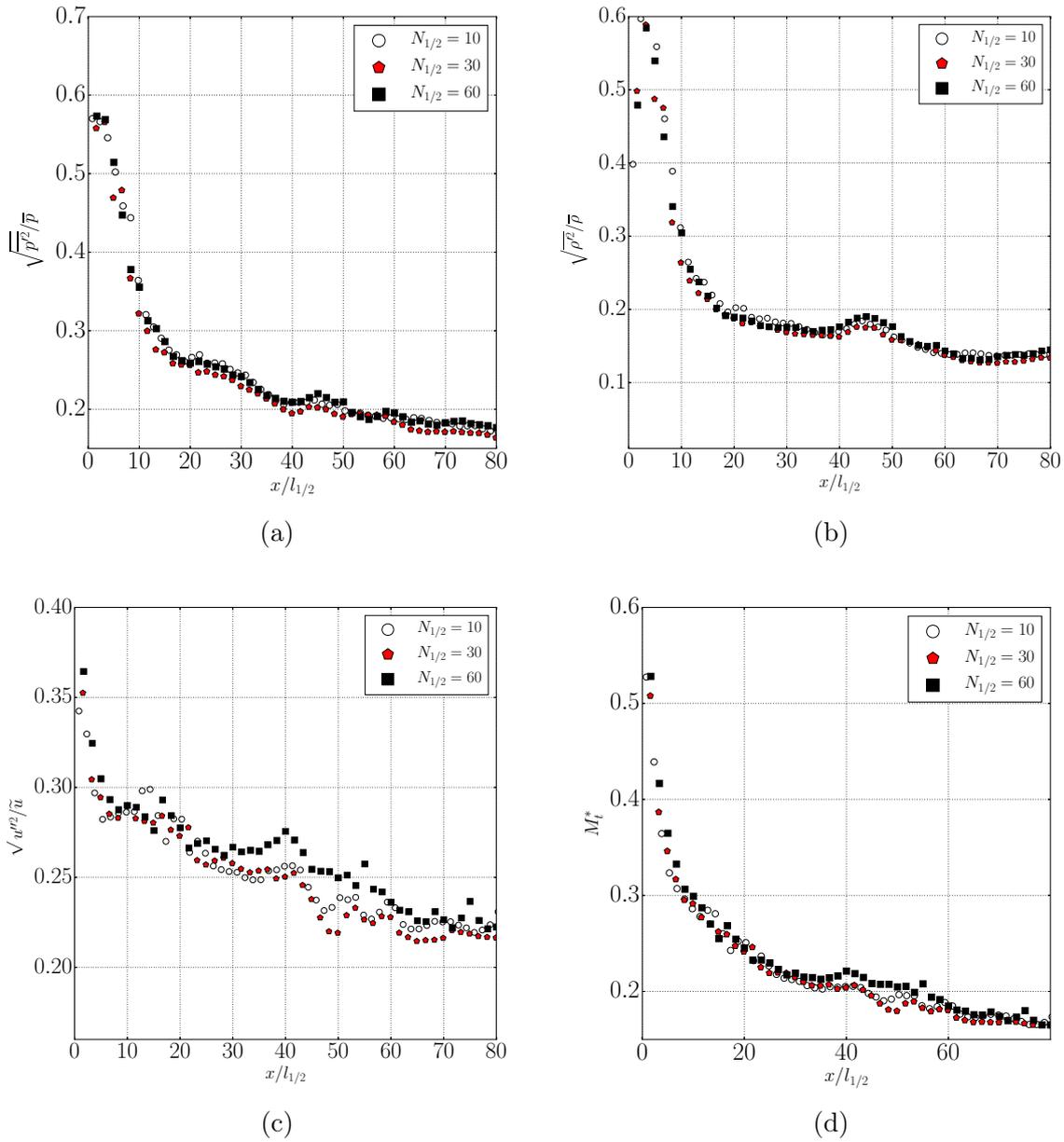


FIGURE 4.23 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour plusieurs résolutions numérique $N_{1/2}$. 1/15, 1/50 et 1/100 des points sont représentés, respectivement.

Détonations confinées par un gaz inerte

Sommaire

5.1	Introduction	119
5.2	Description de la configuration	120
5.3	Topologie générale de la détonation confinée gazeuse	123
5.3.1	Description de la topologie	123
5.3.2	Influence de la sensibilité du mélange réactif	127
5.4	Analyse des profils axiaux moyens	137
5.4.1	Modélisation ZND généralisée (modèle WK)	137
5.4.2	Comparaison avec les profils axiaux moyens	141
5.5	Synthèse des résultats numériques	150
5.5.1	Relation célérité-courbure	150
5.5.2	Hauteur critique de propagation	152
5.6	Mécanismes d'extinction	155
5.6.1	$E_a^* = 20$	155
5.6.2	$E_a^* = 30$	159
5.7	Synthèse partielle	164

5.1 Introduction

Ce chapitre est le premier des deux consacrés aux détonations confinées par un gaz inerte. La littérature spécifique traitant de cette configuration a été introduite dans la Sous-section 2.3.4. Malgré le nombre considérable d'études expérimentales portant sur cette thématique, il est difficile de dresser un bilan d'ensemble du fait des spécificités propres à chacune d'entre elles. Les simulations effectuées dans ce chapitre ont pour objectif de mieux comprendre la phénoménologie particulière aux détonations confinées, et plus globalement des détonations non idéales.

Ce chapitre est organisé comme suit. Tout d'abord, la topologie générale de l'écoulement associé aux détonations confinées gazeuses sera analysée. Nous caractériserons dans un second temps cet écoulement au travers des profils axiaux moyens. Nous ferons ensuite la synthèse des calculs effectués via l'étude de la relation entre la vitesse moyenne du front et sa courbure moyenne, puis par l'intermédiaire des limites de propagation. Enfin, nous clôturerons ce chapitre par une description des mécanismes d'extinction observés.

Les travaux présentés ici ont fait l'objet d'un article publié dans le journal *PHYSICS OF FLUIDS* [166].

5.2 Description de la configuration

Cette section est dédiée à la description des paramètres retenus pour les simulations effectuées dans ce chapitre. Nous nous appliquons à modéliser la situation physique suivante : le milieu est constitué de deux couches de gaz disposées l'une au-dessus de l'autre. La couche inférieure est composée d'un prémélange réactif, tandis que la couche supérieure est chimiquement inerte. Un schéma de cette configuration est représenté sur la Figure 5.1. Consécutivement au passage de l'onde de détonation dans le milieu réactif, les niveaux de pression dans la couche inférieure sont nettement supérieurs à ceux de la couche supérieure. Un faisceau de détentes se développe, centré sur l'interface séparant les deux couches et un choc oblique se propage dans la partie inerte. Cela entraîne une divergence de l'écoulement en aval du front qui devient courbe. La divergence de l'écoulement est alors à l'origine des pertes subies par la détonation. Les deux gaz constituant les deux couches sont à la même température et ont une masse volumique identique. En d'autres termes, cela signifie que seule la capacité du milieu à réagir diffère entre les deux couches. Le ratio des impédances acoustiques entre les deux milieux est $Z = 1$. Cela permet d'observer exclusivement les effets liés aux pertes induites par le confinement, sans subir l'influence d'éventuelles différences initiales de pression et de température entre les deux couches. C'est ce qui distingue les simulations effectuées dans ce chapitre de celles réalisées dans le Chapitre 6, pour lesquelles les couches de gaz sont initialement à des températures différentes. Le Tableau 5.1 présente les paramètres initiaux relatifs aux deux couches de gaz.

Pour rappel, toutes les simulations réalisées dans ce manuscrit sont bidimensionnelles. Ce choix découle des limitations des capacités de calcul et des performances du code. La nécessité de maintenir la résolution numérique au-delà de $N_{1/2} = 10$ ou 30 suivant les cas ne nous permet pas actuellement de réaliser des calculs tridimensionnels des détonations

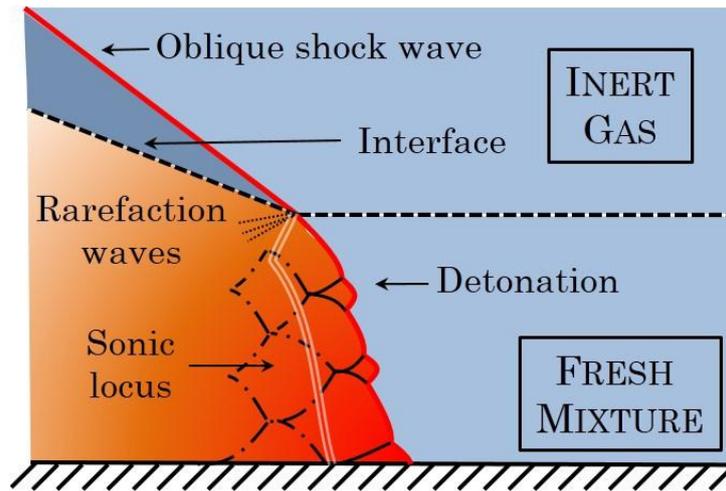


FIGURE 5.1 – Schéma de la configuration étudiée.

TABLE 5.1 – Paramètres relatifs aux conditions initiales dans les deux couches de gaz. Z est le ratio des impédances acoustiques entre les deux couches.

	Réactif	Inerte
p (bar)	1.01325	1.01325
T (K)	295	295
W (g mol ⁻¹)	12	12
Y (-)	1	0
Z (-)	1	1

confinées. C'est un point à garder à l'esprit lors de l'interprétation des résultats numériques et des comparaisons avec la littérature expérimentale.

Les paramètres thermodynamiques employés dans ce chapitre sont identiques à ceux utilisés dans le Chapitre 4. Pour rappel, ces derniers sont issus de la littérature [53, 157] et modélisent un mélange stoechiométrique H_2/O_2 à $p_0 = 1$ atm et $T_0 = 295$ K. La chaleur dégagée par la réaction chimique est $q/rT_0 = 28.83$. Des calculs ont été réalisés pour plusieurs hauteurs de la couche réactive h et pour plusieurs énergies d'activation réduites $E_a^* = E_a/RT_0$: 10, 20, 30 et 38.23. Cette dernière valeur correspond au mélange H_2/O_2 , tandis que les autres énergies d'activation réduites modélisent des mélanges moins sensibles aux fluctuations de la température. Le facteur préexponentiel dépend de l'énergie d'activation réduite et est calibré de façon à conserver la demi-longueur de réaction chimique $l_{1/2} = 90.79$ μm constante.

Les variations de h permettent de faire varier l'amplitude des pertes subies par la détonation, tandis que les variations de E_a^* agissent sur la stabilité du mélange réactif. La résolution numérique employée est $N_{1/2} = 30$, sauf pour le cas $E_a^* = 38.23$ pour lequel $N_{1/2} = 10$. Cette limitation de la résolution numérique pour l'énergie d'activation réduite la plus élevée est due à l'augmentation importante des dimensions du domaine de calcul

TABLE 5.2 – Synthèse des paramètres employés dans ce chapitre. k est le facteur préexponentiel, $N_{1/2}$ le nombre de mailles par demi-longueur de réaction, λ la taille de cellule et $k_{1/2} = \lambda/l_{1/2}$.

	k (s^{-1})	$N_{1/2}$	λ (mm)	$k_{1/2} = \lambda/l_{1/2}$
$E_a^* = 10$	2.015×10^7	30	1.3	14
$E_a^* = 20$	8.121×10^7	30	1.7	19
$E_a^* = 30$	3.356×10^8	30	2.1	23
$E_a^* = 38.23$	1.100×10^9	10	1.9	21

pour ce point de fonctionnement. Cette problématique est traitée ultérieurement au sein de ce chapitre. Les dimensions du domaine de calcul dépendent en effet du point de fonctionnement considéré. Plus la hauteur de la couche de mélange réactive est importante, et plus le domaine de calcul est grand. Le Tableau 5.2 présente une synthèse des paramètres employés dans ce chapitre. Les conditions limites employées sont des conditions d'absorption sur les frontières gauches, supérieures et droites et sont des conditions de symétrie sur la paroi inférieure. Une présentation approfondie des différents types de conditions limites est exposée dans la Sous-section 3.3.5.

Les simulations considérées dans ce chapitre ont été réalisées conjointement dans deux centres de calculs régional et national :

- Le supercalculateur du MÉSOCENTRE DE CALCUL POITEVIN, machine équipée de 2,300 cœurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2680 v2 - 2.80 Ghz pour une puissance de 55 TFlops
- Le supercalculateur OCCIGEN du GENCI-CINES, machine équipée de 85,824 cœurs (50,544 cœurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2690 v3 - 2.80 Ghz et 35,280 cœurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2690 v4 - 2.80 Ghz) pour une puissance totale de 3.5 PFlops.

Entre 400 et 480 processeurs ont été utilisés sur des durées variables suivant le point de fonctionnement considéré.

À l'instant initial, une partie du domaine de calcul est placée à l'état von Neumann. Ce dépôt d'énergie est effectué de manière homogène sur une largeur de 4 mm, soit environ deux fois la taille de cellule λ , et aussi haut que la hauteur de la couche réactive h . Ces dimensions ont été obtenues de manière empirique. Conséquemment à cet état initial, une surdétonation se forme puis s'amortit progressivement pour atteindre un état quasi stationnaire lorsque la propagation est un succès, ou s'éteint lorsqu'elle échoue.

5.3 Topologie générale de la détonation confinée gazeuse

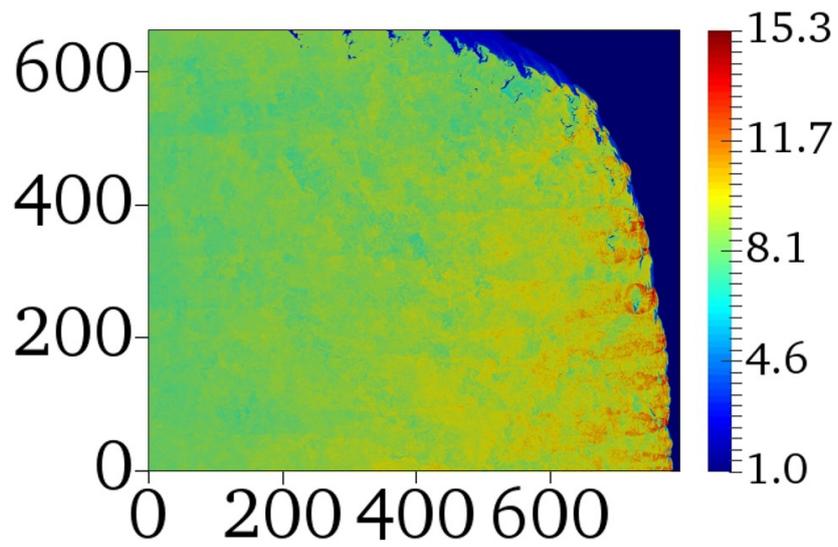
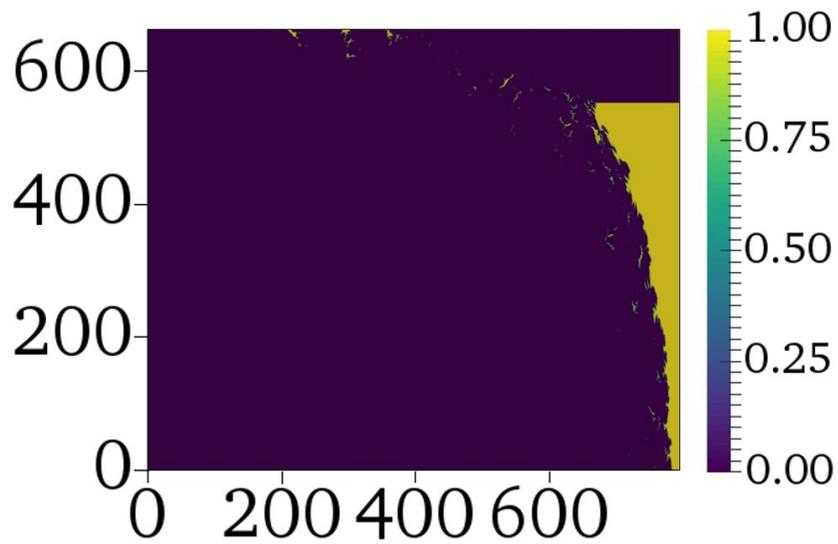
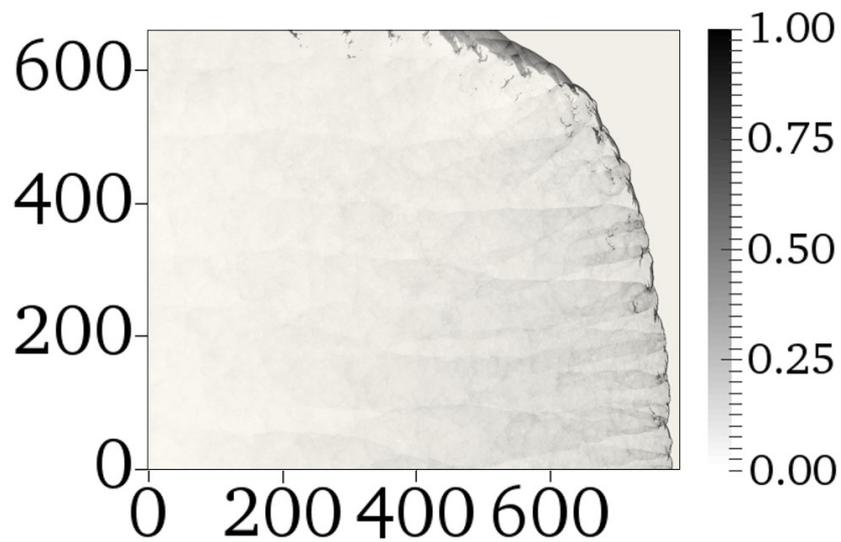
5.3.1 Description de la topologie

Nous allons ici nous intéresser à la topologie générale de la détonation confinée par un gaz inerte. Dans cette section, la détonation se propage dans une couche de mélange réactive de hauteur $h = 50 \text{ mm} = 550 l_{1/2} \approx 26 \lambda$. Dans ce cas, le nombre de mailles est de 16,957,440 et le nombre d'heures CPU nécessaires est d'environ 40,000. Le milieu modélisé est un mélange stœchiométrique d'hydrogène et d'oxygène, correspondant à une énergie d'activation réduite $E_a^* = 38.23$. Les dimensions du domaine de calcul sont de $65 \text{ mm} \times 60 \text{ mm}$. La distance totale de propagation est d'environ $8,000 l_{1/2} \approx 400 \lambda$ et la détonation se propage de la gauche vers la droite dans les figures représentant l'écoulement.

La Figure 5.2 présente différents champs obtenus une fois l'état quasi stationnaire atteint. La Figure 5.2 (a) correspond au champ de température, normalisé par la température initiale T_0 . Les distances sont exprimées en fonction de la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Le front de détonation, situé à l'extrémité droite du domaine de calcul, sépare les gaz frais, en bleu, des gaz brûlés. Les produits de détonation se détendent vers l'aval du front, mais également en direction du confinement compressible. Cette expansion du tube de courant au sein duquel sont entraînés les gaz brûlés crée un faisceau de détentes centré sur l'interface séparant les milieux inertes et réactifs. L'interaction entre ce faisceau de détentes et la zone de réaction est responsable de la courbure du front de détonation. Sur le champ de température, il n'est pas possible de distinguer directement l'interface entre les deux couches, ces dernières étant à la même température. Sa position peut néanmoins être déduite de l'emplacement auquel l'onde de détonation évolue en une onde de choc oblique. Cette dernière se propage dans le milieu inerte. Contrairement aux visualisations du Chapitre 4 dans lesquelles les détonations sont marginales et ne comportent qu'un petit nombre de cellules, ici la détonation est largement multicellulaire. Un nombre important d'ondes transverses, identifiables car concomitantes à des zones de haute température, se propagent en aval du front de détonation. On note que la décroissance axiale de la température est plus rapide que dans les configurations idéales du Chapitre 4. L'interface adopte une forme dentelée consécutivement au passage des points triples dans la couche inerte. Le champ de fraction massique de gaz frais est exposé sur la Figure 5.2 (b). Le milieu réactif est représenté en jaune. L'interface entre la couche réactive et la couche inerte est, cette fois, visible. Des poches de gaz frais sont présentes en aval de l'écoulement. Certaines résultent de la nature intrinsèquement instable des détonations pour les para-

mètres thermodynamiques choisis, et sont également présentes dans la configuration idéale. Ces poches sont issues des collisions entre les points triples se produisant périodiquement le long du front et sont situées dans la partie du domaine de calcul correspondant à la couche réactive, jusqu'à $550 l_{1/2}$. Les autres poches de gaz frais sont situées dans la partie supérieure, pour $y > 550 l_{1/2}$. Elles sont produites lors du passage des points triples de la couche réactive vers la couche inerte, arrachant une partie des gaz frais au passage. Elles sont ensuite convectées vers la partie supérieure du domaine suite à l'expansion des produits de détonation. Les variations de la masse volumique sont soulignées au moyen de la striescopie numérique présentée sur la Figure 5.2 (c). L'ensemble des éléments caractéristiques de la détonation dans cette configuration sont visibles : le front de détonation courbe, qui se prolonge en un choc oblique dans la partie inerte et l'interface séparant les produits de détonation des gaz inertes. À la différence de la propagation en canal, les gaz brûlés adoptent préférentiellement un mouvement dirigé vers la couche inerte (cf. Figure 5.2 (f)), du fait de l'expansion vers le confinement compressible. C'est cette propriété qui permet l'obtention d'une poussée continue dans les moteurs à détonation rotative.

La structure cellulaire associée à cette configuration est représentée sur la Figure 5.3. La ligne rouge marque la position de l'interface entre les deux couches de gaz. Ainsi, deux zones peuvent être distinguées : la bande inférieure, correspondant au milieu réactif, et la bande supérieure associée au milieu inerte. Le nombre important de cellules confirme le caractère multicellulaire de la détonation. La régularité des cellules varie suivant la position transversale : près de la paroi inférieure, elles sont plus petites et plus régulières que près de l'interface entre les deux milieux. Leur orientation varie également : l'axe longitudinal des cellules est dévié vers le haut à la périphérie de la couche réactive, conséquence de la courbure du front. Lors de la transition entre la détonation et l'onde de choc oblique, la trajectoire des points triples devient quasi verticale puis s'estompe. Il n'y a pas de réflexion lors du passage entre les deux milieux. C'est une différence importante avec des dispositifs expérimentaux tels que les tubes aux parois poreuses, pour lesquels cette réflexion, bien qu'amortie, reste présente. La disparition des traces sur la Figure 5.3 correspond à l'interface entre le milieu ayant réagi via la détonation, et le milieu dans lequel le choc et la zone de réaction sont découplés. Cette interface ne correspond pas nécessairement à la séparation existant entre les couches inertes et réactives, symbolisée en rouge. C'est le cas pour les deux extrémités de la Figure 5.3, où la structure cellulaire s'interrompt en deçà de l'interface séparant les deux couches. Ce phénomène est reporté dans les travaux de Borisov et al. [112], unique étude expérimentale présentant la structure cellulaire des détonations confinées par un gaz inerte. Il est noté que les cellules de détonations disparaissent périodiquement à la périphérie de la colonne de gaz réactif suivant un mode de propagation "galopant", c'est-à-dire caractérisé par une

(a) T/T_0 (b) Y (c) S

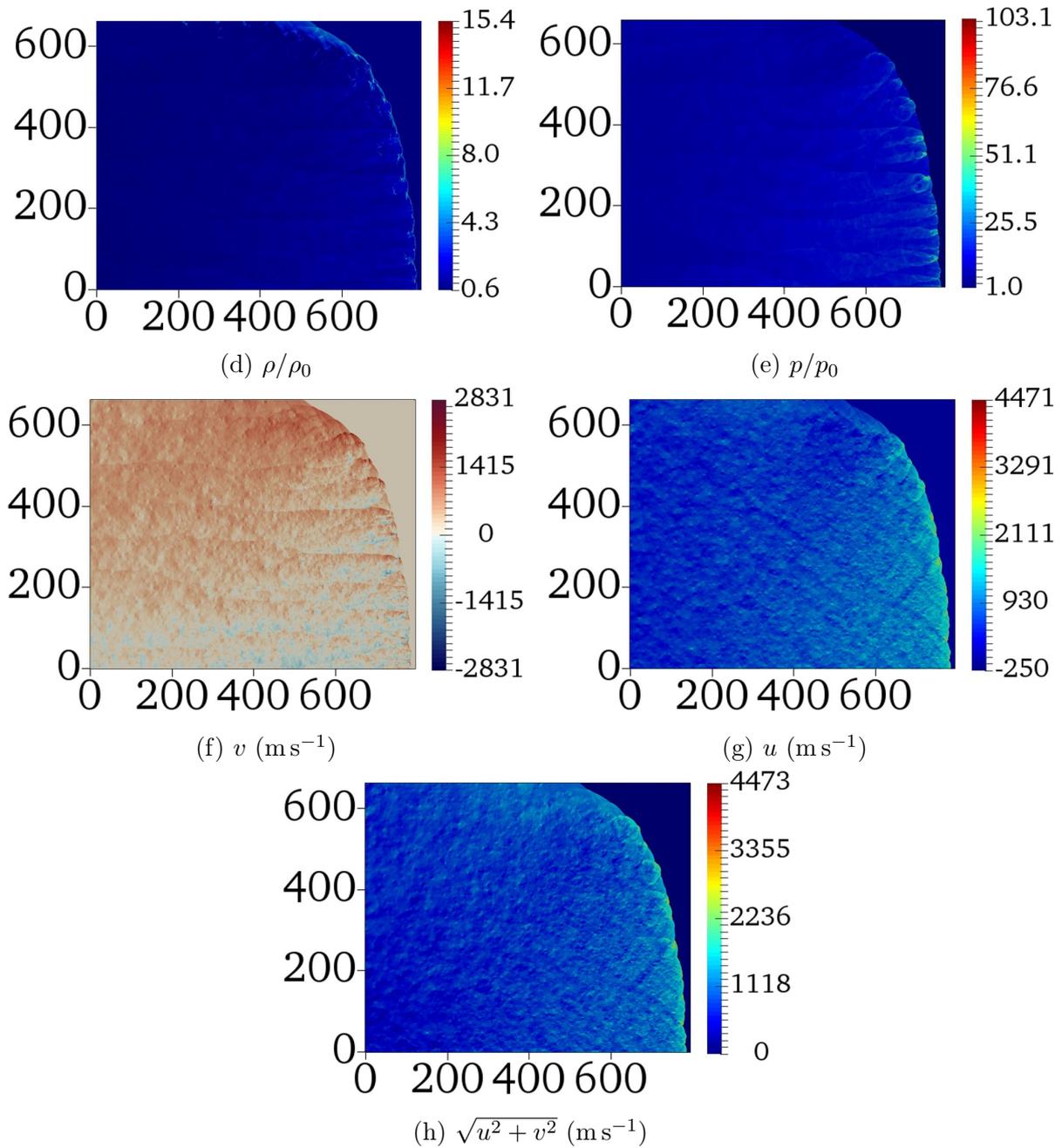


FIGURE 5.2 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz fais, (c) strioscopie numérique, (d) densité, (e) pression, (f) composante verticale de la vitesse, (g) composante horizontale de la vitesse et (h) vitesse (norme). Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.

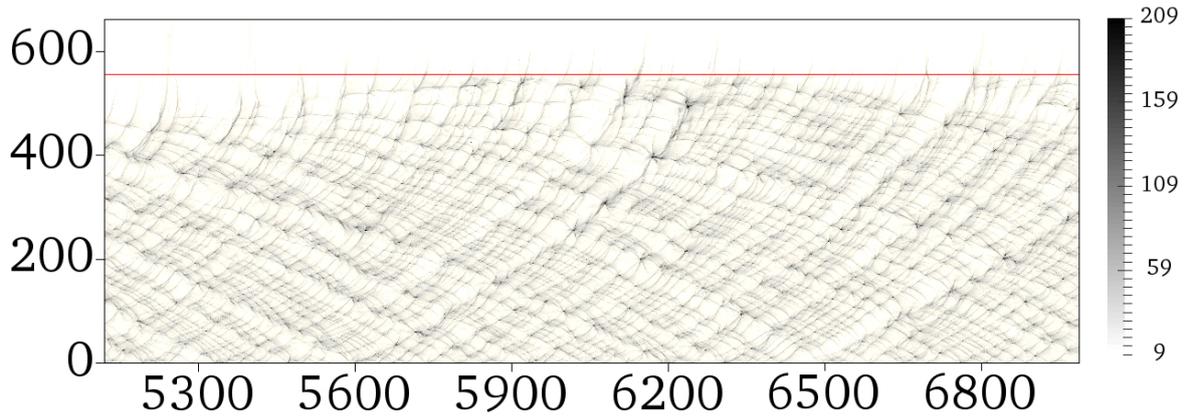


FIGURE 5.3 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$. La ligne rouge représente l'interface entre la couche réactive et inerte.

fréquence faible, correspondant à plusieurs dizaines de centimètres.

L'écoulement au cours d'un épisode de cette nature est exposé sur les Figures 5.4 (a) et (b), révélant le champ de température T/T_0 et de fraction massique des gaz frais Y , respectivement. L'interface entre les couches inerte et réactive peut être observée à $h = 550 l_{1/2}$ sur la Figure 5.4 (b). En revanche, le champ de température montre que le front de détonation n'existe que jusqu'à une hauteur d'environ $375 l_{1/2}$, immédiatement suivi par la formation du choc oblique. En conséquence, une bande de gaz réactif située à la périphérie de la couche n'est pas consommée via l'onde de détonation. Elle est déportée dans la partie supérieure du domaine à cause de l'expansion des produits de détonation jusqu'à son expulsion. L'extinction locale de la détonation près de l'interface entre les deux milieux est causée par la courbure importante du front.

5.3.2 Influence de la sensibilité du mélange réactif

Dans cette sous-section, nous allons étudier l'influence de l'énergie d'activation sur la structure globale de l'écoulement. Les simulations ont été effectuées pour des valeurs moins importantes de l'énergie d'activation réduite ($E_a^* = 30$, $E_a^* = 20$ et $E_a^* = 10$). Seuls les résultats correspondant à $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 20$ sont exposés ici.

Les calculs réalisés dans le Chapitre 4 ont démontré que pour des énergies d'activation réduites de 30 et de 38.23, la détonation se comporte de façon similaire. Néanmoins, dans le cas des détonations confinées par un gaz inerte, les calculs pour $E_a^* = 30$ sont réalisés avec une résolution numérique $N_{1/2} = 30$ contrairement à la première partie de cette section,

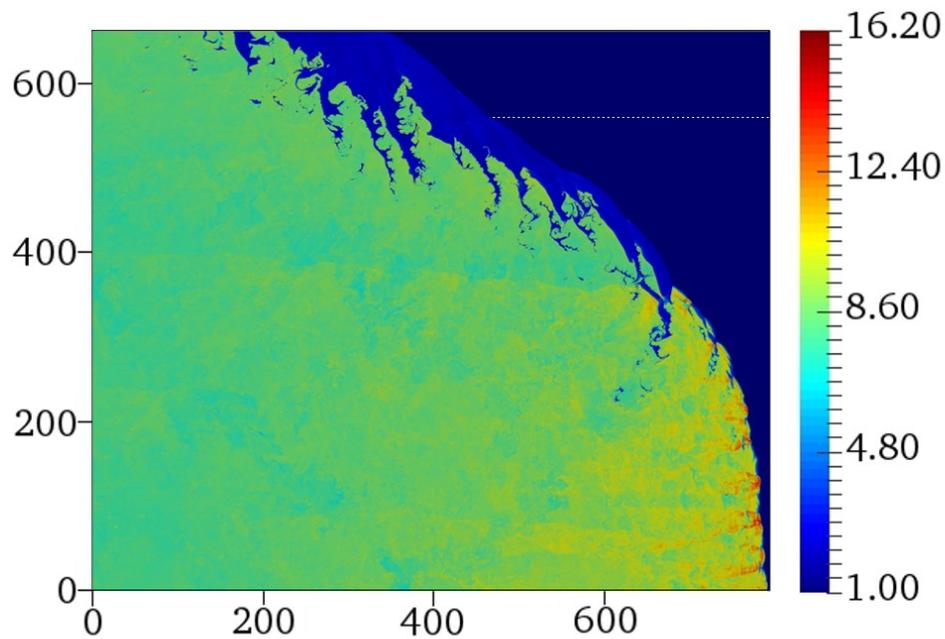
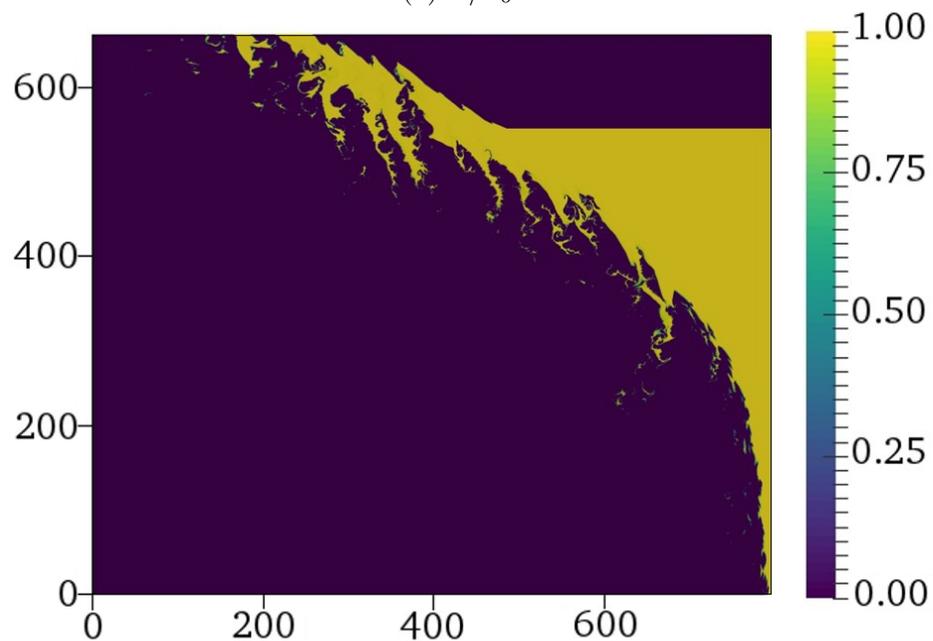
(a) T/T_0 (b) Y

FIGURE 5.4 – Champs de température T/T_0 (a) et de fraction massique des gaz frais Y (b) lorsqu'un découplage local se produit à la périphérie de la couche réactive. L'interface entre les deux couches est représentée par la ligne en pointillés blancs sur le champ de température. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

dans laquelle $N_{1/2} = 10$. Ces résultats vont permettre, en partie, d'observer l'influence de la résolution numérique sur les résultats spécifiques à cette configuration.

La Figure 5.5 présente différents champs représentatifs de l'écoulement obtenu pour $E_a^* = 30$. Dans ce cas, la hauteur de la couche réactive est $h = 16 \text{ mm} = 176 l_{1/2} \approx 7.5 \lambda$. Les dimensions du domaine de calcul sont $35 \text{ mm} \times 22 \text{ mm}$. Dans ce cas, le nombre de mailles est de 37,273,600 et le nombre d'heures CPU d'environ 50,000. La topologie générale de l'écoulement n'est pas modifiée ni par le changement de l'énergie d'activation réduite, ni par l'accroissement du nombre de mailles par demi-longueur de réaction. La structure est semblable à celle observée sur la Figure 5.2 : le front de détonation est globalement courbe et irrégulier. Cette irrégularité se traduit par une variabilité locale importante de la courbure. C'est ce que l'on peut observer dans la partie inférieure du front, entre $y = 0$ et $y = 50$. À cet endroit, la vitesse de la détonation est d'amplitude bien moins forte que sur le reste du front, entraînant un accroissement de la taille des structures telles que les poches de gaz frais. Des variations importantes de la courbure locale du front se manifestent au travers de points de rebroussement. Les poches de gaz frais résultant du passage des points triples dans la couche inerte sont moins nombreuses que ce qui a été observé pour $E_a^* = 38.23$.

La structure cellulaire, révélée sur la Figure 5.6, présente également de nombreuses similarités avec les résultats relatifs à $E_a^* = 38.23$. L'interface effective marquant la disparition de la structure cellulaire oscille et ne correspond pas systématiquement à l'interface réelle entre les couches réactive et inerte, tracée en rouge. Ainsi, à $4,800 l_{1/2}$, seulement deux cellules soutiennent la détonation tandis que de nouvelles apparaissent par la suite. Dans notre configuration, la propagation de la détonation est concomitante avec la présence d'une structure multicellulaire. Cela suggère que les ondes transverses pourraient jouer un rôle favorable et soutenir la propagation d'une part en contrebalançant l'augmentation de la taille des cellules liée aux pertes, et d'autre part en compensant l'extinction locale se produisant à la périphérie de la couche réactive.

La détonation présente, pour des énergies d'activation réduites faibles telles que $E_a^* = 20$, un comportement régulier qui contraste avec les observations réalisées pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$ (cf. Chapitre 4). Les instabilités, qui se traduisent également ici par le développement d'ondes transverses, sont périodiques et régulières. Pour cette simulation, destinée à analyser la topologie des détonations confinées se propageant dans les mélanges réguliers, la couche de mélange réactive est d'une hauteur $h = 8 \text{ mm} = 88 l_{1/2} \approx 5 \lambda$. Les dimensions du domaine de calcul sont $20 \text{ mm} \times 15 \text{ mm}$. Dans ce cas, le nombre de mailles est de 14.384.200 et le nombre d'heures CPU d'environ 20,000. Les différents champs sont reportés sur la Figure 5.7. Comparativement aux résultats obtenus pour des énergies

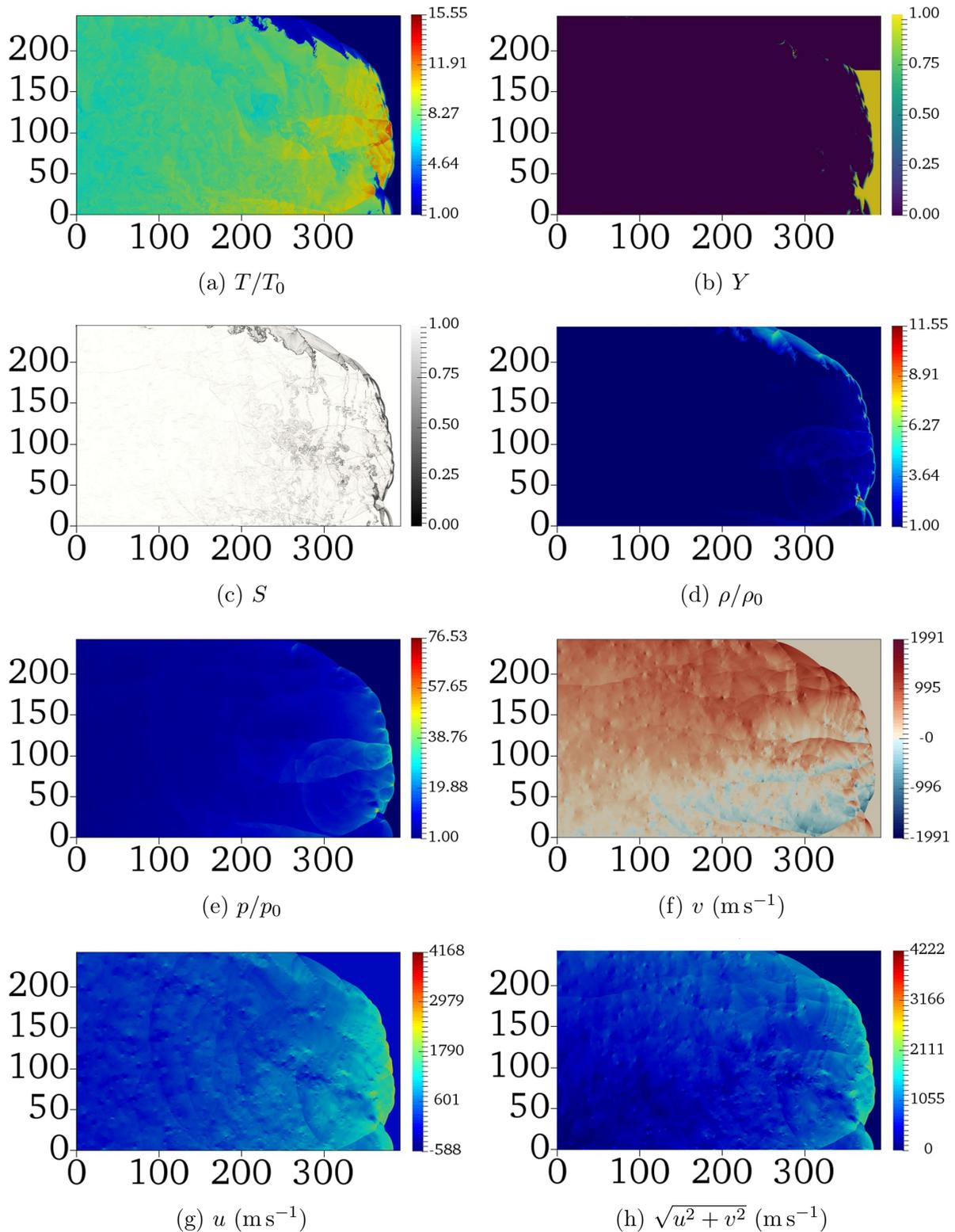


FIGURE 5.5 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz froids, (c) strioscopie numérique de la densité, (d) densité, (e) pression, (f) composante verticale de la vitesse, (g) composante horizontale de la vitesse et (h) vitesse (norme). Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 30$ et $h = 16 \text{ mm} \approx 7.5 \lambda$.

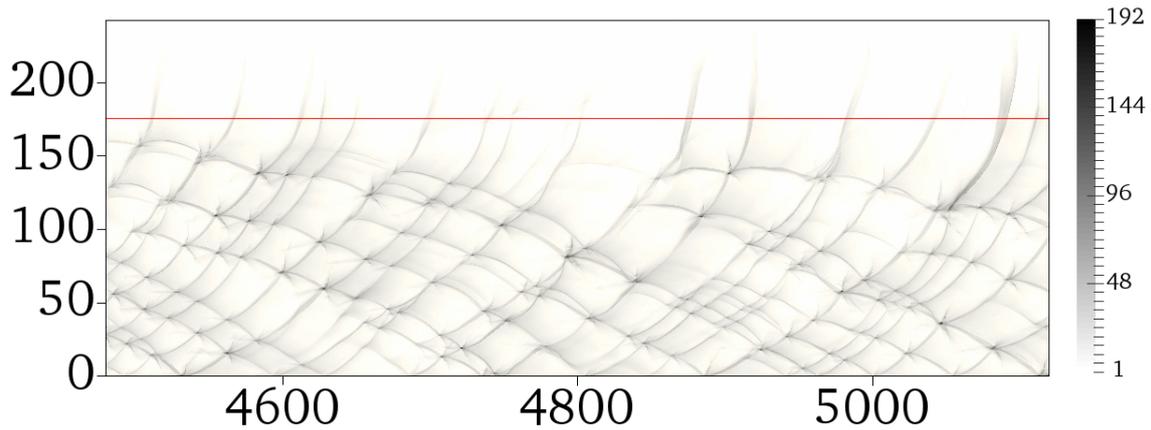


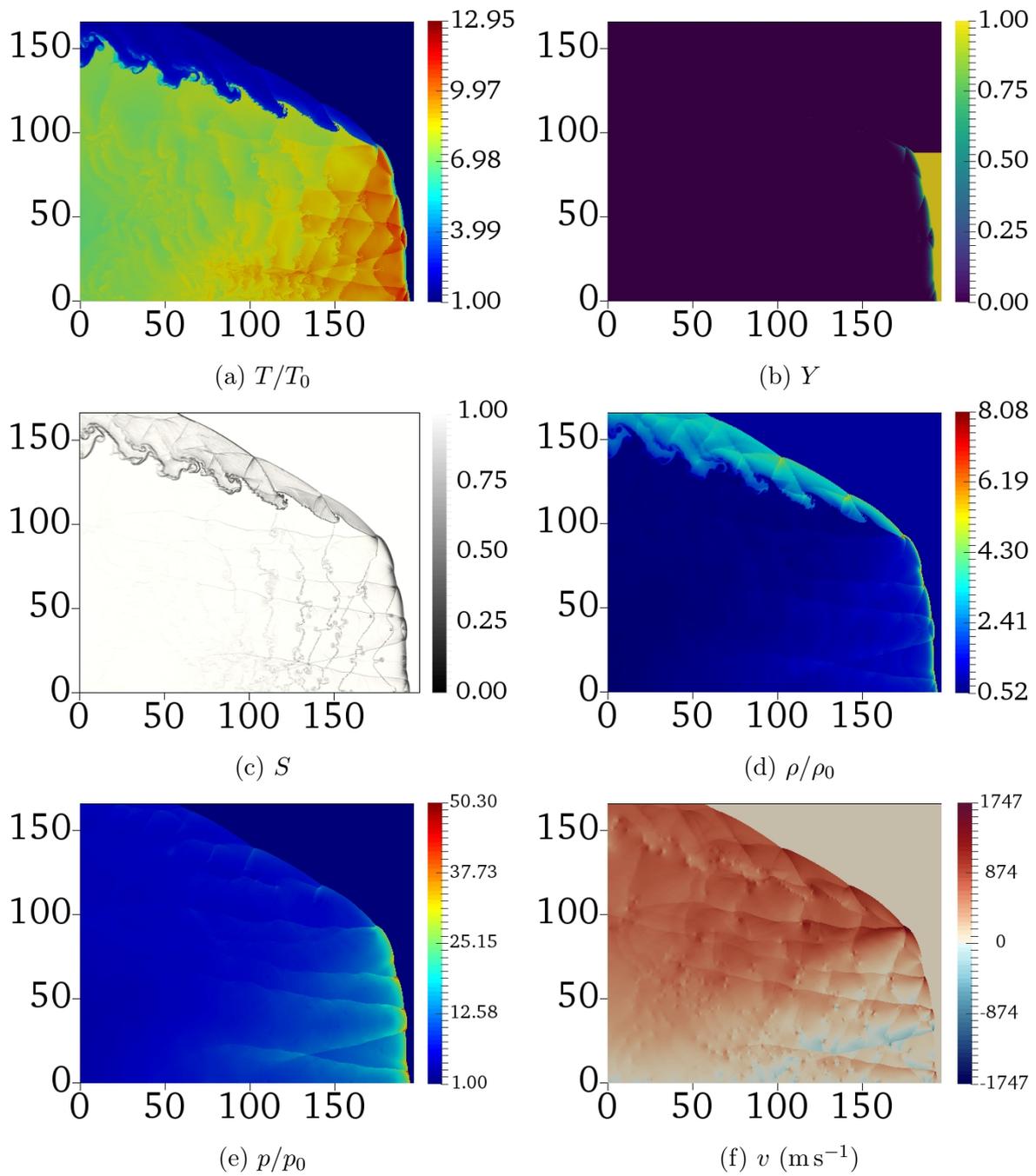
FIGURE 5.6 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 30$ et $h = 16$ mm.

d'activation réduites plus importantes, l'écoulement est très régulier. En particulier près du front de détonation, le milieu est très homogène et est seulement perturbé en aval par le mouvement périodique des ondes transverses. Cela se vérifie également sur le champ de fraction massique des gaz frais. On note alors l'absence de poches de gaz frais en aval du front.

La Figure 5.8 révèle la structure cellulaire associée à l'écoulement de la Figure 5.7. Elle conforte les deux points suivants : d'une part, les pertes introduites par le confinement inerte résultent en une diminution de la régularité de la structure cellulaire. Les cellules présentent une variabilité importante dans leur dimension, contrairement à ce qui a été observé dans le cas de la propagation en canal. Toutefois, leur degré de régularité est plus important que celui des résultats obtenus pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$. Ici, l'interface entre les deux couches correspond à celle marquant la disparition de la structure cellulaire, cette dernière ne présentant pas d'oscillations semblables à ce qui fut observé pour les énergies d'activation réduites plus importantes.

Les résultats exposés dans la première partie de ce chapitre ont permis, d'une façon qualitative, de découvrir la topologie de l'écoulement et de souligner les différences induites par la sensibilité du milieu réactif. Les figures exposées dans la dernière partie de cette section ont pour but de prolonger la comparaison des calculs réalisés pour les différentes énergies d'activation réduites.

La Figure 5.9 propose la visualisation en vis-à-vis des profils de vitesse instantanés obtenus dans le cas d'une configuration en canal ou d'un confinement par un gaz inerte, pour les trois valeurs de E_a^* . Elle illustre ainsi les effets induits par la présence du confinement, ou plus largement par les pertes dans la zone de réaction, sur la vitesse de propagation. Les



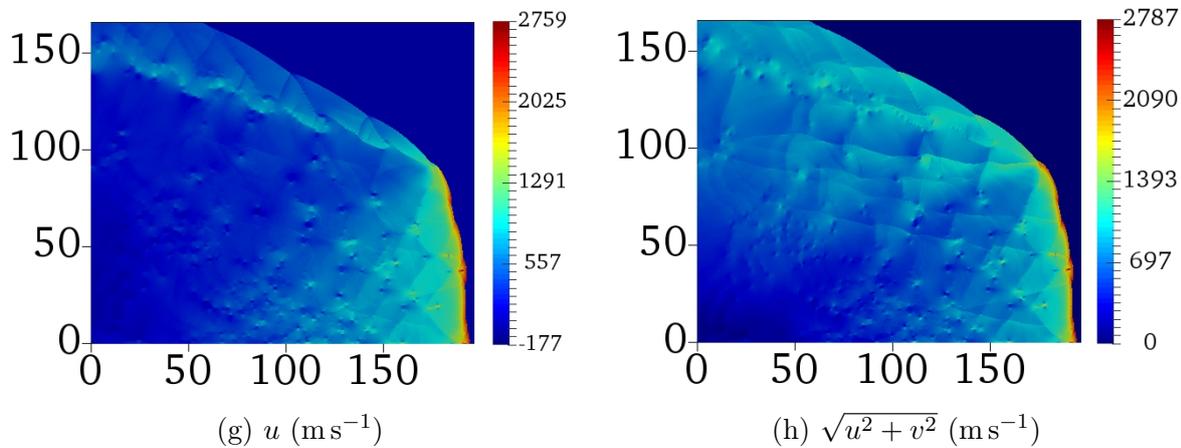


FIGURE 5.7 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz froids, (c) strioscopie numérique de la densité, (d) densité, (e) pression, (f) composante verticale de la vitesse, (g) composante horizontale de la vitesse et (h) vitesse (norme). Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.

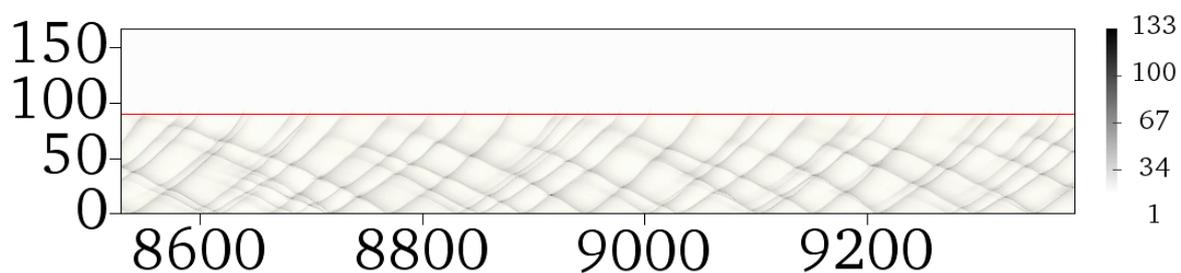


FIGURE 5.8 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.

profils à gauche concernent les données récoltées durant la propagation d'une détonation marginale et sont identiques à celles exposées dans le Chapitre 4. À droite, les profils sont issus des simulations présentées auparavant dans ce chapitre. Les résultats associés au cas le plus régulier ($E_a^*=20$) sont présentés sur les Figures 5.9 (a) et (b). En l'absence de perte, la vitesse évolue périodiquement, traduisant la stabilité du milieu réactif. La présence du confinement altère la répétabilité des oscillations de la vitesse. Ce résultat est difficilement observable sur les Figures 5.9 (c) et (d), ainsi que (e) et (f), l'évolution de la célérité étant déjà chaotique lors de la propagation en canal pour les deux valeurs les plus importantes de E_a^* . Les trois profils relatifs aux détonations confinées par un gaz inerte se démarquent cependant par l'augmentation de la distance entre les extrema successifs, qui sont également d'amplitude plus importante. Cela traduit l'augmentation de la taille des cellules résultant des pertes introduites par le confinement gazeux, tel que cela a également été observé sur la structure cellulaire de la détonation.

Un moyen d'analyser les profils de la Figure 5.9 consiste à calculer la fréquence d'apparition des vitesses D/D_{CJ} . La Figure 5.10 présente les histogrammes obtenus pour chacune des énergies d'activation réduites dans les cas idéal et non idéal. La largeur de l'intervalle retenu pour collecter les données de vitesse est de $0.05 \times D/D_{CJ}$. Dans le cas des faibles énergies d'activation (voir Figures 5.10 (a) et (b)), les répartitions sont sensiblement différentes. Pour la propagation en canal, la population maximale correspond à $0.9 D/D_{CJ}$, puis décroît de façon continue jusqu'à $1.45 D/D_{CJ}$. La population pour des vitesses inférieures à $0.9 D/D_{CJ}$ est nulle. Dans le cas de la configuration non idéale, la population maximale est toujours située à $0.9 D/D_{CJ}$, mais la répartition s'étend cette fois de part et d'autre, de $0.75 D/D_{CJ}$ à plus de $1.5 D/D_{CJ}$. Pour des vitesses supérieures à $0.9 D/D_{CJ}$, les répartitions pour les deux configurations sont similaires. Le décalage de la population maximale à une valeur inférieure à D_{CJ} traduit une présence plus longue dans l'état de sous-détonation que dans celui de surdétonation, conformément à ce qui a été observé dans la littérature [30, 165]. Les différences de formes des histogrammes sont liées au passage d'un comportement parfaitement régulier à un comportement légèrement irrégulier. Pour les énergies d'activation plus importantes, les différences entre les cas idéaux et non idéaux sont moins flagrantes. Les populations maximales sont toujours situées en deçà de D_{CJ} . La forme des profils acquiert cependant davantage de symétrie de part et d'autre de cet extremum. Les pertes se traduisent par un léger décalage d'une partie du profil vers les vitesses plus faibles. Cela est d'autant plus marqué sur les populations correspondant à des vitesses faibles.

La traduction des variations de la vitesse sur la structure du front de détonation est exposée sur la Figure 5.11 pour les différents cas étudiés dans ce chapitre. Elle présente

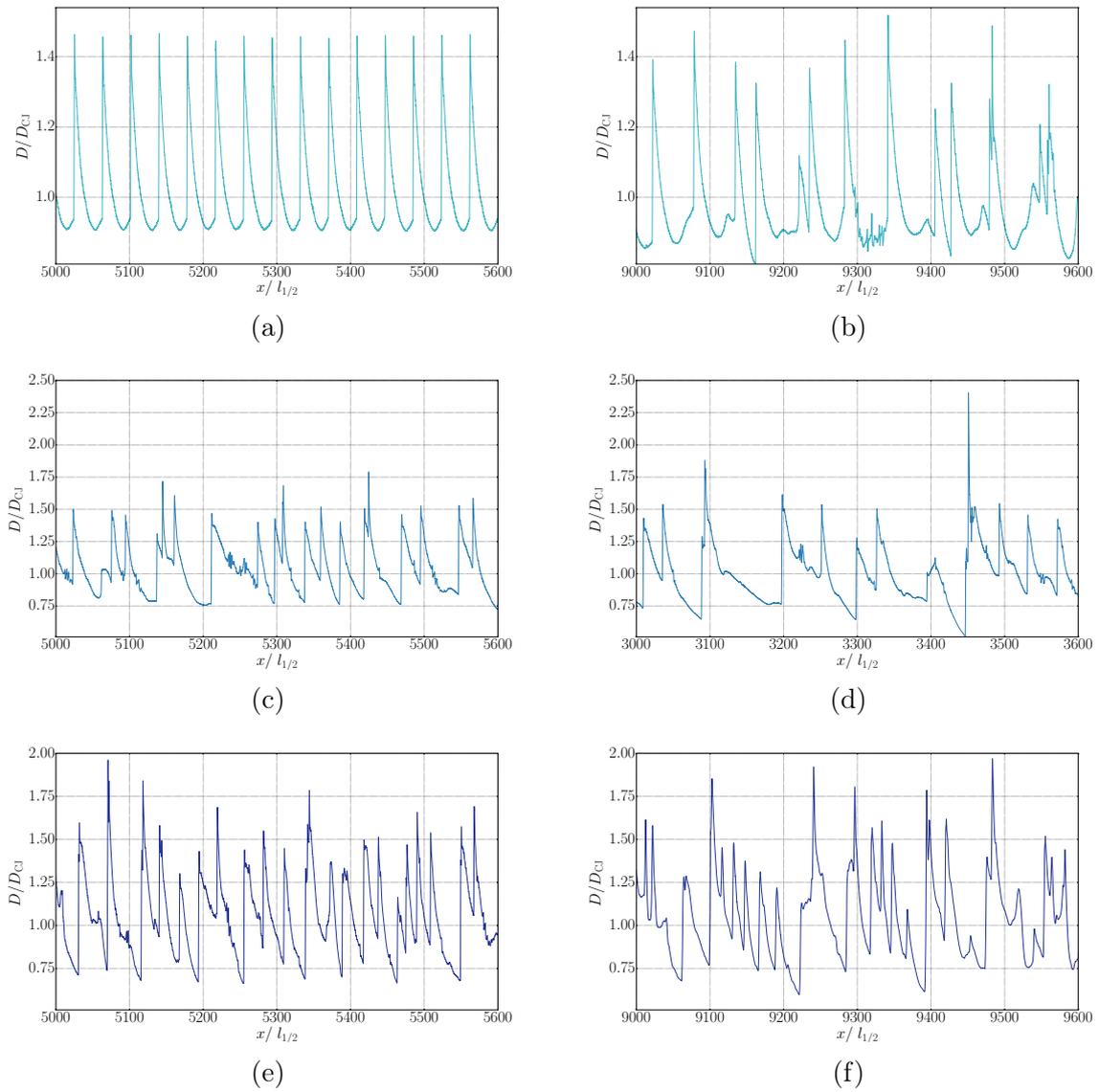


FIGURE 5.9 – Comparaison des profils de vitesse pour les différentes énergies d’activation réduites entre les cas idéaux à gauche (propagation en canal) et non-idéaux à droite (confinement par un gaz inerte). (a) et (b) : $E_a^* = 20$. (c) et (d) : $E_a^* = 30$. (e) et (f) : $E_a^* = 38.23$.

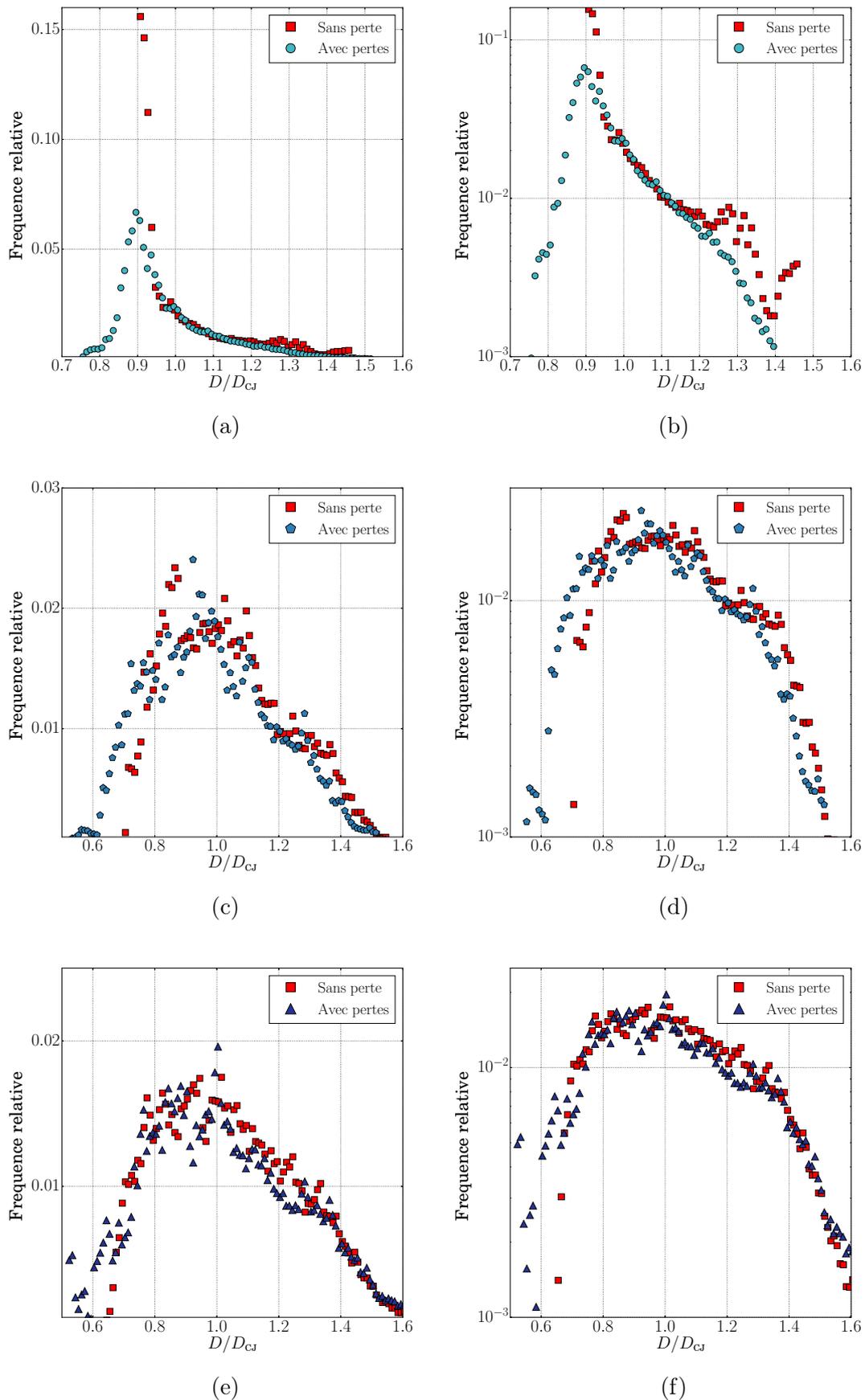


FIGURE 5.10 – Histogrammes de la vitesse de la détonation pour les différentes énergies d’activation réduites dans les cas idéaux (propagation en canal) et non-idéaux (confinement par un gaz inerte). (a) & (b) : $E_a^* = 20$, (c) & (d) : $E_a^* = 30$ et (e) & (f) : $E_a^* = 38.23$. Les Figures de droite sont représentées en échelle logarithmique.

la superposition de profils instantanés extraits au cours des simulations afin de constituer un locus des positions possibles du front de détonation. La position moyenne du front de détonation est tracée en traits pointillés blancs et l'écart type de part et d'autre de la position moyenne est représenté par les lignes noires continues. Pour $E_a^* = 20$, illustré par la Figure 5.11 (a), le locus est particulièrement étroit, moins de $5 l_{1/2}$, avec un écart type de l'ordre de $l_{1/2}$. Cela caractérise la faible variabilité du front, et surtout l'homogénéité de ses variations. Pour les valeurs plus élevées de l'énergie d'activation réduite (voir Figures 5.11 (b) et (c)), le locus adopte une forme plus évasée, avec un écart type supérieur à $5 l_{1/2}$. Les profils instantanés qui sont largement en dehors du locus moyen sont dus à des événements de forte amplitude, qu'il s'agisse d'explosions suite à la collision des ondes transverses avec la paroi ou d'un découplage important entre le choc et la zone de réaction. Cela traduit également les extinctions partielles à la périphérie de la couche réactive observées pour ces paramètres thermodynamiques et cinétiques.

5.4 Analyse des profils axiaux moyens

Nous allons évaluer, dans cette section, l'évolution moyenne de l'écoulement le long de l'axe $y = 0$. Cette approche a été préférée au calcul des champs moyens dans la totalité du domaine de calcul pour plusieurs raisons. Un des objectifs sous-jacents à la caractérisation des détonations non idéales est potentiellement d'aider à la constitution d'un modèle monodimensionnel incorporant les effets dus aux instabilités non linéaires. La réduction de la problématique, initialement 2D, à une analyse 1D, sert cet objectif. D'autre part, la limitation des calculs de moyennes à l'axe est bénéfique du point de vue des temps de calcul. La procédure de moyenne a été présentée dans la Sous-section 3.3.8, et a été utilisée de façon similaire dans le Chapitre 4 dédié à la simulation des détonations marginales. Les profils obtenus vont être comparés aux résultats issus d'une modélisation stationnaire incorporant un terme représentatif de la courbure du front de détonation. La première partie de cette section est consacrée à la description du modèle stationnaire. La seconde partie présente les résultats obtenus à la fois pour la modélisation ZND généralisée et les simulations bidimensionnelles.

5.4.1 Modélisation ZND généralisée (modèle WK)

L'approche décrite dans cette section reprend celle développée par Higgins [167]. Le modèle repose sur la théorie de Wood et Kirkwood [124] et sera en conséquence désigné

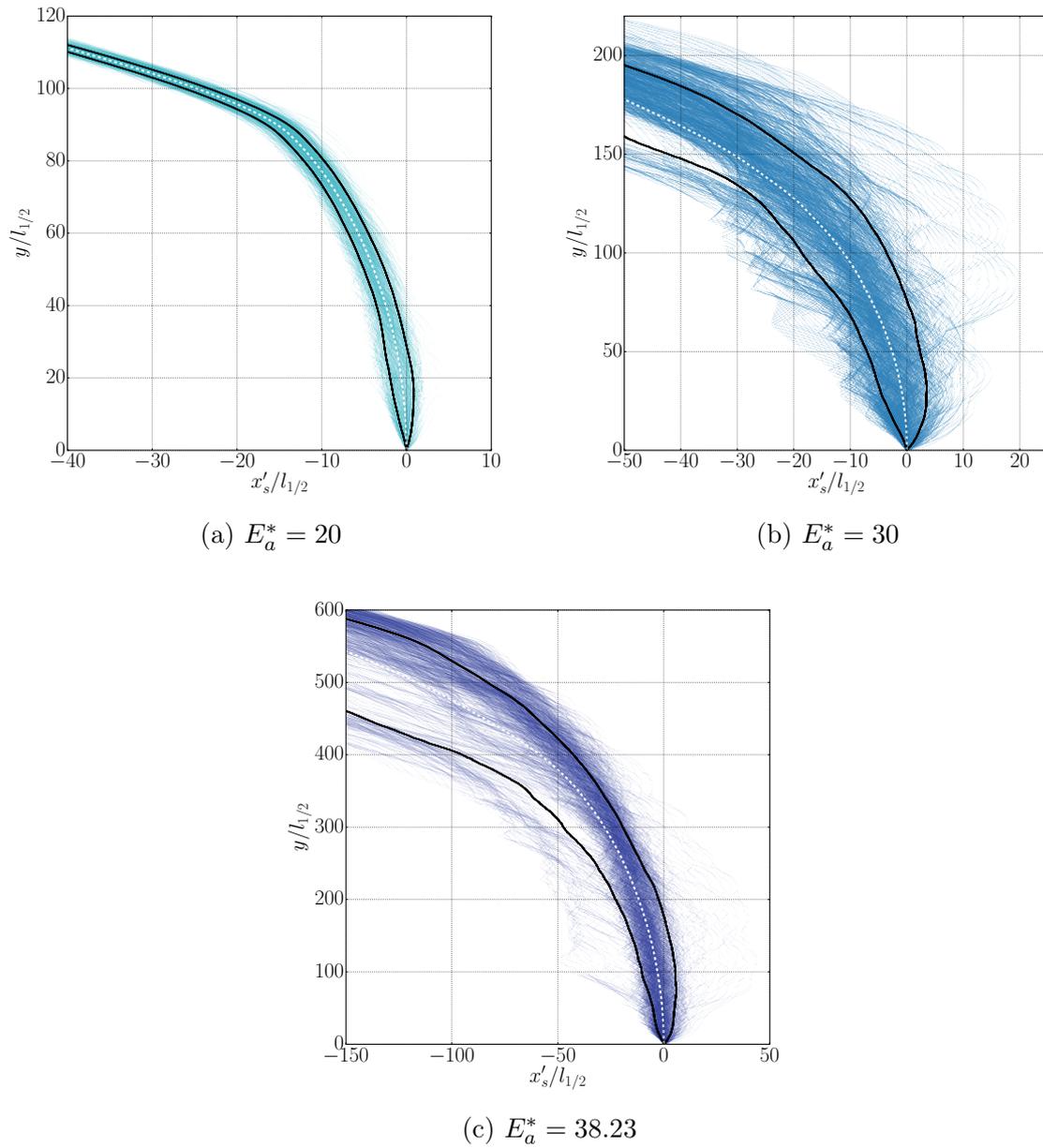


FIGURE 5.11 – Structure instantanée (bleu), moyenne (blanc) et écart-type (noir) du front de détonation pour les différentes valeurs d'énergies d'activation réduites. (a) : $E_a^* = 20$, (b) : $E_a^* = 30$ et (c) : $E_a^* = 38.23$.

par les initiales WK. L'écoulement est considéré comme stationnaire. Les équations de conservation sont réécrites sous leur forme conservative en tenant compte cette fois des éventuelles variations de section via la variable A

$$d(\rho u A) = 0 \quad (5.1)$$

$$d(p + \rho u^2) = -\rho u^2 \frac{dA}{A} \quad (5.2)$$

$$d\left(h + \frac{1}{2}u^2\right) = 0 \quad (5.3)$$

soit, sous la forme différentielle

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{du}{u} + \frac{dA}{A} = 0 \quad (5.4)$$

$$dp + \rho u du = 0 \quad (5.5)$$

$$C_p dT + q dY + u du = 0 \quad (5.6)$$

et finalement

$$\frac{du}{u} = \frac{q/(C_p T) dY - dA/A}{1 - M^2} \quad (5.7)$$

Ainsi, les variations de la vitesse au sein de la zone de réaction ne sont plus seulement liées à la variable de progrès dY , mais aussi aux variations de section du tube de courant de l'écoulement. Afin de prévenir la singularité au point sonique, le numérateur doit s'annuler, traduisant un équilibre entre la réaction chimique et les variations de section. En conséquence, le plan sonique ne correspond plus à la complétion de la réaction chimique.

Pour calculer l'évolution des différentes variables dans la zone de réaction, il est nécessaire de connaître l'expression du terme dA/A . Considérons un écoulement bidimensionnel dans le plan (x, y) . Sur la ligne $y = 0$, l'équation de continuité s'écrit $\text{div}(\rho \vec{V}) = 0$, soit en coordonnées rectangulaires :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (5.8)$$

La condition de symétrie impose une vitesse v nulle en $y = 0$, d'où

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \rho \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (5.9)$$

En identifiant les Eqs. 5.4 et 5.9, la dérivée de la vitesse transversale peut être reliée à la

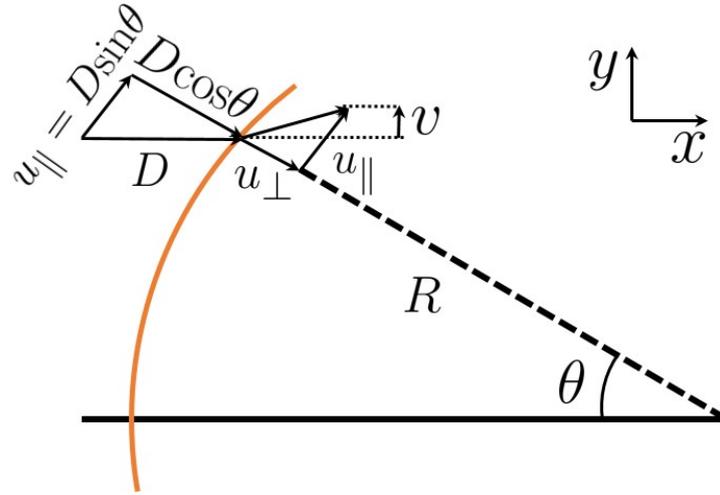


FIGURE 5.12 – Construction géométrique mettant en relation la courbure du front de détonation \mathcal{R} et la dérivée de la vitesse transversale $\frac{\partial v}{\partial y}$. Adapté des travaux de Higgins [167].

divergence du tube de courant :

$$\frac{1}{A} \frac{dA}{dx} = \frac{1}{u} \frac{\partial v}{\partial y} \quad (5.10)$$

Il reste à établir une approximation du terme $\frac{\partial v}{\partial y}$. Celle-ci peut être obtenue via une construction géométrique visant à introduire le rayon de courbure du front, tel qu'illustré sur la Figure 5.12. Les vitesses parallèles u_{\parallel} sont égales de part et d'autre du choc. En conséquence, il est possible d'écrire

$$v = D \sin(\theta) \cos(\theta) - u_{\perp} \sin(\theta) \quad (5.11)$$

Puis, en différenciant par rapport à θ

$$\left(\frac{\partial v}{\partial \theta} \right)_{\text{choc}} = D \cos(2\theta) - u_{\perp} \cos(\theta) - \sin(\theta) \left(\frac{\partial u_{\perp}}{\partial \theta} \right)_{\text{choc}} \quad (5.12)$$

Or,

$$\left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_{\text{choc}} = \left(\frac{\partial v}{\partial \theta} \right)_{\text{choc}} \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)_{\text{choc}} = \frac{1}{\mathcal{R} \cos(\theta)} \left(\frac{\partial v}{\partial \theta} \right)_{\text{choc}} \quad (5.13)$$

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) = \frac{D - u(0)}{\mathcal{R}} \quad (5.14)$$

D'après l'analyse asymptotique de Klein et Stewart [168], il est possible d'écrire que

$$\frac{\partial v}{\partial y} = \frac{D - u(x)}{\mathcal{R}} \quad (5.15)$$

Ainsi, l'effet induit par la variation de section du tube de courant est directement lié au rayon de courbure du front de détonation. Cette modélisation est une approche permettant d'incorporer des pertes dans la structure ZND. Elle peut être utilisée afin de représenter des causes variées (friction aux parois, divergence, etc.) et s'applique donc dans notre cas au confinement gazeux.

La démarche retenue dans notre cas est la suivante : la vitesse moyenne de la détonation \bar{D} et la courbure moyenne du front \mathcal{R} en $y = 0$ sont calculées pour chaque simulation. La procédure permettant d'obtenir la vitesse instantanée de la détonation est décrite à la Sous-section 3.4.1. La courbure moyenne est calculée à partir de la forme moyennée de la détonation. À chaque itération, la position de tous les points constituant le choc précurseur est détectée par l'intermédiaire d'un seuil de pression (0.1% de la valeur initiale p_0) puis moyennée via la procédure présentée à la Section 3.3.8. La courbe de la position moyenne est ensuite symétrisée horizontalement et interpolée par un polynôme d'ordre 4. La connaissance de l'équation polynomiale permet de calculer la courbure en chaque point, et donc plus particulièrement en $y = 0$. Les rayons de courbure obtenus par ce biais constituent alors un paramètre d'entrée du modèle WK, permettant de calculer la divergence de l'écoulement intervenant dans le terme de thermicité.

5.4.2 Comparaison avec les profils axiaux moyens

Cette section traite des résultats obtenus par le biais du modèle WK et des profils axiaux moyens calculés dans les simulations bidimensionnelles. L'état moyen de l'écoulement sur l'axe $y = 0$ est reporté sur les Figures 5.13 et 5.14 dans le cas d'un mélange stœchiométrique d'hydrogène et d'oxygène ($E_a^* = 38.23$). Les paramètres de la simulation correspondent à ceux employés dans la Section 5.3 ($h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$). La Figure 5.13 présente, via les symboles bleus, l'évolution de la pression moyenne \bar{p} , de la masse volumique moyenne $\bar{\rho}$, de la fraction massique de gaz frais moyenne \tilde{Y} et du nombre de Mach local moyen \tilde{M} dans le cas du confinement par un gaz inerte. Les symboles rouges correspondent à la propagation de la détonation dans un canal, configuration sans perte étudiée dans le Chapitre 4. Les lignes en traits pleins exposent les résultats relatifs aux modélisations stationnaires : en rouge pour le modèle ZND et en bleu pour le modèle WK.

En ce qui concerne les modélisations stationnaires, les deux profils sont similaires. Seule

la fin de la zone de réaction est affectée par les pertes, ces dernières se traduisant par un raccourcissement du profil d'environ $3 l_{1/2}$. Dans cette configuration, les pertes subies par la détonation n'engendrent qu'un déficit de vitesse d'environ 2%, ce qui explique sans doute le peu d'écart entre les profils. Le rayon de courbure moyen en $y = 0$ est alors $\mathcal{R} = 15.4$ cm. Les modélisations stationnaires ne permettent pas de retrouver les résultats obtenus dans les simulations bidimensionnelles. Ce constat, connu dans le cas idéal, était attendu pour le modèle WK, ce dernier reposant sur le modèle ZND.

Les simulations réalisées dans le cas du confinement par un gaz inerte ne conduisent pas à des différences majeures dans la zone de réaction, comparativement au cas idéal sans perte. Les profils de pression et de densité moyens sont relativement identiques. En revanche, les pertes entraînent une complétion plus lente de la réaction chimique (cf. Figure 5.13 (c)). L'effet le plus notable concerne la position du plan sonique. De $170 l_{1/2}$ dans le cas idéal, l'épaisseur hydrodynamique est ramenée à $60 l_{1/2} \approx 3 \lambda$ dans la configuration du confinement gazeux.

Les fluctuations moyennes de pression, masse volumique, vitesse et le nombre de Mach turbulent moyen sont révélés sur la Figure 5.14. Globalement, la présence de la couche de gaz inerte se traduit par une augmentation du niveau des fluctuations. L'écart entre les deux profils reste constant sur la totalité du domaine de calcul. L'évolution des fluctuations de vitesse $\sqrt{\tilde{u}'^2}/\tilde{u}$ est présentée sur la Figure 5.14 (c). Il apparaît que l'évolution de ce terme n'est pas monotone, mais est constituée de deux phases. Immédiatement en aval du choc, la courbe décroît puis atteint un minimum. La position de ce minimum, notée $x_{u''}$, varie suivant la configuration du calcul : pour la propagation en canal, celui-ci est situé à plus de $200 l_{1/2}$ tandis que dans le cas du confinement inerte il est localisé à seulement $60 l_{1/2}$ et semble concomitant avec la position du plan sonique. Le niveau global des fluctuations de vitesse est plus important dans la configuration avec pertes. Le nombre de Mach turbulent moyen, exposé sur la Figure 5.14 (d), ne révèle pas de différence majeure dans le comportement général, si ce n'est une légère augmentation dans le cas non idéal.

Les Figures 5.15 et 5.16 font référence aux calculs effectués pour une énergie d'activation réduite $E_a^* = 30$. La configuration avec pertes correspond aux paramètres de la Section 5.3 pour cette même valeur de l'énergie d'activation réduite ($h = 16$ mm $\approx 8 \lambda$). Rappelons que dans ce cas, le déficit de vitesse relativement à D_{CJ} est d'environ 5%, légèrement plus marqué que pour $E_a^* = 38.23$. Le rayon de courbure moyen est alors $\mathcal{R} = 4.15$ cm. Ainsi, sur les profils de pression présentés sur la Figure 5.15 (a), l'effet dû aux pertes est plus important. La quasi-totalité de la courbe est située en deçà de celle issue du calcul sans perte. Les niveaux de pression à l'état ZND sont également différents, ce qui est correctement restitué par les modélisations stationnaires ZND et WK. À l'instar des

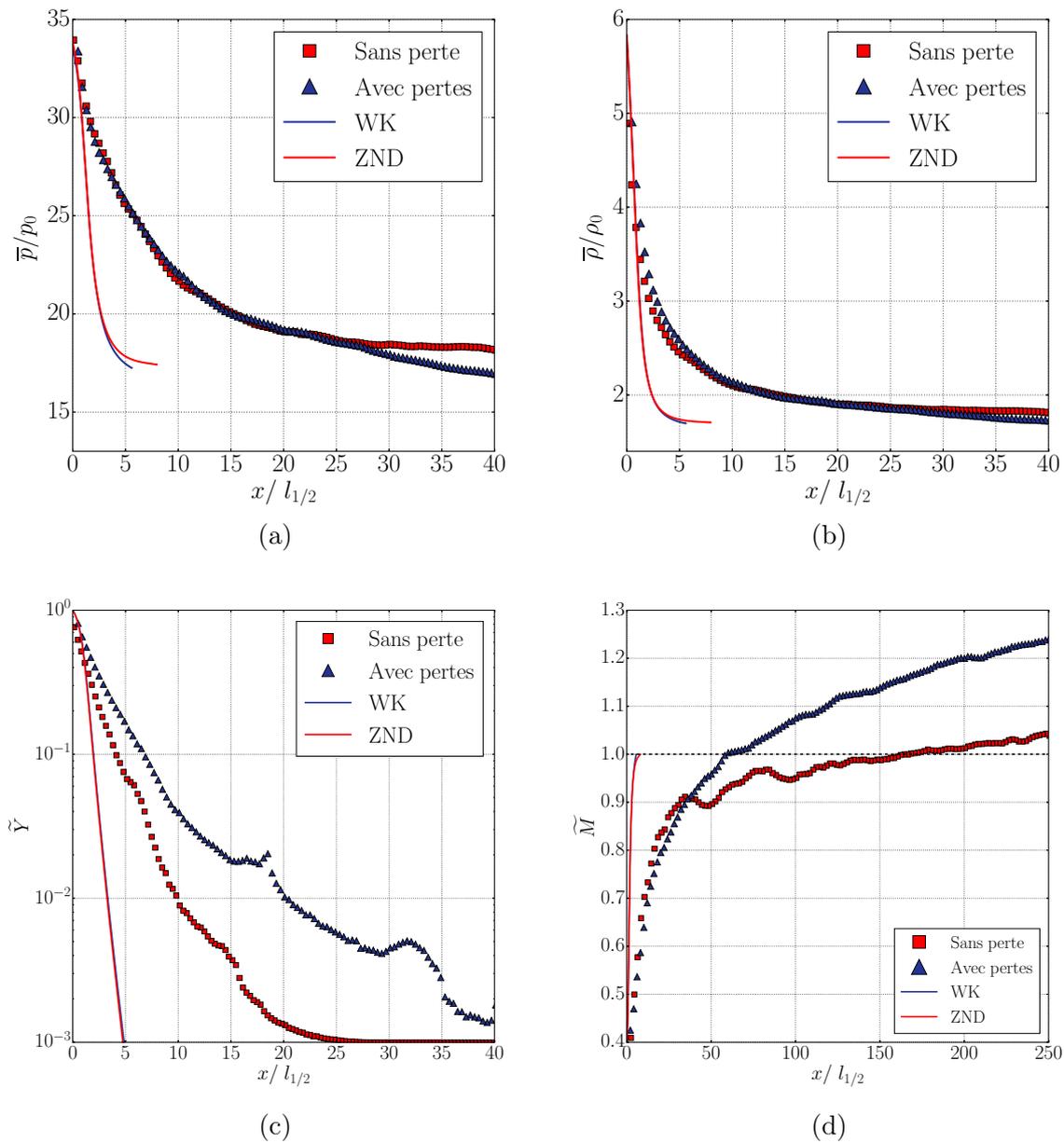


FIGURE 5.13 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 38.23$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.

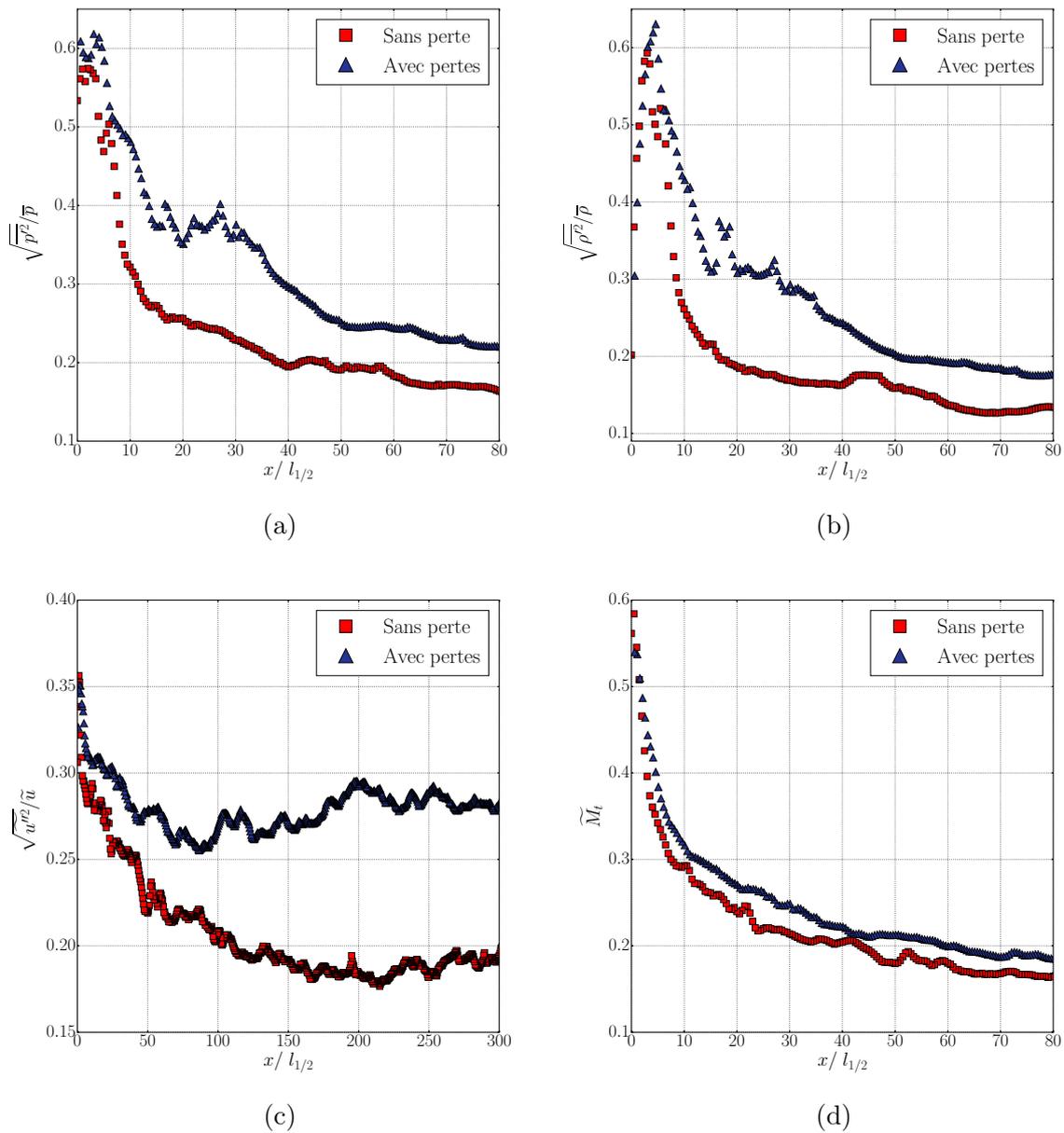


FIGURE 5.14 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 38.23$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.

calculs effectués pour $E_a^* = 38.23$, la relaxation de l'écoulement en aval de la zone de réaction est beaucoup plus marquée lorsque les pertes sont présentes. La progression de la réaction chimique est également ralentie par les pertes. Notons une forte diminution de l'épaisseur hydrodynamique dans la configuration non idéale. L'influence du confinement gazeux est également forte sur les fluctuations moyennes, exposées sur les Figures 5.16 (a), (b) et (c). Les pertes augmentent sensiblement l'amplitude des fluctuations.

Les résultats exposés dans le Chapitre 4 révélèrent que pour $E_a^* = 20$, la modélisation stationnaire ZND donne des résultats satisfaisants. C'est donc pour ce type de mélange que le modèle WK est susceptible de représenter correctement l'écoulement moyen en prenant en compte la présence de pertes. Les Figures 5.17 et 5.18 sont des comparaisons des profils axiaux moyens obtenus dans les configurations idéales et non idéales, pour les résultats stationnaires et issus des simulations numériques. Les profils de pression et de masse volumique dans la zone de réaction sont correctement captés par les modélisations stationnaires (voir Figure 5.17 (a) et (b)). Un très léger décalage, de l'ordre de grandeur de la demi-longueur de réaction, apparaît entre les résultats stationnaires et bidimensionnels à la fin de la zone de réaction. Cet écart persiste dans la configuration non idéale et peut être attribué à la faible influence des ondes transverses pour cette valeur de E_a^* . L'épaisseur hydrodynamique est une nouvelle fois considérablement réduite et devient alors du même ordre de grandeur que la fin de la zone de réaction calculée par le modèle WK.

L'évolution des fluctuations moyennes en aval du front de détonation est révélée sur la Figure 5.18. Dans la zone de libération de l'énergie chimique, comprise entre le front et environ $10 l_{1/2}$, les fluctuations moyennes de la pression et de la masse volumique (Figures 5.18 (a) et (b)) sont identiques. En aval de cette région, il apparaît que ces fluctuations de pression et de masse volumique atteignent un niveau légèrement inférieur dans le cas des simulations avec pertes que dans le cas de la propagation en canal idéal. Le nombre de Mach turbulent est également inférieur à 0.3. Ce résultat contraste avec les tendances obtenues pour les énergies d'activation réduites plus importantes. Les courbes décrivant l'évolution des fluctuations moyennes de la vitesse matérielle sont tracées sur la Figure 5.18 (c). Comme pour les mélanges irréguliers, la position du minimum $x_{\bar{u}'}$ diminue avec les pertes. Cependant, le minimum est cette fois-ci extrêmement proche du front, à environ $2 l_{1/2}$. Les fluctuations de vitesse sont plus importantes dans la configuration non idéale que lors de la propagation en canal. La Figure 5.18 (d) présente les variations du nombre de Mach turbulent moyen. Un constat similaire à celui effectué sur les Figures 5.18 (a) et (b) peut être réalisé : nous notons une concordance des deux profils dans une première partie de l'écoulement puis la courbe relative à la configuration avec pertes demeure légèrement inférieure aux résultats recueillis dans la configuration idéale.

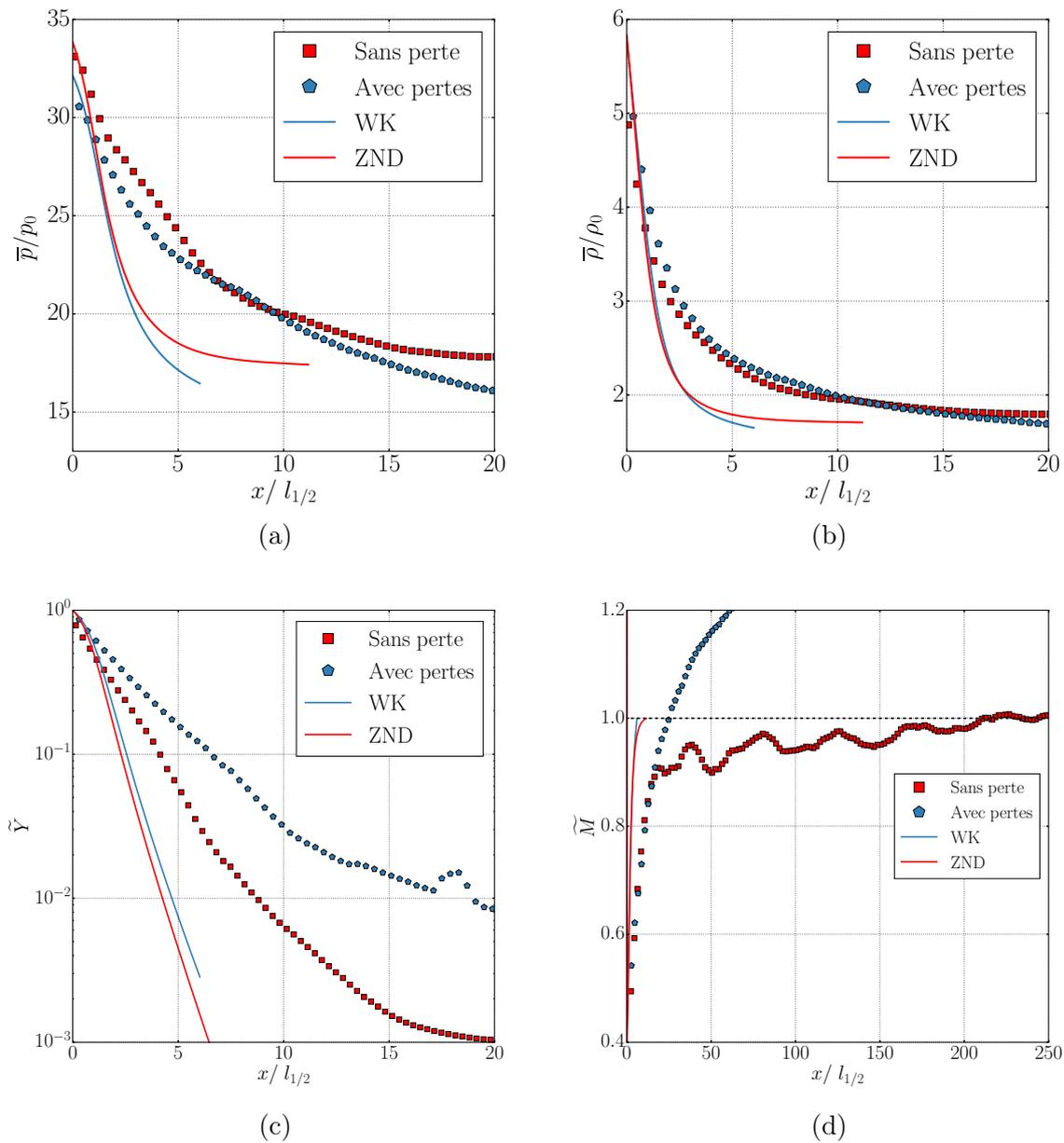


FIGURE 5.15 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 30$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 16 \text{ mm} \approx 8 \lambda$.

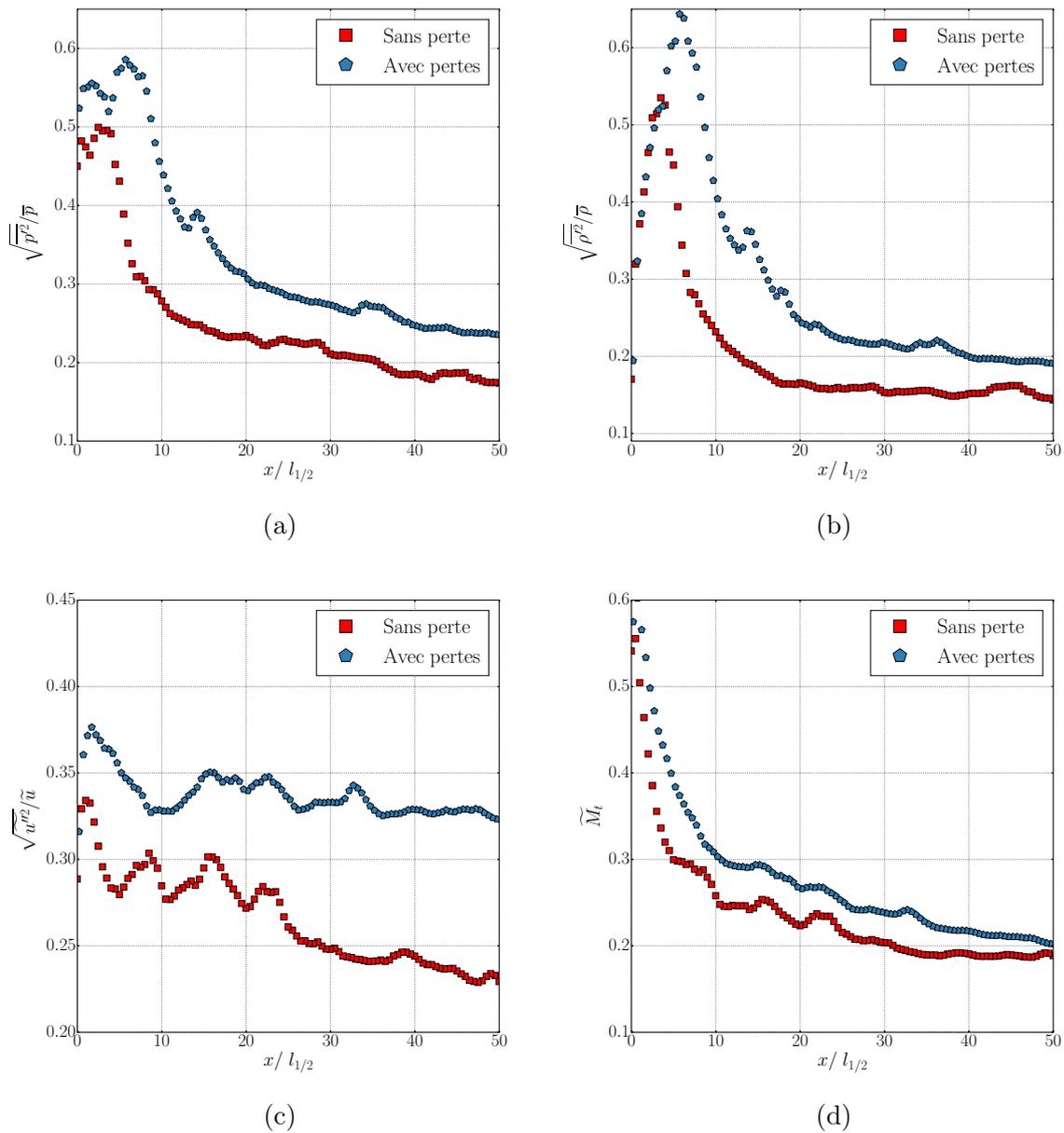


FIGURE 5.16 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 30$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 16 \text{ mm} \approx 8 \lambda$.

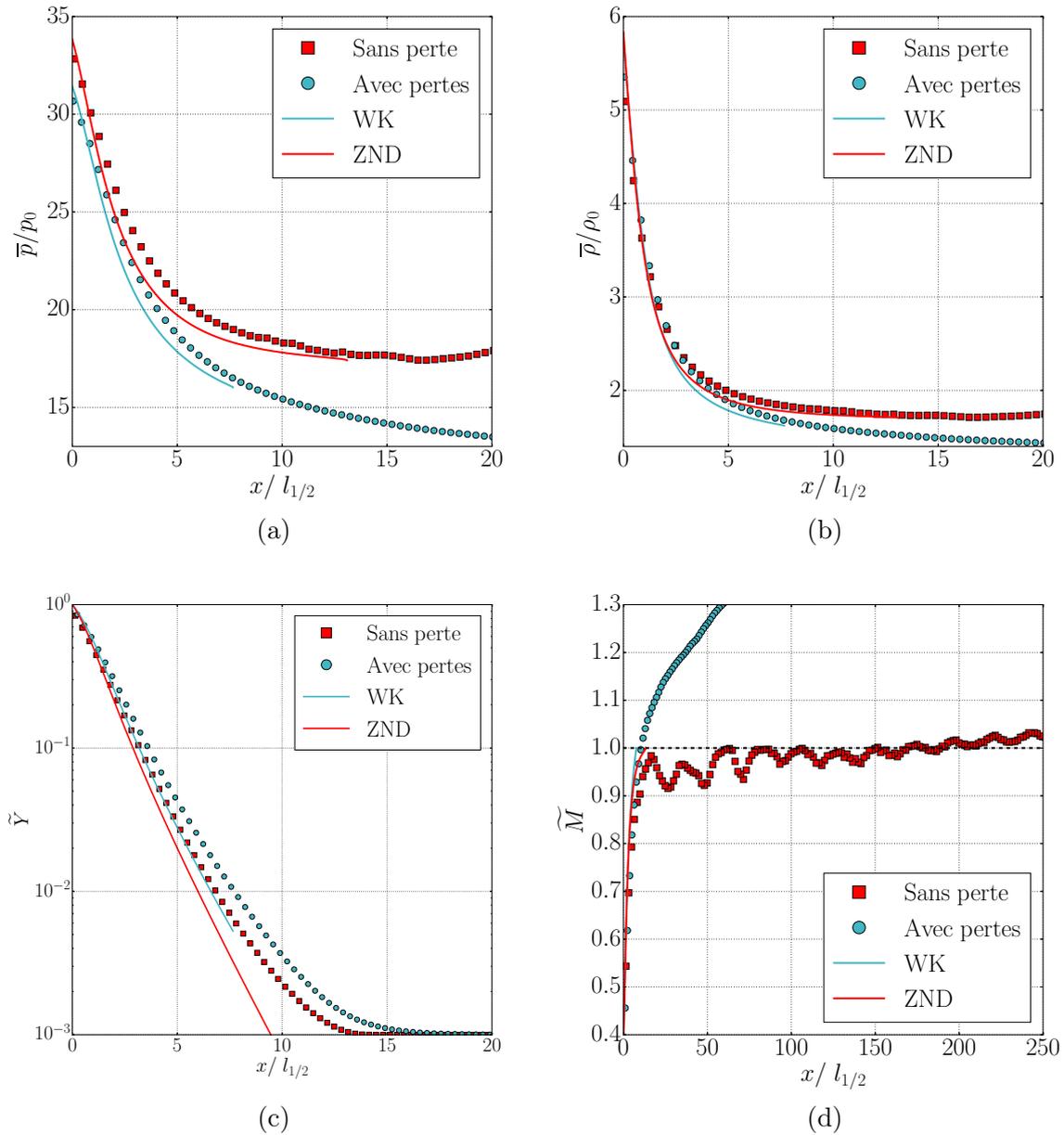


FIGURE 5.17 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 20$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.

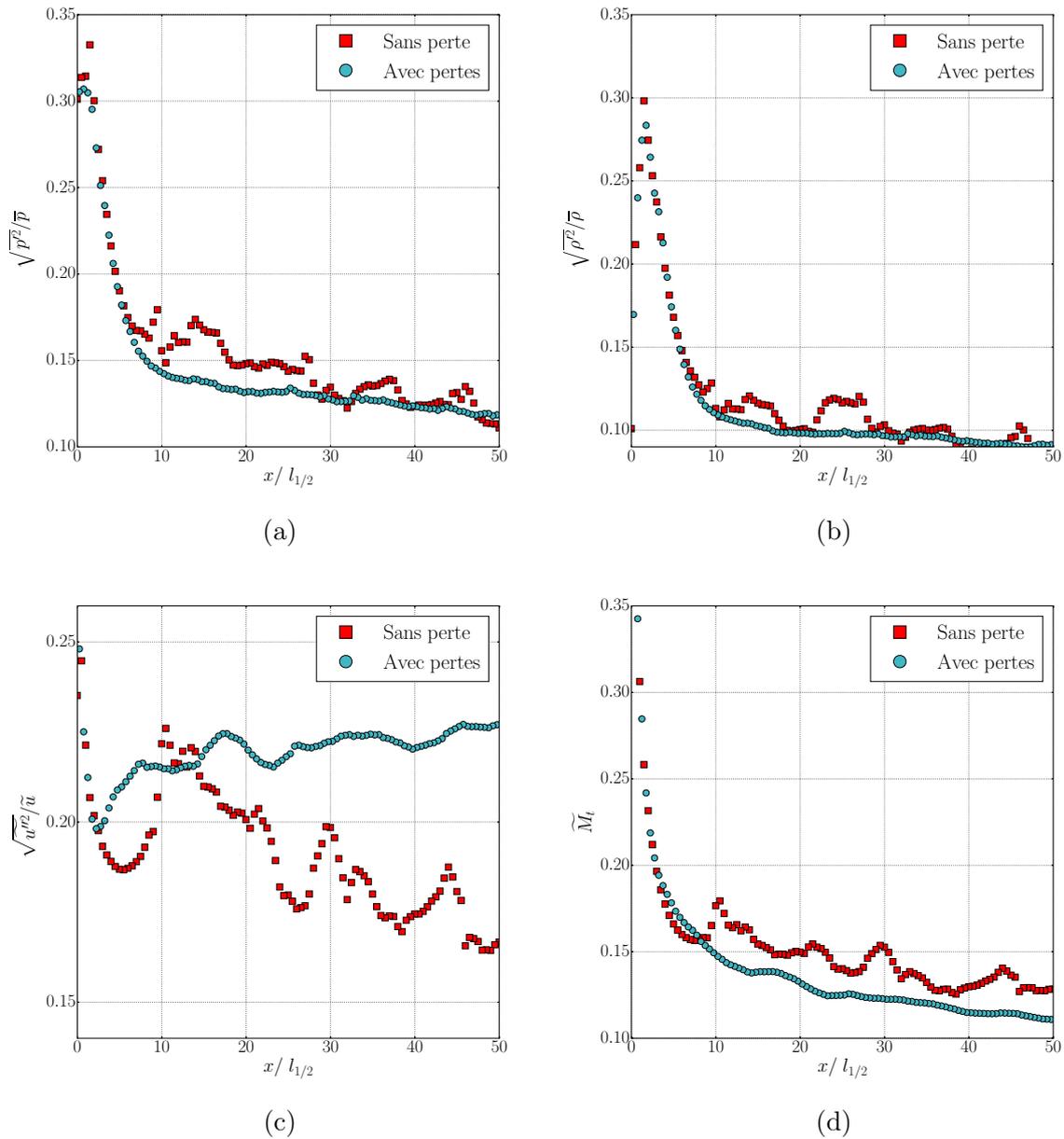


FIGURE 5.18 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour $E_a^* = 20$ en configuration idéale et confinée par un gaz inerte. Pour cette simulation, $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.

TABLE 5.3 – Synthèse des données récoltées pour les différentes énergies d'activation réduites

	$D/D_{CJ} = 1$		$D/D_{CJ} < 1$	
	$h_t/l_{1/2}$	$x_{\tilde{u}''}/l_{1/2}$	$h_t/l_{1/2}$	$x_{\tilde{u}''}/l_{1/2}$
$E_a^* = 20$	168	150	11	2
$E_a^* = 30$	213	255	25	80
$E_a^* = 38.23$	168	215	60	85

Le Tableau 5.3 présente une synthèse de certains résultats issus des simulations, et notamment la valeur de l'épaisseur hydrodynamique et la distance entre le front et le minimum des fluctuations de vitesse $x_{\tilde{u}''}$. Il apparaît que les variations $x_{\tilde{u}''}$ semblent corrélées aux variations de l'épaisseur hydrodynamique. Expérimentalement, l'épaisseur hydrodynamique peut être déterminée à partir des fluctuations de pression [65]. Son association, d'une façon ou d'une autre, avec les fluctuations moyennes de la vitesse matérielle est donc envisageable.

5.5 Synthèse des résultats numériques

Les simulations présentées dans la première partie de ce chapitre ont été réalisées pour une seule hauteur h de la couche réactive pour chaque valeur de l'énergie d'activation réduite. Afin de généraliser les résultats obtenus, une étude paramétrique a été effectuée pour chaque E_a^* pour différentes hauteurs h afin de faire varier l'amplitude des pertes subies par la détonation.

5.5.1 Relation célérité-courbure

La relation entre la vitesse moyenne et la courbure moyenne du front est présentée sur la Figure 5.19, à la fois pour le modèle WK et pour les simulations bidimensionnelles. La célérité \bar{D}/D_{CJ} est tracée en fonction de $l_{1/2}/\mathcal{R}$ pour les différentes énergies d'activation réduites E_a^* . La Figure 5.19 (a) est relative aux faibles énergies d'activation réduites ($E_a^* = 10$ et $E_a^* = 20$), et la Figure 5.19 (b) concerne les énergies d'activation réduites plus importantes ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$). Les lignes représentent la solution du modèle WK et démarquent le domaine de viabilité théorique des détonations non idéales. Le déficit de vitesse de la détonation augmente avec la courbure jusqu'à ce qu'un point d'inflexion soit atteint, au-delà duquel le modèle WK ne fournit plus de solution. Ce point peut être interprété comme une limite en deçà de laquelle la détonation ne peut plus endurer la

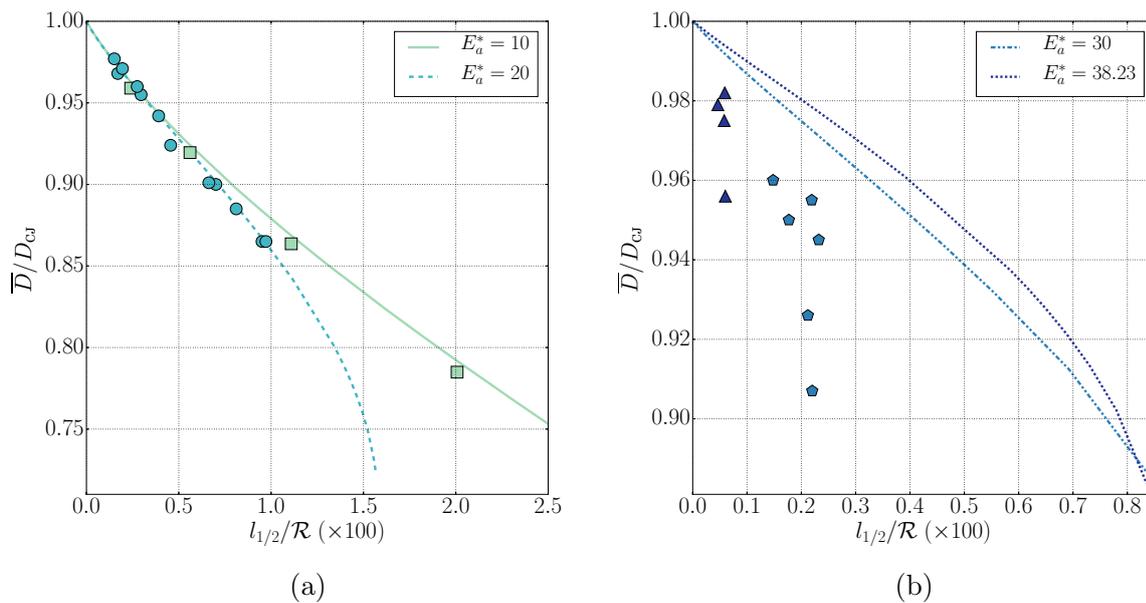


FIGURE 5.19 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction. (a) : mélanges réguliers ($E_a^* = 10$ et $E_a^* = 20$). (b) : mélanges irréguliers ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$). Les traits pleins représentent les résultats issus du modèle WK tandis que les symboles représentent ceux issus des simulations bi-dimensionnelles.

perte de vitesse, ce qui conduit à son extinction [167].

Les symboles représentent les résultats obtenus au travers des simulations bidimensionnelles pour les différentes valeurs de E_a^* . Chaque type de symbole, de couleur différente, est associé à une valeur d'énergie d'activation réduite. En faisant varier la hauteur de la couche réactive en amont du front, l'amplitude des pertes subies par la détonation est modifiée ce qui affecte également sa vitesse de propagation. Chaque point correspond donc à une unique simulation pour une hauteur h fixée.

Les résultats du modèle WK et des simulations numériques instationnaires concordent pour les faibles énergies d'activation réduites présentées sur la Figure 5.19 (a). Ce n'est plus le cas pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$ (Figure 5.19 (b)), pour lesquels des différences importantes apparaissent. Ce résultat est similaire aux observations faites dans le Chapitre 4 pour les configurations idéales. Nous avons démontré que la modélisation stationnaire ZND de la zone de réaction n'était pas concluante pour les mélanges irréguliers ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$). Ce constat s'étend donc naturellement à l'effet des pertes sur l'onde de détonation, sachant que le modèle WK s'appuie sur la théorie ZND.

Les ondes transverses sont présentes dans l'écoulement pour toutes les valeurs de E_a^* . En conséquence, les différences entre le modèle WK et les simulations bidimensionnelles

pour les énergies d'activation réduites supérieures ou égales à 30 ne peuvent pas résulter uniquement de la présence ou de l'absence de la structure cellulaire. Il convient en effet de différencier les différents types de structure cellulaire. Suivant la valeur de E_a^* , les ondes transverses peuvent être qualifiées de simples perturbations acoustiques jusqu'à des chocs de plus forte amplitude. Les différences entre les résultats de la modélisation WK et ceux issus des simulations 2D pour les mélanges irréguliers ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$) semblent indiquer que la structure cellulaire joue dans ce cas un rôle prépondérant. Ces résultats soutiennent l'existence de deux comportements distincts. Le premier correspond au mécanisme physique décrit par le modèle WK et aux mélanges ayant une faible énergie d'activation, c'est-à-dire la compression par un choc suivie d'une réaction exothermique. Le second est associé aux mélanges plus irréguliers pour lesquels le mécanisme précité d'auto-inflammation en aval du choc incident n'est plus suffisant. Cette ségrégation suivant la stabilité des mélanges réactifs correspond aux observations expérimentales dans le cas des configurations non idéales. Ce point a été largement adressé dans le Chapitre 2.

Le déficit maximum supporté par la détonation avant l'extinction, appelé déficit critique, n'est pas le même dans les résultats issus de la modélisation stationnaire et dans les résultats des simulations, et ce quelle que soit l'énergie d'activation réduite. Le déficit critique est surévalué dans le cas de la modélisation stationnaire en comparaison des valeurs récoltées à l'issue des simulations.

Dans le cas des mélanges irréguliers, et pour un rayon de courbure identique, le déficit de vitesse obtenu par les simulations instationnaires est plus important que celui prédit par le modèle WK. Ces résultats sont en accord avec les conclusions de Sow et al. [149], qui ont observé que le déficit de vitesse causé par la présence de pertes aux parois était sous-évalué par le modèle analytique. Ce point est également en accord avec les résultats obtenus récemment par Borzou et Radulescu pour les détonations régulières [103].

5.5.2 Hauteur critique de propagation

Sur la Figure 5.20 (a), le déficit de vitesse \bar{D}/D_{CJ} est tracé en fonction de la hauteur de la couche réactive h normalisée par la taille de cellule λ . Sur la Figure 5.20 (b), la hauteur de la couche réactive est normalisée par l'épaisseur hydrodynamique calculée à l'issue des simulations.

Lorsque la hauteur de la couche réactive est inférieure à une valeur critique h_c , la détonation ne parvient pas à maintenir un régime de propagation autoentretenu et s'éteint. La hauteur critique dépend de l'énergie d'activation réduite du mélange, comme en témoigne

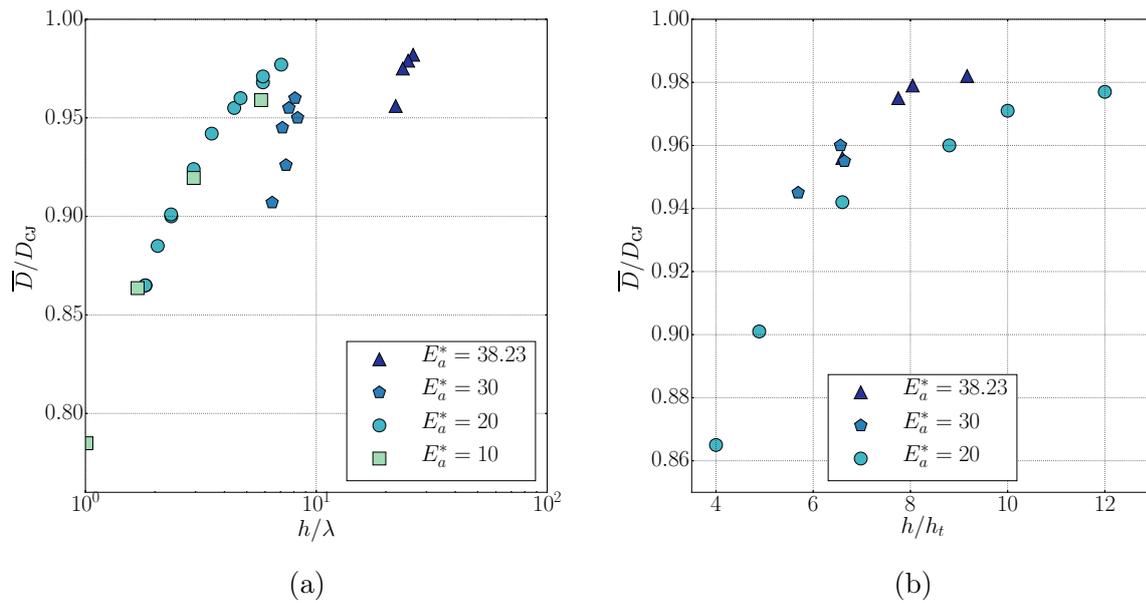


FIGURE 5.20 – (a) : vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par taille de cellule. (b) : vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par l'épaisseur hydrodynamique.

TABLE 5.4 – Synthèse des données relatives aux limites de propagation obtenues dans les simulations bidimensionnelles et via le modèle WK.

	$h_c/l_{1/2}$	h_c/λ	D_c/D_{CJ}	$(D_c/D_{CJ})_{WK}$
$E_a/RT_0 = 10$	14.5	1.01	0.78	0.56
$E_a/RT_0 = 20$	34.1	1.82	0.86	0.74
$E_a/RT_0 = 30$	149	6.44	0.91	0.85
$E_a/RT_0 = 38.23$	462	22.0	0.96	0.88

la Figure 5.20 (a). Les valeurs obtenues sont regroupées au sein du Tableau 5.4. Comme observé précédemment, le déficit critique D_c augmente avec l'énergie d'activation à la fois pour le modèle WK et pour les résultats bidimensionnels. De plus, quelle que soit la valeur de E_a^* , le modèle WK sous-évalue le déficit critique.

La hauteur critique obtenue pour les paramètres représentatifs d'un mélange H_2 / O_2 à la stoechiométrie ($E_a^* = 38.23$) est supérieure aux valeurs habituellement rencontrées expérimentalement pour cette configuration (voir la Sous-section 2.3.4 pour une synthèse des résultats expérimentaux). Pour des détonations confinées dans un canal rectangulaire (c'est-à-dire dans lesquels trois parois sur quatre sont constituées de murs rigides), la hauteur critique obtenue dans la littérature est d'environ 3λ . Cependant, certaines spécificités propres à ces travaux expérimentaux sont susceptibles d'avoir influé sur les résultats obtenus. En premier lieu, la majorité des études effectuées en configuration rectangulaire emploie un film plastique afin de prévenir la diffusion moléculaire s'établissant entre les

milieux réactifs et inertes. L'usage d'un tel film est sujet à discussion, puisque certains auteurs lui attribuent un rôle non négligeable au sein de la dynamique de l'onde de détonation, en permettant aux points triples de se réfléchir et d'ainsi contribuer à soutenir la détonation. Seuls les travaux initiaux de Sommers [104] et ceux très récents de Cho et al. [117] s'affranchissent d'une séparation solide entre les deux milieux pour la configuration rectangulaire. Or, ces deux études ne déterminent pas explicitement la hauteur critique, mais la bornent seulement. De plus, dans notre configuration le ratio des impédances acoustiques Z est égal à l'unité. Ce n'est le cas d'aucun travail expérimental. Il est possible que pour des $Z \neq 1$, les limites de propagations soient réduites. Ce point particulier est adressé en détail dans le chapitre suivant. Enfin, il est possible que la présence de deux autres parois dans la profondeur du dispositif expérimental puisse réduire les hauteurs critiques en comparaison de celles obtenues dans nos simulations 2D. En effet, si des ondes de choc se développent dans cette direction, elles peuvent constituer une source de régénération des points triples à même de contribuer au maintien de la détonation. Cette tendance a été observée par Radulescu [91] dans le cadre de la propagation des détonations dans des tubes poreux.

La hauteur critique h_c permettant la propagation autonome de la détonation augmente avec l'énergie d'activation réduite E_a^* . Cependant, plusieurs résultats issus de la littérature expérimentale relative aux détonations avec pertes suggèrent au contraire que les détonations irrégulières se montrent davantage robustes face aux pertes que les détonations régulières. Par exemple, dans le cas de la diffraction de la détonation, le diamètre critique dépend de la stabilité du mélange. Les mélanges dilués à l'argon suivent la corrélation $d_c/\lambda \approx 20 \sim 30$, tandis les mélanges irréguliers se comportent suivant $d_c/\lambda \approx 13$. L'étude effectuée par Radulescu et Lee [90] à propos des détonations évoluant dans des tubes poreux mène à des conclusions identiques. Ils obtinrent des diamètres critiques inférieurs avec les mélanges irréguliers qu'avec les mélanges dilués. Cette même tendance a été observée dans les travaux relatifs à l'influence des couches limites sur la propagation des détonations [80, 84, 169].

L'augmentation de la hauteur critique h_c avec l'énergie d'activation réduite fut également constatée dans plusieurs études numériques des détonations non idéales. Sow et al. [149] se sont intéressés à l'influence des pertes aux parois sur les détonations monodimensionnelles dans le cas des mélanges modérément irréguliers. Ils ont montré qu'avec la diminution du diamètre du tube, les détonations qui présentent des oscillations sont davantage assujetties à l'extinction que les détonations stables. Un comportement similaire fut observé par Mazaheri et al. [92] dans leur étude numérique des détonations se propageant dans un tube poreux. Pour $E_a^* = 15$, l'extinction survient pour $h_c/\lambda \approx 1$ alors que pour

les mélanges irréguliers plusieurs ondes transverses sont présentes et sont nécessaires à la propagation. La seule exception réside dans les travaux de Li et al. [126], dans lesquels la résistance de la détonation à l'extinction était accrue par la présence d'hétérogénéités introduites en amont du front. Cependant, les paramètres cinétiques et thermodynamiques choisis ne permettaient pas le développement d'instabilités intrinsèques à la détonation, ce qui limite la portée de ce résultat quant à l'influence de la sensibilité inhérente au mélange réactif sur les limites de propagation.

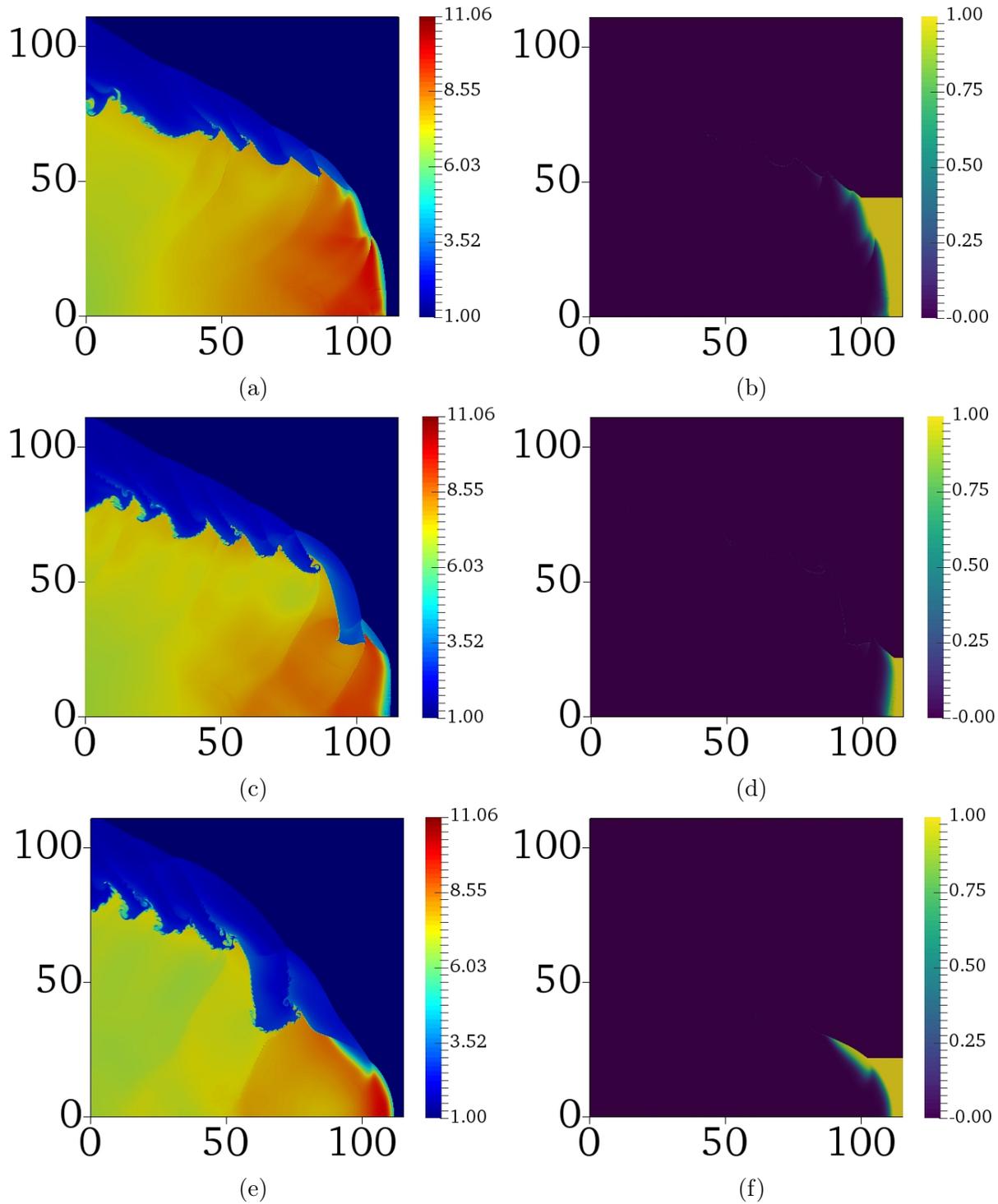
La Figure 5.20 (b) pondère les résultats obtenus par l'épaisseur hydrodynamique calculée pour chacune des simulations. Seuls les résultats pour lesquels cette quantité a pu être déterminée sont présentés sur cette figure. Deux lignes de tendance se dégagent des résultats, selon que le mélange modélisé est régulier ou irrégulier. Les symboles issus des simulations effectuées pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$ se superposent, légèrement au-dessus des symboles relatifs aux mélanges réguliers. Ce résultat illustre la pertinence de l'épaisseur hydrodynamique en tant que longueur caractéristique représentative de l'état de la détonation. Cette représentation peut être rapprochée des résultats expérimentaux obtenus dans des tubes poreux pour différents types de mélanges. L'évolution de D/D_{CJ} en fonction de h/λ montre alors également une répartition en deux groupes suivant la régularité du prémélange [44, 90].

5.6 Mécanismes d'extinction

Cette section est consacrée aux mécanismes d'extinction de la détonation lorsque la hauteur de la couche réactive est trop faible pour permettre à l'onde de se propager. Des simulations spécifiques ont été réalisées afin d'analyser ces mécanismes. Ces simulations sont conduites en deux temps : en premier lieu, un calcul est effectué pour une hauteur de la couche réactive h supérieure à la hauteur critique h_c . Une fois l'état quasi stationnaire atteint, l'écoulement résultant est utilisé en tant que conditions initiales pour une nouvelle simulation, dans laquelle la hauteur h est fixée en deçà de la limite h_c . Ces calculs ont été réalisés pour deux énergies d'activation différentes : $E_a^* = 20$ et $E_a^* = 30$, représentatifs de mélanges réguliers et irréguliers, respectivement.

5.6.1 $E_a^* = 20$

La hauteur critique h_c est d'environ 3 mm pour les mélanges caractérisés par $E_a^* = 20$. Afin d'observer l'extinction de la détonation dans ce cas, les calculs ont été effectués dans



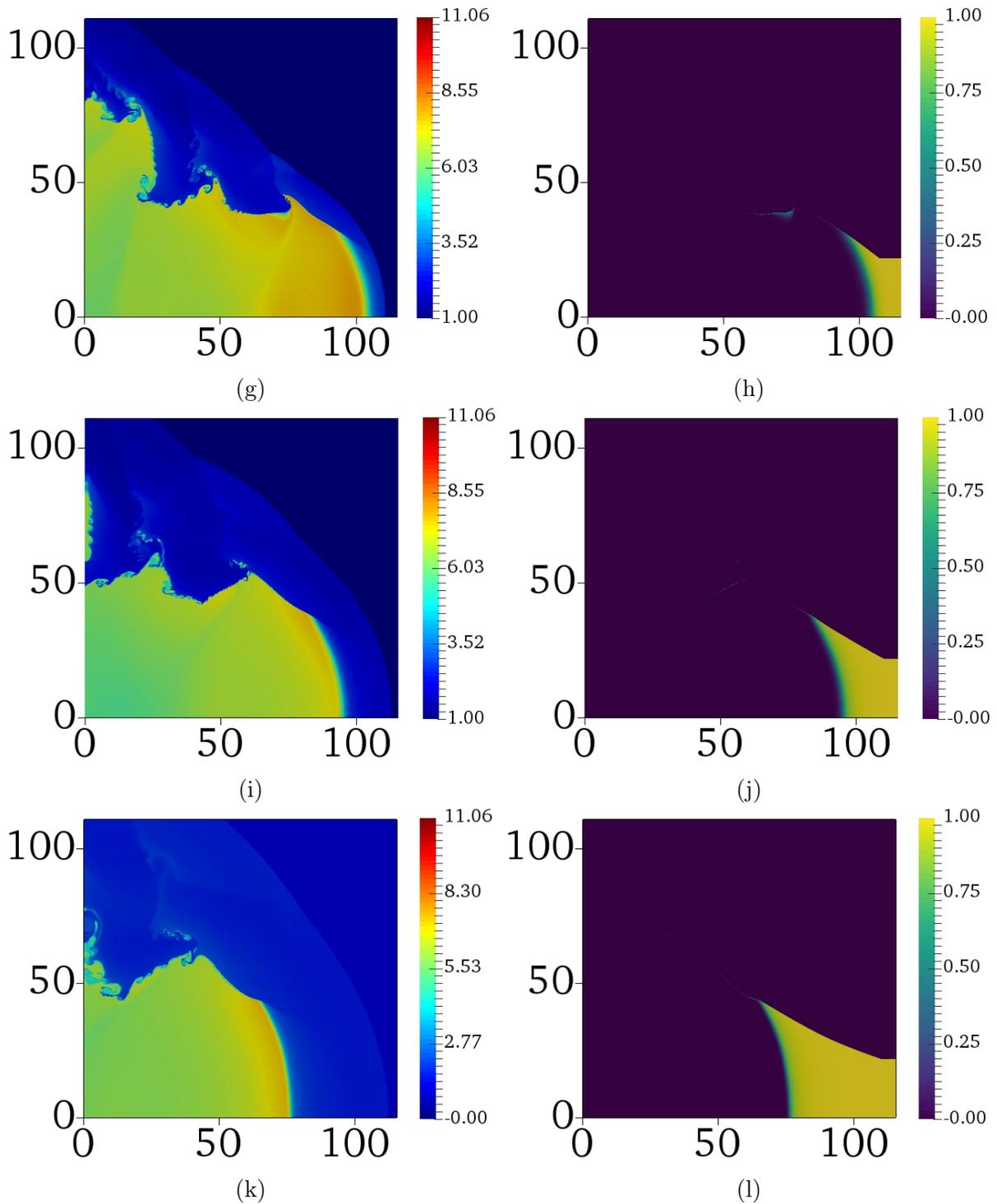


FIGURE 5.21 – Champs de température T/T_0 (gauche) et de fraction massique de gaz frais Y (droite) illustrant le mécanisme d'extinction pour un mélange régulier ($E_a^* = 20$). Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

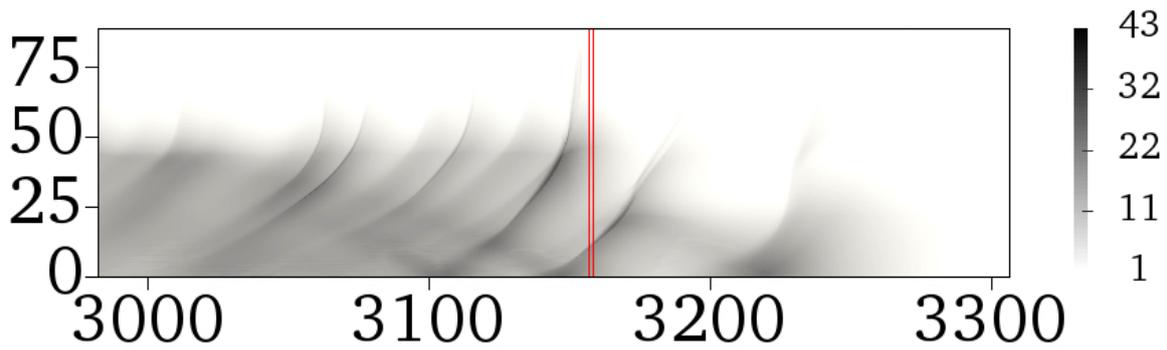


FIGURE 5.22 – Historique de la pression maximale régnant dans l'écoulement. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 4$ mm à $h = 2$ mm. La pression est donnée en MPa et les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

une couche réactive de 4 mm réduite à 2 mm. La Figure 5.21 présente l'évolution de l'écoulement au cours de l'extinction au travers des champs de température (à gauche) et de fraction massique de gaz frais (à droite). Les Figures (a) et (b) sont antérieures à la diminution de la hauteur h , tandis que les figures suivantes y sont postérieures. L'écoulement est particulièrement stable et lisse. Étant donné la faible valeur de la hauteur de la couche réactive h , la structure cellulaire n'est pas développée. Les seules ondes transverses présentes dans le milieu sont créées à l'intersection entre la paroi inférieure et la détonation, puis se propagent en direction de l'interface entre les deux couches. Le front de détonation est courbé, du fait de l'expansion des produits de détonation vers la couche inerte. Dès les Figures 5.21 (c) et (d), la détonation pénètre dans la couche de hauteur $h = 2$ mm. La courbure du front augmente progressivement au cours de sa propagation, ce qui se traduit par une augmentation de la longueur d'induction séparant le choc incident de la zone de réaction. Finalement, il y a découplage global du choc et de la zone de réaction et la détonation ne peut plus se propager de façon autonome.

La structure cellulaire de la détonation est capturée sur la Figure 5.22. Les traits verticaux rouges marquent la transition de $h = 4$ mm à $h = 2$ mm. Les cellules de détonation ne sont pas formées, les trajectoires des points triples étant uniquement orientées en direction de la couche inerte. Les effets de la réduction de la hauteur h sont visibles rapidement. L'extinction de la détonation survient en moins de $200 l_{1/2}$. Cette évolution est corrélée aux variations de la célérité du front, présentées sur la Figure 5.23. Dans la partie associée à $h = 4$ mm, l'amplitude de ces variations est très faible, entre $0.8 D_{CJ}$ et $1.1 D_{CJ}$. Peu de temps après la réduction de h à 2 mm, la vitesse chute à moins de $0.4 D_{CJ}$, ce qui correspond à la célérité du son dans les gaz brûlés.

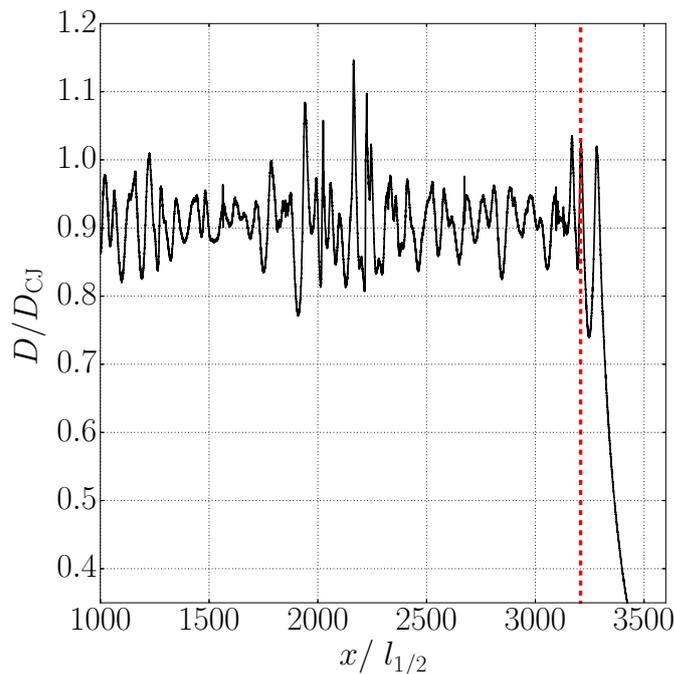


FIGURE 5.23 – Évolution de la vitesse de propagation de la détonation D/D_{CJ} en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 4$ mm à $h = 2$ mm.

5.6.2 $E_a^* = 30$

Cette sous-section traite des mécanismes d'extinction pour un mélange modérément irrégulier, caractérisé par une énergie d'activation réduite $E_a^* = 30$. La détonation se propage initialement dans une couche réactive de hauteur $h = 16$ mm, laquelle est ensuite réduite à $h = 12$ mm. La Figure 5.24 présente l'évolution de l'écoulement au cours de cette transition vers l'extinction, par le biais des champs de température (à gauche) et de fraction massique des gaz frais (à droite). Préalablement à la réduction de la hauteur du milieu réactif (Figure 5.24 (a) et (b)), la détonation est multi-cellulaire et plus d'une dizaine de cellules est présente le long du front. Le passage de $h = 16$ mm $\approx 8 \lambda$ à $h = 12$ mm $\approx 6 \lambda$ se traduit par une diminution du nombre d'ondes transverses. Les structures en clef de voûte associées à l'alternance entre les chocs incidents et les ondes de Mach sont de plus grandes dimensions. Le volume des poches de gaz frais se détachant du front de détonation est également accru. Ce comportement est transitoire, et conduit à une situation pour laquelle l'augmentation de la distance entre le front et la zone de réaction est trop importante pour être compensée par le mouvement des ondes transverses. Cela conduit au découplage entre le choc et la zone de réaction, se traduisant par l'extinction de la détonation. Sur les Figures 5.24 (k) et (l), ce découplage se produit d'abord dans la partie inférieure du front puis gagne la partie supérieure. La zone de réaction est alors figée, et n'évolue plus

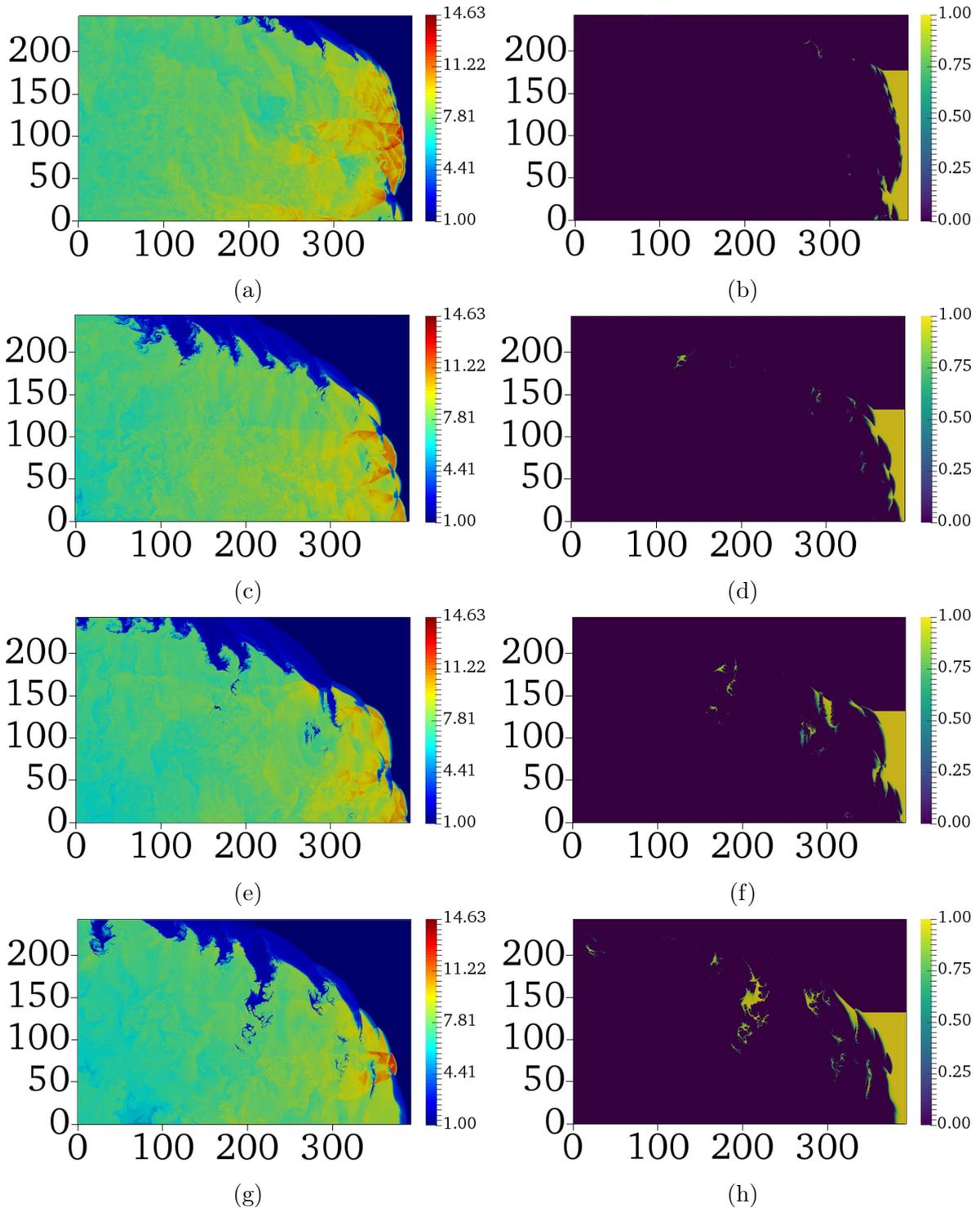
que par le biais des fluctuations de l'écoulement.

La structure cellulaire associée à cette configuration est présentée sur la Figure 5.22. La ligne verticale tracée en rouge symbolise la transition entre les couches réactives de hauteurs différentes. La distance nécessaire à l'extinction de la détonation est décuplée par rapport au cas où $E_a^* = 20$. Le découplage se produit après plus de 2,000 $l_{1/2}$. La réduction du nombre d'ondes transverses, qui se traduit par une augmentation de la taille des cellules, est visible sur la première partie de la plaque, entre 4,200 $l_{1/2}$ et 4,900 $l_{1/2}$. Le mode de propagation devient ensuite marginal, avec seulement une demi-cellule présente ponctuellement à 5,700 $l_{1/2}$. À cet instant, l'impact de la seule onde transverse présente dans l'écoulement contre la paroi inférieure suffit à réinitier la propagation. Ce régime est cependant instable et ne parvient pas à se maintenir de façon stationnaire. Après 6,300 $l_{1/2}$, les ondes transverses perdent en intensité et la trajectoire des points triples s'atténue progressivement.

La Figure 5.26 décrit l'évolution de la vitesse du front en fonction de la distance de propagation et confirme les analyses précédentes. Après la réduction de la hauteur h , la détonation continue de se propager et conserve majoritairement son caractère multicellulaire. La séquence marginale située à 5,700 $l_{1/2}$ (cf. Figure 5.25) s'illustre par une chute de la vitesse en deçà de $0.5 D_{CJ}$, suivit par un réamorçage fort, c'est-à-dire une surdétonation.

La réinitiation de la détonation par une unique onde transverse indique également que les limites de propagation pourraient potentiellement être réduites par le passage de simulations 2D à des simulations 3D. En effet, la présence d'ondes transverses dans la profondeur du domaine de calcul constituerait une source éventuelle de points triples susceptibles d'entretenir la propagation pour des hauteurs h plus petites que dans les simulations bidimensionnelles.

Les mécanismes d'extinction de la détonation présentent d'importantes différences suivant l'énergie d'activation du milieu réactif. Pour les mélanges réguliers, ici représentés par $E_a^* = 20$, l'augmentation de la courbure du front provoque un découplage global entre le choc et la zone de réaction. Pour les énergies d'activation plus importantes, la propagation de la détonation est concomitante avec la présence d'une structure cellulaire et avec la régénération des points triples. Les ondes transverses accroissent alors localement les niveaux de pression et de température, et donc les taux de réaction chimique. Cela permet de compenser dans une certaine mesure les découplages locaux, engendrés par la divergence globale de l'écoulement. Il est cependant important de noter que la présence de la structure cellulaire peut également induire des effets défavorables à la propagation [170]. En effet, ces phénomènes locaux de forte amplitude s'accompagnent également de fortes



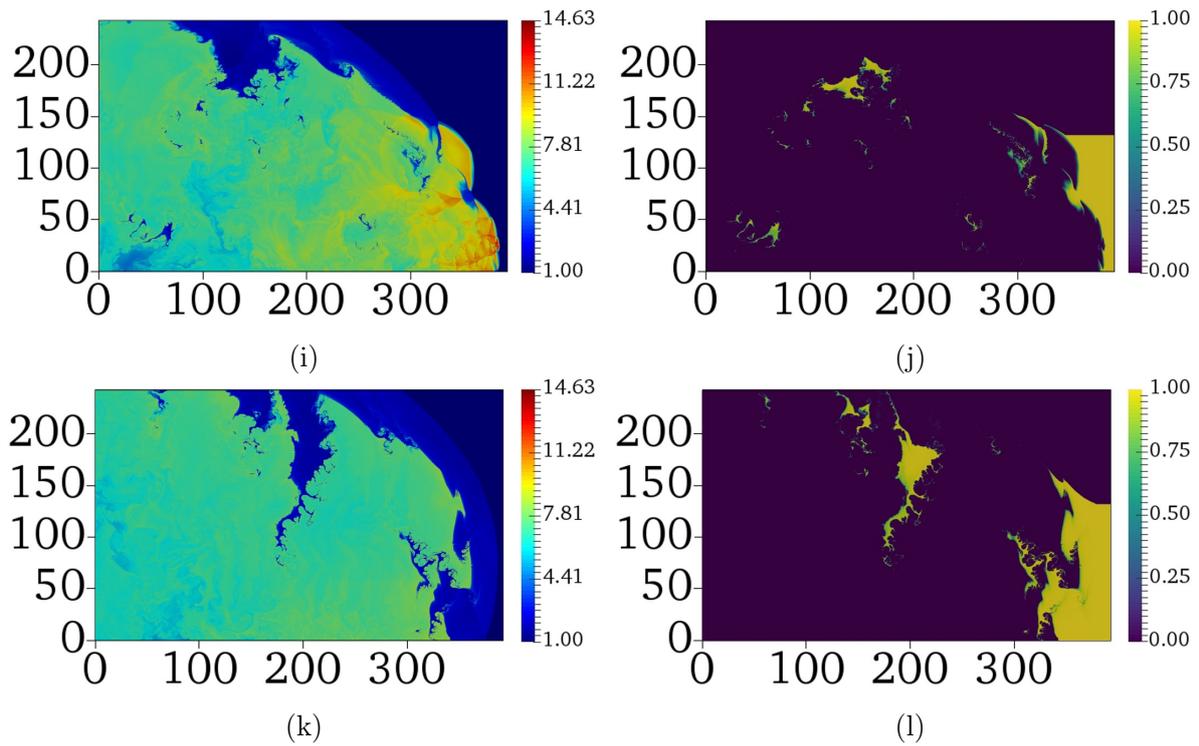


FIGURE 5.24 – Champs de température (gauche) et de fraction massique de gaz frais (droite) illustrant le mécanisme d’extinction pour un mélange irrégulier ($E_a^* = 30$). Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

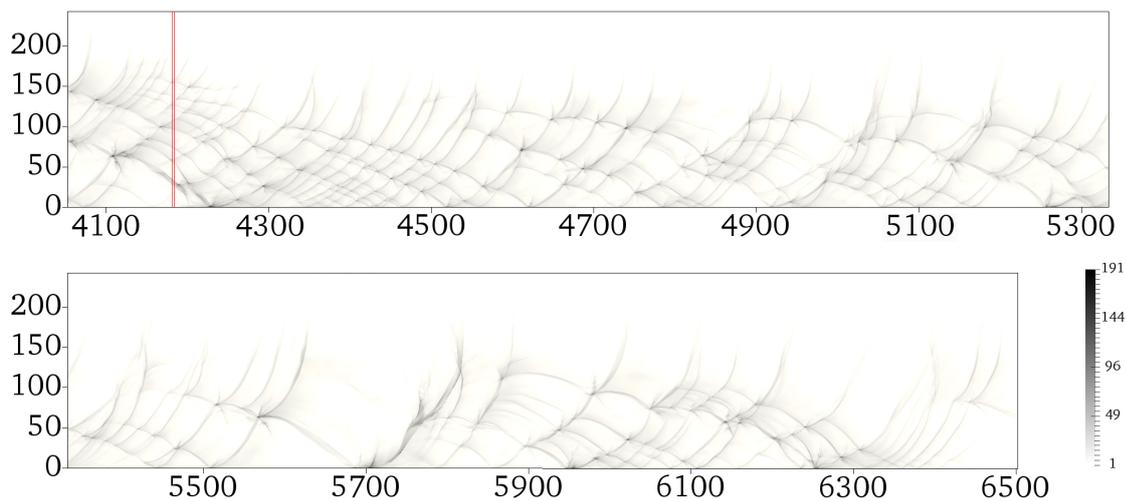


FIGURE 5.25 – Historique de la pression maximale régnant dans l’écoulement. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 16$ mm à $h = 12$ mm. La pression des donnée en MPa et les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$.

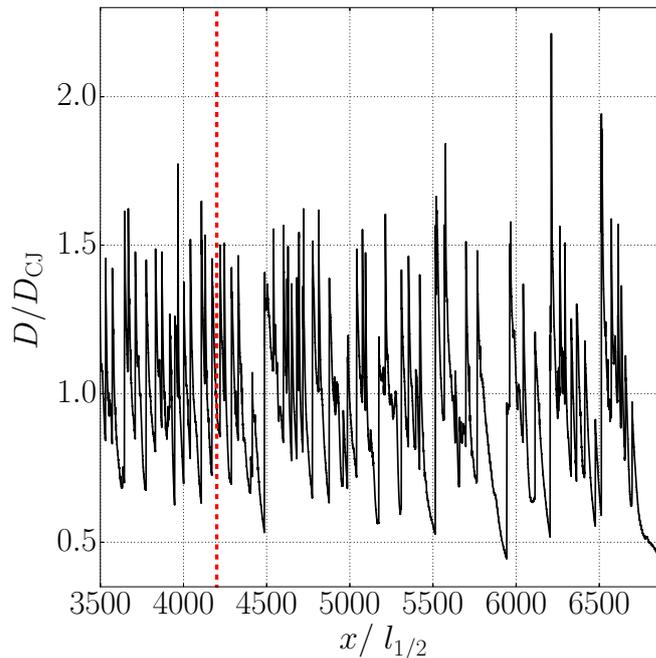


FIGURE 5.26 – Évolution de la vitesse de propagation de la détonation D/D_{CJ} en fonction de la distance normalisée par la demi-longueur de réaction. La ligne verticale démarque la diminution de la hauteur de la couche réactive, de $h = 16$ mm à $h = 12$ mm.

détentes qui ont pour conséquence des décélérations importantes du front de choc et des découplages locaux [159, 171, 172]. Dans le cas où cet équilibre est rompu, la quantité de gaz frais en aval du front s'accroît localement, conduisant par la suite à un découplage global. Ces différences entre les différents types de mélanges s'expriment également via la distance nécessaire à l'extinction pour se produire. Dans le cas des faibles énergies d'activation, le découplage intervient après que la détonation ait parcouru environ 10 fois la hauteur de la couche réactive, contre près de 17 fois pour le cas à $E_a^* = 30$. Ces résultats diffèrent de ceux observés par Radulescu et al. [90] à propos de l'extinction des détonations dans les canaux poreux. Dans cette étude expérimentale, la détonation irrégulière s'éteint sur une distance plus courte que pour les mélanges dilués à l'argon. Cependant, la nature fortement stochastique du processus de maintien de la détonation pour les mélanges irréguliers nécessiterait d'effectuer de multiples simulations afin de généraliser nos résultats et de pouvoir les comparer à la littérature expérimentale sur ce point particulier. Notons également que les pertes appliquées à la détonation par le biais du confinement compressible découlent directement de la hauteur de la couche réactive h , choisie arbitrairement dans les deux configurations de cette sous-section. Ainsi, le passage de $h = 14$ mm à $h = 12$ mm pour $E_a^* = 30$ [166] conduit cette fois à une extinction plus rapide que pour les mélanges réguliers.

5.7 Synthèse partielle

Ce chapitre traite des détonations confinées par un gaz inerte. Des simulations ont été réalisées pour plusieurs énergies d'activation réduites, ce qui agit sur la sensibilité du milieu réactif aux fluctuations de température. Les calculs ont été conduits dans des couches réactives de hauteurs variées afin de contrôler l'amplitude des pertes subies par la détonation.

L'écoulement possède, dans cette configuration, une structure établie constituée d'un front de détonation courbe, d'une onde de choc oblique et d'une interface séparant les gaz brûlés du milieu inerte. Cette topologie est correctement restituée par les simulations numériques. C'est également le cas de certaines spécificités propres aux mélanges irréguliers. À la périphérie de la couche réactive, la détonation se comporte suivant un mode de propagation galopant, avec une succession d'extinctions et de re-initiations à très basse fréquence.

Des calculs statistiques ont été réalisés afin de caractériser l'écoulement et d'effectuer des comparaisons avec les configurations idéales du Chapitre 4. La présence de pertes dans la zone de réaction se traduit par une augmentation des fluctuations pour les mélanges irréguliers, au contraire des faibles énergies d'activation pour lesquelles les niveaux sont inférieurs. L'épaisseur hydrodynamique, qui dépend également de E_a^* , est réduite entre 0.5λ et 3λ et permet d'introduire une similitude entre les résultats. La célérité de la détonation D/D_{CJ} peut être vue comme une fonction de h/h_t pour chacune des familles de mélange. L'évolution des fluctuations de vitesse, non monotone, met également en lumière une nouvelle échelle de longueur caractéristique de l'écoulement.

La compilation de l'ensemble des résultats obtenus a été exposée via la dépendance entre la courbure moyenne du front et sa célérité moyenne. Les tendances ont pu être comparées au modèle WK, généralisation de la théorie ZND aux détonations non idéales. La pertinence de cette modélisation stationnaire est limitée aux faibles énergies d'activation, pour lesquelles le mécanisme de propagation de type ZND convient. Dans nos simulations, la hauteur critique en deçà de laquelle la détonation ne peut plus se propager augmente avec l'énergie d'activation réduite du mélange. Bien que répandu dans la littérature numérique des détonations non idéales, ce résultat contraste avec les données expérimentales.

Enfin, nous nous sommes intéressés aux mécanismes intervenant lors de l'extinction de la détonation, pour des couches de mélange réactif plus petites que la hauteur critique h_c . Pour les mélanges réguliers, le découplage entre le choc et la flamme intervient de manière globale, causé par la courbure du front. Les calculs réalisés pour $E_a^* = 30$ montrent qu'au

contraire, l'extinction survient d'abord localement avant de s'étendre à la totalité du front. Le découplage intervient après que la détonation ait parcouru une distance correspondant à plus de 10 fois la hauteur de la couche réactive.

Influence de la température du milieu inerte

Sommaire

6.1	Introduction	167
6.2	Description de la configuration	168
6.3	Influence de la température de la couche inerte sur la topologie	169
6.4	Influence de la température de la couche inerte sur les profils axiaux moyens	176
6.5	Synthèse des résultats numériques	178
6.5.1	Limites de propagation	178
6.5.2	Relation célérité-courbure	188
6.6	Synthèse partielle	192

6.1 Introduction

Dans le Chapitre 5, seule la réactivité du milieu distingue les deux couches de gaz. En particulier, les propriétés thermodynamiques telles que leur température, leur pression ou leur masse molaire sont identiques. Ce n'est que rarement le cas dans les dispositifs réels : dans les moteurs à détonations rotatives, ce sont les gaz brûlés à haute température issus du cycle de combustion précédent qui constituent le confinement compressible. Dans la littérature expérimentale dédiée à l'étude des détonations confinées, les gaz sont de natures différentes.

C'est pourquoi nous nous intéressons dans ce chapitre à l'influence de la température des gaz inertes sur la détonation confinée. Les variations de la température du confinement permettent à la fois d'illustrer la configuration du moteur à détonation rotative et de se rapprocher des configurations expérimentales. Ainsi, le rapport des impédances acoustiques

entre les deux milieux, qui constitue un paramètre important dans cette configuration (cf. Annexe B), va évoluer au travers des variations de la température de la couche inerte.

Ce chapitre est organisé de la façon suivante : en premier lieu, les effets sur la topologie générale de l'écoulement seront analysés. Nous caractériserons dans un second temps cette influence au travers des profils axiaux moyens. Enfin, nous clôturerons ce chapitre par la synthèse des calculs effectués via l'étude de la relation entre la vitesse moyenne du front et sa courbure moyenne, puis par l'intermédiaire des effets sur les limites de propagation.

Une partie des travaux présentés ici ont fait l'objet d'une communication au 26th INTERNATIONAL COLLOQUIUM ON THE DYNAMICS OF EXPLOSIONS AND REACTIVE SYSTEMS (ICDERS) [173].

6.2 Description de la configuration

La configuration physique modélisée dans ce chapitre est en grande partie identique à celle introduite dans le Chapitre 5. Le milieu est composé de deux couches de gaz disposées l'une au-dessus de l'autre. La couche inférieure, positionnée contre la paroi en $y = 0$, est constituée d'un mélange réactif et la couche supérieure d'un mélange chimiquement inerte. En particulier, les propriétés du milieu réactif sont strictement identiques à celles présentées dans le chapitre précédent. Plusieurs énergies d'activations sont étudiées ($E_a^* = 20$, $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$) ainsi que plusieurs hauteurs h . En ce qui concerne le milieu inerte, plusieurs températures T_i sont employées : $T_i = 295$ K, ce qui correspond aux calculs réalisés dans le Chapitre 5, $T_i = 750$ K et $T_i = 1400$ K. Le Tableau 6.1 regroupe les différentes températures ainsi que leur équivalence en termes de ratio des impédances acoustiques $Z = \sqrt{T_r/T_i}$. La résolution numérique employée est toujours $N_{1/2} = 30$, sauf pour les calculs à $E_a^* = 38.23$ dans lesquels $N_{1/2} = 10$, par nécessité de modéliser de plus grands domaines de calcul.

Lorsque la température de la couche inerte est $T_i = 1400$ K, une partie du domaine située dans la partie supérieure de l'écoulement devient subsonique dans le repère associé à l'onde de détonation. Afin d'assurer la présence d'une ligne sonique dans cette partie de l'écoulement, il est nécessaire d'accroître les dimensions, en particulier la hauteur, du domaine de calcul. Les simulations ont montré qu'une hauteur environ égale à trois fois la hauteur h de la couche réactive permet de satisfaire cette condition.

Les simulations considérées dans ce chapitre ont été réalisées conjointement dans deux centres de calculs régional et national :

TABLE 6.1 – Correspondance entre la température de la couche inerte T_i et le ratio des impédances acoustiques Z .

T_i	Z
295 K	1.0
750 K	0.63
1400 K	0.46

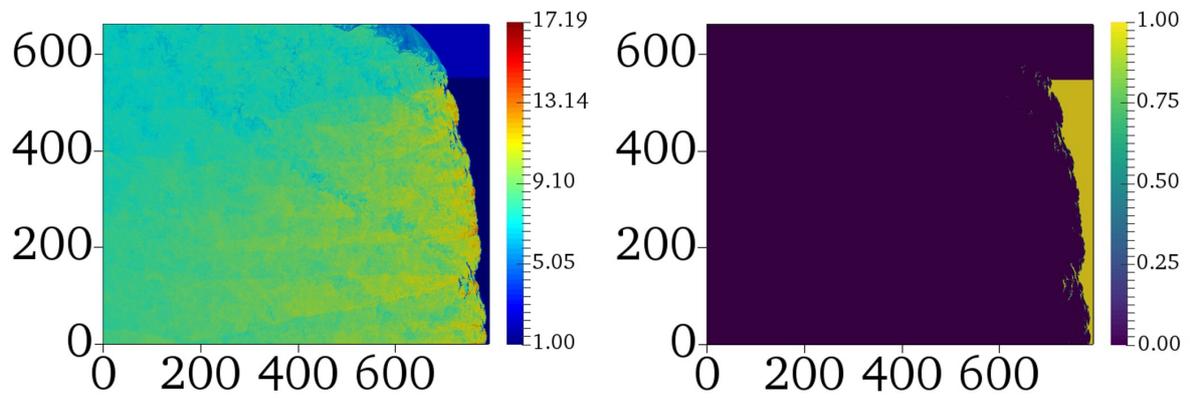
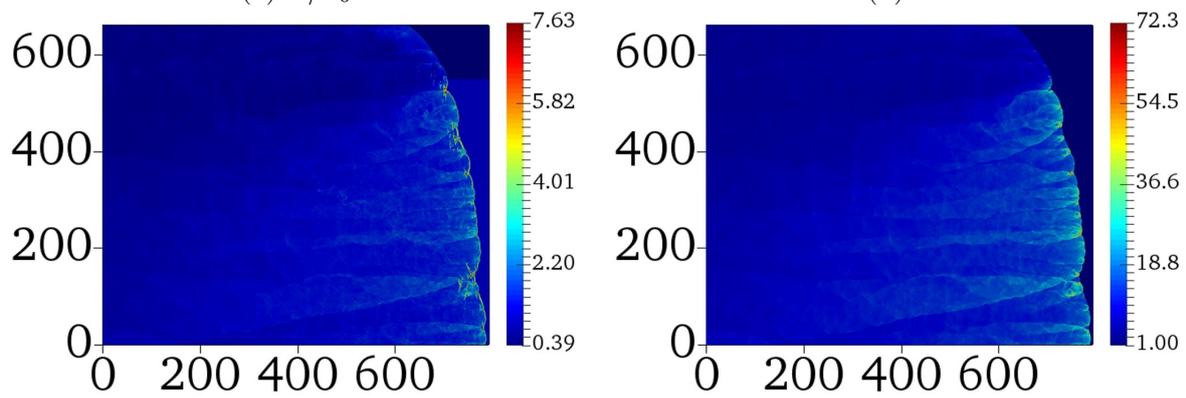
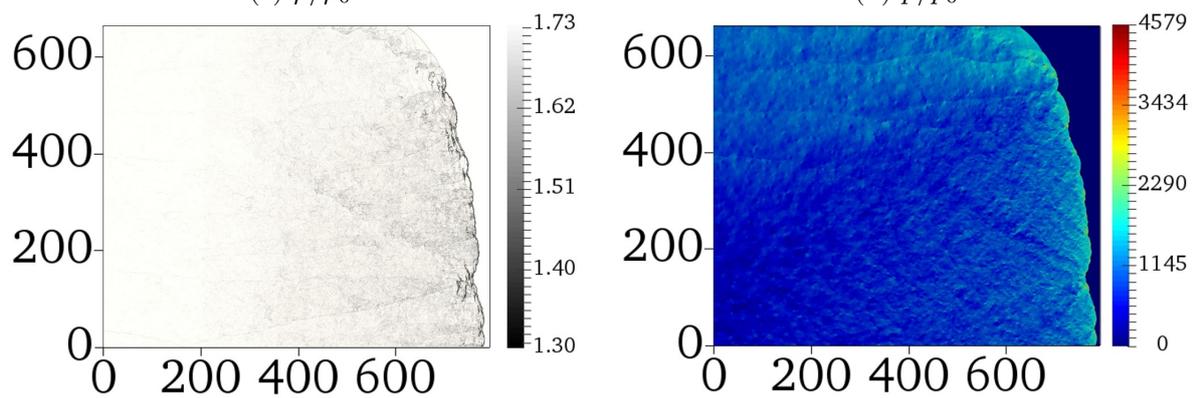
- Le supercalculateur du MÉSOCENTRE DE CALCUL POITEVIN, machine équipée de 2,300 cœurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2680 v2 - 2.80 Ghz pour une puissance de 55 TFlops
- Le supercalculateur OCCIGEN du GENCI-CINES, machine équipée de 85,824 cœurs (50,544 cœurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2690 v3 - 2.80 Ghz et 35,280 cœurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-2690 v4 - 2.80 Ghz) pour une puissance totale de 3.5 PFlops.

Entre 400 et 480 processeurs ont été utilisés sur des durées variables suivant le point de fonctionnement considéré.

6.3 Influence de la température de la couche inerte sur la topologie

Dans cette section, nous nous intéressons à la structure de l'onde de détonation et à son évolution suivant la valeur de la température de la couche inerte. L'écoulement pour l'énergie d'activation la plus élevée ($E_a^* = 38.23$) est exposé sur la Figure 6.1 dans le cas d'un confinement à $T_i = 750$ K. La topologie générale est dans ce cas très proche de celle déjà observée lorsque les deux milieux sont à des températures identiques. L'impédance acoustique du milieu diminuant, la vitesse transverse de l'interface augmente (cf. Analogie du tube à choc en Annexe B), ce qui entraîne une augmentation de l'angle de déflexion et de l'angle du choc. Ce comportement est d'autant plus prononcé lorsque la couche inerte est à $T_i = 1400$ K, tel qu'illustré sur la Figure 6.2. L'angle formé par l'onde de choc oblique est plus important. Localement, un choc droit détaché se forme et précède localement l'onde de détonation. Les températures de part et d'autre de l'interface de contact sont alors très proches dans cette configuration.

Une visualisation détaillée de la structure de l'interface entre les deux couches est proposée sur la Figure 6.3. Ces résultats proviennent d'une simulation réalisée pour $E_a^* = 30$, afin de bénéficier de la résolution numérique maximale, $N_{1/2} = 30$. La Figure 6.3 (a) présente une strioscopie numérique, tandis que la Figure 6.3 (b) expose le champ de fraction massique des gaz frais. Le choc détaché est clairement visible et forme un angle

(a) T/T_0 (b) Y (c) ρ/ρ_0 (d) p/p_0 (e) S (f) $\sqrt{u^2 + v^2}$ (m s^{-1})

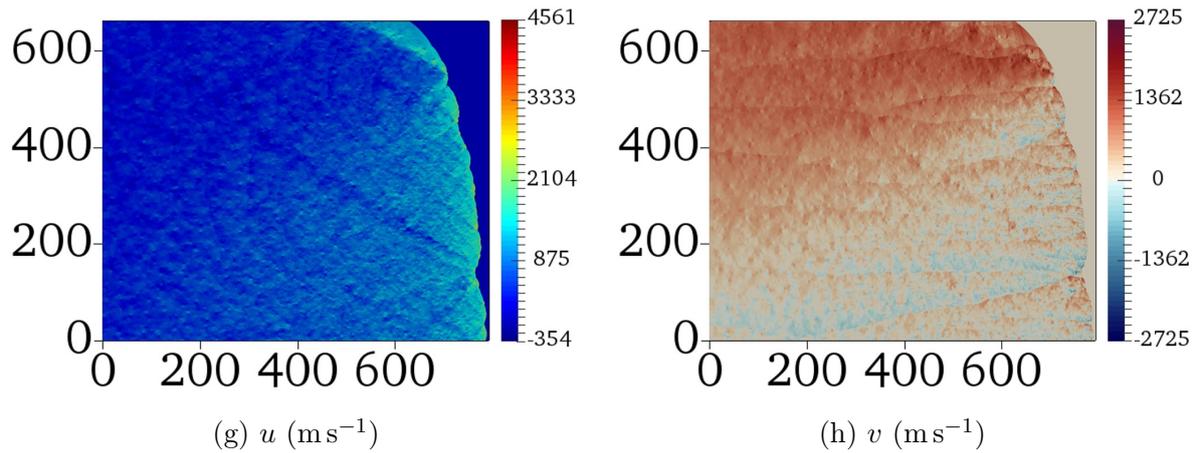
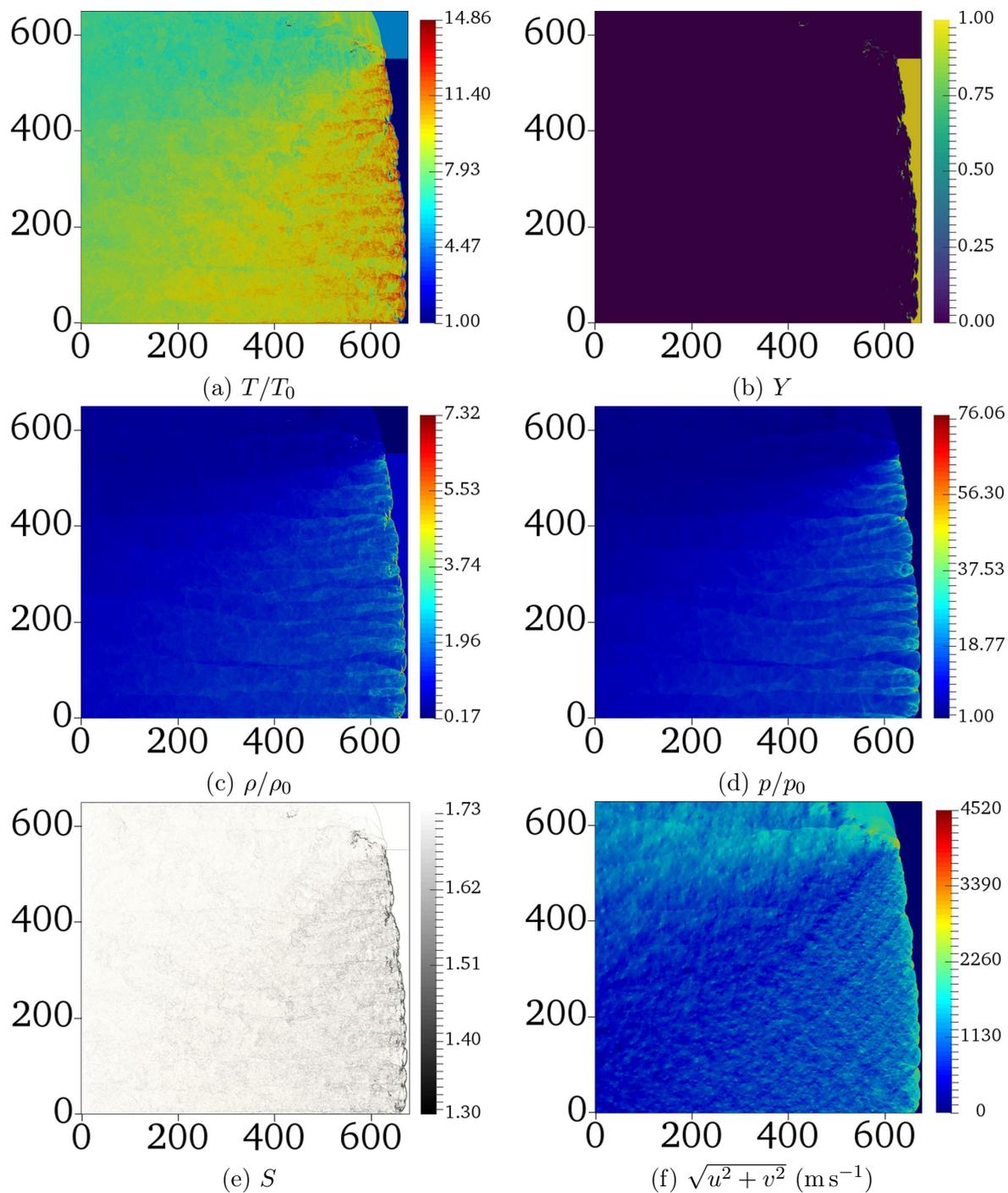


FIGURE 6.1 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz frais, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$ et $T_i = 750 \text{ K}$.

droit avec le milieu inerte. La détonation progresse quant à elle dans la partie inférieure de la figure correspondant au mélange réactif. La jonction entre ces deux entités est effectuée par un choc oblique et un choc oblique réfléchi au sein du jet. Cette sous-structure locale est qualifiée de *Mach lens* dans la littérature [127]. Le gaz réactif présent proche de l'interface est mis en vitesse après le passage du choc détaché, ce qui résulte en la création d'un jet de gaz frais en aval du front. L'interaction de ce jet avec les ondes de choc transverses conduit à la formation d'instabilités hydrodynamiques de type Richtmyer-Meshkov. Cette région devient particulièrement turbulente et tourbillonnante, phénomène qui persiste longtemps en aval du front. La présence du jet de gaz frais n'est pas stationnaire, mais intermittente. La longueur du choc oblique fluctue au gré du mouvement des points triples le long du front. Lorsqu'un point triple traverse l'interface entre les deux couches de gaz, la détonation gagne localement en célérité et la jonction avec l'onde de choc détachée se fait directement. Le jet de gaz frais se détache alors du front et est convecté en aval. Ce mouvement cyclique est responsable de la création de larges structures tourbillonnaires dans cette région. Les gaz frais ainsi déportés se consomment ensuite de façon similaire à celle des poches de gaz classiquement rencontrées.

La structure cellulaire associée à $E_a^* = 38.23$ est révélée sur la Figure 6.4 pour les différentes valeurs de la température de la couche inerte T_i . A la différence de ce qui est observé pour $T_i = 295 \text{ K}$, la démarcation de la structure cellulaire correspond à la frontière entre les deux couches. Ainsi, le mode de propagation "galopant" de faible fréquence observé à la périphérie de la couche réactive semble être caractéristique des situations



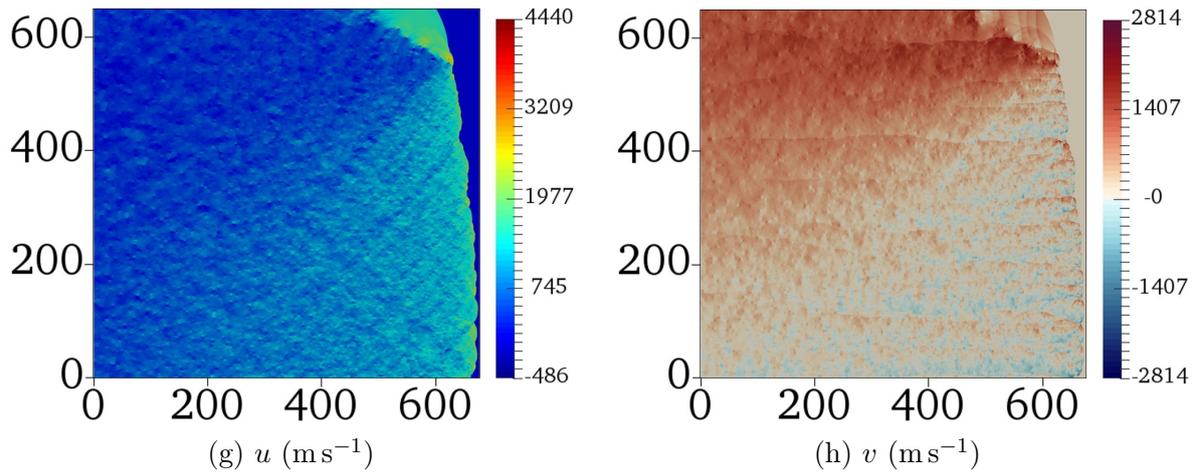


FIGURE 6.2 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz froids, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$ et $T_i = 1400 \text{ K}$.

dans lesquelles le ratio des impédances acoustiques est proche de l'unité. L'observation expérimentale de ce phénomène réalisée par Borisov et al. [112] fut effectuée pour un mélange stoechiométrique de méthane et d'oxygène, soit pour un ratio des impédances acoustiques $Z = 0.95$ proche de l'unité. En outre, l'augmentation de la température T_i se traduit par une diminution de la taille de cellule et par une augmentation de la régularité. Enfin, le comportement des ondes transverses lorsqu'elles traversent l'interface entre les deux couches diffère. Pour $T_i = 295 \text{ K}$, le passage des points triples au travers de l'interface n'entraîne pas de réflexion. Ce n'est plus le cas pour $T_i = 750 \text{ K}$ et $T_i = 1400 \text{ K}$: le déplacement des points triples vers la couche inerte produit une onde réfléchie, ce qui conduit à la réflexion de la structure cellulaire à l'interface entre les deux milieux, phénomène potentiellement source de points chauds dans l'écoulement [127].

Cette évolution de la topologie de l'onde de détonation lorsque la température de la couche inerte est élevée peut être observée dans la littérature consacrée à la modélisation numérique des moteurs à détonation rotative. Par exemple, sur la Figure 6.5 adaptée des travaux de Tsuboi et al. [174], le front de détonation coïncide avec la surface grise déterminée par l'isocontour de pression. Sur la partie supérieure du front, un bourrelet avançant la détonation est visible, et fait la jonction avec le choc oblique. Expérimentalement, la transformation de l'onde de choc oblique en un choc détaché a été observée par Dabora [106, 107] puis Adams [108, 109] dans des configurations au sein desquelles le confinement est réalisé à l'aide d'un gaz de plus faible masse molaire que le milieu réactif (voir le Chapitre 2).

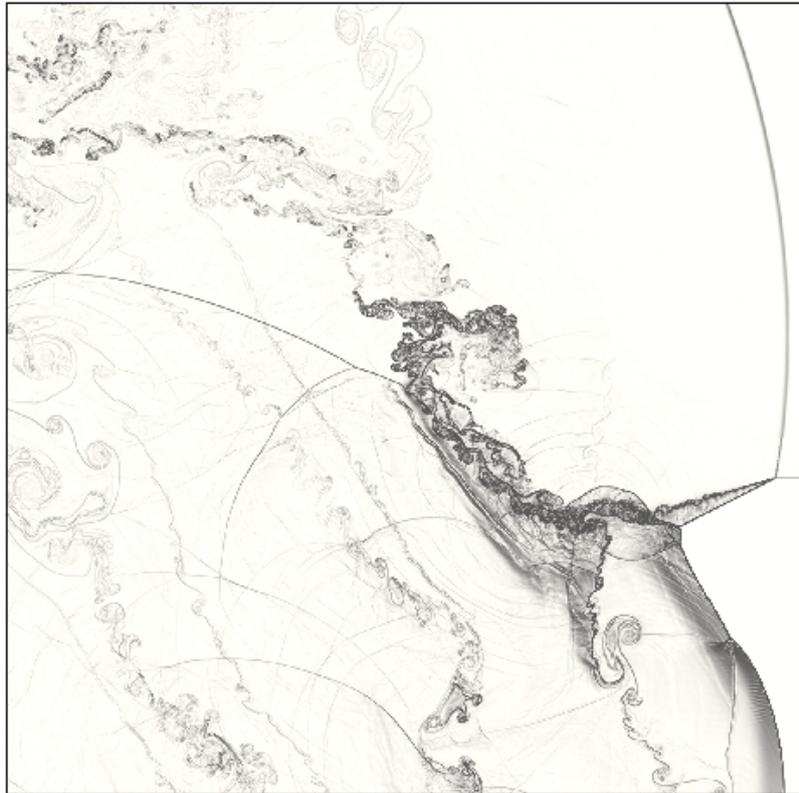
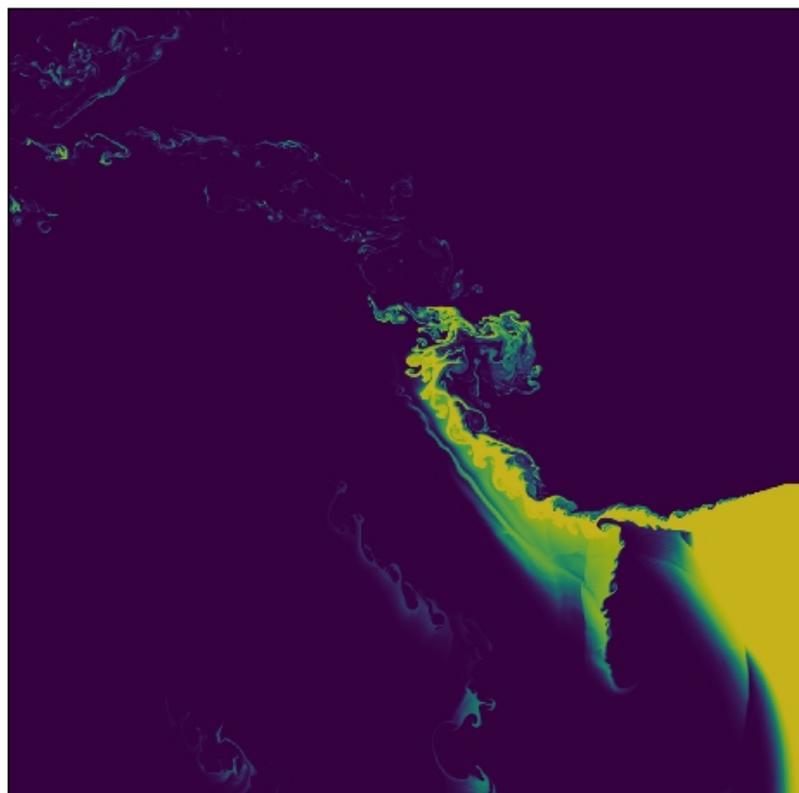
(a) S (b) Y

FIGURE 6.3 – Vue détaillée de la structure de l'écoulement à l'interface entre les deux couches. Pour cette simulation, $E_a^* = 30$, $h = 15 \text{ mm} \approx 7 \lambda$ et $T_i = 1400 \text{ K}$.

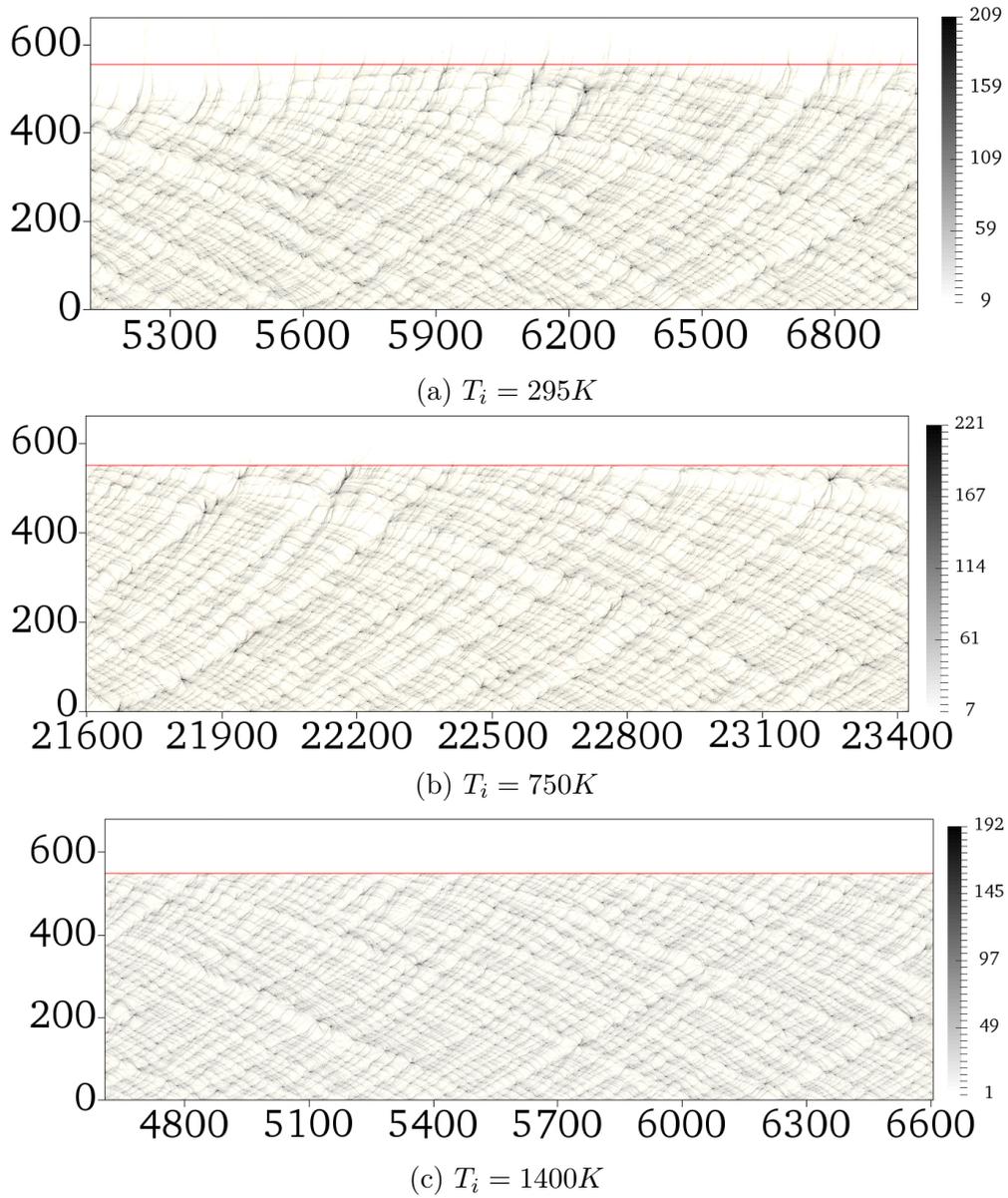


FIGURE 6.4 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.

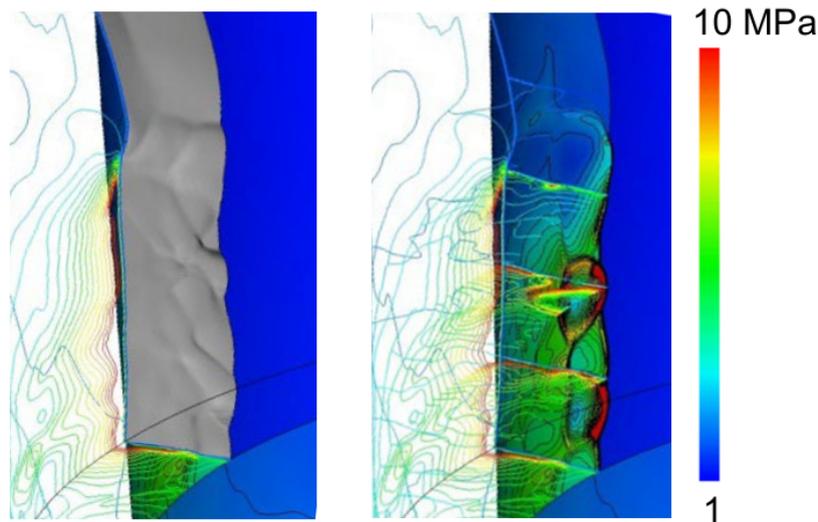


FIGURE 6.5 – Isocontours de pression d’une détonation tridimensionnelle se propageant dans un moteur à détonation rotative. Adapté de Tsuboi et al. [174]

6.4 Influence de la température de la couche inerte sur les profils axiaux moyens

Nous nous intéressons dans cette section à l’influence de la température T_i sur les profils axiaux moyens, de façon à caractériser les effets produits par l’élévation de la température du milieu inerte. La Figure 6.6 présente l’évolution de la pression moyenne \bar{p} , de la densité moyenne $\bar{\rho}$, de la fraction massique de gaz frais moyenne \tilde{Y} ainsi que du nombre de Mach local moyen \tilde{M} . Les variations de T_i n’entraînent pas de modification majeure des profils moyens obtenus. L’augmentation de la température de la couche inerte conduit à un léger accroissement des niveaux de pression. Ce comportement est dû à la moindre divergence de l’écoulement en aval du front. La position pour laquelle le nombre de Mach local moyen est égal à 1 est également accrue. Ainsi, les caractéristiques de l’écoulement moyen tendent à se rapprocher du cas idéal avec l’augmentation de la température T_i . Plus la température de la couche inerte est élevée, moins les pertes subies par la détonation sont importantes.

La Figure 6.7 est consacrée à l’évolution des fluctuations de pression $\overline{p'^2}^{1/2}$, de masse volumique $\overline{\rho'^2}^{1/2}$, de vitesse matérielle $\overline{u'^2}^{1/2}$ et du nombre de Mach turbulent local \tilde{M}_t . L’augmentation de la température du confinement réduit légèrement l’amplitude des fluctuations de pression et de masse volumique. Cet écart est d’autant plus marqué pour les fluctuations de vitesse, pour lesquels la courbe relative à $T_i = 1400$ K se distingue clairement des autres configurations. Ces différences démontrent l’effet stabilisateur induit par l’augmentation de la température du milieu confinant, et par la réduction des pertes subies par l’onde de détonation. La position du minimum $x_{u''}$ semble également évoluer

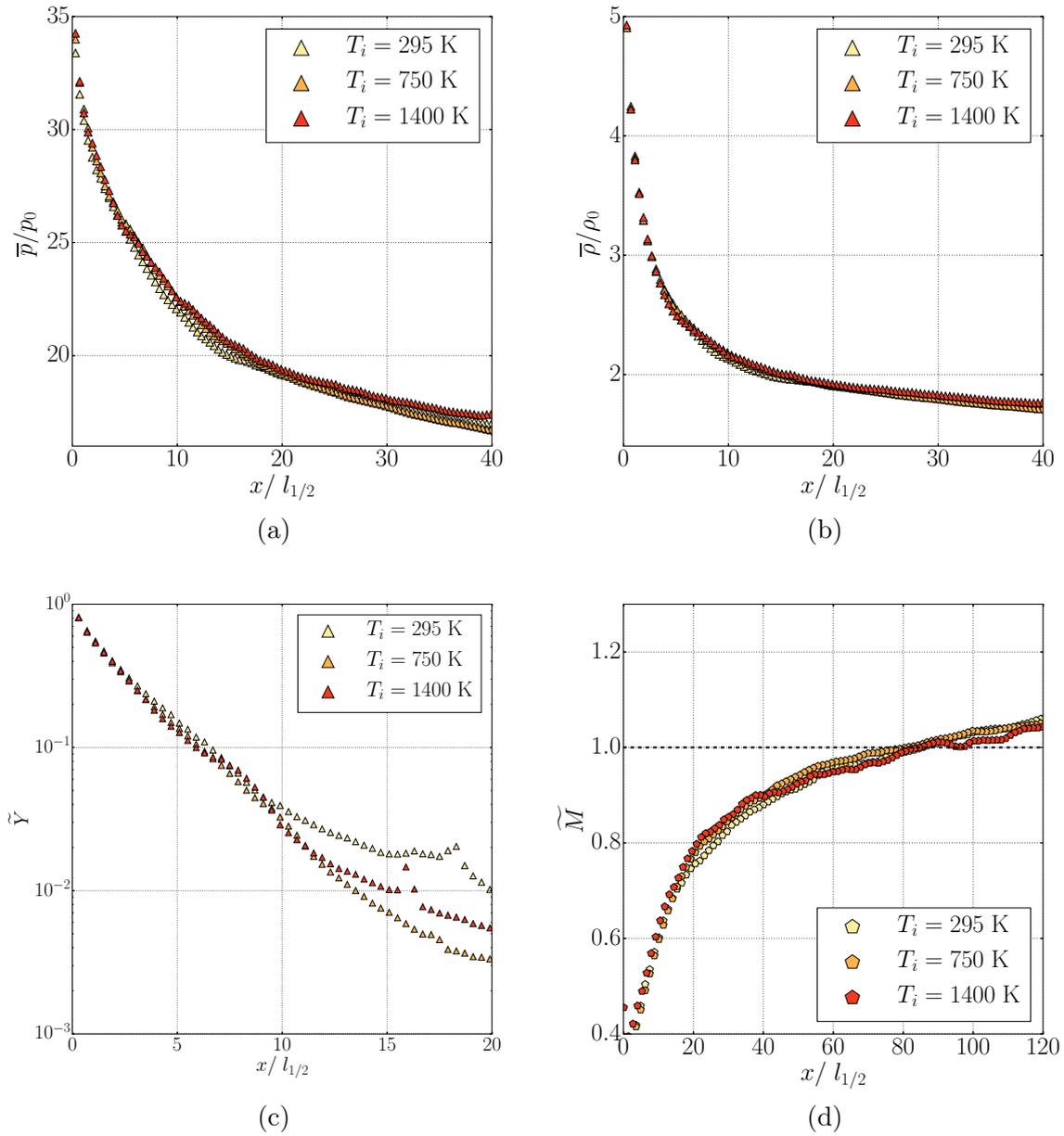


FIGURE 6.6 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50$ mm $\approx 26 \lambda$.

avec la température T_i . De $x_{u''} = 85 l_{1/2}$ pour $T_i = 295$ K, cette distance augmente à $x_{u''} = 120 l_{1/2}$ et $x_{u''} = 190 l_{1/2}$ pour $T_i = 750$ K et $T_i = 1400$ K, respectivement. L'évolution de cette variable est de nouvelle fois en adéquation avec l'évolution de l'épaisseur hydrodynamique. Le nombre de Mach turbulent local, présenté sur la Figure 6.7 (d), décrit un comportement similaire avec une réduction de l'amplitude avec l'augmentation de la température du milieu inerte.

La Figure 6.8 détaille l'évolution de l'écoulement moyen sur l'axe $y = 0$ pour une énergie d'activation réduite $E_a^* = 20$. Les profils de la pression et de la masse volumique gagnent en intensité avec l'augmentation de la température de la couche inerte T_i . Cela confirme la réduction de la divergence de l'écoulement lorsque T_i augmente. En revanche, les profils décrivant l'évolution de la fraction massique sont strictement identiques. L'épaisseur hydrodynamique présente également un léger accroissement. En ce qui concerne les fluctuations, décrites sur la Figure 6.9, les résultats contrastent avec ceux obtenus pour $E_a^* = 38.23$. Le niveau des fluctuations semble augmenter avec la température de la couche inerte pour ce mélange régulier.

6.5 Synthèse des résultats numériques

Cette section traite des résultats obtenus pour des hauteurs h variées et les différentes températures de la couche inerte T_i .

6.5.1 Limites de propagation

L'influence de la température du confinement sur les limites de propagation est illustrée sur la Figure 6.10 pour les différentes valeurs de l'énergie d'activation réduite. Dans le cas d'un mélange stable (cf. Figure 6.10 (a)), l'augmentation de T_i conduit à une réduction du déficit de vitesse subit par la détonation. L'amplitude de cette réduction est d'autant plus importante que la hauteur de la couche réactive est faible. Ainsi, pour $h = 12$ mm, la transition de $T_i = 295$ K à $T_i = 1400$ K entraîne une augmentation de moins de $0.01 D/D_{CJ}$. A l'opposé, pour la hauteur de la couche réactive la plus petite ($h = 3.1$ mm), le déficit de vitesse est réduit de près de $0.07 D/D_{CJ}$. La transition de $T_i = 295$ K à $T_i = 750$ K produit des effets semblables, bien que moins prononcés que ceux observés pour $T_i = 1400$ K. Un constat identique se dégage des résultats obtenus pour des énergies d'activation plus élevées ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$) : la hausse de la température T_i se traduit par une augmentation de la célérité de l'onde de détonation. De plus, les calculs réalisés pour la

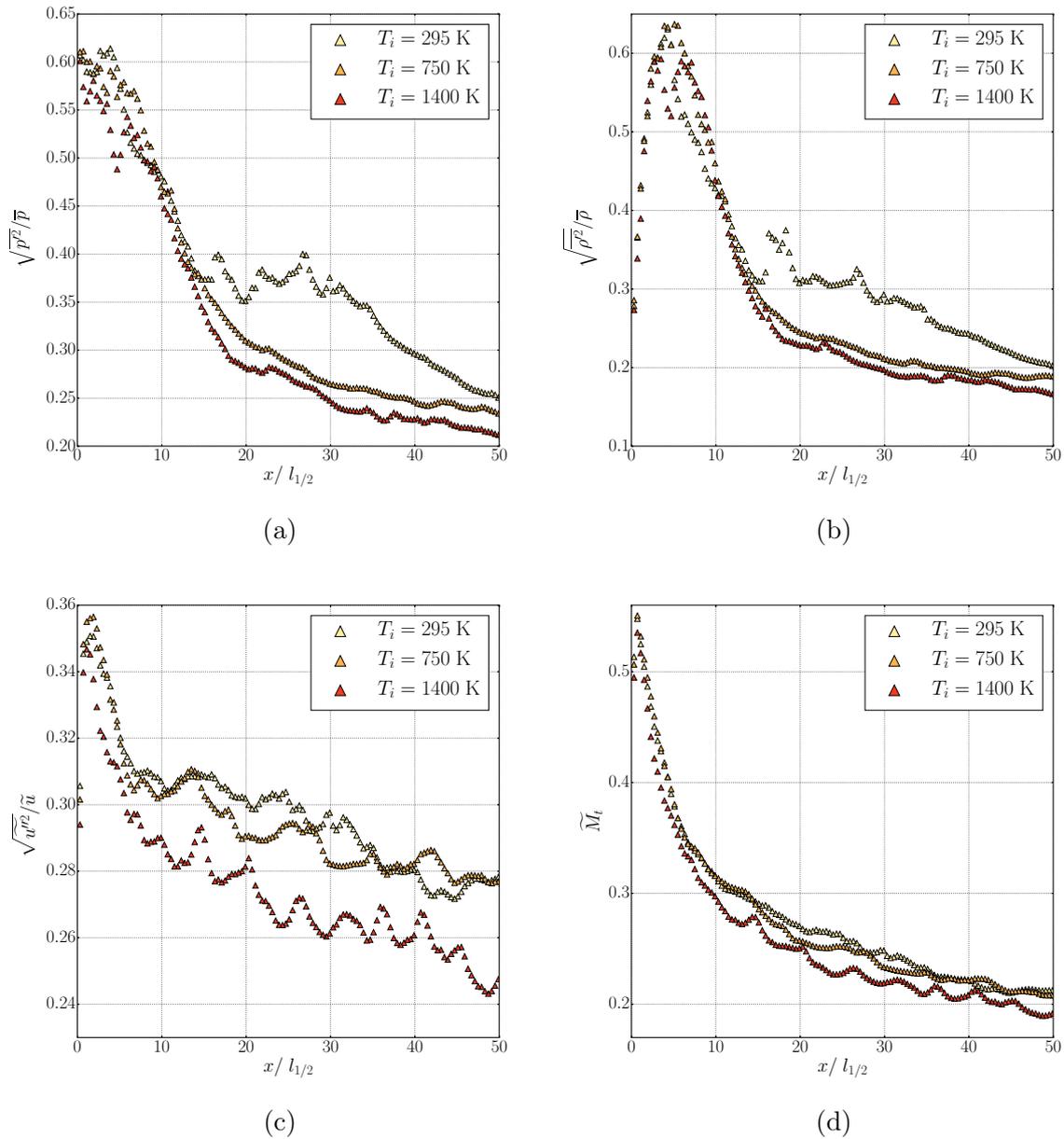


FIGURE 6.7 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 38.23$ et $h = 50 \text{ mm} \approx 26 \lambda$.

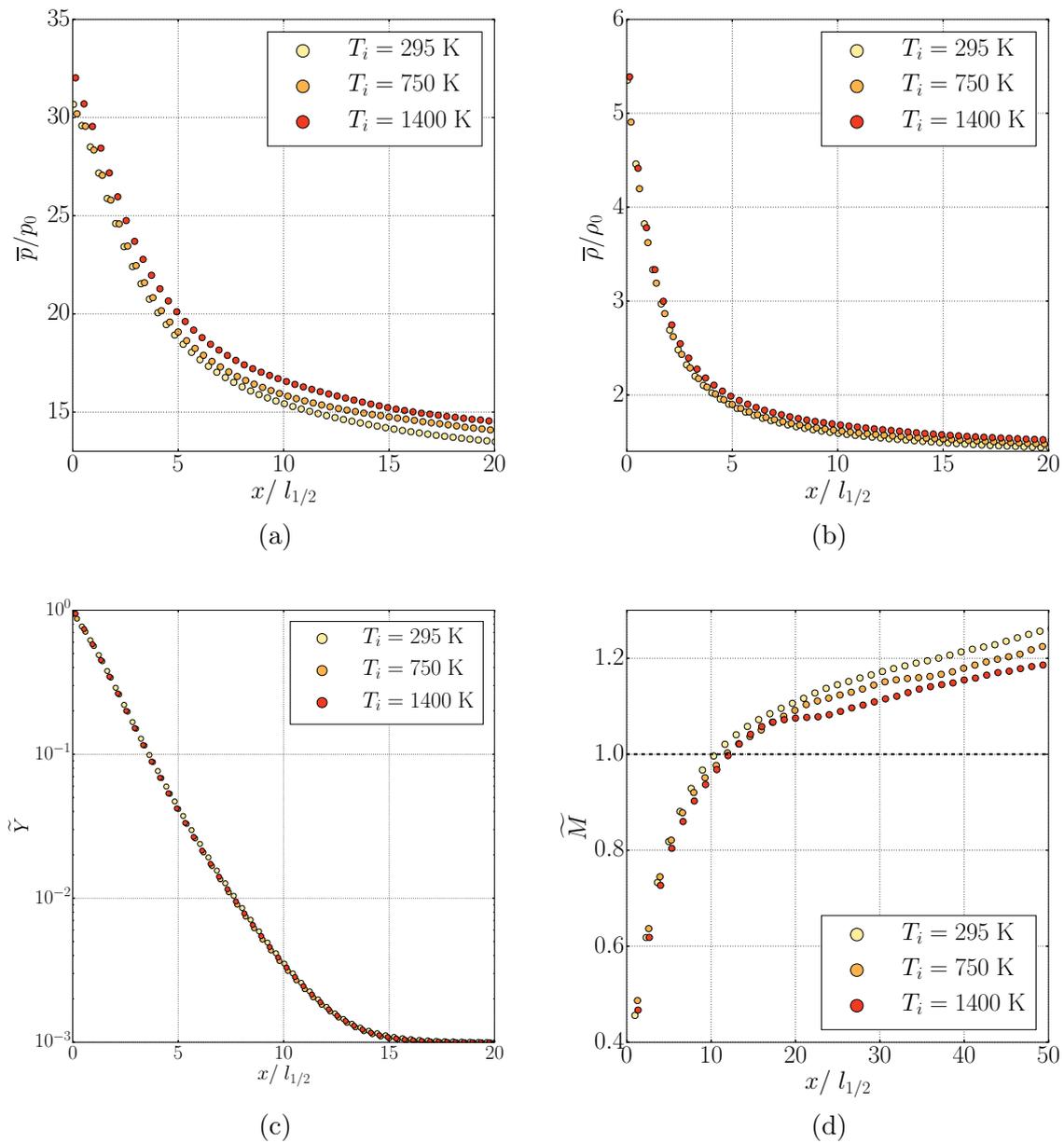


FIGURE 6.8 – Évolution des profils moyens de pression (a), de masse volumique (b), de fraction massique de gaz frais (c) et du nombre de Mach local dans le repère du choc (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.

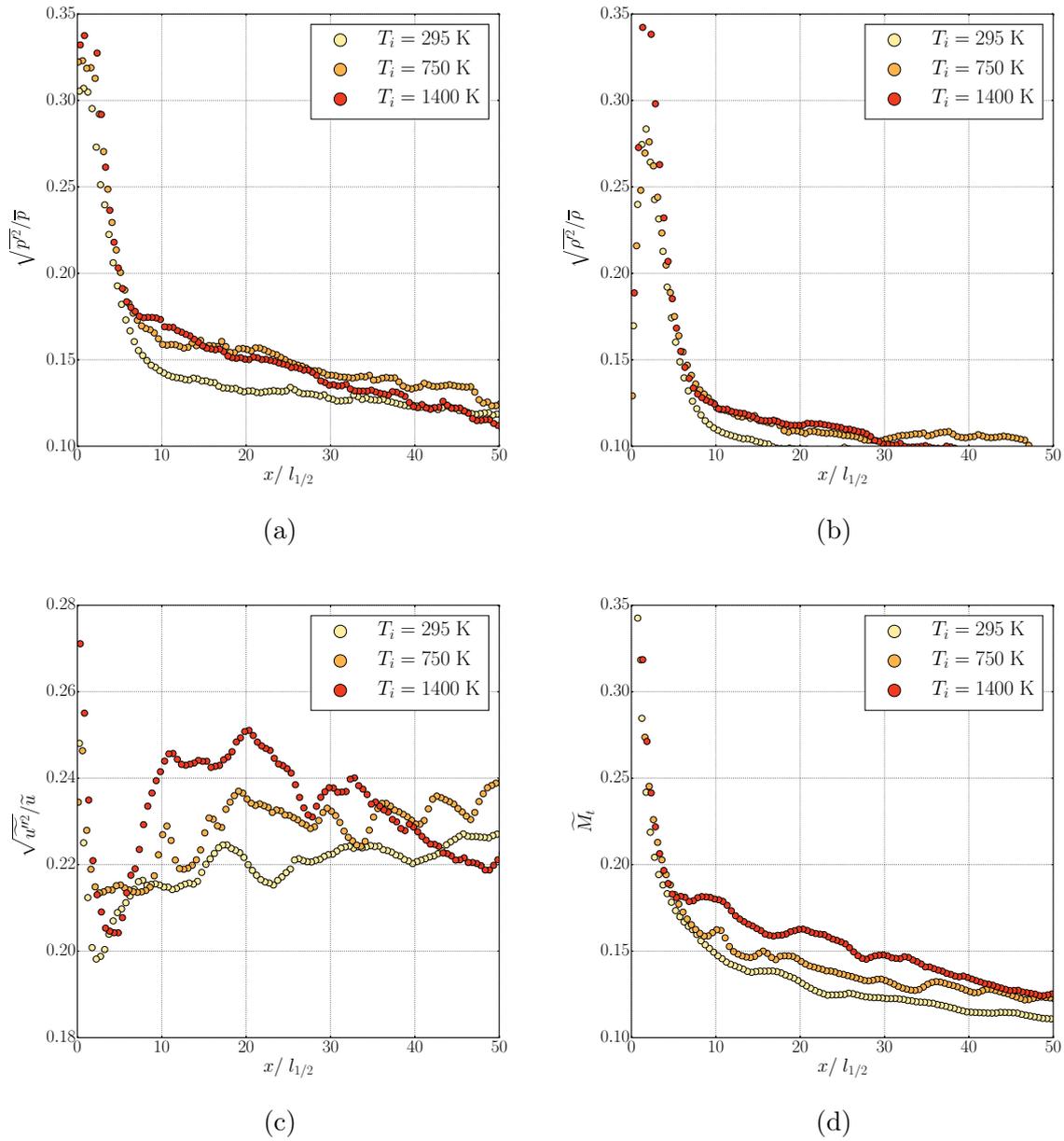


FIGURE 6.9 – Évolution des fluctuations moyennes de pression (a), de masse volumique (b), de vitesse (c) et du Mach turbulent moyen (d) en fonction de la distance au choc pour les différentes valeurs de T_i . Dans cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8 \text{ mm} \approx 5 \lambda$.

température la plus importante ($T_i = 1400$ K) montrent que la détonation parvient à se propager dans des couches de gaz réactif de hauteur h inférieure aux hauteurs critiques obtenues pour $T_i = 295$ K et $T_i = 750$ K. La hauteur critique est réduite de 3.5λ et de 12λ pour $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$, respectivement, ce qui équivaut à une réduction d'un facteur 1.75 et 2.75, respectivement.

La Figure 6.11 (a) expose l'évolution de la vitesse du front en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par λ pour l'ensemble des calculs réalisés. Elle englobe donc les simulations effectuées pour les différentes énergies d'activation réduites ainsi que pour les différentes températures de la couche inerte. Cette représentation entraîne une dispersion importante des résultats, sans qu'il soit possible d'observer une tendance étant fonction de la température T_i . La Figure 6.11 (b) présente les données colorisées suivant l'énergie d'activation réduite du mélange. Dans ce cas, les résultats suivent une progression croissante en fonction de la sensibilité du mélange réactif (c'est-à-dire E_a^*), et ce de façon plutôt indépendante à la valeur de T_i . Ainsi, la taille de cellule idéale utilisée en tant qu'échelle de longueur caractéristique de la détonation ne permet pas d'effectuer la comparaison des résultats en configuration non idéale. Sur la Figure 6.11 (c), la célérité moyenne du front est tracée en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par l'épaisseur hydrodynamique calculée durant chacune des simulations. Comme dans le Chapitre 5, l'utilisation de l'épaisseur hydrodynamique comme longueur caractéristique permet de regrouper les données. L'effet du confinement compressible sur la détonation est alors visible. L'augmentation de T_i , assimilable à la réduction des pertes subies par la détonation, se traduit alors par un décalage des courbes vers la gauche de la figure, ce qui correspond à des rapports h/h_t petits.

Les variations de la hauteur critique h_c en fonction du ratio des impédances acoustiques entre les deux couches sont révélées sur la Figure 6.12 pour les paramètres correspondants au mélange d'hydrogène et d'oxygène dans des proportions stœchiométriques ($E_a^* = 38.23$). La valeur maximale est d'environ 22λ et est associée à $Z = 1$, soit à une température de la couche inerte $T_i = 295$ K. L'augmentation de T_i , qui correspond à $Z < 1$, conduit à une diminution de la hauteur critique, d'abord faible pour $T_i = 750$ K puis importante pour $T_i = 1400$ K. Dans ce cas, la hauteur critique h_c n'est plus que de 8λ . Dans les études expérimentales dédiées à l'influence d'un confinement gazeux sur la détonation, la couche inerte est le plus souvent constituée d'air. Pour un mélange tel que $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ confiné par l'air ambiant, le ratio des impédances acoustiques est $Z = 1.54$. Cette valeur est atteinte avec une couche de gaz inerte à la température de 124 K. Deux simulations ont été conduites pour ces conditions, et ont permis d'établir la hauteur critique h_c correspondante à environ 12λ . Ainsi, il apparaît que les conditions de propagation les moins favorables à

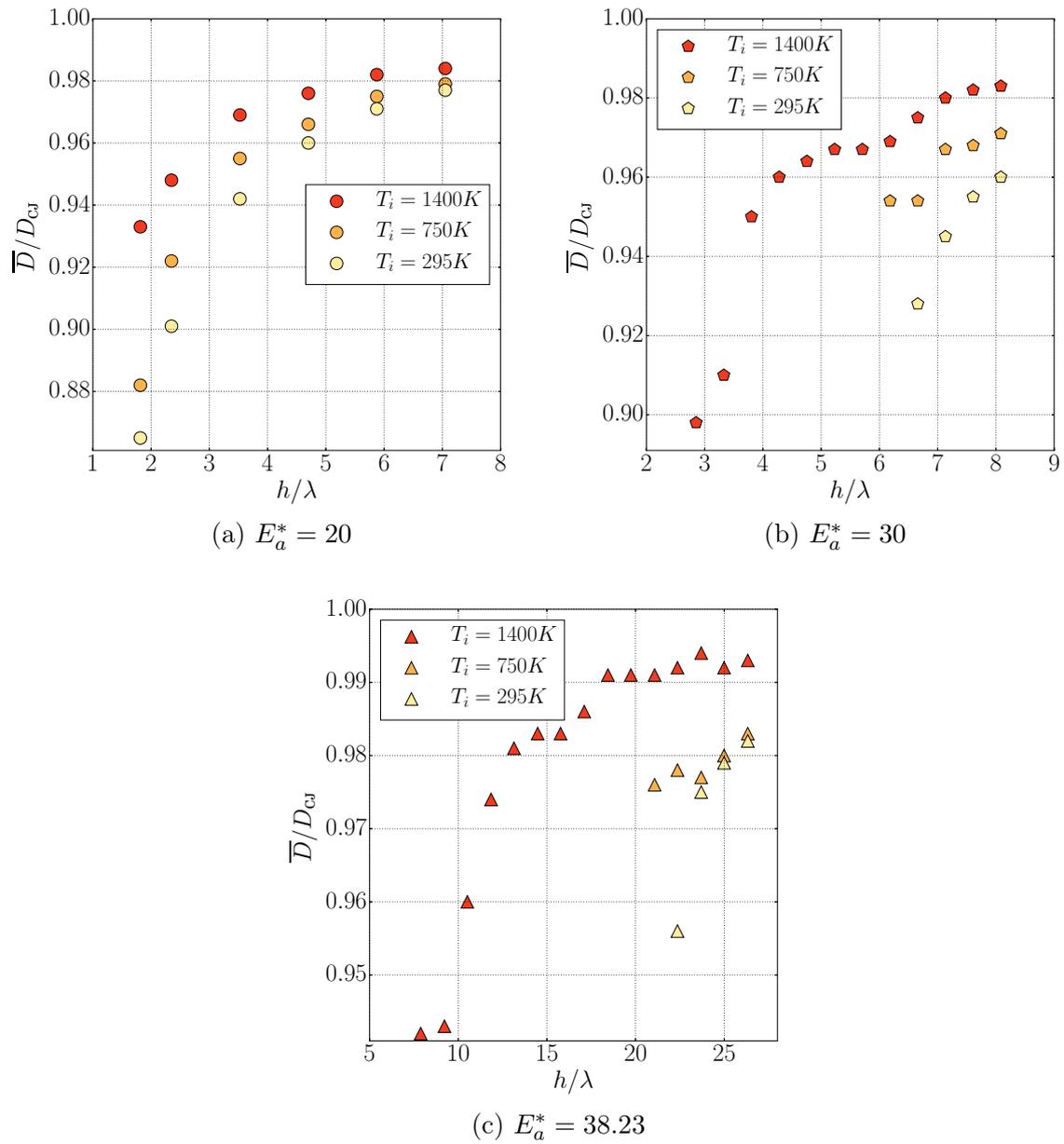


FIGURE 6.10 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par taille de cellule colorisé suivant la température de la couche inerte. (a) : $E_a^* = 20$. (b) : $E_a^* = 30$. (c) : $E_a^* = 38.23$.

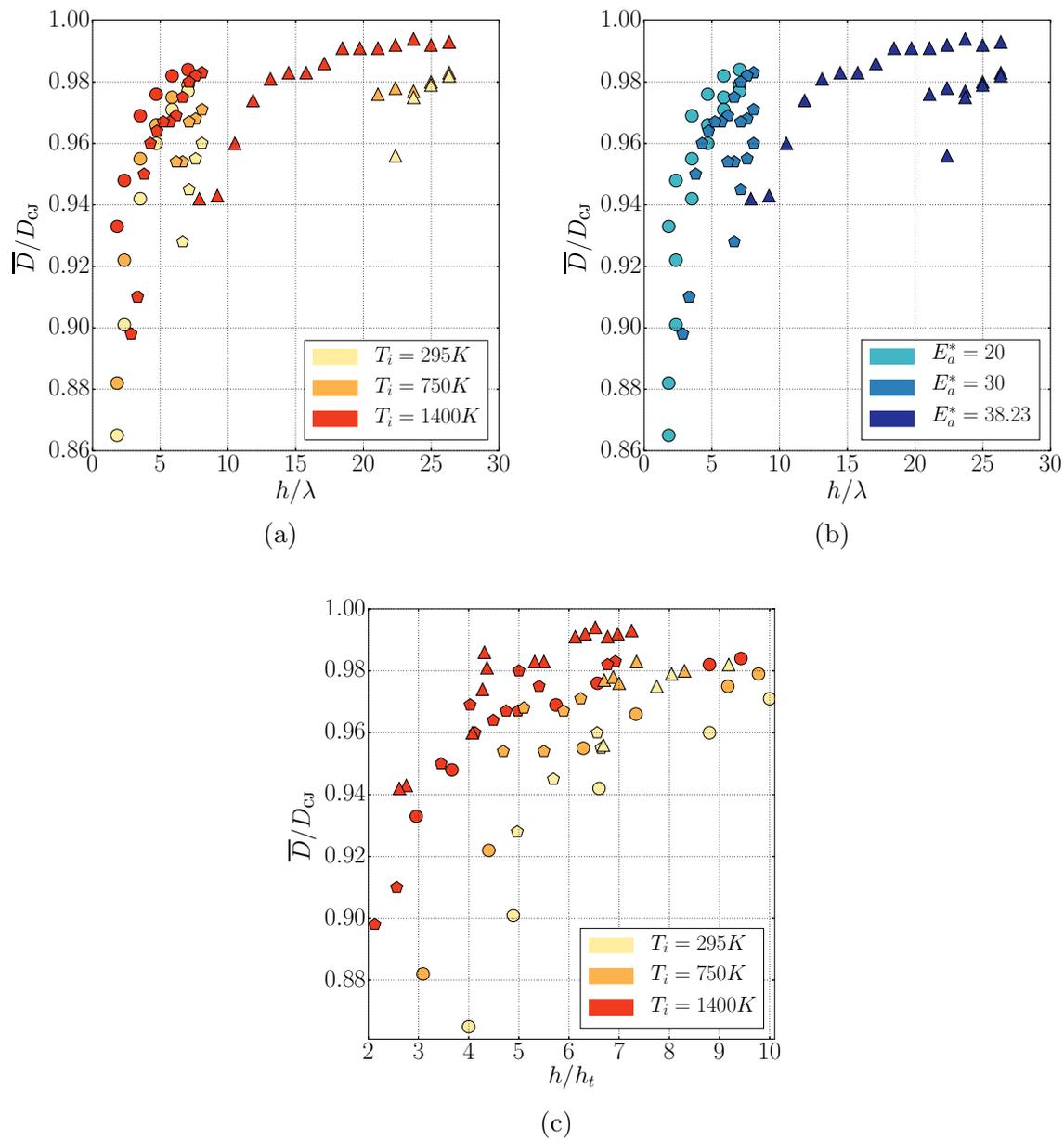


FIGURE 6.11 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la hauteur de la couche réactive normalisée par taille de cellule (a) et par l'épaisseur hydrodynamique (b) colorisé suivant la température de la couche inerte. \circ : $E_a^* = 20$, \diamond : $E_a^* = 30$, \triangle : $E_a^* = 38.23$.

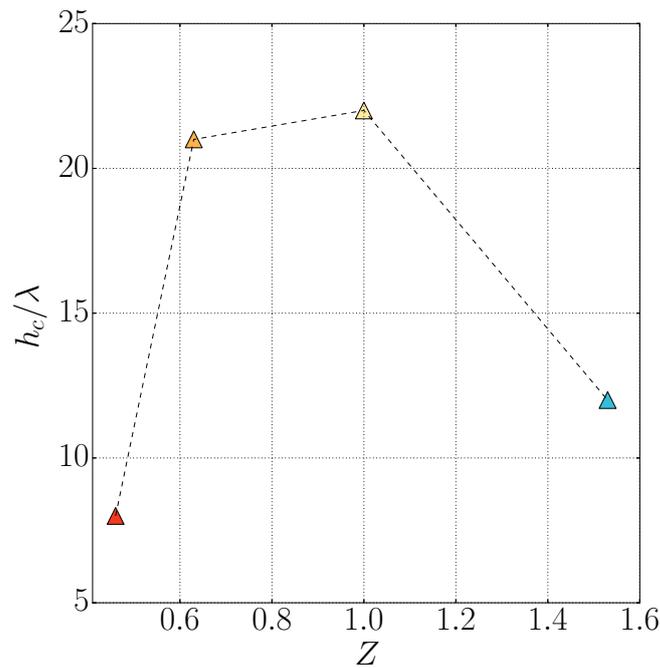
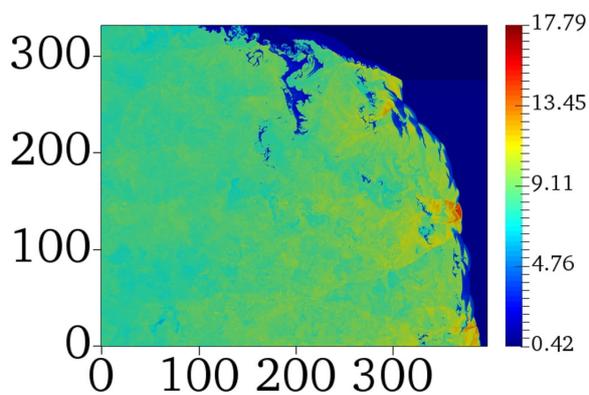
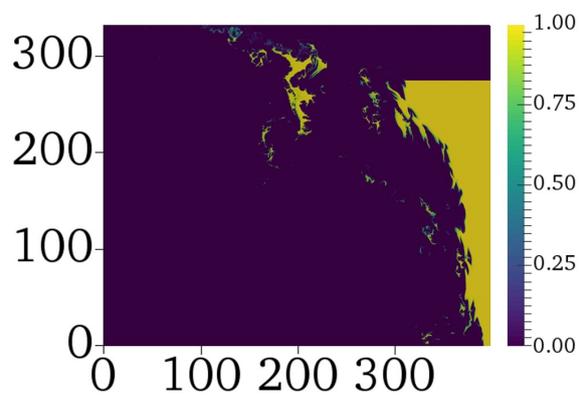
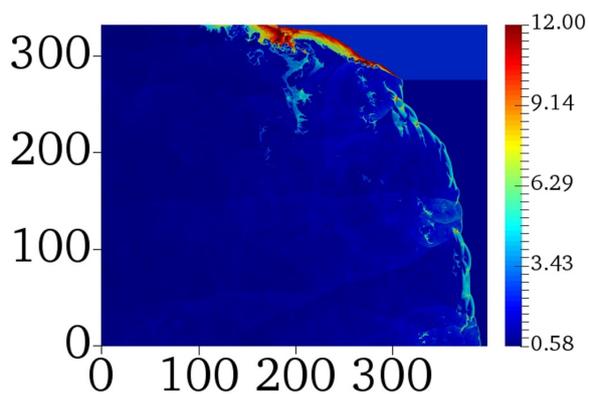
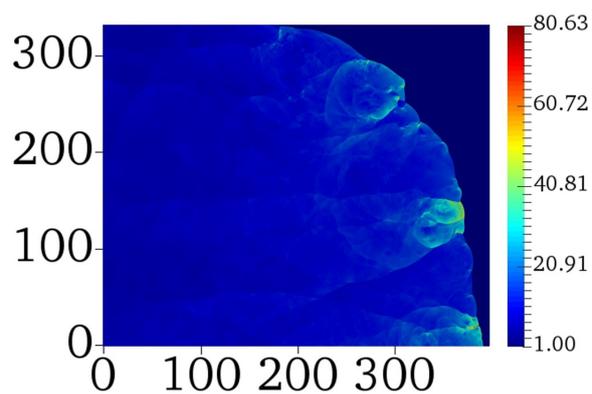
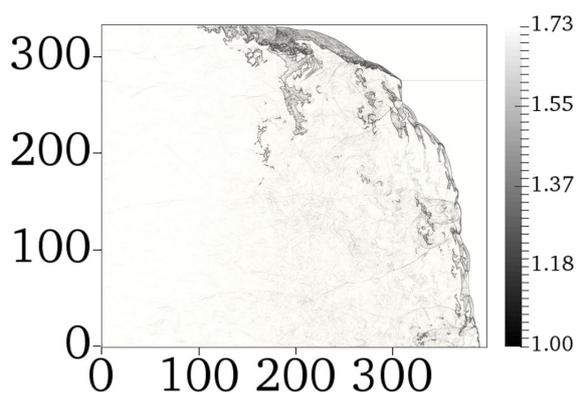
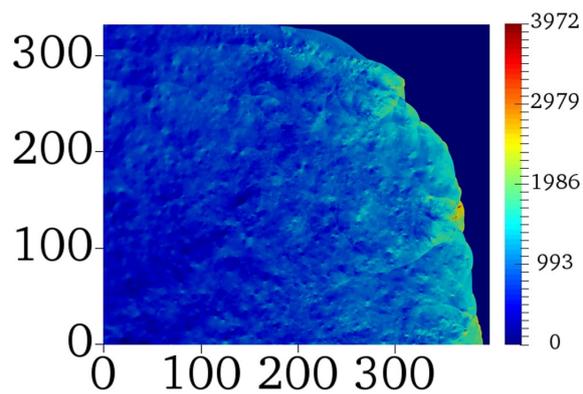


FIGURE 6.12 – Évolution de la hauteur critique de propagation h_c en fonction du ratio des impédances acoustiques Z .

l'onde de détonation sont atteintes pour $Z = 1$ lorsque les milieux réactifs et inertes sont à des températures identiques. La diminution et l'augmentation du ratio des impédances acoustiques Z réduit la hauteur critique et permettent à la détonation de se propager dans un milieu pour lequel l'extinction se produirait avec $Z = 1$.

La Figure 6.13 révèle l'écoulement pour une couche inerte à 124 K. La structure générale de la détonation est similaire à celle obtenue dans le cas d'un confinement à $T_i = 295$ K. Le front présente une courbure globale, surmonté d'un choc oblique et d'une interface de contact. L'angle entre le choc oblique et l'interface entre les deux milieux est cependant plus important. La région de plus forte densité est située en aval du choc oblique, dans la couche inerte. La structure cellulaire associée est présentée sur la Figure 6.14. La qualité irrégulière du réseau formé par la trajectoire des points triples semble identique à celle observée pour $T_i = 295$ K, c'est-à-dire $Z = 1$. En revanche, contrairement à la configuration dans laquelle les deux couches sont à une température identique, les points triples interagissent avec l'interface entre les milieux réactif et inerte. Les intersections des trajectoires avec cette interface, symbolisée en rouge sur la Figure 6.14, donnent lieu à la naissance d'une nouvelle trace, synonyme de réflexion des ondes transverses. Ce mécanisme pourrait certainement participer à la réduction des limites de propagation en constituant une source de régénération des points triples, que l'on sait être essentiels aux détonations dans les mélanges instables. Les réflexions observées ne sont cependant pas

(a) T/T_0 (b) Y (c) ρ/ρ_0 (d) p/p_0 (e) S (f) $\sqrt{u^2 + v^2}$ (m s^{-1})

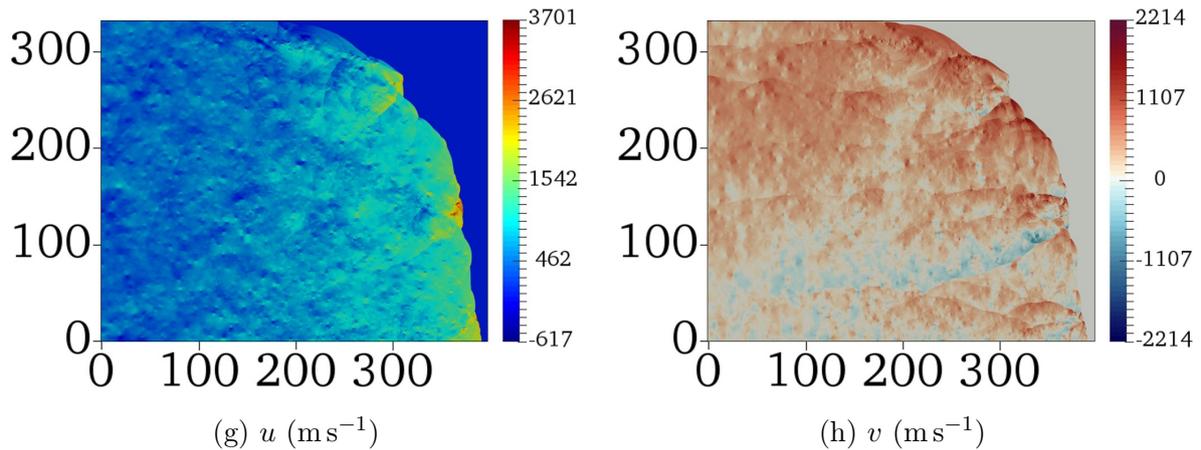


FIGURE 6.13 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz fais, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 25$ mm et $T_i = 124$ K.

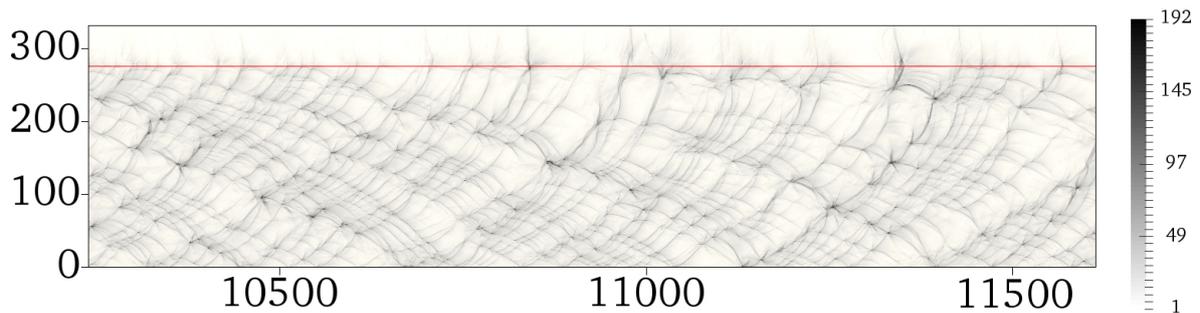


FIGURE 6.14 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 38.23$, $h = 25$ mm et $T_i = 124$ K.

aussi importantes que lorsque la température de la couche inerte est supérieure à celle du milieu réactif, i.e. $T_i = 750$ K et $T_i = 1400$ K.

L'aptitude à la propagation des détonations dans les moteurs à détonations rotatives résulte de la combinaison d'une multitude de facteurs intrinsèques au dispositif. Il apparaît par exemple que le mélange issu de l'injection séparée du combustible et de l'oxydant ne conduit pas à une composition homogène. Des gradients de richesse sont présents dans le milieu réactif, qui se mélange partiellement avec les gaz brûlés déjà présents dans la chambre. Ce premier facteur est potentiellement responsable d'un déficit de vitesse relativement à la célérité observée dans un milieu parfaitement homogène. C'est pourquoi il est difficile de parler d'une hauteur critique h_c/λ à propos de la propagation dans les moteurs à détonations rotatives, la taille de cellule caractéristique du mélange homogène

n'étant sans doute pas représentative du mélange réel dans la chambre de combustion. Nous ne nous avancerons donc pas à établir un critère préjugéant de l'aptitude de la détonation à se propager dans les RDE pour une hauteur de gaz frais donnée. En revanche, nous pouvons affirmer que la présence de gaz chauds au-dessus des gaz frais permet d'accroître la stabilité de la détonation. La combustion de la couche de gaz frais à l'interface entre les deux milieux pourrait, en augmentant la température localement, augmenter d'autant plus ce phénomène [127]. De plus, le confinement chaud entraîne une réduction du déficit de vitesse causé par l'expansion des produits de détonation.

La hauteur critique obtenue numériquement pour $Z = 1.56$ ($h_c = 12 \lambda$) reste supérieure aux valeurs de la littérature pour des propagations en canaux rectangulaires. Plusieurs éléments sont susceptibles d'expliquer cet écart, certains d'entre eux ayant été introduits dans le chapitre précédent : la profondeur des dispositifs dans lesquels se propage la détonation n'est pas prise en compte dans nos simulations, qui sont bidimensionnelles. Or, il est certain que les ondes transverses jouent un rôle actif dans la propagation des détonations instables, et tout particulièrement dans les phases de re-initiations. La présence d'ondes transverses évoluant dans la profondeur du domaine de calcul constituerait ainsi une source de points triples supplémentaire susceptible de soutenir la détonation.

6.5.2 Relation célérité-courbure

En ce qui concerne la courbure moyenne du front, les résultats sont présentés sur la Figure 6.15. La célérité de la détonation D/D_{CJ} est tracée en fonction de $\mathcal{R}/l_{1/2}$ pour les différentes énergies d'activation réduites et pour les différentes valeurs de T_i . Les données obtenues via les simulations numériques sont comparées à celles issues du modèle WK, décrit dans la Section 5.4.1. La Figure 6.15 (a) révèle les résultats associés à $E_a^* = 20$. L'augmentation de la température de la couche supérieure se traduit par une translation des symboles vers des vitesses de propagation plus importantes, mais aussi vers des courbures plus faibles. La transition de $T_i = 295$ K à $T_i = 750$ K n'entraîne pas d'écarts avec le modèle WK. En revanche, pour la température la plus élevée ($T_i = 1400$ K), des différences apparaissent et sont de plus en plus marquées lorsque la hauteur de la couche réactive (ou la vitesse de la détonation) diminue. L'évolution de la topologie du front de détonation, avec l'apparition du choc détaché et du choc oblique, est probablement responsable de cet écart. Dans le cas des énergies d'activation plus élevées ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$), les calculs effectués dans le Chapitre 5 ont montré que le modèle WK ne permettait pas de retrouver la relation entre la célérité du front et sa courbure telle qu'observée dans les simulations numériques. Ce n'est toujours pas le cas des calculs

réalisés pour des confinements à $T_i = 750$ K et $T_i = 1400$ K. Les tendances sont malgré tout identiques à celles observées pour les mélanges stables, à savoir un déplacement des données vers le point $(0, 1)$ du domaine, le cas idéal correspondant à l'absence de perte. Ce comportement retranscrit les observations réalisées sur les profils moyens axiaux quant à la réduction des pertes et à l'évolution vers un état idéal.

La Figure 6.16 expose l'évolution de la vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure normalisée par la demi-longueur de réaction ((a) & (c)) et par l'épaisseur hydrodynamique ((b) & (d)). L'ensemble des résultats obtenus pour les différentes énergies d'activation, hauteurs de la couche réactive et températures de la couche inerte est représenté. Ainsi, ces quatre figures représentent les mêmes données colorisées et organisées de façon différente. L'adimensionnement par l'épaisseur hydrodynamique améliore la concentration des résultats (comparaison entre les Figures 6.16 (a) et (b)). En revanche, contrairement à l'évolution de la célérité moyenne avec la hauteur de la couche réactive h/h_t (Figure 6.11(c)), l'influence de la température T_i n'est plus visible. Sur les Figures 6.16 (c) et (d), les résultats sont colorisés d'après l'énergie d'activation réduite du mélange réactif. La représentation en $l_{1/2}/\mathcal{R}$ offre une séparation claire entre les différentes valeurs de E_a^* . En particulier, une délimitation entre les mélanges réguliers d'une part, et irréguliers d'autre part apparaît. Notons que c'était également le cas sur la Figure 6.11 (b) à propos des variations de \bar{D}/D_{CJ} avec h/λ . La séparation des données régulières et irrégulières n'est plus aussi franche lorsque l'épaisseur hydrodynamique est employée en tant que longueur caractéristique (Figure 6.16 (d)). Cependant, les résultats associés aux conditions irrégulières ($E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$) sont cette fois regroupés dans un unique amas de points. Deux familles se dégagent alors des résultats selon que le mélange est régulier ou irrégulier. L'introduction de l'épaisseur hydrodynamique pourrait permettre de passer d'une formulation initiale du problème en $D/D_{CJ} = f(h/\lambda, E_a^*, Z)$ à une formulation en $D/D_{CJ} = f(h_t/\mathcal{R})$ avec deux familles de mélanges.

Le rayon de courbure moyen du front pourrait être influencé par les transformations de la topologie du front se produisant à $T_i = 1400$ K. C'est pourquoi la Figure 6.17 détaille les résultats de la Figure 6.16 suivant que la température de la couche inerte est égale à 295 K et 750 K ((a) et (c)) ou égale à 1400 K ((b) et (d)). La colorisation est effectuée suivant l'énergie d'activation réduite du milieu réactif. Les droites ocre représentent les courbes de tendances. Lorsque l'adimensionnement repose sur la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ (Figures (a) et (b)), les données se concentrent en trois amas distincts d'après la valeur de E_a^* . L'utilisation de l'épaisseur hydrodynamique en tant que longueur caractéristique permet d'adimensionnaliser les résultats. Sur la Figure 6.17 (c), deux droites se dégagent et correspondent aux mélanges réguliers et irréguliers, respectivement. Enfin, sur la Figure

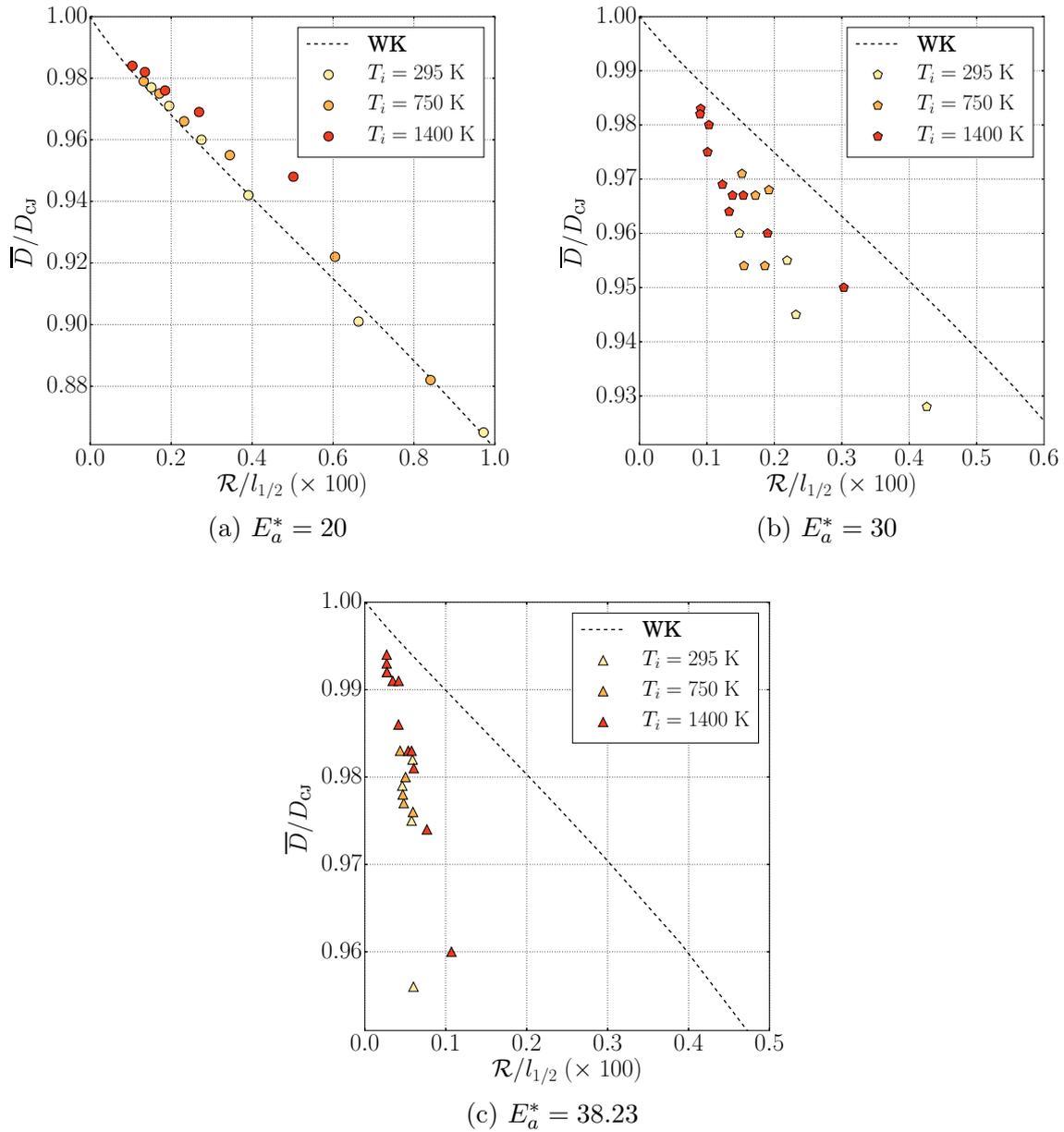


FIGURE 6.15 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction pour les différentes énergies d’activation réduites et pour les différentes températures de la couche inerte. (a) : $E_a^* = 20$. (b) : $E_a^* = 30$. (c) : $E_a^* = 38.23$.

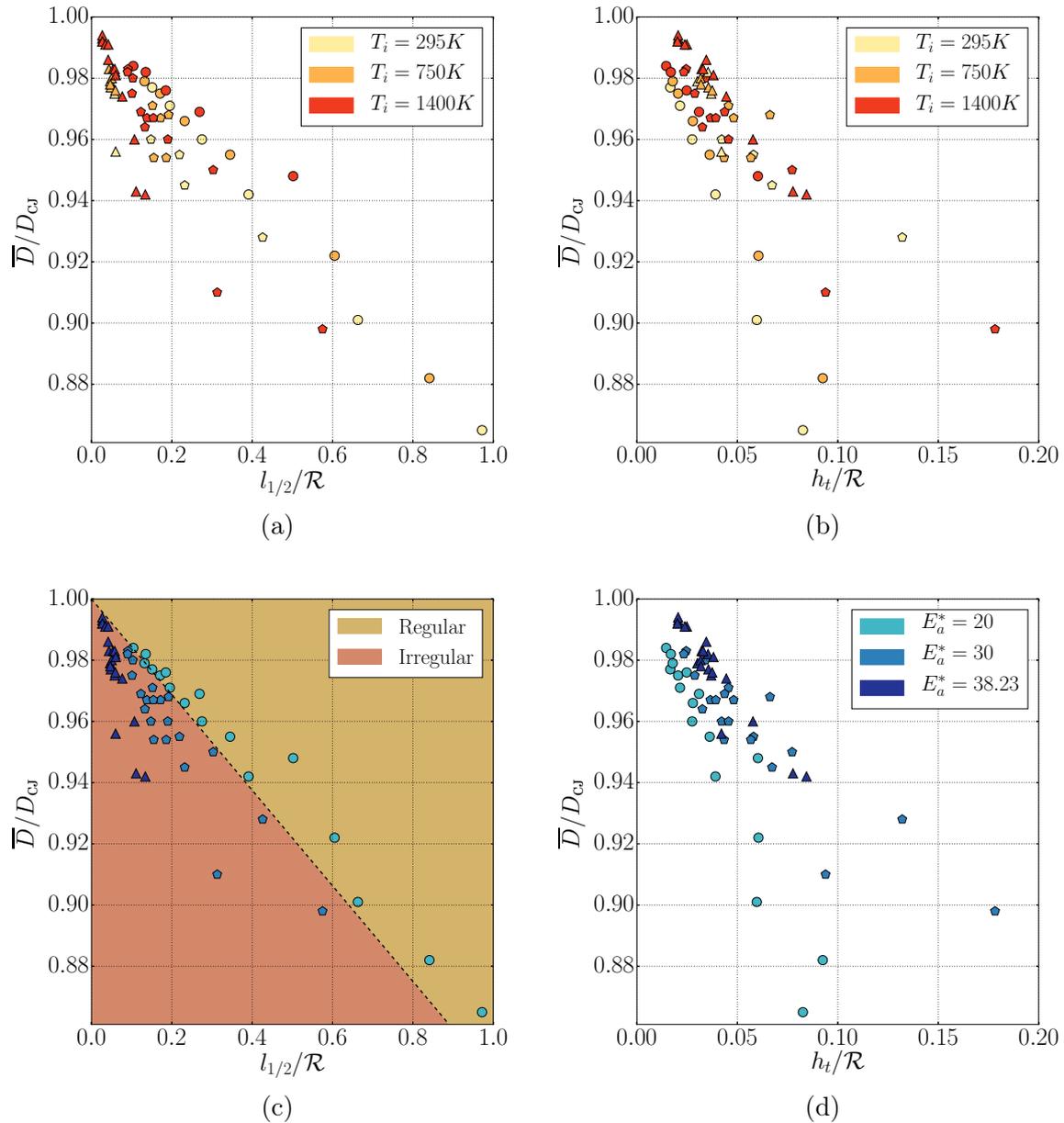


FIGURE 6.16 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction ((a) & (c)) et par l'épaisseur hydrodynamique ((b) & (d)) pour les différentes énergies d'activation réduites et pour les différentes températures de la couche inerte. (a) & (b) : colorisation suivant la température T_i . (c) & (d) : colorisation suivant la régularité du milieu réactif. \circ : $E_a^* = 20$, \diamond : $E_a^* = 30$, \triangle : $E_a^* = 38.23$.

6.17 (d), l'ensemble des données est groupé en une droite unique pour l'ensemble des énergies d'activation réduites.

6.6 Synthèse partielle

Ce chapitre traite de l'influence de la température de la couche inerte sur la détonation confinée. Des simulations ont été conduites pour trois énergies d'activation réduites ($E_a^* = 20$, $E_a^* = 30$ et $E_a^* = 38.23$), pour trois températures de la couche inertes ($T_i = 295$ K, $T_i = 750$ K et $T_i = 1400$ K) ainsi que pour des hauteurs de la couche réactive h variées.

L'augmentation de la température du confinement compressible se traduit par un redressement de l'onde de choc oblique qui évolue dans le milieu inerte. Pour $T_i = 1400$ K, l'onde de choc évolue localement au devant de la détonation et adopte la forme d'une onde de choc détachée. Dans ce cas, un jet de gaz frais se développe en aval de la détonation au voisinage de l'interface entre les milieux réactif et inerte. La jonction entre le front de détonation courbe et le choc détaché s'effectue au moyen d'un double choc oblique. Ces nouveaux éléments associés à un ratio des impédances acoustiques Z faible correspondent aux observations expérimentales d'une part, et aux simulations numériques de l'écoulement au sein des moteurs à détonations rotatives d'autre part. La présence du confinement chaud agit également sur la structure cellulaire de la détonation. La trajectoire des points triples, qui disparaît au travers de l'interface séparant les deux couches lorsque $T_i = 295$ K, se réfléchit sur celle-ci pour $T_i = 750$ K et $T_i = 1400$ K. La régularité des cellules augmente également.

Ces évolutions de la topologie globale de l'écoulement modifient les caractéristiques moyennes de la détonation. En effet, le déficit de vitesse engendré par l'expansion des produits de détonation est réduit, au même titre que la courbure moyenne du front. La hauteur minimale de la couche réactive permettant à la détonation de se propager est fortement réduite pour $T_i = 1400$ K. Ainsi, le ratio des impédances acoustiques des deux milieux influence de manière non-négligeable les limites de propagation. Il apparaît que la configuration la moins favorable à l'onde de détonation est celle détaillée dans le Chapitre 5, dans laquelle les deux couches sont à des températures identiques. Les limites de propagation sont étendues lorsque le ratio des impédances acoustiques est différent de l'unité. La réduction des pertes provoquée par l'augmentation de T_i engendre des niveaux de pression et de masse volumique supérieurs. Le déficit de vitesse peut être corrélé au rapport de l'épaisseur hydrodynamique et du rayon de courbure.

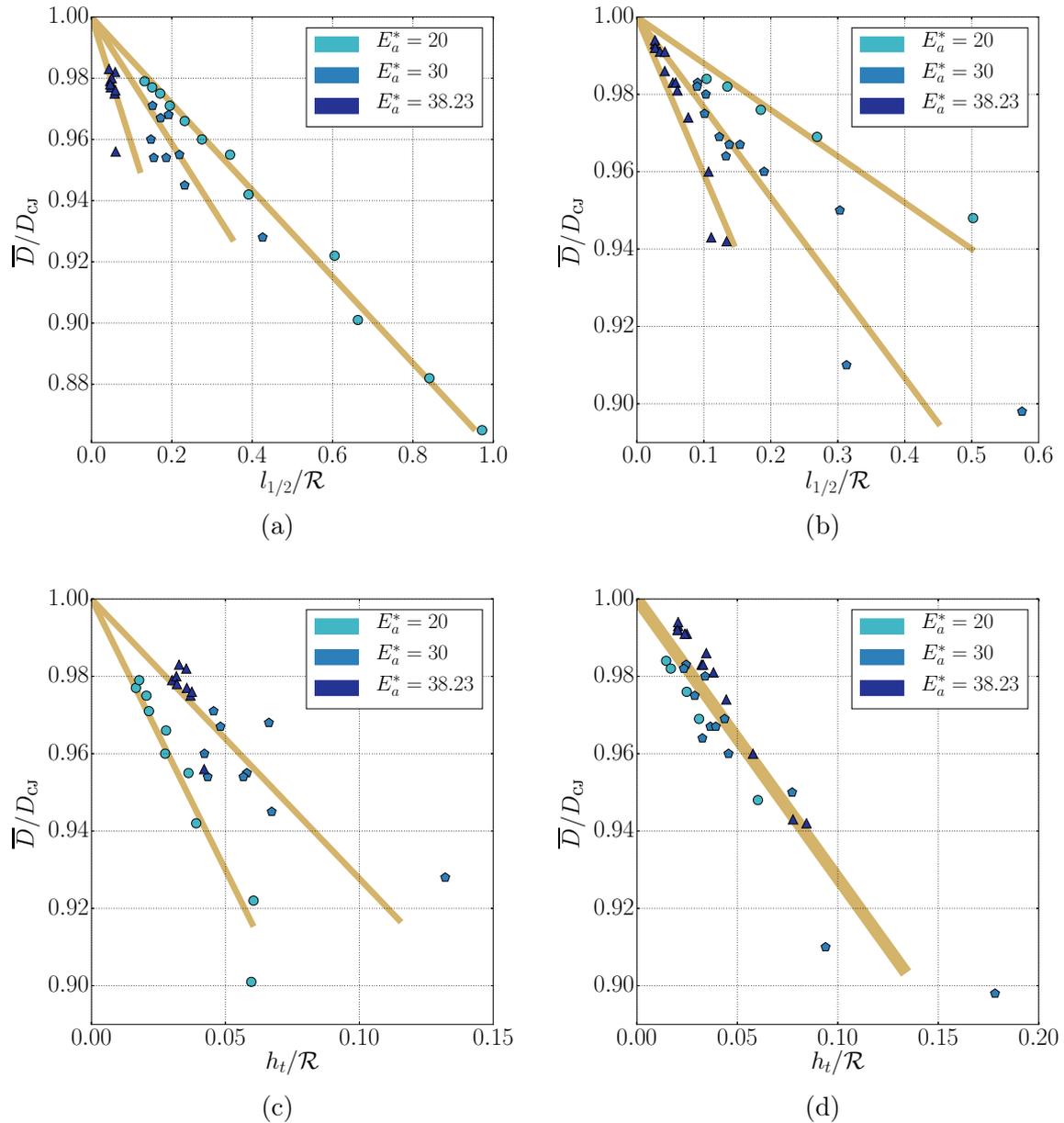


FIGURE 6.17 – Vitesse moyenne de la détonation en fonction de la courbure moyenne du front normalisée par la demi-longueur de réaction ((a) & (b)) et par l'épaisseur hydrodynamique ((c) & (d)) pour les différentes énergies d'activation réduites et pour les différentes températures de la couche inerte. Les Figures (a) et (c) regroupent les résultats relatifs à $T_i = 295$ K et à $T_i = 750$ K. Les Figures (b) et (d) regroupent les résultats relatifs à $T_i = 1400$ K. \circ : $E_a^* = 20$, \square : $E_a^* = 30$, \triangle : $E_a^* = 38.23$.

Conclusions et perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit sont consacrés à la simulation numérique des détonations, et plus particulièrement aux détonations confinées par un milieu inerte compressible. Les trois paramètres clé de notre étude sont : la hauteur de la couche réactive h , la sensibilité du prémélange réactif $E_a^* = E_a/RT_0$ et le ratio de la température du confinement par celle du prémélange.

La résolution numérique s'appuie sur la résolution des équations d'Euler bidimensionnelles réactives, complétées par une chimie simple en une étape et la loi d'état des gaz parfaits. Sur le plan des méthodes numériques, l'interpolation des variables caractéristiques est réalisée via le schéma MP d'ordre 9. Le problème de Riemann est résolu par le solveur HLLC et l'avancement temporel repose sur un schéma Runge-Kutta du troisième ordre. Le développement numérique a consisté en la parallélisation du code de calcul, la mise en place du système de *checkpoint / restart*, l'implémentation des méthodes de recyclage du domaine de calcul et de raffinement du maillage. Nous avons également fixé les standards de sorties fichiers et développé les procédures de calcul des profils axiaux moyens.

Trois études ont été réalisées :

- La simulation numérique des détonations idéales : comparaison des résultats ZND avec les simulations 1D et 2D (détonation marginale).
- La simulation numérique des détonations confinées par un gaz inerte I : influence de l'énergie d'activation réduite.
- La simulation numérique des détonations confinées par un gaz inerte II : influence de la température de la couche inerte.

10,5 millions d'heures de calculs ont été nécessaires afin de mener à bien ces trois études (7 millions sur le MÉSOCENTRE DE CALCUL POITEVIN et 3.5 millions sur le supercalculateur OCCIGEN du GENCI-CINES).

La première étude a permis de constituer une validation du code de calcul en s'assurant que la phénoménologie générale des détonations est correctement restituée et est conforme aux observations de la littérature expérimentale. De plus, ces simulations, et en particulier les profils axiaux moyens, forment une première série de résultats pouvant être comparés par la suite à ceux obtenus dans des configurations non idéales. Ainsi, l'amplitude des fluctuations de pression s'accroît d'un facteur 2 lors du passage des simulations 1D aux simulations 2D, et la relaxation de la pression est retardée. Les fluctuations sont réparties en deux groupes distincts suivant leur régularité. Pour les mélanges irréguliers, le nombre

de Mach turbulent dépasse 0.3. L'augmentation du nombre de dimensions abaisse le seuil d'apparition des instabilités non linéaires, ce qui entraîne leur émergence dans des configurations stables dans les simulations monodimensionnelles. L'énergie d'activation réduite du milieu réactif est un paramètre crucial qui détermine l'évolution des variables thermodynamiques. Pour les faibles valeurs de E_a^* , le modèle ZND permet de décrire correctement la zone de réaction. Ce n'est plus le cas pour des valeurs plus importantes, pour lesquelles les instabilités non linéaires affectent fortement la libération de l'énergie chimique. Enfin, l'étude de résolution numérique conduite pour $N_{1/2} = 10$, $N_{1/2} = 30$ et $N_{1/2} = 60$ a révélé que 10 points par demi-longueur de réaction suffisent à capturer le comportement moyen de la détonation.

L'étude des détonations confinées par un gaz inerte est scindée en deux parties. Dans la première, les milieux réactifs et inertes sont dans des états thermodynamiques identiques, et se distinguent seulement par la valeur de la fraction massique de gaz frais. La topologie de la détonation est conforme à celle observée expérimentalement dans la littérature : l'onde de détonation courbe se propage dans la couche réactive tandis qu'une onde de choc oblique et une interface de contact se déplacent dans le confinement inerte. À la périphérie de la couche réactive, une succession à basse fréquence d'extinctions et de réinitiation se produit. La distinction entre les mélanges dotés d'une faible énergie d'activation et ceux caractérisés par des valeurs plus importantes est également marquée dans cette configuration non idéale. Le modèle WK, incorporant l'effet des pertes dans la zone de réaction et basé sur la théorie ZND, décrit avec succès l'écoulement dans le cas régulier, mais échoue pour les énergies d'activations importantes. Cette distinction est également visible dans les mécanismes d'extinctions relatifs à chacune de ces catégories. Pour les mélanges réguliers, le découplage est global alors que pour les mélanges irréguliers l'extinction est d'abord locale avant de s'étendre à l'ensemble du front. Dans les deux cas, le découplage intervient après que la détonation ait parcouru une distance correspondant à plus de dix fois la hauteur de la couche réactive h .

La seconde partie de l'étude traite de l'influence de la température du confinement gazeux. Plusieurs cas sont examinés : un confinement chaud (750 K et 1400 K) et un confinement froid (124 K, ce qui conduit à un rapport des impédances acoustiques semblable à $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ confiné par l'air ambiant). Ces paramètres permettent de se rapprocher des configurations rencontrées expérimentalement : dans les moteurs à détonation rotative, ce sont les produits de détonation qui constituent le confinement du mélange réactif tandis que dans les montages en laboratoire la couche inerte est souvent composée d'air. Les résultats numériques montrent que la topologie de la détonation confinée évolue suivant le ratio des impédances acoustiques entre les deux milieux. En particulier, l'angle de déflexion

de l'interface séparant les deux couches et l'angle de l'onde de choc oblique sont d'autant plus grands que la température du confinement inerte est élevée. Ce comportement conduit à la formation d'une topologie différente lorsque la température de la couche inerte est assez importante : le choc oblique devance la détonation et devient un choc détaché. La jonction entre le front de détonation et le choc détaché s'effectue par un double choc oblique. Un jet de gaz frais se forme alors au voisinage de l'interface entre les deux milieux en aval de la détonation. L'augmentation de la température du milieu inerte influence également les caractéristiques de la détonation. La structure cellulaire gagne en régularité et une réflexion de la trajectoire des points triples à la périphérie de la couche réactive peut être observée. Le déficit de vitesse causé par l'expansion des produits dans le milieu compressible est réduit. Enfin, dans le cas extrême à 1400 K, les limites de propagation sont considérablement affectées. La hauteur critique permettant à la détonation de se propager avec succès passe de plus de 20λ à 8λ . C'est également le cas des limites observées pour un confinement froid, à environ 12λ , le mécanisme physique étant par contre différent. Nous avons également pu montrer que la célérité \bar{D}/D_{CJ} pouvait être corrélée au ratio entre l'épaisseur hydrodynamique et le rayon de courbure h_t/\mathcal{R} .

La comparaison quantitative de nos résultats avec la littérature expérimentale des détonations confinées est difficile, du fait de la diversité des configurations expérimentales employées. Il apparaît néanmoins que la hauteur critique dans des canaux rectangulaires pour lesquels seulement une paroi est ouverte sur le confinement est d'environ 3λ , soit moins que la valeur obtenue numériquement pour un ratio des impédances acoustiques correspondant à un mélange hydrogène-oxygène confiné par l'air ambiant (12λ). Plusieurs facteurs pourraient être à l'origine de cet écart. La limitation des simulations à un domaine bidimensionnel restreint par nature la probabilité pour la détonation de poursuivre sa propagation. En particulier dans les canaux rectangulaires, des ondes transverses ont la possibilité d'évoluer dans la profondeur du dispositif et d'aider au maintien de la détonation pour des hauteurs de la couche réactive plus faible. La diminution de la hauteur critique avec l'augmentation de la profondeur du dispositif expérimental fut observée dans le cas de la propagation des détonations dans des tubes poreux [91]. Si la mise à jour du code de calcul afin de simuler un écoulement tridimensionnel ne présente pas de difficultés particulières, les ressources informatiques nécessaires à la conduite de ces calculs constituent un véritable challenge. Cette évolution nous semble cependant primordiale afin de modéliser le plus précisément possible l'écoulement en aval de la détonation et la turbulence associée.

La modélisation de la chimie par un mécanisme simplifié en une étape globale est une hypothèse forte également susceptible d'affecter les résultats obtenus en termes de dimen-

sions critiques. Bien que largement employée, cette réduction des différents mécanismes cinétiques intervenant dans la transformation des réactifs en produits soulève plusieurs interrogations. Entre autre, l'utilisation d'un mécanisme en une étape ne permet pas de contrôler indépendamment les temps d'induction et de réaction. L'influence de l'énergie d'activation dépasse alors dans ce cas la modification de la sensibilité du milieu réactif, et pourrait ainsi perturber l'analyse relative à ce paramètre.

Enfin, il est possible de s'interroger sur la pertinence des équations résolues, soit en d'autres termes sur la nécessité d'employer les équations de Navier-Stokes à la place des équations d'Euler. En configuration idéale, il est établi que les effets dissipatifs deviennent non-négligeables pour des mélanges extrêmement irréguliers tels que méthane-oxygène. Dans notre cas, l'énergie d'activation réduite du mélange est bien plus faible et ce dernier peut être considéré comme étant seulement modérément irrégulier. Cependant, en configuration confinée, l'influence des effets visqueux est potentiellement plus importante du fait de la présence de la couche de gaz inerte. À la périphérie de la charge réactive, l'onde de détonation est galopante et une quantité importante de gaz frais est déportée en aval. De plus, proche des limites de propagation, l'allongement des zones d'induction est responsable de la création de volumes de gaz frais considérables. L'influence de la combustion de volumes de gaz réactifs sur les limites de propagation n'est pas connue. La mise en place de la résolution des équations de Navier-Stokes n'est pas triviale, dans la mesure où une résolution numérique inférieure à 300 points par demi-longueur de réaction est nécessaire afin de distinguer les résultats de ceux obtenus via les équations d'Euler. Cette résolution dépasse d'un ordre de grandeur celle utilisée dans ce manuscrit et est au-delà des capacités de calcul disponibles pour les domaines modélisés. Le développement de modèles intermédiaires de type LES-LEM [175, 176] pourrait permettre de dépasser cette difficulté afin de représenter de façon correcte les effets dissipatifs.

Le formalisme adopté dans ce manuscrit dans l'optique de caractériser la détonation du point de vue de l'écoulement moyen doit servir au développement de nouveaux modèles adaptés aux mélanges irréguliers. La mesure systématique de nouvelles échelles de longueur caractéristiques, telles que l'épaisseur hydrodynamique, vont dans ce sens. Les simulations effectuées dans notre étude ont permis de montrer que les pertes réduisent l'épaisseur hydrodynamique, et que la réduction semble dépendre de la stabilité du mélange réactif. Ce type d'analyse peut être effectué dans d'autres configurations non idéales, telles que la propagation en canal courbé ou en tube divergeant, afin de conforter les tendances obtenues ici et également de confronter les effets conjugués. L'étude de l'écoulement moyen doit également être étendue à la totalité du domaine de calcul afin d'observer les effets dimensionnels (voir Figure 6.18 pour un exemple d'écoulement moyen dans cette

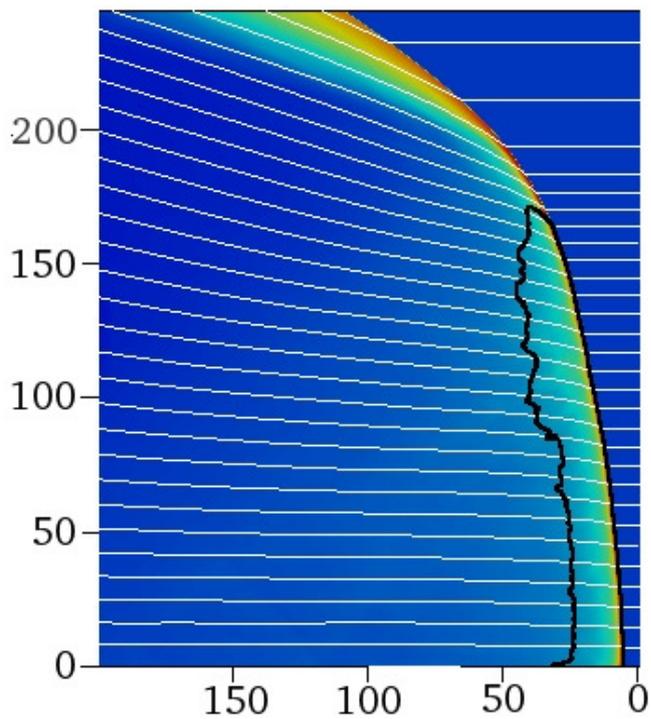
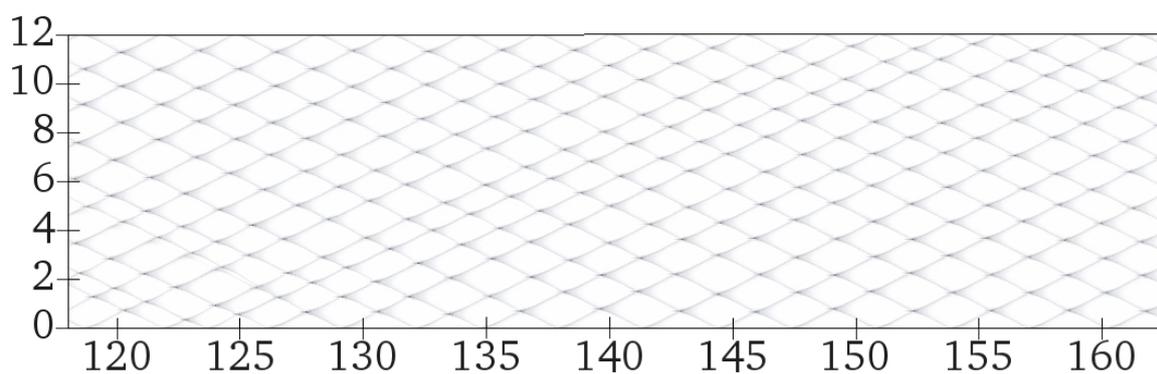


FIGURE 6.18 – Champ moyen de densité d’une détonation confinée par un gaz inerte. Le plan sonique moyen est représenté par la ligne noire tandis que les lignes de courant sont représentées en blanc. Avec l’aimable autorisation de SAID TAILEB.

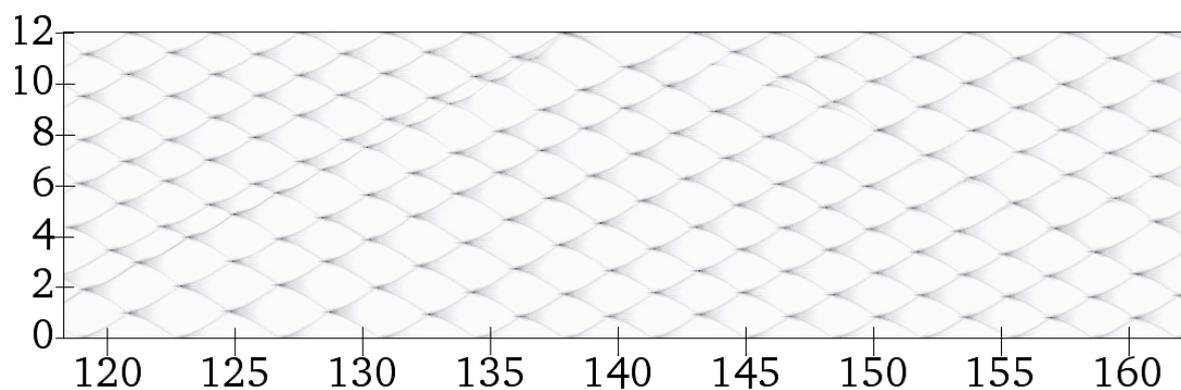
configuration).

Structure cellulaire des détonations idéales dans une configuration multicellulaire

La Figure présentée dans cette Annexe décrit la structure cellulaire de la détonation dans sa forme la plus libre, c'est à dire multi-cellulaire. Les historiques des maxima de pression sont révélés sur la Figure A.1 pour les différentes énergies d'activation réduites.



(a) $E_a^* = 10$



(b) $E_a^* = 20$

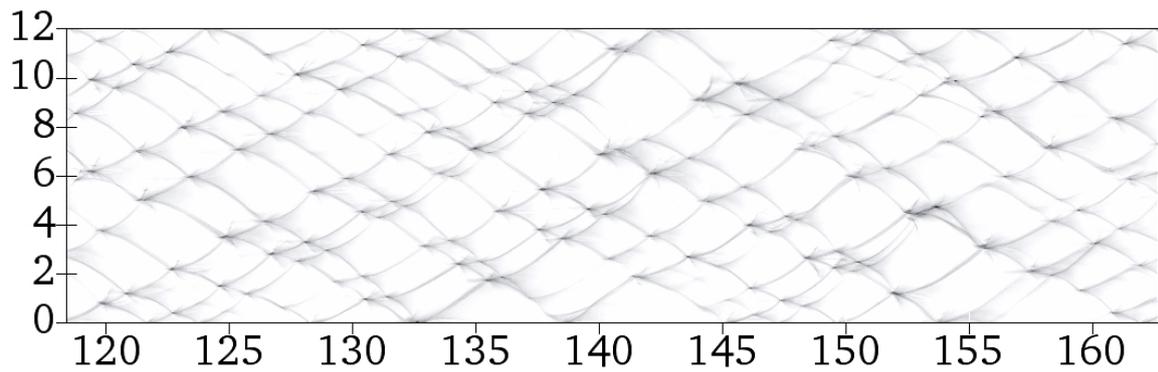
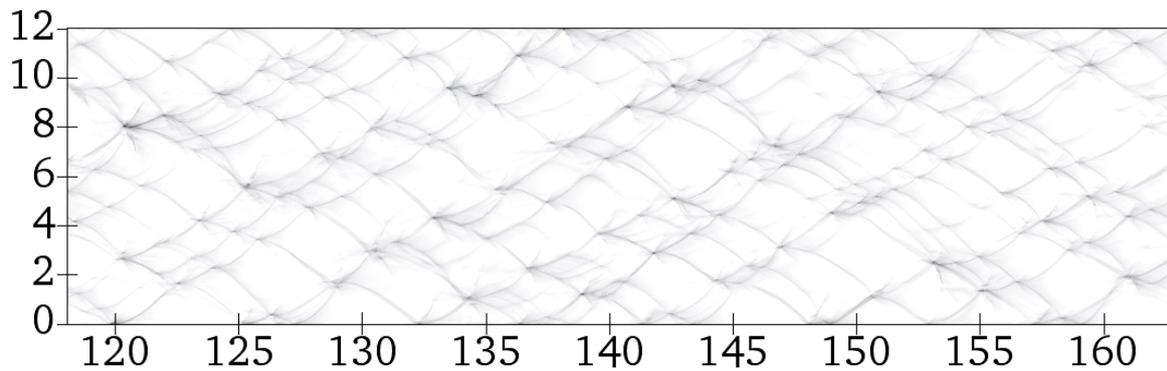
(c) $E_a^* = 30$ (d) $E_a^* = 38.23$

FIGURE A.1 – Historiques des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation pour les différentes énergies d'activation réduites. Les distances sont données en mm. Pour ces simulations, $h = 12$ mm.

Analogie du tube à choc

L'écoulement caractéristique en aval de la détonation confinée par un milieu compressible peut être modélisé par une analogie avec un tube à choc. Cette formulation est décrite sur le schéma de la Figure B.1. Alors :

$$\left(\frac{\rho_{e1}\gamma_{e1}}{\rho_{i1}\gamma_{i1}}\right)^{1/2} \left(\frac{\gamma_{i1}}{2(\gamma_{i1}+1)}\right)^{1/2} = \frac{\phi_2 \left[1 - \left(\frac{\bar{P}}{\phi_1}\right) \frac{\gamma_{e20}-1}{2\gamma_{e20}}\right] \left[\bar{P} + \frac{1}{M_{e1}^2} \left(\frac{\gamma_{i1}-1}{\gamma_{i1}+1}\right) \frac{p_{i1}}{p_{e1}}\right]^{1/2}}{\frac{\gamma_{e20}-1}{\gamma_{e1}} \left[\bar{P} - \frac{p_{i1}}{p_{e1}} \frac{1}{M_{e1}^2}\right]} \quad (\text{B.1})$$

Avec $\bar{P} = \frac{1}{M_{e1}^2} \left(\frac{p_{i1}}{p_{e1}}\right) \left(\frac{p_{i2}}{p_{i1}}\right)$. Ce rapport correspond au ratio des pressions de part et d'autre de la détonation en tenant compte de l'expansion dans le confinement, normalisé par M_{e1}^2 . Pour de grands nombres de Mach M_{e1} , les fonctions ϕ_1 et ϕ_2 sont constantes. De plus, l'équation B.1 devient :

$$\left(\frac{\rho_{i1}\gamma_{i1}}{\rho_{e1}\gamma_{e1}}\right)^{1/2} \left(\frac{2(\gamma_{i1}+1)}{\gamma_{i1}}\right)^{1/2} = \frac{\gamma_{e20}-1}{\phi_2\gamma_{e1}} \frac{\sqrt{\bar{P}}}{1 - \left(\frac{\bar{P}}{\phi_1}\right) \frac{\gamma_{e20}-1}{2\gamma_{e20}}} \quad (\text{B.2})$$

Ainsi, sachant que $p_{i1} = p_{e1}$, il est possible de faire apparaître le ratio des impédances acoustiques des milieux acoustiques et inertes :

$$Z = \left(\frac{2(\gamma_{i1}+1)}{\gamma_{i1}}\right)^{1/2} \frac{\phi_2\gamma_{e1}}{\gamma_{e20}-1} \frac{1 - \left(\frac{\bar{P}}{\phi_1}\right) \frac{\gamma_{e20}-1}{2\gamma_{e20}}}{\sqrt{\bar{P}}} \quad (\text{B.3})$$

L'angle de déflexion de l'interface de contact δ peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\tan(\delta) = \frac{2}{\gamma_{e20} - 1} \phi_2 \left[1 - \left(\frac{\bar{P}}{\phi_1} \right) \frac{\gamma_{e20} - 1}{2\gamma_{e20}} \right] \quad (\text{B.4})$$

Les Figures B.2 et B.3 décrivent l'évolution de \bar{P} et de $\tan(\delta)$ en fonction du paramètre de densité.

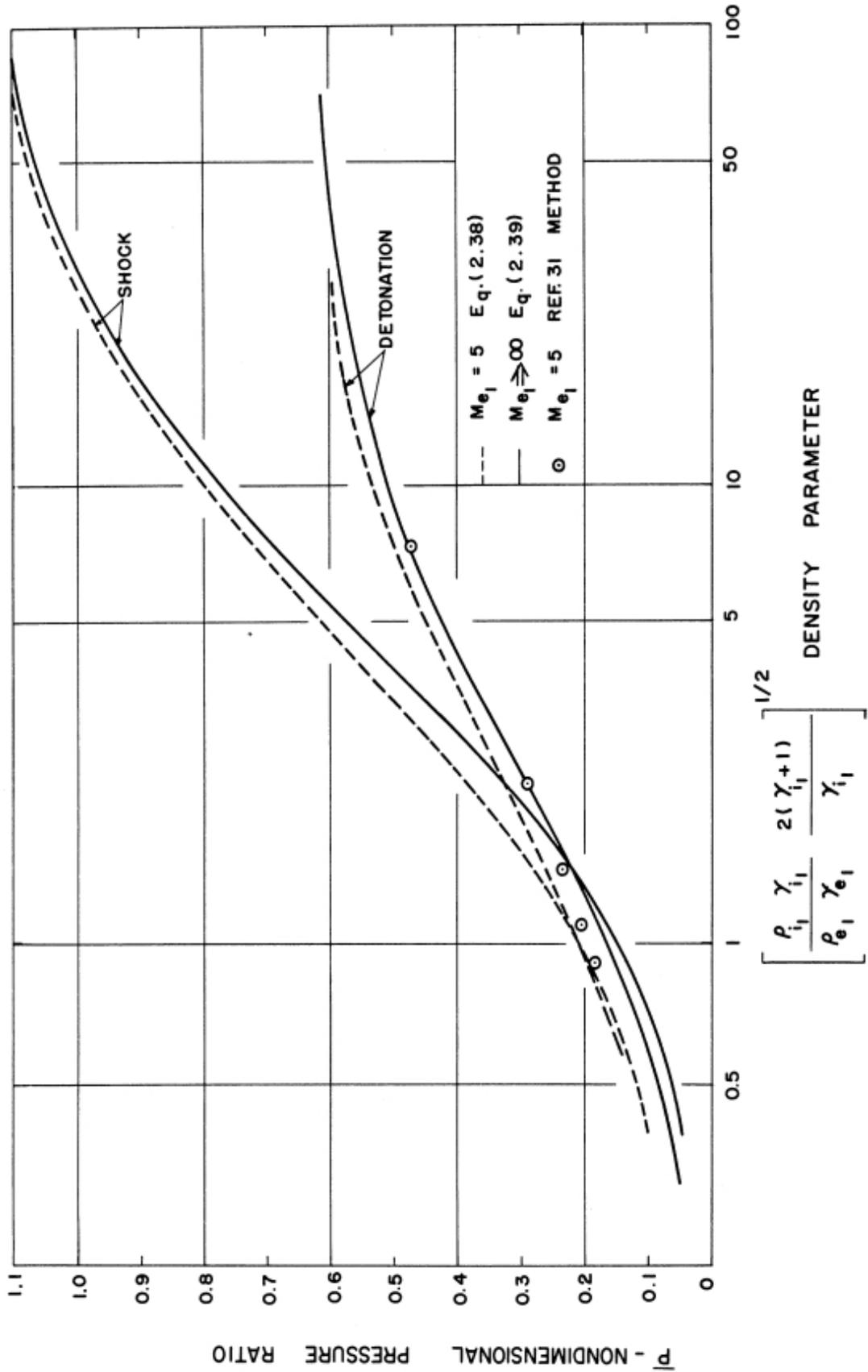


FIGURE B.2 – Variation du ratio de pression \bar{P} en fonction du paramètre de densité [107].

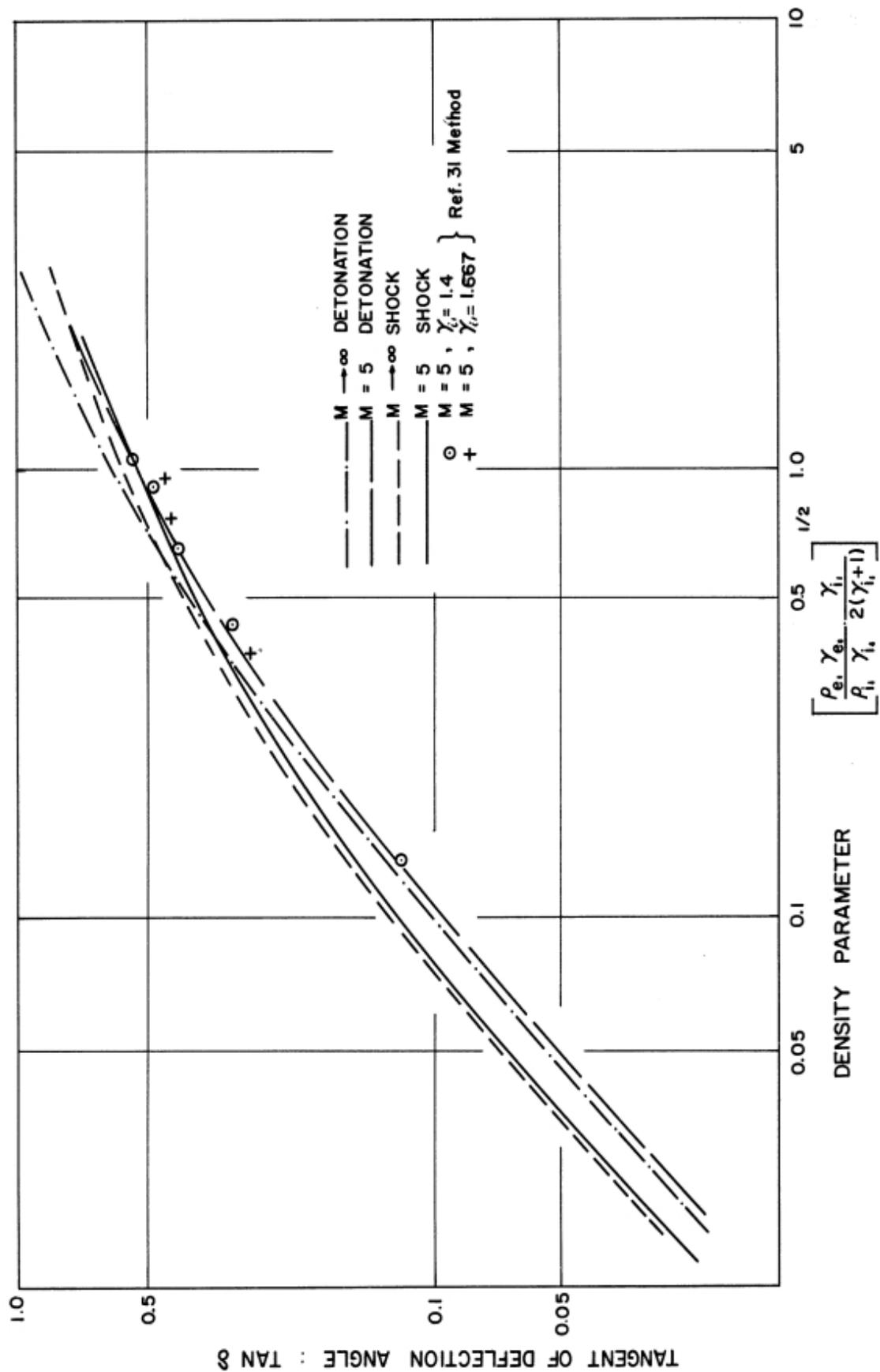
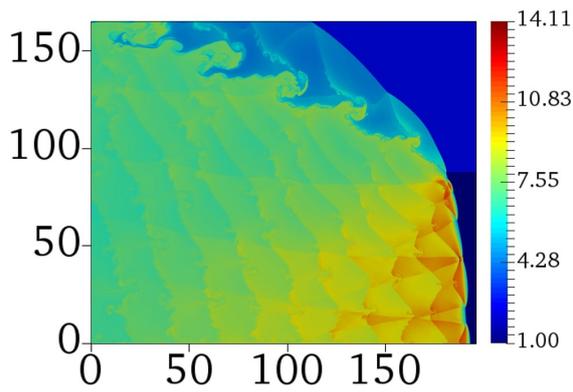
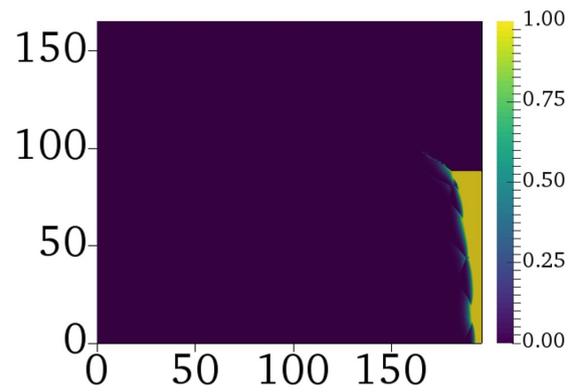


FIGURE B.3 – Variation de $\tan(\delta)$ en fonction du paramètre de densité [107].

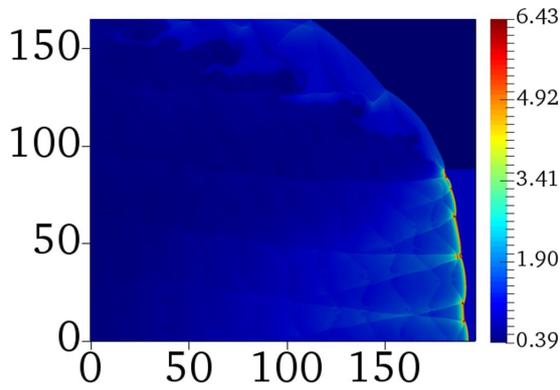
Simulations complémentaires



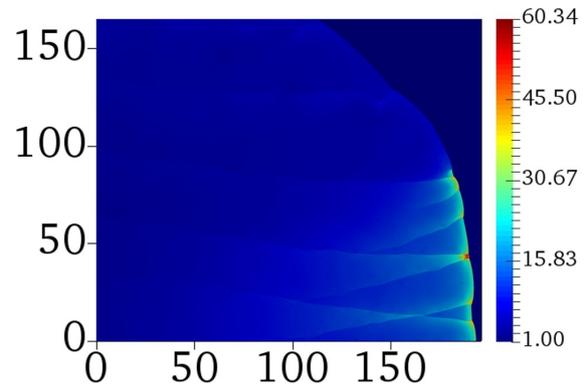
(a)



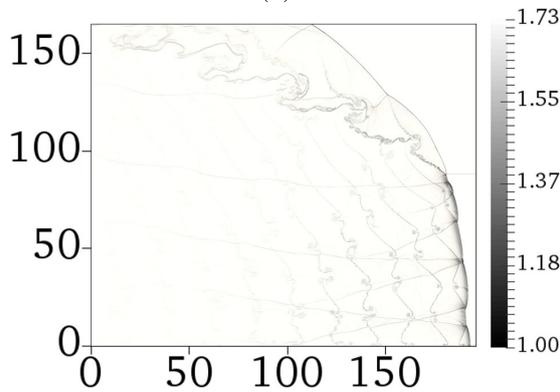
(b)



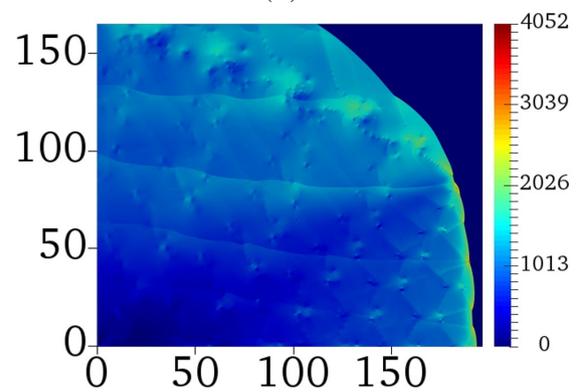
(c)



(d)



(e)



(f)

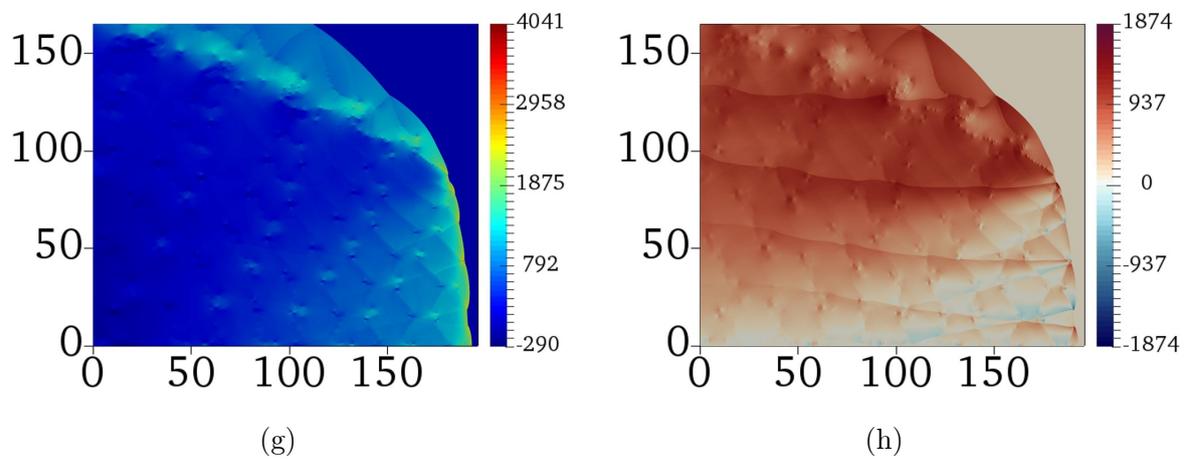
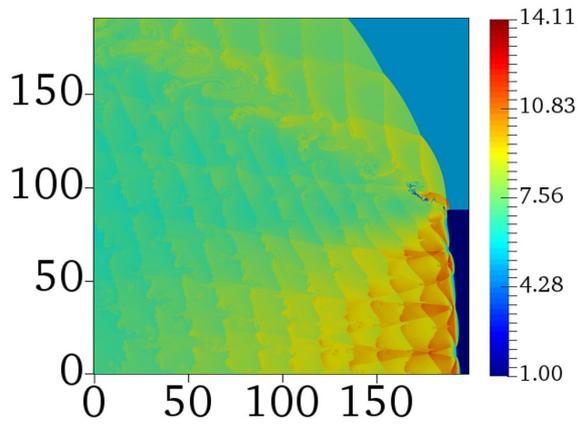
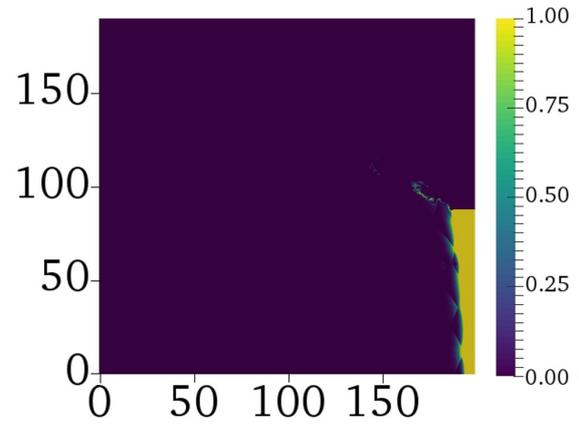


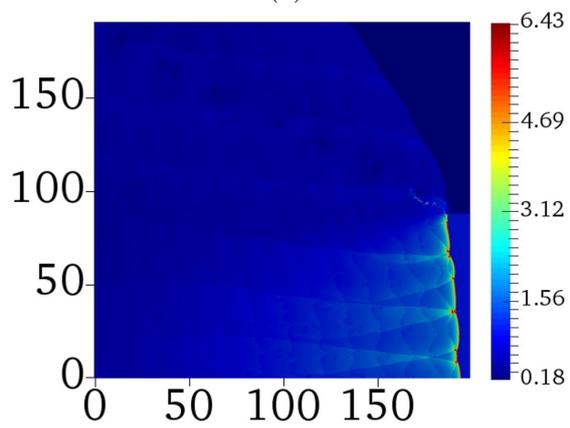
FIGURE C.1 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz fais, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$, $h = 8$ mm et $T_i = 750$ K.



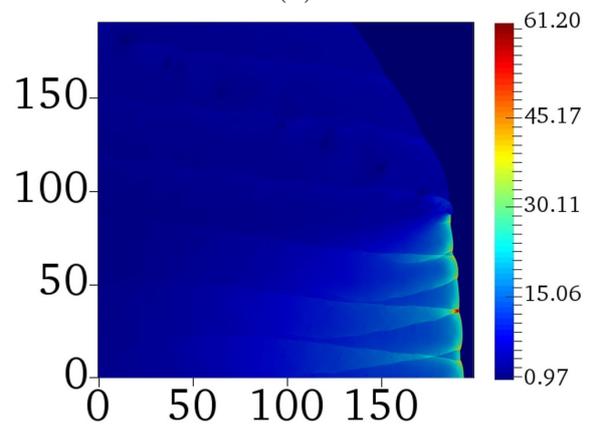
(a)



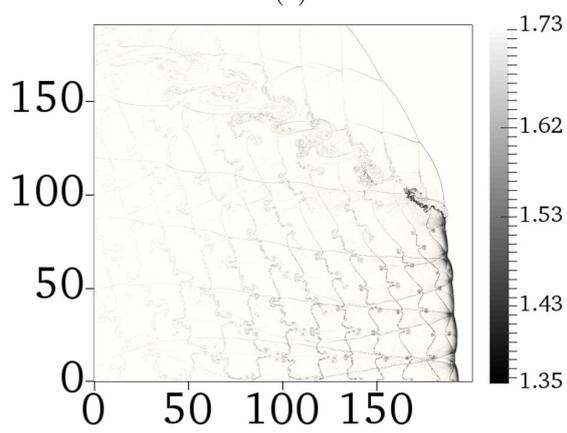
(b)



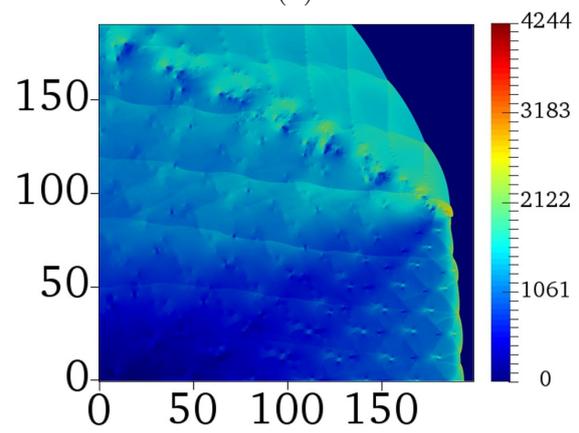
(c)



(d)



(e)



(f)

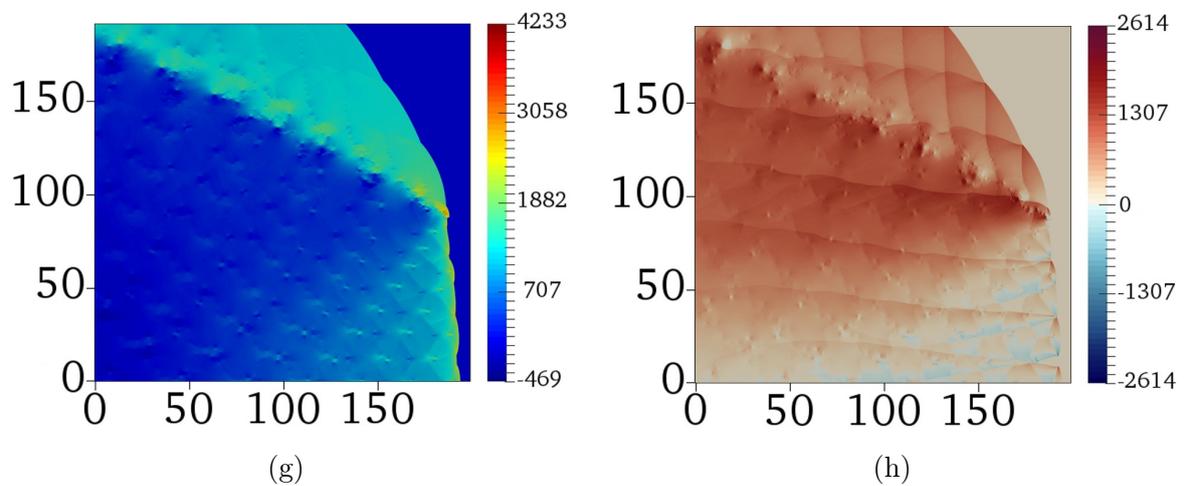


FIGURE C.2 – Visualisation de l'écoulement centrée sur le front de détonation : (a) température, (b) fraction massique des gaz froids, (c) densité, (d) pression, (e) strioscopie numérique, (f) vitesse (norme), (g) composante horizontale de la vitesse et (h) composante verticale de la vitesse. Les variables sont adimensionnalisées par les valeurs initiales lorsque non-nulles et les dimensions spatiales par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$, $h = 8$ mm et $T_i = 750$ K.

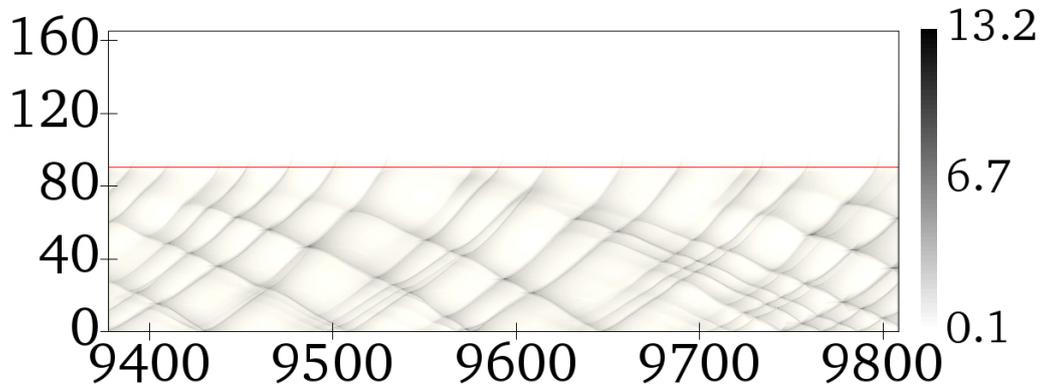
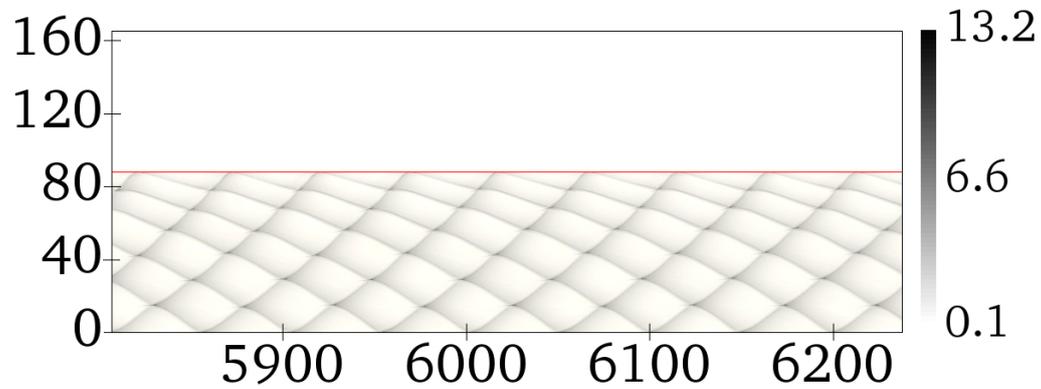
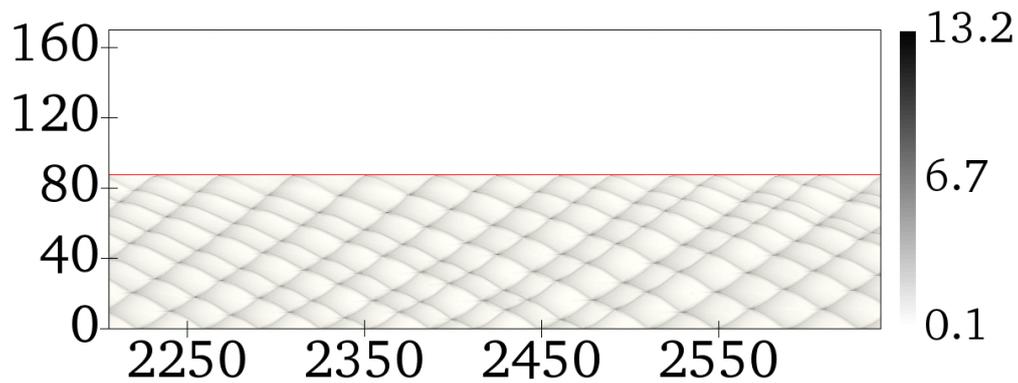
(a) $T_i = 295K$ (b) $T_i = 750K$ (c) $T_i = 1400K$

FIGURE C.3 – Historique des maxima de pression illustrant la structure cellulaire de la détonation. Les distances sont normalisées par la demi-longueur de réaction $l_{1/2}$ et la pression est donnée en MPa. Pour cette simulation, $E_a^* = 20$ et $h = 8$ mm.

A computational study of the interaction of gaseous detonations with a compressible layer

PHYSICS OF FLUIDS 29, 056101 (2017)



A computational study of the interaction of gaseous detonations with a compressible layer

Maxime Reynaud,^{a)} Florent Virot,^{b)} and Ashwin Chinnayya^{c)}
*Institut Pprime, UPR 3346 CNRS, ISAE-ENSMA and University of Poitiers, BP 40109,
 86961 Futuroscope-Chasseneuil cedex, France*

(Received 4 October 2016; accepted 15 April 2017; published online 12 May 2017)

The propagation of two-dimensional cellular gaseous detonation bounded by an inert layer is examined via computational simulations. The analysis is based on the high-order integration of the reactive Euler equations with a one-step irreversible reaction. To assess whether the cellular instabilities have a significant influence on a detonation yielding confinement, we achieved numerical simulations for several mixtures from very stable to mildly unstable. The cell regularity was controlled through the value of the activation energy, while keeping constant the ideal Zel'dovich - von Neumann - Döring (ZND) half-reaction length. For stable detonations, the detonation velocity deficit and structure are in accordance with the generalized ZND model, which incorporates the losses due to the front curvature. The deviation with this laminar solution is clear as the activation energy is more significant, increasing the flow field complexity, the variations of the detonation velocity, and the transverse wave strength. The chemical length scale gets thicker, as well as the hydrodynamic thickness. The sonic location is delayed due to the presence of hydrodynamic fluctuations, for which the intensity is increased with the activation energy as well as with the losses to a lesser extent. The flow field has been studied through numerical soot foils, detonation velocities, and 2D detonation front profiles, which are consistent with experimental findings. The velocity deficit increases with the cell irregularity. Moreover, the relation between the detonation limits obtained numerically and in detonation experiments with losses is discussed. *Published by AIP Publishing.* [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4982659>]

I. INTRODUCTION

A gaseous detonation consists of an exothermic chemical reaction coupled to a supersonic shock wave that propagates through a detonable medium. The very rapid energy conversion leads us to consider the detonation as an alternative to the more classical combustion in aeronautical engines. However, many issues arise from its potential use for propulsion applications.¹ As for the rotating detonation engine, the combustion chamber is usually an annular ring composed of the walls of two coaxial cylinders. Subsequently to the injection at the bottom-end, detonation fronts propagate circumferentially into the fresh mixture. The expansion of the detonation products through the engine top-end creates a continuous thrust. Prior to the arrival of the detonation, the burned gases generated by the previous front confine the freshly injected reactive material. Thus, the flow field within the combustion chamber highlights a complex shock/detonation structure and, most of the time, a deficit of the detonation velocity.^{2,3} A better understanding of the underlying physical phenomena is needed in order to ensure the design of this new propulsion device.^{4,5}

The velocity at which a detonation is propagating through the reactive material is an essential data. The simple theory developed by Chapman and Jouguet (CJ) at the beginning of

the last century states that the steady detonation velocity is the minimum velocity compatible with the conservation laws.⁶ This model provides very accurate results in predicting the detonation velocity in the knowledge that only the initial state and thermodynamic properties were required to perform the calculations. Moreover, no assumption on the kinetics mechanism is needed as the products are in thermochemical equilibrium and the reaction is considered to occur instantaneously. Consequently, the influence of boundary conditions such as walls or confinements cannot be taken into account. For this reason, models have to include a reaction zone of finite thickness. In his initial work, Zel'dovich⁷ attempted to incorporate the effects of heat and momentum losses into the Zel'dovich - von Neumann - Döring (ZND) model. However, the wall forces distribution was incorrectly represented and led to inaccurate results. Fay⁸ focused on the influence of the boundary layer that develops in tubes downstream of the leading shock. He treated the induced negative displacement layer as a flow divergence, leading to a curved detonation. The friction induced by the walls is thus analogous to the effects produced by the lateral expansion of the detonation products towards the yielding confinement. This is responsible for the front curvature.⁹ See the monograph by Lee¹⁰ for a review on the effect of boundary conditions on the detonation dynamics.

The very early steady models for 2D detonations were proposed by Jones¹¹ and Eyring *et al.*¹² They established a relationship between the detonation velocity in cylindrical explosives and the radius of the charge. Wood and Kirkwood¹³ (WK) developed a quasi-1D model by restraining the analysis

^{a)}maxime.reynaud@ensma.fr

^{b)}florent.virot@ensma.fr

^{c)} Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: ashwin@ensma.fr

Bibliographie

1. EUROSTAT, E. Energy, transport and environment indicators-2015 edition. *Publications Office of the European Union, Luxembourg* (2015) (cf. page 1).
2. LU, F. K., MILLER, R., NALIM, M. R. & YU, K. H. Introduction : Special Section on Pressure Gain Combustion. *Journal of Propulsion and Power* **33**, 16–16 (2017) (cf. page 1).
3. WOLAŃSKI, P. Detonative propulsion. *Proceedings of the combustion Institute* **34**, 125–158 (2013) (cf. page 2).
4. ANDRUS, I. Q., KING, P., POLANKA, M. D., SCHAUER, F. & HOKE, J. *Experimentation of a premixed rotating detonation engine utilizing a variable slot feed plenum 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2016), 2016–1404 (cf. page 2).
5. ABEL, F. A. Contributions to the history of explosive agents. *Journal of the Franklin Institute* **88**, 52–55 (1869) (cf. page 5).
6. ABEL, F. A. Contributions to the history of explosive agents. Second memoir. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **164**, 337–395 (1874) (cf. page 5).
7. BERTELOT, M. Sur la vitesse de propagation de la detonation dans les matières explosives solides et liquides. *Annales de Chimie et de Physique, 6th serie*, 556–573 (1885) (cf. page 5).
8. BERTHELOT, M. & VIEILLE, P. Sur la vitesse de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie des Sciences* **93**, 18–22 (1881) (cf. page 5).
9. MALLARD, E. & LE CHATELIER, H. Sur les vitesses de propagation de l'inflammation dans les mélanges gazeux explosifs. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie des Sciences* **93**, 145–148 (1881) (cf. page 5).
10. CHAPMAN, D. L. On the Rate of explosion in gases. *Philosophical Magazine* **47**, 90–104 (1899) (cf. pages 5, 6).
11. JOUGUET, E. Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz. *Journal des Mathématiques Pures et Appliquées* **1**, 327–425 (1905) (cf. pages 5, 6).
12. REYNOLDS, W. C. *STANJAN : Interactive Computer Programs for Chemical Equilibrium Analysis* (1981) (cf. page 7).

13. GORDON, S. & MCBRIDE, B. J. *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications* (National Aeronautics, Space Administration, Office of Management, Scientific et Technical Information Program, 1994) (cf. page 7).
14. KEE, R. J., RUPLEY, F. M. & MILLER, J. A. *Chemkin-II : A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics* rapport technique (Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1989) (cf. page 7).
15. GOODWIN, D. G., MOFFAT, H. K. & SPETH, R. L. *Cantera : An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes* <http://www.cantera.org>. Version 2.3.0. 2017 (cf. page 7).
16. ZEL'DOVICH, Y. On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz. (Journal of Experimental and Technical Physics)* **10**, 542–568 (1940) (cf. pages 9, 29).
17. Von NEUMAN, J. Theory of Detonation Waves. *Progress report to the National Defense Research Comittee* (1942) (cf. page 9).
18. DÖRING, W. Über den Detonationsvorgang in Gasen. *Annalen der Physik* **435**, 421–436 (1943) (cf. page 9).
19. VIEILLE, P. Sur le rôle des discontinuités dans les phénomènes de propagation. *Mémoire des Poudres et Salpêtres* **10**, 177 (1900) (cf. page 9).
20. MICHEL'SON, V. A. On the normal ignition velocity of explosive gaseous mixtures. *Scientific Transactions of Imperial Moscow University on Mathematics and Physics* **10**, 1–93 (1893) (cf. page 9).
21. BOULAL, S. *Comportements dynamiques de la détonation dans des compositions gazeuses non-uniformes* thèse de doctorat (Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2017) (cf. page 12).
22. ABDERRAHMANE, H. A., PAQUET, F. & NG, H. D. Applying nonlinear dynamic theory to one-dimensional pulsating detonations. *Combustion Theory and Modelling* **15**, 205–225 (2011) (cf. page 12).
23. HENRICK, A. K., ASLAM, T. D. & POWERS, J. M. Simulations of pulsating one-dimensional detonations with true fifth order accuracy. *Journal of Computational Physics* **213**, 311–329 (2006) (cf. page 12).
24. LEE, H. I. & STEWART, D. S. Calculation of linear detonation instability : one-dimensional instability of plane detonation. *Journal of Fluid Mechanics* **216**, 103–132 (1990) (cf. page 13).

25. NG, H. D. & ZHANG, F. *Shock Waves Science and Technology Library* 107–212 (2012) (cf. page 13).
26. CAMPBELL, C. & WOODHEAD, D. W. CCCCI.-The ignition of gases by an explosion-wave. Part I. Carbon monoxide and hydrogen mixtures. *Journal of the Chemical Society* **129**, 3010–3021 (1926) (cf. page 14).
27. CAMPBELL, C. & WOODHEAD, D. W. CCVII.-Striated photographic records of explosion-waves. *Journal of the Chemical Society*, 1572–1578 (1927) (cf. page 14).
28. VOITSEKHOVSKII, B. V., MITROFANOV, V. V. & TOPCHIAN, M. E. Struktura fronta detonastii i gaza. *Akad. Nauk., SSSR, Novosibirsk* (1963) (cf. page 14).
29. WHITE, D. R. Turbulent Structure of Gaseous Detonation. *Physics of Fluids* **4**, 465–480 (1961) (cf. page 14).
30. RADULESCU, M. I., SHARPE, G. J., LAW, C. K. & LEE, J. H. S. The hydrodynamic structure of unstable cellular detonations. *Journal of Fluid Mechanics* **580**, 31–81 (2007) (cf. pages 16, 23, 85, 95, 109, 134).
31. ANTOLIK, K. Das Gleiten elektrischer Funken. *Annalen der Physik* **230**, 14–37 (1875) (cf. page 15).
32. DENISOV, Y. N. & TROSHIN, Y. K. Pulsating and spinning detonation of gaseous mixtures in tubes *Doklady Akademii nauk SSSR* **125** (1959), 110–113 (cf. page 15).
33. DENISOV, Y. N. & TROSHIN, Y. K. On the mechanism of detonative combustion. *Symposium (International) on Combustion* **8**, 600–610 (1961) (cf. page 15).
34. DESBORDES, D. & PRESLES, H.-N. *Shock Waves Science and Technology Library* 281–338 (2012) (cf. pages 15, 18).
35. PRESLES, H.-N., DESBORDES, D. & BAUER, P. An optical method for the study of the detonation front structure in gaseous explosive mixtures. *Combustion and Flame* **70**, 207–213 (1987) (cf. page 17).
36. GUILLY, V. *Etude de la diffraction de la détonation des mélanges C₂H₂ – O₂* thèse de doctorat () (cf. pages 18, 34, 35).
37. FICKETT, W. & DAVIS, W. C. *Detonation : theory and experiment* (2012) (cf. page 15).
38. STREHLOW, R. A. Gas phase detonations : recent developments. *Combustion and Flame* **12**, 81–101 (1968) (cf. page 17).
39. LIBOUTON, J. C., JACQUES, A. & VAN TIGGELEN, P. J. *Cinétique, structure et entretien des ondes de détonation Actes du Colloque International Berthelot-Vieille-Mallard-Le Chatelier* **2** (1981), 437–442 (cf. pages 17, 19, 95).

40. SHCHELKIN, K. & TROSHIN, Y. Gasodynamika Goreniya [Gas dynamics of combustion]. *Izdatel Akad. Nauk SSSR Moscow* (1963) (cf. page 19).
41. SHCHELKIN, K. I. & TROSHIN, Y. K. Non-stationary phenomena in the gaseous detonation front. *Combustion and Flame* **7**, 143–151 (1963) (cf. page 19).
42. GAVRIKOV, A. I., EFIMENKO, A. A & DOROFEEV, S. B. A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics. *Combustion and Flame* **120**, 19–33 (2000) (cf. page 19).
43. NG, H. D. *The effect of chemical reaction kinetics on the structure of gaseous detonation* thèse de doctorat (McGill University, 2005) (cf. page 19).
44. LEE, J. H. S. *The detonation phenomenon* (Cambridge University Press, 2008) (cf. pages 20, 30, 35, 155).
45. VIROT, F. *Contribution à l'étude expérimentale et numérique du régime hélicoïdal de détonation dans les systèmes H₂, CH₄, C₂H₆ – –O₂ dilués ou non par N₂ ou Ar* thèse de doctorat (Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2009) (cf. pages 20, 21).
46. KNYSTAUTAS, R., GUIRAO, C., LEE, J. H. S. & SULMISTRAS, A. Measurement of cell size in hydrocarbon-air mixtures and predictions of critical tube diameter, critical initiation energy, and detonability limits. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **94**, 23–37 (1984) (cf. page 21).
47. GUIRAO, C. M., KNYSTAUTAS, R., LEE, J. H. S., BENEDICK, W. & BERMAN, M. *Hydrogen-air detonations Symposium (International) on Combustion* **19** (1982), 583–590 (cf. page 21).
48. LEE, J. H. S. The universal role of turbulence in the propagation of strong shocks and detonation waves. *High-Pressure Shock Compression of Solids* **6**, 121–148 (2003) (cf. page 21).
49. SUBBOTIN, V. A. Two kinds of transverse wave structures in multifront detonation. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **11**, 83–88 (1975) (cf. page 21).
50. ORAN, E., YOUNG, T., BORIS, J., PICONE, J. & EDWARDS, D. A study of detonation structure : The formation of unreacted gas pockets. *19th Symposium (International) on Combustion*, 573–582 (1982) (cf. page 21).
51. BOURLIOUX, A. & MAJDA, A. J. Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations. *Combustion and Flame* **90**, 211–229 (1992) (cf. page 21).

52. ORAN, E. S., WEBER, J. W., STEFANIW, E. I., LEFEBVRE, M. H. & ANDERSON, J. D. A numerical study of a two-dimensional H₂-O₂-Ar detonation using a detailed chemical reaction model. *Combustion and Flame* **113**, 147–163 (1998) (cf. pages 21, 54).
53. GAMEZO, V. N., DESBORDES, D. & ORAN, E. S. Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations. *Combustion and Flame* **116**, 154–165 (1999) (cf. pages 21, 82, 96, 121).
54. SHARPE, G. J. Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations. *Journal of Fluid Mechanics* **447**, 31–51 (2001) (cf. pages 21, 54).
55. SABZPOOSHANI, M. & MAZAHERI, K. Formation of unburnt pockets in gaseous detonations. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **45**, 182–189 (2009) (cf. page 21).
56. KIYANDA, C. B. & HIGGINS, A. J. Photographic investigation into the mechanism of combustion in irregular detonation waves. *Shock Waves* **23**, 115–130 (2012) (cf. pages 22, 95).
57. AUSTIN, J. M. *The role of instability in gaseous detonation* thèse de doctorat (California Institute of Technology, 2003) (cf. pages 22, 95).
58. MAXWELL, B. M., BHATTACHARJEE, R. R., LAU-CHAPDELAIN, S. S. M., FALLE, S. A. E. G., SHARPE, G. J. & RADULESCU, M. I. Influence of turbulent fluctuations on detonation propagation. *Journal of Fluid Mechanics* **818**, 646–696 (2017) (cf. pages 23, 95).
59. SOLOUKHIN, R. I. Multiheaded structure of gaseous detonation. *Combustion and Flame* **10**, 51–58 (1966) (cf. page 23).
60. SOLOUKHIN, R. *Nonstationary phenomena in gaseous detonation Symposium (International) on Combustion* **12** (1969), 799–807 (cf. page 23).
61. VASIL'EV, A. A., GAVRILENKO, T. P., MITROFANOV, V. V., SUBBOTIN, V. A. & TOPCHIYAN, M. E. Location of the sonic transition behind a detonation front. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **8**, 80–84 (1972) (cf. pages 23, 24).
62. VASILIEV, A. A., GAVRILENKO, T. P. & TOPCHIAN, M. E. On the Chapman-Jouguet surface in multi-headed gaseous detonations. *Astronautica Acta* **17**, 499–502 (1972) (cf. pages 23, 24).
63. WEBER, M. & OLIVIER, H. The thickness of detonation waves visualised by slight obstacles. *Shock Waves* **13**, 351–365 (2003) (cf. page 24).

64. LEE, J. H. S. & RADULESCU, M. I. On the hydrodynamic thickness of cellular detonations. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **41**, 745–765 (2005) (cf. page 24).
65. EDWARDS, D. H., JONES, A. T. & PHILLIPS, D. E. The location of the Chapman-Jouguet surface in a multiheaded detonation wave. *Journal of Physics D : Applied Physics* **9**, 1331 (1976) (cf. pages 24, 150).
66. JARSALÉ, G., VIROT, F. & CHINNAYYA, A. Ethylene–air detonation in water spray. *Shock Waves* **26**, 561–572 (2016) (cf. page 24).
67. HANANA, M., LEFEBVRE, M. H. & TIGGELEN, P. J. V. Pressure profiles in detonation cells with rectangular and diagonal structures. *Shock Waves* **11**, 77–88 (2001) (cf. page 24).
68. TSUBOI, N., KATOH, S. & HAYASHI, A. K. Three-dimensional numerical simulation for hydrogen/air detonation : Rectangular and diagonal structures. *Proceedings of the Combustion Institute* **29**, 2783–2788 (2002) (cf. page 24).
69. ZHANG, F. & LEE, J. H. S. *Friction-induced oscillatory behaviour of one-dimensional detonations* *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **446** (1994), 87–105 (cf. page 28).
70. DIONNE, J.-P., NG, H. D. & LEE, J. H. S. Transient development of friction-induced low-velocity detonations. *Proceedings of the Combustion Institute* **28**, 645–651 (2000) (cf. page 28).
71. WATT, S. D. & SHARPE, G. J. *One-dimensional linear stability of curved detonations* *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **460** (2004), 2551–2568 (cf. page 28).
72. WATT, S. D. & SHARPE, G. J. Linear and nonlinear dynamics of cylindrically and spherically expanding detonation waves. *Journal of Fluid Mechanics* **522**, 329–356 (2005) (cf. page 28).
73. FARIA, L. M. & KASIMOV, A. R. Qualitative modeling of the dynamics of detonations with losses. *Proceedings of the Combustion Institute* **35**, 2015–2023 (2015) (cf. page 28).
74. KISTIAKOWSKY, G. B., KNIGHT, H. T. & MALIN, M. E. Gaseous detonations. III. Dissociation energies of nitrogen and carbon monoxide. *The Journal of Chemical Physics* **20**, 876–883 (1952) (cf. page 29).
75. MANSON, N. & GUÉNOCHE, H. *Effect of the charge diameter on the velocity of detonation waves in gas mixtures* *Symposium (International) on Combustion* **6** (1957), 631–639 (cf. page 29).

76. GORDON, W. E., MOORADIAN, A. J. & HARPER, S. A. *Limit and spin effects in hydrogen-oxygen detonations Symposium (International) on Combustion* **7** (1958), 752–759 (cf. page 29).
77. MANSON, N., BROCHET, C., BROSSARD, J. & PUJOL, Y. *Vibratory phenomena and instability of self-sustained detonations in gases Symposium (International) on Combustion* **9** (1963), 461–469 (cf. page 29).
78. SAINT-CLOUD, J. P., MANSON, N., GUERRAUD, C. & BROCHET, C. Some properties of very unstable detonations in gaseous mixtures. *Astronautica Acta* **17**, 487–498 (1972) (cf. page 29).
79. FAY, J. A. Two-dimensional gaseous detonations : velocity deficit. *Physics of Fluids* **2**, 283–289 (1959) (cf. pages 29, 30, 31).
80. LABERGE, S., KNYSTAUTAS, R. & LEE, J. H. S. Propagation and extinction of detonation waves in tube bundles. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **153**, 381–381 (1993) (cf. pages 30, 154).
81. DUPRÉ, G., KNYSTAUTAS, R. & LEE, J. H. S. Near-limit propagation of detonation in tubes. *AIAA, Progress in Astronautics and Aeronautics* **106**, 144–259 (1986) (cf. page 30).
82. DUPRÉ, G., JOANNON, J., KNYSTAUTAS, R. & LEE, J. H. S. *Unstable detonations in the near-limit regime in tubes Symposium (International) on Combustion* **23** (1991), 1813–1820 (cf. page 30).
83. MOEN, I. O., SULMISTRAS, A., THOMAS, G. O., BJERKETVEDT, D. & THIBAUT, P. A. Influence of cellular regularity on the behavior of gaseous detonations. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **106**, 220–243 (1986) (cf. page 30).
84. CAMARGO, A., NG, H. D., CHAO, J. & LEE, J. H. S. Propagation of near-limit gaseous detonations in small diameter tubes. *Shock Waves* **20**, 499–508 (2010) (cf. pages 30, 154).
85. DUPRÉ, G., PERALDI, O., LEE, J. H. S. & KNYSTAUTAS, R. Propagation of detonation waves in an acoustic absorbing walled tube. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **114**, 248–263 (1988) (cf. page 31).
86. MURRAY, S. B. & LEE, J. H. S. The influence of yielding confinement on large-scale ethylene-air detonations. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **94**, 80–103 (1984) (cf. pages 31, 41, 42, 44).
87. MURRAY, S. B. & LEE, J. H. S. The influence of physical boundaries on gaseous detonation waves. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **106**, 329–355 (1986) (cf. pages 31, 41, 42).

88. TEODORCZYK, A. & LEE, J. H. S. Detonation attenuation by foams and wire meshes lining the walls. *Shock Waves* **4**, 225–236 (1995) (cf. page 31).
89. VASIL'EV, A. A. Near-limiting detonation in channels with porous walls. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **30**, 101–106 (1994) (cf. page 31).
90. RADULESCU, M. I. & LEE, J. H. S. The failure mechanism of gaseous detonations : experiments in porous wall tubes. *Combustion and Flame* **131**, 29–46 (2002) (cf. pages 31, 32, 33, 154, 155, 163).
91. RADULESCU, M. I. *The propagation and failure mechanism of gaseous detonations : experiments in porous-walled tubes* thèse de doctorat (McGill University, 2003) (cf. pages 31, 154, 197).
92. MAZAHERI, K., MAHMOUDI, Y., SABZPOOSHANI, M. & RADULESCU, M. I. Experimental and numerical investigation of propagation mechanism of gaseous detonations in channels with porous walls. *Combustion and Flame* **162**, 2638–2659 (2015) (cf. pages 33, 154).
93. WANG, L., MA, H., SHEN, Z., XUE, B., CHENG, Y. & FAN, Z. Experimental investigation of methane-oxygen detonation propagation in tubes. *Applied Thermal Engineering* **123**, 1300–1307 (2017) (cf. page 33).
94. LAFITTE, P. *Annalen der Physik* **10**, 623–634 (1925) (cf. page 34).
95. ZEL'DOVICH, Y. B., KOGARKO, S. M. & SIMONOV, N. H. Etude expérimentale de la détonation sphérique dans les gaz. *ZEPT* **26**, 1744–1772 (1956) (cf. page 34).
96. PINTGEN, F. & SHEPHERD, J. E. Detonation diffraction in gases. *Combustion and Flame* **156**, 665–677 (2009) (cf. page 35).
97. MITROFANOV, V. V. & SOLOUKHIN, R. I. *The diffraction of multifront detonation waves Soviet Physics Doklady* **9** (1965), 1055 (cf. page 35).
98. EDWARDS, D., THOMAS, G. & NETTLETON, M. The diffraction of a planar detonation wave at an abrupt area change. *Journal of Fluid Mechanics* **95**, 79–96 (1979) (cf. page 35).
99. KNYSTAUTAS, R., LEE, J. H. S. & GUIRAO, C. M. The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures. *Combustion and Flame* **48**, 63–83 (1982) (cf. page 35).
100. KOGARKO, S. Possibility of the detonation of gas mixtures in conical tubes. *Russian Chemical Bulletin* **5**, 409–416 (1956) (cf. page 35).

101. GUBIN, S. A., KOGARKO, S. M. & MIKHALKIN, V. N. Experimental study of gas detonation in conical tubes. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **18**, 592–597 (1982) (cf. page 35).
102. KHASAINOV, B., PRESLES, H.-N., DESBORDES, D., DEMONTIS, P. & VIDAL, P. Detonation diffraction from circular tubes to cones. *Shock Waves* **14**, 187–192 (2005) (cf. page 35).
103. BORZOU, B. & RADULESCU, M. I. Dynamics of detonations with a constant mean flow divergence (2016) (cf. pages 36, 152).
104. SOMMERS, W. P. *The interaction of a detonation wave with an inert boundary* thèse de doctorat (The University of Michigan, 1961) (cf. pages 37, 38, 39, 41, 44, 45, 154).
105. SOMMERS, W. P. & MORRISON, R. B. Simulation of condensed-explosive detonation phenomena with gases. *Physics of Fluids* **5**, 241–248 (1962) (cf. pages 37, 38).
106. DABORA, E. K., NICHOLLS, J. A. & MORRISON, R. B. *The influence of a compressible boundary on the propagation of gaseous detonations* **10** (1965), 817–830 (cf. pages 38, 39, 40, 41, 43, 173).
107. DABORA, E. K. *The influence of a compressible boundary on the propagation of gaseous detonations* rapport technique 3559-E (NASA, 1963) (cf. pages 38, 41, 43, 45, 173, 205, 206, 207).
108. ADAMS, T. G. Do weak detonation waves exist? *AIAA Journal* **16**, 1035–1040 (1978) (cf. pages 40, 173).
109. ADAMS, T. G. *Experimental investigation of the interaction of a detonation wave with a boundary gas* thèse de doctorat (Michigan State University, 1972) (cf. pages 40, 173).
110. VASIL'EV, A. A. Critical diameter of gas-mixture detonation. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **18**, 349–355 (1982) (cf. pages 40, 41, 42, 44).
111. VASIL'EV, A. A. & ZAK, D. V. Detonation of gas jets. *Combustion, Explosion and Shock Waves* **22**, 463–468 (1986) (cf. pages 41, 44).
112. BORISOV, A. A., KHOMIC, S. V. & MIKHALKIN, V. N. Detonation of unconfined and semiconfined charges of gaseous mixtures. *Progress in Astronautics and Aeronautics* **133**, 118–132 (1991) (cf. pages 42, 44, 124, 173).
113. RUDY, W., KUZNETSOV, M., POROWSKI, R., TEODORCZYK, A., GRUNE, J. & SEMPERT, K. Critical conditions of hydrogen-air detonation in partially confined geometry. *Proceedings of the Combustion Institute* **34**, 1965–1972 (2013) (cf. pages 43, 45).

114. GRUNE, J., SEMPERT, K., FRIEDRICH, A., KUZNETSOV, M. & JORDAN, T. Detonation wave propagation in semi-confined layers of hydrogen–air and hydrogen–oxygen mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy* **42**, 7589–7599 (2016) (cf. pages 43, 45).
115. RUDY, W., DZIUBANII, K., ZBIKOWSKI, M. & TEODORCZYK, A. Experimental determination of critical conditions for hydrogen-air detonation propagation in partially confined geometry. *International Journal of Hydrogen Energy* **42**, 7366–7373 (2016) (cf. pages 43, 46).
116. RUDY, W., ZBIKOWSKI, M. & TEODORCZYK, A. Detonations in hydrogen-methane-air mixtures in semi confined flat channels. *Energy* **116**, 1479–1483 (2016) (cf. pages 43, 46).
117. CHO, K. Y., CODONI, J. R., RANKIN, B. A., HOKE, J. & SCHAUER, F. *Effects of Lateral Relief of Detonation in a Thin Channel 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2017), 0373 (cf. pages 43, 46, 154).
118. IVANOV, M. F., FORTOV, V. E. & BORISOV, A. A. Numerical simulation of the development of detonation in gaseous volumes of finite thickness. *Fizika Goreniia i Vzryva* **17**, 108–116 (1981) (cf. pages 47, 69).
119. IVANOV, M., SHEBEKO, Y. N. & KOROL'CHENKO, A. Y. Numerical modeling of the propagation of detonation in a layer of detonating gas diluted with nitrogen. *Fiz. Goren. Vzryva* **20**, 118–121 (1984) (cf. page 47).
120. ORAN, E. S., JONES, D. A. & SICHEL, M. *Numerical simulations of detonation transmission Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **436** (1992), 267–297 (cf. page 47).
121. LIU, J. C., LIOU, J. J., SICHEL, M., KAUFFMAN, C. W. & NICHOLLS, J. A. *Diffraction and transmission of a detonation into a bounding explosive layer Symposium (International) on Combustion* **21** (1988), 1639–1647 (cf. page 47).
122. LIU, J. C., KAUFFMAN, C. W. & SICHEL, M. Lateral interaction of detonating and detonable gaseous mixtures. *Dynamics of Explosions*, 264–283 (1988) (cf. page 47).
123. LI, J., MI, X & HIGGINS, A. J. Geometric scaling for a detonation wave governed by a pressure-dependent reaction rate and yielding confinement. *Physics of Fluids* **27**, 027102 (2015) (cf. page 47).
124. WOOD, W. W. & KIRKWOOD, J. G. Diameter Effect in Condensed Explosives. The Relation between Velocity and Radius of Curvature of the Detonation Wave. *The Journal of Chemical Physics* **22**, 1920–1924 (1954) (cf. pages 47, 137).

125. TSUGE, S., FURUKAWA, H., MATSUKAWA, M. & NAKAGAWA, T. On the dual property and the limit of hydrogen-oxygen free detonation waves. *Astronautica Acta* **15**, 377–386 (1970) (cf. page 47).
126. LI, J., MI, X. & HIGGINS, A. J. Effect of spatial heterogeneity on near-limit propagation of a pressure-dependent detonation. *Proceedings of the Combustion Institute* **35**, 2025–2032 (2015) (cf. pages 47, 69, 155).
127. HOUIM, R. W. & FIEVISOHN, R. T. The influence of acoustic impedance on gaseous layered detonations bounded by an inert gas. *Combustion and Flame* **179**, 185–198 (2017) (cf. pages 47, 48, 171, 173, 188).
128. KESSLER, D. A., GAMEZO, V. N. & ORAN, E. S. Multilevel detonation cell structures in methane-air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute* **33**, 2211–2218 (2011) (cf. page 54).
129. GAMEZO, V. N., VASIL'EV, A. A., KHOKHLOV, A. M. & ORAN, E. S. Fine cellular structures produced by marginal detonations. *Proceedings of the Combustion Institute* **28**, 611–617 (2000) (cf. page 54).
130. KHASAINOV, B., VIROT, F., PRESLES, H.-N. & DESBORDES, D. Parametric study of double cellular detonation structure. *Shock Waves* **23**, 213–220 (2013) (cf. page 54).
131. VARATHARAJAN, B & WILLIAMS, F. A. Chemical-kinetic descriptions of high-temperature ignition and detonation of acetylene-oxygen-diluent systems. *Combustion and Flame* **124**, 624–645 (2001) (cf. page 54).
132. MAHMOUDI, Y. & MAZAHERI, K. High resolution numerical simulation of triple point collision and origin of unburned gas pockets in turbulent detonations. *Acta Astronautica* **115**, 40–51 (2015) (cf. page 54).
133. TAYLOR, B. D., KESSLER, D. A., GAMEZO, V. N. & ORAN, E. S. Numerical simulations of hydrogen detonations with detailed chemical kinetics. *Proceedings of the Combustion Institute* **34**, 2009–2016 (2013) (cf. page 54).
134. SURESH, A & HUYNH, H. T. Accurate monotonicity-preserving schemes with Runge–Kutta time stepping. *Journal of Computational Physics* **136**, 83–99 (1997) (cf. page 56).
135. VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method. *Journal of computational Physics* **32**, 101–136 (1979) (cf. pages 56, 75).
136. COLELLA, P. & WOODWARD, P. R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal of Computational Physics* **54**, 174–201 (1984) (cf. page 56).

137. CHAUDHURI, A., HADJADJ, A., CHINNAYYA, A. & PALERM, S. Numerical study of compressible mixing layers using high-order WENO schemes. *Journal of Scientific Computing* **47**, 170–197 (2011) (cf. page 57).
138. MIGNONE, A., TZEFERACOS, P. & BODO, G. High-order conservative finite difference GLM–MHD schemes for cell-centered MHD. *Journal of Computational Physics* **229**, 5896–5920 (2010) (cf. page 57).
139. RADICE, D. & REZZOLLA, L. THC : a new high-order finite-difference high-resolution shock-capturing code for special-relativistic hydrodynamics. *Astronomy & Astrophysics* **547**, A26 (2012) (cf. page 57).
140. HARTEN, A., ENGQUIST, B., OSHER, S. & CHAKRAVARTHY, S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics* **131**, 3–47 (1997) (cf. page 57).
141. HARTEN, A., LAX, P. D. & van LEER, B. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review* **25**, 35–61 (1983) (cf. page 61).
142. BATTEN, P., LESCHZINER, M. A. & GOLDBERG, U. C. Average-state jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows. *Journal of Computational Physics* **137**, 38–78 (1997) (cf. pages 61, 63).
143. TORO, E. F., SPRUCE, M. & SPEARES, W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves* **4**, 25–34 (1994) (cf. page 61).
144. TORO, E. F. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction* (2013) (cf. pages 61, 64).
145. DAVIS, S. F. Simplified second-order Godunov-type methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* **9**, 445–473 (1988) (cf. page 63).
146. SHU, C.-W. & OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics* **77**, 439–471 (1988) (cf. page 64).
147. GOTTLIEB, S. & SHU, C.-W. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Mathematics of computation of the American Mathematical Society* **67**, 73–85 (1998) (cf. page 64).
148. TAYLOR, G. The dynamics of the combustion products behind plane and spherical detonation fronts in explosives. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **200**, 235–247 (1950) (cf. page 68).

149. SOW, A., CHINNAYYA, A. & HADJADJ, A. Mean structure of one-dimensional unstable detonations with friction. *Journal of Fluid Mechanics* **743**, 503–533 (2014) (cf. pages 69, 111, 152, 154).
150. SAVITZKY, A. & GOLAY, M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry* **36**, 1627–1639 (1964) (cf. pages 72, 73).
151. HADJADJ, A. & KUDRYAVTSEV, A. Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. *Journal of Turbulence*, N16 (2005) (cf. page 73).
152. QUIRK, J. J. & KARNI, S. On the dynamics of a shock–bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics* **318**, 129–163 (1996) (cf. page 73).
153. SOD, G. A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* **27**, 1–31 (1978) (cf. pages 74, 75).
154. GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik* **89**, 271–306 (1959) (cf. page 75).
155. HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* **49**, 357–393 (1983) (cf. page 75).
156. ROE, P. L. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics* **18**, 337–365 (1986) (cf. page 75).
157. GAMEZO, V. N., DESBORDES, D. & ORAN, E. S. Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves. *Shock Waves* **9**, 11–17 (1999) (cf. pages 82, 121).
158. KANESHIGE, M. & SHEPHERD, J. E. *Detonation database* rapport technique FM97-8 (GALCIT, 1997) (cf. pages 82, 91).
159. ECKETT, C. A. *Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations* thèse de doctorat (California Institute of Technology, 2001) (cf. pages 84, 163).
160. FAVRE, A. Equations des gaz turbulents compressibles. *Journal de Mécanique* **4**, 391 (1965) (cf. page 85).
161. GATSKI, T. B. & BONNET, J.-P. *Compressibility, turbulence and high speed flow* (Academic Press, 2013) (cf. page 108).

162. DONZIS, D. A. & JAGANNATHAN, S. Fluctuations of thermodynamic variables in stationary compressible turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* **733**, 221–244 (2013) (cf. page 108).
163. LEE, K. C. *Heat release effects on decaying homogeneous compressible turbulence* thèse de doctorat (Texas A & M University, 2010) (cf. page 108).
164. SARKAR, S., ERLEBACHER, G., HUSSAINI, M. & KREISS, H. The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* **227**, 473–493 (1991) (cf. page 108).
165. STREHLOW, R. A. & CROOKER, A. J. The structure of marginal detonation waves. *Acta Astronautica* **1**, 303–315 (1974) (cf. pages 109, 134).
166. REYNAUD, M., VIROT, F. & CHINNAYYA, A. A computational study of the interaction of gaseous detonations with a compressible layer. *Physics of Fluids* **29**, 056101 (2017) (cf. pages 120, 163).
167. HIGGINS, A. *Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6* 33–105 (2012) (cf. pages 137, 140, 151).
168. KLEIN, R. & STEWART, D. S. The relation between curvature, rate state-dependence, and detonation velocity. *SIAM Journal on Applied Mathematics* **53**, 1401–1435 (1993) (cf. page 141).
169. GAO, Y., ZHANG, B., NG, H. D. & LEE, J. H. S. An experimental investigation of detonation limits in hydrogen–oxygen–argon mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy* **41**, 6076–6083 (2016) (cf. page 154).
170. SHEN, H. & PARSANI, M. The role of multidimensional instabilities in direct initiation of gaseous detonations in free space. *Journal of Fluid Mechanics* **813** (2017) (cf. page 160).
171. ECKETT, C. A., QUIRK, J. J. & SHEPHERD, J. E. The role of unsteadiness in direct initiation of gaseous detonations. *Journal of Fluid Mechanics* **421**, 147–183 (2000) (cf. page 163).
172. RADULESCU, M. I. & MAXWELL, B. M. Critical ignition in rapidly expanding self-similar flows. *Physics of Fluids* **22**, 066101 (2010) (cf. page 163).
173. REYNAUD, M., VIROT, F. & CHINNAYYA, A. Interactions of a Detonation Wave Confined by a High-Temperature Compressible Layer (cf. page 168).
174. TSUBOI, N., ETO, S., HAYASHI, A. K. & KOJIMA, T. Front Cellular Structure and Thrust Performance on Hydrogen–Oxygen Rotating Detonation Engine. *Journal of Propulsion and Power* (2016) (cf. pages 173, 176).

-
175. KERSTEIN, A. R. Linear-eddy modelling of turbulent transport. Part 6. Microstructure of diffusive scalar mixing fields. *Journal of Fluid Mechanics* **231**, 361–394 (1991) (cf. page 198).
176. MAXWELL, B., FALLE, S., SHARPE, G & RADULESCU, M. A compressible-LEM turbulent combustion subgrid model for assessing gaseous explosion hazards. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **36**, 460–470 (2015) (cf. page 198).

Résumé

Cette Thèse de Doctorat est dédiée à la simulation numérique des détonations, et plus particulièrement aux détonations confinées par un gaz inerte. Cette configuration correspond en partie à l'écoulement rencontré au sein des moteurs à détonations rotatives, dans lesquels le combustible est confiné par les gaz brûlés issus du cycle précédent. Le code de calcul employé s'appuie sur des schémas numériques d'ordre élevé adaptés à la capture des discontinuités (interpolation MP d'ordre 9, solveur HLLC et intégration temporelle d'ordre 3). Une attention particulière a été portée à la caractérisation de l'écoulement au travers de son évolution moyenne dans le repère de la détonation. Les simulations ont été réalisées pour différentes valeurs de l'énergie d'activation, qui traduit la sensibilité du milieu réactif, pour des couches réactives de dimensions variées et enfin pour des confinements inertes à différentes températures. La base de données résultante démontre l'existence de deux comportements distincts suivant l'énergie d'activation du milieu réactif. Le déficit de la célérité de la détonation peut être globalement appréhendé comme fonction du ratio de l'épaisseur hydrodynamique par le rayon de courbure sur l'axe. Enfin, la présence d'une couche inerte à haute température modifie de façon importante la topologie de la détonation et en étend les limites de propagation.

Mots Clés : Simulation par ordinateur / Ondes de détonation / Instabilités hydrodynamiques / Hautes pressions / Hautes températures / Moteurs à détonation / Relation célérité-courbure / Limites de propagation

Abstract

This dissertation is devoted to the numerical study of detonation waves, and more specifically to the dynamics of detonations bounded by an inert gaseous layer. This configuration is similar to the flow field within the rotating detonation engines, in which the fuel is confined by the burned gases produced during the previous combustion cycle. The computational solver is based on high-order schemes designed for capturing discontinuities (9th order MP interpolation, HLLC solver and 3rd order temporal integration). The detonation was investigated by calculating the averaged profile in the shock frame of reference. The simulations were performed for various values of the activation energy, which control the mixture sensitivity, for different heights of the reactive layer and for different temperature of the inert medium. The resulting database shows that according to the activation energy, two different behaviors can be observed. The presence of a high-temperature inert layer strongly affects the detonation structure and extends the propagation limits. The detonation deficit can be globally expressed as a function of the ratio of the hydrodynamic thickness to the radius of curvature on the axis.

Key words : Computer simulation / Detonation waves / Hydrodynamic instabilities / High pressure (Science) / High temperatures / Detonation engines / Velocity-curvature relationship / Propagation limits